Метаморфозы аналитической химии*

Ф. Адамс[1], М. Адрианс[2]

Попытки представить аналитическую химию только как способ измерения отдельных характеристик состава выбранных объектов исследования приводят к ограничению понимания уникальных перспектив, которые химики-аналитики открывают для науки и общества в 21 веке. В статье обсуждаются некоторые из существующих сегодня предубеждений и неверных интерпретаций роли аналитической химии, а также дана ее оценка с современной научной точки зрения Эры Больших Данных. Это позволяет рассматривать аналитическую химию в более широком аспекте, признавая ее заслуженно важную роль в современной науке и технике.

Ключевые слова: аналитическая химия, химический анализ, масштаб, эволюция, обзор, Эра Больших Данных, наука об измерениях

Defining analytical chemistry as the measurement of isolated compositional features in a selected study object ignores the unique perspective that analytical chemists bring to twenty-first century science and society. In this feature article, we will discuss some of the existing preconceptions and misinterpretations of analytical chemistry that occur at present and will tackle them from the more up-to-date perspective of science in the Big Data Era. This will place their influence in context while simultaneously enlarging the scope of the discipline analytical chemistry to its well-deserved prevalent position in present-day science and technology.

Keywords: analytical chemistry, chemical analysis, Scope, evolution, review, Big Data Era, measurement science

Введение

На протяжении последних 20 лет аналитическая химия все теснее переплетается и интегрируется в качестве важного компонента науки Эры Больших Данных. Большие данные в сочетании с новой аналитикой данных бросают вызов устоявшимся концепциям аналитической химии, порождая смену парадигм во всей области знаний. В статье рассматриваются последствия этой трансформации в различных аспектах. Необходимо переосмыслить основы аналитической химии, ее положение в науке в целом, образовательные аспекты и практическую деятельность, правила и терминологию.

В рамках химии, аналитическая химия – это область знаний, изучающая состав и структуру как природных, так и искусственно полученных объектов. Она опирается на технологические разработки и научные знания, как самой химии, так и других дисциплин, таких как физика и биология, выполняя сложные и многообразные междисциплинарные задачи сегодняшнего дня.

Будучи одной из важнейших научных дисциплин, обеспечивающей другие науки необходимой информацией, аналитическая химия помогает достичь впечатляющих результатов в современной

* Перевод статьи, опубликованной в журнале Analytical and Bioanalytical Chemistry (2020) 412: 3525–3537 https://doi.org/10.1007/s00216-019-02313-z. Открытый доступ. Данная статья лицензируется в соответствии с международной лицензией Creative Commons Attribution 4.0, которая разрешает использование, совместное использование, адаптацию, распространение и воспроизведение на любом носителе или в любом формате, при условии, что вы отдаете должное оригинальному автору(ам) и источнику, предоставляете ссылку на лицензию Creative Commons и указываете, были ли внесены изменения. http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/

[1] Freddy Adams freddy.adams@uantwerpen.be, Department of Chemistry, University of Antwerp, Drie Eiken Campus, Universiteitsplein 1, 2610 Antwerp, Belgium.

[2] Mieke Adriaens mieke.adriaens@ugent.be, Department of Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281-S12,9000 Ghent, Belgium.

науке, например в материаловедении и нанотехнологиях, и особенно в биологии, биомедицине, биотехнологии и др.

Аналитическая химия за прошлые два десятилетия претерпела настоящую «метаморфозу». В отличие от слова «изменение», которое подразумевает, что некоторые вещи меняются, но суть, основные принципы остаются прежними, «метаморфоза» означает гораздо более радикальную трансформацию, сдвиг парадигмы, когда вместо старых убеждений появляется нечто совершенно новое. «Метаморфозы» уже нельзя рассматривать как результат нормальной эволюции, поэтому необходимо пересмотреть теоретические и концептуальные основы дисциплины.

В настоящий момент не вполне ясно, как следует определять аналитическую химию и химический анализ и как они соотносятся с другими науками, в частности с химией и метрологией. Нынешняя ситуация усугубляется распространением искаженных, зачастую неполных и минималистичных, исторически сложившихся взглядов на сущностные особенности дисциплины и на ее этимологию. Ее правила, принципы и определения должны выйти за пределы упрощенных концепций прошлого, определяющих химический анализ как единичное измерение конкретного химического вещества.

Терминология и правила, методы, методики и инструкции – это порождение своего времени. Нам стоит проследить, как они эволюционировали примерно с 1960-х годов до сегодняшнего дня. В этой статье мы обсудим некоторые из существующих предубеждений и неверных интерпретаций аналитической химии, которые, несмотря на фундаментальные изменения, все еще применяются. Это позволит рассмотреть аналитическую химию в более широком аспекте и признать ее заслуженное важное положение в современной науке и технике.

Краткий «анализ» аналитической химии

Мы должны вернуться к основным понятиям, прежде чем перейти к обсуждению того, что сейчас означает аналитическая химия и как мы должны правильно интерпретировать ее основополагающие характеристики и их значение в современной науке и технике. Это связано с тем, что аналитическая химия связана с различными видами деятельности, которые не всегда можно правильно разграничить. Для того чтобы иметь возможность сделать выводы, необходимо вернуться к основным особенностям дисциплины, но при этом не комментируя и не критикуя достижения прошлого.

Анатомия аналитической химии

Подобно фабрикам, производящим все с нуля, от гаек и болтов до готовых машин, включая большие самолеты (с потенциально дефектным программным обеспечением), аналитическая химия направлена не только на простое определение какого-то компонента состава. Как правило, она сталкивается с необходимостью подробного определения химического состава сложных и часто весьма неоднородных объектов или с анализом ряда похожих, но неидентичных образцов.

Таким образом, терминологическое определение аналитической химии просто как комбинированного варианта совокупных химических знаний игнорирует уникальные возможности, которые аналитическая химия привносит в познание химии. Искусство аналитической химии состоит не в выполнении анализа на рутинном образце, который более уместно назвать химическим анализом, а в совершенствовании аналитических методов, в расширении понимания существующих аналитических явлений [1].

Область аналитической химии включает в себя тех, кто развивает эту науку и пользователей ее результатами: то есть у нее есть производители и потребители. Она может быть разделена на три отдельные рабочие сферы, которые приведены на рис. 1. Слева мы видим аналитическую химию как фундаментальную дисциплину (1) в рамках химии – науку об измерении химического состава. Это фундаментальная наука, создающая и применяющая основополагающие понятия, принципы и стратегии для измерения характеристик химических систем. Она включает в себя как измерение концентраций, так и все, что важно для характеризации объекта [2]. В центре рис. 1 – химический анализ (2), который содержит методы и методики, идеи, вспомогательные средства и оборудование, разработанные для применения не только в различных научных областях химии, но и в других естественных науках, а также в технологических и социальных сферах. Эти виды деятельности могут носить как фундаментальный характер (создание новых знаний), так и прикладной, помогающий понять сложность природы и многообразие современного мира. Фундаментальная аналитическая химия и химический анализ тесно взаимосвязаны и иногда неотличимы друг от друга. Кроме того, фундаментальный и прикладной химический анализы должны быть четко отделены от третьего вида деятельности, связанного с химическим анализом,

Рис. 1. «Анатомия» аналитической химии: 1 – аналитическая химия, 2 – химический анализ и 3 – аналитические службы

а именно от аналитической службы (3): формализованной, рутинной технологической платформы, функционирующей в промышленности, различных сферах общественной жизни и охраны окружающей среды. Что касается аналитических служб, то контроль качества, осуществляемый ими, в значительной степени опирается на использование формальных оценочных показателей, в то время как два других элемента триады следуют правилам научных процессов принятия решений.

Важен баланс спроса и предложения: деятельность в области химического анализа и аналитических услуг стимулирует развитие процессов в области *1*. Без такого вклада разработка новых методических подходов может стать искусственной. Кроме того, деятельность *1* и *2* управляется некими открытиями, в то время как функционирование *3* базируется на востребованности для промышленности и общества.

Аналитическая химия: как она развивалась

Описывая революцию в науках о жизни, Сидней Бреннер (Sydney Brenner) заметил, что «студенты делят историю на две эпохи: последние два года и все остальное до этого» [3]. Подобным же образом, если смотреть с более отдаленной точки зрения, мы можем отметить быстрое развитие аналитической химии, происходившее примерно в 1960-х годах прошлого столетия. До этого была предыстория, в которой доминировали аналитические методы, основанные на разрушении образца, химическом разделении, равновесии химической реакции и простых инструментальных спектрометрических инструментах или электрохимии. Первые имели дело в основном с оптическим диапазоном электромагнитного излучения. Тем не менее, многие базовые концепции, разработанные в тот период, сохраняют свою актуальность сегодня и остаются прочной основой дисциплины.

С начала 1960-х годов аналитическая химия была перенесена в новую эпоху, часто называемую Эрой Большой Науки, с присущей ей сложностью, как по характеру, так и по количеству методологических подходов. Ранняя фаза взрывного расширения этой дисциплины хорошо иллюстрируется, например, ежемесячными передовицами Герберта Лайтинена (Herbert Laitinen) в журнале Analytical Chemistry. Это поле феноменально расширялось и увеличивалось за счет внедрения инструментальных технологий, основанных на воздействии на объект излучения в широком спектральном диапазоне от терагерцовой области до жестких рентгеновских лучей и далее. Спектроскопия повсеместно использовалась в качестве инструмента для определения характеристик во многих научных и промышленных областях. Стало возможным связать тонкий характер взаимодействия излучения с веществом с изучением in situ все более малых объектов исследования. Различные виды спектроскопии и масс-спектрометрии (МС) обеспечили значительные достижения в области чувствительности, специфичности, пространственной дискриминации (размер образца) и скорости анализа с впечатляющим рядом теперь полностью автоматизированных аналитических инструментов.

Полученный в результате комплекс аналитических методов представляет собой мощный двигатель научного прогресса. В настоящее время необходимо решать проблемы нарастающей сложности с помощью методических приемов, которые все чаще базируются на экспрессных повторяющихся определениях элементного состава и исследованиях все более сложных, часто лабильных, молекулярных видов структурных композиций и дефектов.

Феноменальное развитие аналитической химии за последние 50 лет было обусловлено как инструментальной базой, так и идеями [4]. Движущие силы пришли сверху вниз за счет таких нововведений, как микроэлектроника и информационные технологии, от аналитических приборостроительных компаний, микро- и нанотехнологий, а снизу вверх – за счет общего научного прогресса в области химии, биологии и физики (рис. 2).

Метаморфозы аналитической химии

Феноменальные изменения, наблюдаемые в аналитической химии, не удивительны. На самом деле они находятся в русле постепенного эволюционного процесса, движимого идеями и соответствующими инструментами во многих других областях науки [4]. Однако то, что представляет собой настоящую метаморфозу для аналитической химии, – это массовое и комбинированное использование аналитического инструментария. Оно открыло возможности для понимания сложных (натуральных и технологических) гетерогенных материалов. Благодаря современному оборудованию стало возможно проследить пространственно-временные отношения между химическим составом, структурой и морфологией, с одной стороны, и свойствами и характеристиками материалов – с другой.

Рис. 2. Развитие аналитической химии, инструментов и идей сверху – вниз и снизу – вверх (2) химический анализ и (3) аналитические службы

Эти взаимоотношения показаны на рис. 3б и сравниваются с общепринятым подходом в аналитической химии на рис. 3а. Ясно, что на рис. 3а, качество измерения (метрология, обеспечение качества) находится в фокусе внимания, в то время как на рис. 3б собранные данные должны быть преобразованы в блок информации, чтобы в конечном счете обеспечить знание, а движущей силой является наука об информации.

С чем же связана такая перемена? Для того чтобы понять связь между составом и структурой на нано/микроскопическом пространственном уровне и функциональным поведением на макроскопическом уровне, потребовалось значительно увеличить объем информации, получаемой в результате аналитического процесса. Нанотехнологии принесли новые инструменты визуализации, такие как сканирующая туннельная, а также и атомно-силовая микроскопия и различные производные методы. Они все чаще используются в качестве инструментов наблюдения в сочетании со спектроскопическим химическим анализом и позволяют выявить детали субмикроскопического уровня вплоть до отдельных атомов и молекул.

Таким образом, многие практические направления в аналитической химии изменились с сингулярного уровня, на котором анализ был направлен только на определение состава (см. рис. 3а) к множественному, всеобъемлющему подходу, при котором анализ учитывает определение структурных деталей и взаимосвязь различных компонентов (см. рис. 3б).

В целом «метаморфоза» включала в себя следующие изменения:

- от простых измерений до комбинаций инструментальной базы и методов (мультиспектральные, гиперспектральные, мультиплексирование инструментальных подходов, композиционные

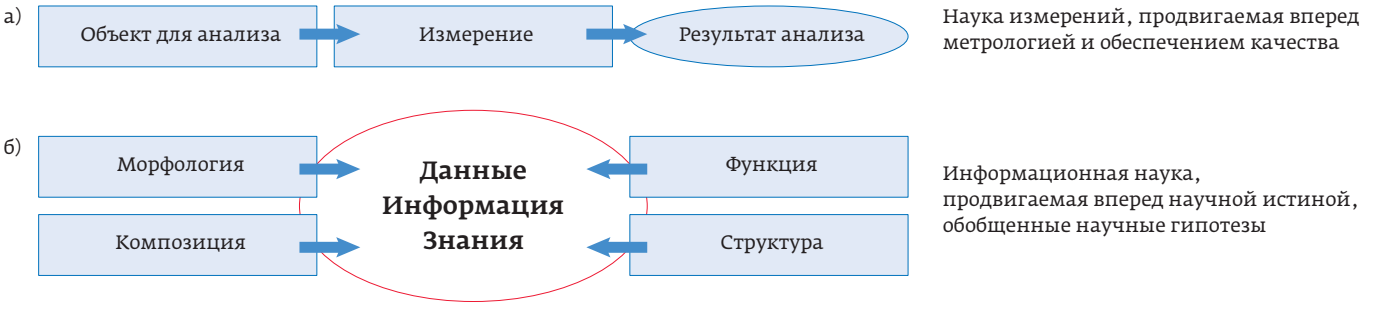


Рис. 3. Традиционный (а) и новый (б) подходы к химическому анализу

отношения между многими образцами и т. д.);
- от формулирования проблем к их решению (генерация гипотез);
- все более сложные проблемы в изучении природы и материалов;
- использование системного (целостного) подхода вместо основанного на единичных процедурах и индивидуальных измерениях.

Эти разработки вывели аналитическую химию за рамки обычного, традиционного и общепринятого в оценке аналитических результатов. Таким образом, они интегрировали аналитическую химию в науку об информации в Эру Больших Данных.

Рис. 4. «Химический аналитический микроскоп»: характеристики, лежащие в основе визуализирующего химического анализа

Особое значение здесь имеет применение дисциплины при характеризации и анализе микро- и наноструктурированных гетерогенных технологических материалов, а также в различных областях биологии, включая изучение природных объектов, например тех, которые появились в результате эволюционных процессов.

Новые тенденции в аналитической химии перекликаются с концепцией «бури созидательного разрушения», придуманной Йозефом Шумпетером (Joseph Schumpeter), лауреатом Нобелевской премии по экономике за 1993 год, в которой новые продукты и технологические инновационные механизмы заменяют устаревшие [5]. Разница в том, что не существует старых подходов, выработанных в прошлом. Вместо этого добавляется новое измерение и значительно расширяется сфера применения аналитической химии в науке.

Аналитическая химия и химическая визуализация

Для многих образцов желательно получить аналитическую информацию о трехмерной структуре и составе конкретного объекта. Это может быть сделано с помощью анализа изображений, который основан на систематическом расширении от единичных наблюдений (точка, 0D) до линии (1D), затем до 2D-изображений на поверхности, наконец, для получения 3D-информации [6]. Таким образом, химическая визуализация представляет собой значительное расширение возможностей спектрального анализа.

Основные цели применения мультиспектрального и мультимодального химического анализа изображений кратко представлены на рис. 4. В дополнение к химическим методам визуализации, направленным на получение информации об элементном составе, существуют и другие, которые обеспечивают молекулярную (пространственное перераспределение молекул или функциональных групп молекул), структурную (пространственное перераспределение кристалличности, направление ориентации в кристалле или фазы) или картированную морфологическую информацию. Для поверхностного и глубинного молекулярного изучения и визуализации существуют различные методы молекулярной диагностики, основанные на ИК-ВИД-УФ-наблюдении [7]. Другие основаны на измерении результатов взаимодействий потока частиц (например, электронов) или лазерного луча с образцом.

Химическая визуализация связана со сбором и интерпретацией сложных данных. Рис. 5 схематично иллюстрирует структуру данных мультиспектрального/гиперспектрального анализа изображений. Каждый отдельный элемент 3D- или 4D- (для повторных измерений) изображения может рассматриваться как часть цифровой информации, свидетельствующей об особенностях состава неоднородного объекта. Она может быть значительно сложнее, когда мультиспектральные/гиперспектральные наборы данных представляют собой результат совместного использования различных и иногда ортогональных инструментов наблюдения, включая

изменения плотности (даже пустоты), структурные особенности, изменения морфологии или физических свойств. В итоге формируется куб данных для каждой точки измерения с большим объемом структурированной информации (цифры с их специфическими уровнями значимости), такой как дифракционные паттерны или масс-спектры высокого разрешения, включая наборы вызванных столкновением фрагментов, морфологическую информацию, даже текстовые данные и т. д. [6].

Собранные многомерные массивы данных требуют декомпозиции с использованием различных компьютерных и статистических (хемометрических) инструментов для получения 2D- или 3D-изображений и повышения эффективности интерпретации. Такие наборы химических данных обычно довольно велики. Например, для МС-визуализации может легко состоять из пиксельного набора масс-спектров, представляющих относительное содержание ионизированных молекул со значениями до 50 000 m/z при среднем разрешении, в то время как времяпролетные анализаторы могут получить доступ к значениям m/z до 100 000, а соотношения m/z до миллиона и более могут быть достигнуты с помощью масс-спектрометров с ионным циклотронным резонансом с фурье-преобразованием или приборов Orbitrap [8]. Интерпретация всей совокупности данных и их взаимосвязь друг с другом так же важны, как и метрологическое качество отдельных измерений.

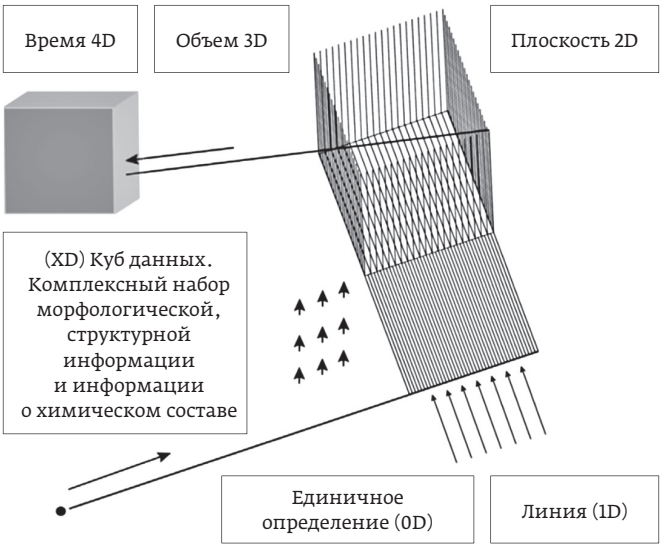


Рис. 5. *Структура данных в мультиспектральной / гиперспектральной химической визуализации. Из работы Адамса и Барбанте [6]; воспроизведено с разрешения авторов*

Многие области науки претерпели революцию больших данных, в том числе аналитическая химия [9]. Прочная интеграция ее в Эру Больших Данных проиллюстрирована на рис. 3б, 4 и 5. Большие объемы достоверных данных, поступающих от естественных или искусственных объектов, должны обрабатываться с помощью надежных высокопроизводительных вычислительных инструментов и методов искусственного интеллекта. Данные состоят в совокупном и непротиворечивом конгломерате взаимосвязанных и взаимозависимых показателей отдельных составляющих, очерченных его пространственными и временными границами.

Кроме того, с ростом числа доступных сегодня инструментальных методов визуализации все чаще комбинируются различные аналитические методы для исследования одного и того же объекта анализа. Такой подход реализуется либо в одной многофункциональной инструментальной установке, либо путем объединения нескольких отдельных приборов. Комбинированные методики визуализации направлены на извлечение максимального объема информации из конкретного образца: элементных, молекулярных или других видов химических или физических образований, даже супрамолекулярных структур со сложной архитектурой. При целенаправленном подходе необходимо решить, что нужно измерить, а также выбрать метод и оценить его достоверность до проведения анализа. При нецелевом анализе важно извлечь максимум разнообразной информации из собранных данных [6].

Объединение данных, полученных различными технологиями визуализации, позволяет добиться более глубоких знаний и улучшает интерпретацию.

Появление биоаналитической химии

Ведущим направлением развития аналитической химии «нового века» является биоанализ: молекулярная биология, биотехнология, фармация, медицина. За прошлое десятилетие появление технологии микрочипов и робототехники привело к смене парадигмы молекулярной биологии: акцент сместился с редукционистских и так называемых однобелковых подходов на координированные исследования все более сложных молекулярных систем, их взаимодействий и взаимосвязей в пространстве и времени. Эти «системные подходы» используются для изучения процессов в целом и построения модели для прогнозирования поведения системы в ответ на различные внешние сигналы, возмущения или изменения ее положения [10].

Важность биологии и биотехнологии в аналитической химии можно проиллюстрировать простым примером: название журнала на рубеже 20 и 21-го веков изменилось с Zeitschrift für Analytische Chemi (нем. Журнал аналитической химии) на Analytical and Bioanalytical Chemistry (англ. Аналитическая и биоаналитическая химия).

Масс-спектрометрия (МС) – один из ключевых методов в аналитической химии, особенно для биологических применений. Широкий спектр разновидностей МС обеспечивает беспрецедентную способность идентифицировать и индивидуально определять очень сложные компоненты с экстремальной чувствительностью при малых количествах пробы. Развитие МС стало успешным благодаря способности понимать и моделировать движение ионов в электрическом и магнитном полях, а также многочисленным методам жесткой и мягкой ионизации соединений в сложных образцах [11]. МС с высоким разрешением обладает уникальным потенциалом использования метода разбавления изотопов с прослеживаемостью вплоть до фундаментальных измеряемых единиц.

МС необходима для многих важных направлений, таких как протеомика, метаболомика, липидомика и гликомика. Среди всех этих платформ метаболомика используется для обнаружения пертурбаций, которые вызывают болезни, лекарства или токсины, тем самым влияя на концентрации и потоки метаболитов, участвующих в ключевых биохимических процессах. Традиционно исследования метаболомики на основе МС имеет две основные стратегии: нецелевое профилирование с помощью МС с высоким разрешением для идентификации молекулярных соединений, за которым следует основанный на гипотезах целевой подход для количественной оценки части из них. На стадии обнаружения устанавливают присутствие и идентифицируют потенциальные метаболиты, которые биологически значимы на уровне отдельных клеток. Стадия целевой валидации может подтвердить идентичность на основе паттернов фрагментации и количественно определить эти метаболиты в крупных выборках, чтобы обеспечить понимание на функциональном уровне. В то время как нецелевой подход является чисто качественным, целевой анализ может быть выполнен с высоким метрологическим обоснованием с использованием метода изотопного разбавления, непосредственно прослеживаемого до единицы массы СИ (начиная с 2019 года единица массы в системе СИ определяется через постоянную Планка).

Основные препятствия при преобразовании «омических» данных в осязаемые средства для практических приложений возникают из-за огромной многомерной природы паномических данных. Изучение молекулярных свойств в сотнях тысяч, если не в миллионе или более, характеристик означает, что ответы на конкретно поставленные вопросы могут появиться исключительно случайно. Кроме того, омические данные часто страдают от слабо изученных источников [12]. Для решения проблем необходимы достижения в области компьютерного зрения, машинного обучения и статистической биоинформатики [13].

Формирующаяся область методов одноклеточной характеризации (одноклеточная метаболомика) затрагивает фундаментальные биологические вопросы и позволяет наблюдать метаболические явления в гетерогенных популяциях одиночных клеток. Вся структура схематически представлена на рис. 6. Выделенные одиночные клетки сортируются цитометрическими методами и подвергаются мультиплексному и мультитехнологичному анализу.

Паномические исследования сочетают в себе различные методы омики с метаболомическим анализом. Он включает в себя геномику (таргетирование ДНК), эпигеномику (для метилирования ДНК и некодирующей РНК), транскриптомику (мессенджерная РНК) и протеомику (экспрессия белка) с нецелевым метаболомическим МС-анализом для обнаружения малых молекул [14]. Эти исследования также имеют тенденцию включать методы визуализации, которые способны отслеживать движение отдельных белков и молекулярных комплексов

Рис. 6. Одноклеточная паномика, сочетающая геномику, эпигеномику, транскриптомику и протеомику с метаболомическим анализом

в субклеточных образованиях, отражая динамику большого числа макромолекулярных сборок.

Приведенный выше пример иллюстрирует основные характеристики аналитической химии (см. рис. 3б). Во-первых, такие эксперименты дают чрезвычайно большие многомерные коллекции данных с многотысячными отдельными выборками, каждая из которых порождает чрезвычайно сложный набор значений. Во-вторых, составные аналитические данные интегрированы и должны интерпретироваться вместе с данными, полученными на платформе «-омик». В-третьих, это исследование, скорее, порождает гипотезы, чем управляется ими.

Методы многомерного масштабирования используются для визуализации объектов в виде точек на низкоразмерных метрических картах для более глубокого понимания и визуализации сходства большого числа различных объектов, таких как клетки. Эти методы являются адаптацией метода анализа основных компонентов и основаны, например, на довольно популярном применении стохастического вложения соседей с t-распределением [15], подходе, особенно хорошо подходящем для визуализации многомерных наборов данных.

Таким образом, химическая визуализация и биоанализ – основные области развития науки в Эру Больших Данных. Они производят огромное количество информации. Теперь мы должны соотнести их с традиционными понятиями аналитической химии, как они были, так и остаются, с акцентом на метрологии.

Аналитическая химия и физика

Многие новые области химического анализа используют физические методы. Наиболее впечатляющие успехи аналитической химии связаны с непосредственным наблюдением атомов (например, с помощью электронного микроскопа) и молекулярных структур (например, благодаря флуоресцентной масс-спектрометрии или вибрационной микроскопии). Максимальное пространственное разрешение, которого можно достичь, – это измерение на уровне отдельного атома или молекулы. Чтобы определить концентрацию молекул, лучше всего подсчитать количество молекул в данном объеме. До тех пор, пока объем содержит статистически достаточно большое число молекул и находится выше предела пуассоновского шума, подсчет атомов или молекул потенциально является наиболее точным (а также наиболее прямым) способом измерения [16]. Такая аналитическая химия настолько хороша, насколько это вообще возможно.

Одним из частных примеров влияния физики на развитие аналитической химии является колебательная спектроскопия. На макроскопическом уровне инфракрасная, рамановская и флуоресцентная спектроскопия – довольно нечувствительные методы из-за значительного несоответствия между размерами молекул и длиной волны соответствующего излучения. В 1974 году Флейшман (Fleischmann) и др. [17] опубликовали информацию о значительно усиленных сигналах комбинационного рассеяния от пиридина, адсорбированного на серебряном электроде, этот эффект называется усиленным поверхностью комбинационным рассеянием (УПКР). УПКР оставалось аналитически непригодным для использования в течение многих лет из-за своей неустойчивой природы до тех пор, пока не были выяснены детальные механизмы, участвующие в локализованном поверхностном плазмонном резонансе (ЛППР) в зависимости от морфологических деталей. Сегодня используется метод спектрометрии комбинационного рассеяния усиленной острием (УОСКР), чувствительный инструмент молекулярного обнаружения и визуализации с пределом обнаружения вплоть до одной молекулы [18, 19]. Наночастицы металла также могут быть использованы для повышения чувствительности флуоресцентного детектирования, поскольку они генерируют явление, известное как усиленная металлом флуоресценция, тем самым увеличивая время жизни флуоресценции и ее квантовые выход. Мы определяем этот революционный процесс трансформации из научного любопытства в сверхчувствительный аналитический инструмент как метаморфозу.

В аналитической химии есть много других подобных метаморфоз, многие из которых Ричард Фейнман (Richard Feynman) точно предвидел в своей знаменитой лекции в Калифорнийском технологическом институте в 1959 году: появление нанотехнологий, экстремальная миниатюризация, прямое манипулирование отдельными атомами и бесконечно малые механизмы [20]. Он утверждал, что со временем электронный микроскоп станет достаточно мощным, чтобы локализовать и идентифицировать атомы с точностью до нескольких пикометров (10^{-12} м). Он также прокомментировал химический анализ и его дальнейшее развитие в следующей пророческой позиции: «...физика обеспечивает основы химии. Но в химии тоже есть анализ. Если у вас есть странная субстанция и вы хотите знать, что это такое, вы проходите через долгий и сложный процесс химического анализа. Сегодня вы можете анализировать почти все, так что я немного опоздал со своей идеей. Но если бы физики захотели, они могли

бы также копать под химиков в проблеме химического анализа. Было бы очень легко провести анализ любой сложной химической субстанции, все, что нужно было бы сделать, – это посмотреть на нее и увидеть, где находятся атомы».

В последние годы неуклонный прогресс в области просвечивающей и сканирующей просвечивающей электронной микроскопии обеспечил сверхточное определение атомного расположения непериодических структур в материалах и контроль наноструктур [21]. Это позволяет объяснить различные свойства материала, например, что деформация, вызванная рассогласованием решетки между подложкой и сверхпроводящим слоем, выращенным сверху, может изменять межатомные расстояния на несколько пикометров и таким образом превращать изолятор в проводник [22]. Кроме того, как и предполагал Фейнман, вскоре мы можем получить детальные изображения сложных механизмов жизненных процессов с атомным разрешением. Нобелевская премия по химии за 2017 год была присуждена за разработку криоэлектронной микроскопии, которая одновременно упрощает и улучшает прямое изображение формы и детальной структуры отдельных биомолекул in situ. Можно измерить в динамике детальное структурное расположение отдельных белковых молекул, в определенных местах клеточной мембраны. Этот новый метод резко контрастирует с обычной кристаллографией белков, при котором необходимо кристаллизовать молекулу для измерения коллективной структуры. Сможет ли этот метод в конечном итоге заменить рентгеновскую дифракцию кристаллизованного материала для структурной характеристики?

Но был ли Фейнман прав со своим методологически редукционистским и творчески разрушительным предсказанием об аналитической химии? Конечно, нет, как он сам объяснил в воспоминаниях в своей книге «Конечно, вы шутите, мистер Фейнман» [23]. Подход, основанный на непосредственном наблюдении атомных полей с помощью электронного микроскопа для решения задач аналитической химии, остается – и, несомненно, останется в будущем – скорее, исключением, чем правилом. Это объясняется тем, что Фейнман рассуждает как физик, а аналитическая химия базируется на фундаментальном подходе химии: аналитическая химия включает физику, но не является частью физики.

Аналитическая химия и химия

И физика, и химия имеют дело с веществом и его взаимодействием с энергией, но эти две дисциплины различаются по своему подходу, поскольку они наблюдают научный мир с разных точек зрения и под разным углом. В физике обычно абстрагируются от конкретного типа вещества и сосредотачиваются на общих свойствах многих различных материалов, в то время как химия изучает характеристики вещества со значительно большей детализацией.

Бернадетт Бенсод-Венсан (Bernadette Bensaude-Vincent), философ химии и соавтор книги Chemistry – the impure science [24], посвященной философским и историческим основам химии, выражает это различие следующим образом [25]: «в оптике, например, материалы характеризуются своим показателем преломления, и материалы с одинаковым показателем преломления будут иметь одинаковые свойства. Химия, с другой стороны, фокусируется на том, какие соединения присутствуют в образце, и исследует, как изменение структуры молекул изменит их реакционную способность и физические свойства».

Мы приходим к выводу, что аналитическая химия – это химия, и не только потому, что химия сформировала ее индивидуальность. Это особая дисциплина в химии; фактически, наряду с синтезом, она остается одним из основных столпов, на которых химия базируется. Она тщательно изучает состав природных и искусственных объектов. Она заимствует научные знания и технологические разработки – как из самой химии, так и из других наук, таких как физика, биология и т. д., и от технологических разработок – для основной задачи решения того или иного научного или технического вопроса с помощью множества различных подходов. Вот почему аналитическую химию теперь часто называют «аналитическими науками». Как таковая, она легко включает в свою сферу и охватывает, а затем поглощает возможности, предлагаемые нанотехнологией, а также потенциал электронной микроскопии для непосредственного наблюдения атомов, а не заменяется этими разработками.

Что такое аналитическая химия в 2020 году?

В то время как химия направлена на поиск сочетаний элементарных частиц и тех взаимодействий, которые они создают с молекулярными и надмолекулярными соединениями, аналитическая химия (как часть химии) следит за этими процессами. Это может быть сделано на нескольких уровнях сложности, первичный – характеристика состава и его количественное описание или, более подробно, где расположены элементы, как они связаны друг

с другом. Эта точка зрения предполагает, что аналитическая химия включает в себя изучение всего, что характеризует объект, естественный или искусственный, твердый или мягкий, живой или нет, на основе внешнего вида, структуры или свойств. В таких условиях основной постулат аналитической химии и ее связь со стандартными метрологическими концепциями (неопределенность, валидация и/или прослеживаемость к фундаментальным единицам), по-видимому, утрачивают свою ведущую роль.

При таком развернутом толковании мы можем просто резюмировать, что есть аналитическая химия, процитировав Вирджинию Вулф (конечно, в совершенно другом контексте): «Я не одна и не проста, а сложна и многогранна».

Обсуждение

Итак, постараемся оценить место аналитической химии в химии и науке в целом с учетом того, как она развивалась в течение последних двух десятилетий. Сосредоточимся на научных аспектах *1* и *2* рис. 1, при этом хорошо понимая важность технологической роли дисциплины в *3*. Новые области применения дисциплины, рассмотренные ранее, относятся к теории систем, междисциплинарному изучению систем, к системному, а не к аналитическому мышлению. Возможно, было бы странно рассматривать аналитическую химию как переход, по крайней мере, частично, к методу синтетического мышления, но тем не менее ее достижения дают такие основания.

Аналитическая химия и метрология

Анализируя рис. 3а и отмечая важное место измерения в аналитическом процессе, можно прийти к убеждению, что раз аналитическая химия имеет дело с измерениями и поскольку метрология является наукой об измерениях, то аналитическая химия является частью метрологии. Такое (по-видимому, ложное) применение логики дедуктивного метода приводит к переосмыслению аналитической химии как науки об измерениях, химической метрологии или химической измерительной науке [26, 27]. Именно поэтому во многих учебниках циркулируют (и поддерживаются европейскими учеными обществами) такие определения: «Аналитическая химия – это метрологическая дисциплина для разработки, оптимизации и применения измерительных процессов с целью получения качественной (био)химической информации о природных и искусственных системах».

Ситуация значительно усложняется, если речь идет о больших данных. Качество измерений остается важным, но правильная интерпретация данных усугубляется многими другими источниками ошибок. В мире все более автономных компьютерных систем программные ошибки представляют собой большую угрозу, чем когда-либо прежде.

Хотя нельзя отрицать, что метрология формализует практику проведения надежных измерений в аналитической химии и в других научных областях, такие утверждения представляют собой, выражаясь психологическими терминами, когнитивный диссонанс для нас, авторов этого обзора, а также, вероятно, для многих других химиков аналитиков.

Как и любая другая научная дисциплина, аналитическая химия должна быть верным пользователем метрологических принципов, но не более того. Исторически метрология возникла из определения единиц измерения и до сих пор в значительной степени доминирует. На практике требования к правильности и прецизионности могут варьироваться в зависимости от целей и задач анализа, а также от природы объекта [28]. Аналитическая химия и химический анализ зависят от наличия информации и принципов научного поиска, правил и практики научной объективности [29]. Они отвечают концепции «согласованных результатов», с помощью которой можно прийти к компромиссному соответствию между аналитическими результатами [30]. Такой подход, важный и за пределами аналитического сообщества, опирается на основные философские идеи, касающиеся научной истины. Они выражены в научно-философских дискуссиях, например Карла Поппера (Karl Popper) [31], и научно-философских концепциях, таких как соразмерность, введенных Томасом Куном (Thomas Kuhn) и Полом Фейерабендом (Paul Feyerabend).

Одним словом, основы науки должны быть возвращены в дисциплину. В развитие этой мысли отметим, что Джонатан Суидлер (Jonathan Sweedler) предложил повторяемость и воспроизводимость как основные показатели качества для аналитической химии и Analytical Chemistry в качестве главного научного журнала [32].

Несколько лет назад возникла критическая ситуация, связанная с результатами психологических исследований, основанных на функциональной медицинской резонансной томографии. Из-за неисправного программного обеспечения для интерпретации данных попытки повторно воспроизвести полученные ранее результаты оказались

неудачными [33]. Такое событие не уникально для психологии. Неспособность воспроизвести важные результаты была также задокументирована в доклинических исследованиях рака, поведенческих социальных науках и экспериментальной экономике, а также в других областях [34]. Именно такие примеры приводят к идее о том, что метрология должна адаптироваться к процессам принятия решений в Эру Больших Данных и трансформироваться в интеллектуальную метрологию: от метрологии контрольно-измерительных приборов до метрологии принятия решений [35].

Аналитическая химия в Эру Больших Данных: химический анализ в 21 веке

В начале 21 века мы стали свидетелями рождения новой промышленной (цифровой) революции. Появилась возможность хранить данные из различных источников (в частности, через связанные с ними предметы) в беспрецедентно больших количествах и эксплуатировать их с помощью все более высоких вычислительных мощностей с использованием методов искусственного интеллекта (ИИ) и машинного обучения. В этом новом сценарии под названием «Большие данные» надежность становится незаменимым критерием: большой объем собранных данных и их анализ совершенно бесполезны, если хранится ненадежная информация, которая не может помочь понять сложную реальность. В совершенно ином контексте Роб Китчин (Rob Kitchin) подробно описывает, что большие данные велики по объему (состоят из терабайт, даже петабайт данных), высоки по скорости (создаваемые в реальном времени или почти в реальном времени), многообразны (структурированные и неструктурированные по своей природе) и исчерпывающи по объему (стремящиеся охватить целые популяции или системы) [36]. При таком «управляемом данными» ходе исследований аналитические измерения проводятся для разработки и подтверждения новых гипотез, а не для проверки существующих и использования нецелевого подхода. А центральное понятие традиционной аналитической химии – аналит – и его связь со стандартными метрологическими понятиями (неопределенность, валидация и/или прослеживаемость до фундаментальных констант), по-видимому, утрачивают свою ведущую руководящую роль.

Аналитические приборы в целом и инструменты химической визуализации в частности следуют концепциям четвертой промышленной революции в области интеграции различных технологий. В своей основе четвертая промышленная революция представляет собой беспрецедентное слияние цифровых, физических и биологических технологий и вытекающую из этого ожидаемую трансформацию в том, как производятся и используются продукты [37]. Как участник процесса аналитическая химия становится партнером в более крупном научно-техническом объединении, чем химия.

Мы должны изучить конкретные обстоятельства и посмотреть, как они влияют на основы аналитической химии как научной дисциплины.

Системное мышление против аналитического мышления

В системном мышлении единичное измерение становится частью конгломерированного взаимосвязанного объекта, значение которого превышает сумму его частей. В табл. 1 кратко представлены некоторые из наиболее важных различий между обоими мыслительными процессами. Аналитическое мышление – это процесс разделения, при котором схожие измерения, понятия и идеи разделяются между собой. Напротив, системное (или синтетическое) мышление – это интегративный процесс объединения концептуальных различий [38].

Аналитическая химия системного типа действует на метауровне всего эксперимента вместо того, чтобы концентрироваться на деталях. Это подход к пониманию более широкой картины состава и структуры объекта анализа, а не отдельных измерений, путем объединения его частей воедино. Он контрастирует с существовавшими десятилетиями редукционистскими взглядами, которые постепенно разбирали фрагменты на

Таблица 1. *Различия между аналитическим и системным мышлением*

Аналитический подход	Системный подход
Редукционистский подход	Целостный (сравнительный) подход
Акцент на деталях	Объединяет и концентрирует внимание на взаимодействии между объектами изучения
Выделяет объекты изучения, затем концентрируется на одной или нескольких деталях	Подчеркивает глобальное восприятие
Ведет к действию, запрограммированному в деталях	Ведет к действию через цели
Обладает знанием деталей, но плохо сформулированы цели	Обладает знанием целей, нечеткий в деталях

Таблица 2. Синтетическое мышление в аналитической химии «нового стиля»

Аналитическое мышление	Синтетическое мышление
Наука, опирающаяся на измерения	Наука, опирающаяся на информацию
Фокусируется на неопределенности измерений	Фокусируется на формировании научного консенсуса
Метрология является доминирующим фактором	Допускает некоторые уровни неопределенности
Отдает предпочтение однородности	Научная истина, возможность опровержения
Гетерогенность является источником аналитической погрешности	Фокусируется на гетерогенности
Основана на профильном образовании и методическом подходе	Изучаемая область – природные и технологические объекты
	Основана на междисциплинарном образовании и проблемно-ориентированном подходе

части, концентрируясь на индивидуальных измерениях [39]. Основные различия этих двух подходов к аналитической химии обобщены в табл. 2. Удивительно, но новые концепции аналитической химии реагируют, скорее, на синтетическое, а не аналитическое мышление и на концепции решения проблем.

Является ли современная аналитическая химия все еще частью химии?

Наука подразделяется на отдельные дисциплины не по какому-либо естественному закону, а по практическим соображениям, и химия – одна из таких дисциплин. Но можно ли считать аналитическую химию все еще химией в ее нынешнем состоянии развития? Этот вопрос имеет важные последствия и предостережения, которые следует обсудить.

Обратимся к центральному вопросу, вызывающему озабоченность: какова сегодня основная деятельность аналитической химии? Должны ли исследования и образование в области аналитической химии быть организованы внутри химических факультетов в университетах или исследовательских центрах? На все эти вопросы нет однозначного ответа, но они заслуживают тщательного обсуждения.

Этимология и семиотика аналитической химии

Мы уже говорили о том, что аналитическая химия не может быть отождествлена ни с метрологией, ни с физикой. Часто утверждается, что название «аналитическая химия» больше не соответствует предметной области дисциплины, и что оно относится к периоду, когда аналитическая химия была не более чем совокупностью «мокро-химических» методов анализа. Такой термин может рассматриваться как исторический артефакт точно так же, как школы живописи, например, «Фламандские примитивисты» или «Прерафаэлиты» – исторические имена, которые не отражают их реального содержания и не являются точным описанием конкретного вида искусства.

Фламандские примитивисты не были по сути примитивными художниками в 15 веке. Напротив, они занимали передовые позиции художественного и технического развития своего времени. Прерафаэлиты – группа британских художников, которые привнесли новаторский подход в художественное искусство второй половины 19 века, подчеркивая духовное родство с флорентийскими художниками эпохи раннего Возрождения.

Сегодня никто по-настоящему не возражает против этих, казалось бы, совершенно ложных наименований. Мы можем воспользоваться аналогичными аргументами для аналитической химии – можно просто терпеливо дождаться момента, когда этот термин приобретет значение, далеко выходящее за пределы ее нынешнего, буквального значения. И на самом деле эта ситуация уже сложилась.

Лингвистика, занимающаяся наименованиями, пересекается с философскими соображениями. Собственное имя должно принадлежать конкретному объекту, но конкретные имена могут также относиться и к коллективному целому. Это происходит с семантикой аналитической химии. Сегодня эта дисциплина представляет собой широкую совокупность методов, связанных не только с химией, но также с физикой и биологией. Особое значение имеет изучение эволюционных процессов, которые за последние два миллиарда лет привели к появлению множества потенциально важных материалов. Увеличивается влияние технологических областей на устойчивое удовлетворение потребностей и ожиданий общества завтрашнего дня [40].

Повторное крещение дисциплины в «аналитическую науку» или «аналитическую науку и технологию» даст некоторое преимущество, поскольку эти термины охватывают основную деятельность – анализ, а также исследовательскую часть и применение аналитической науки, – и выведут ее в более

широкий научный контекст. «Но что в имени тебе моем? Роза пахнет розой, хоть розой назови ее, хоть нет» (У. Шекспир «Ромео и Джульетта»).

Однако мы продолжаем считать, что аналитическая химия – это правильное название, поскольку связывает ее с дисциплиной, к которой она принадлежит – химией. Самый высоко цитируемый журнал в этой дисциплине имеет название Analytical Chemistry; он публикует материал гораздо шире, чем химические исследования, и никто, кажется, не возражает. Официальное определение аналитической химии IUPAC начинается следующим образом: научная дисциплина, которая разрабатывает и применяет методы, инструменты и подходы к получению информации о составе и природе вещества. Это определение прошло через бесчисленные заседания комитета, и никто, кажется, не возражает против него.

Резюмируя все вышесказанное, отметим, что лучше избегать любого определения аналитической химии, которое говорит просто: «Аналитическая химия – это то, чем занимаются аналитические химики».

Аналитическая химия в образовании

Два основных принципа общенаучной практики – количественная оценка и систематизация. В этой связи уже на ранних этапах обучения студентам объясняют важность понятий «неопределенность измерений» и «воспроизводимость результатов». Тем удивительнее, что в различных дисциплинах, особенно в естественных науках, для количественной оценки данных и проверки физических теорий используются относительно простые или устаревшие методические приемы.

То же самое происходит и с учебными планами по химии. Систематический подход опирается на кажущуюся простоту периодической системы, а затем получает дальнейшее развитие во внутренней сложности органической химии, ее номенклатуры и синтеза. Количественные аспекты дисциплины вводятся с упрощенной точки зрения: принципы количественной оценки вводят в дисциплину на основе понятий равновесной химии. Как бы ни были важны эти глубоко укоренившиеся принципы в образовании химика, они дают устаревший взгляд. Когда в большинстве учебников это дополняется инструментальным химическим анализом, обучение начинает носить фрагментарный характер и сопровождаться глубоким разделением между органическим и неорганическим анализом и строгим дифференцированием методических подходов. В целом, в этой картине доминирует измерение как таковое и его точность. В большинстве учебников отсутствуют новые холистические синтетические подходы к решению проблем, описанные нами выше.

Сегодня предпринимаются многочисленные образовательные инициативы по обновлению учебных программ по аналитической химии, причем как на уровне традиционной химии и измерительной науки (см. рис. 3а), так и на междисциплинарном, информационно-научном уровне (см. рис. 3б). Магистерская программа Erasmus Mundus EACH (Excellence in Analytical CHemistry – Особые успехи в аналитической химии), например, остается в основном монодисциплинарной (химия) и на уровне измерений и метрологии [41]. Инициатива Graduate School SALSA (Высшая школа аналитических наук Адлерсхоф), с другой стороны, предлагает структурированные междисциплинарные исследования в сочетании с интегрированным курсом по аналитической химии [42]. Эта инициатива осуществляется в Берлинском университете Гумбольдта, следуя открытым интегративным концепциям Александра фон Гумбольдта [43]. Оба этих подхода имеют свои плюсы и минусы в подготовке молодых химиков-аналитиков к решению стоящих перед ними сложных задач.

В целом мы считаем, что образовательные усилия в области аналитической химии должны быть сосредоточены на участии химиков в междисциплинарных и метапредметных командах, а не на установление дисциплинарных границ химии.

Видное место аналитической химии в науке

По мнению Мигеля Валькарселя (Miguel Valcárcel), аналитическая химия не воспринимается адекватно и даже рассматривается как научная дисциплина второго сорта. Он относит это к давним предрассудкам химиков из других дисциплин и даже профессионалов из других областей, принижающих аналитиков-химиков [44]. Мы полагаем, что такие негативные взгляды, если они действительно где-то существуют, порождаются в самом сообществе и являются следствием отсутствия самоуважения химиков-аналитиков. Эта дисциплина – не Золушка, страдающая от незаслуженного пренебрежения, а научный центр, могучий источник влияния и вдохновения.

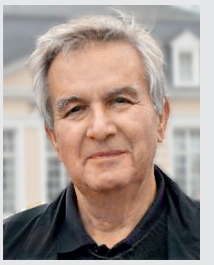
Профессиональный успех выпускников аналитической химии очевиден. Показано, что в Европе не хватает хорошо образованных химиков-аналитиков [45]. Значительная часть грантов Европейского исследовательского совета последних лет выделяется на инновационные

исследовательские проекты, связанные с химическим анализом или разработкой аналитических методов. В табл. 3 представлен краткий перечень Нобелевских премий за прошлые пять лет и место в них химического анализа. Особое место принадлежит биоанализу и исследованию наноструктур. Вклад аналитической химии в премию по физике 2018 года задокументировано в недавней статье М. С. Асплунда (M. C. Asplund) и др. [46]. Важность лазеров и инструментов для манипулирования наноразмерными образцами очевидна. То, что два других примера относятся к области аналитической химии, может быть, конечно, оспорено, но мы твердо верим, что это так. Премия по химии 2014 года посвящена обнаружению и отслеживанию в пространстве одиночных биомолекул с целью изучения процессов их взаимодействия, а премия по химии 2018 года – измерению детального структурного расположения отдельных белковых молекул in situ в конкретных клетках.

Выводы и перспективы

Сегодня аналитическая химия опирается на взаимовлияние состава, структуры и структурных дефектов, с одной стороны, и свойств и функциональности мягких и твердых материальных объектов – с другой. Она ушла от области исследований, ориентированных только на химию, к более широкому междисциплинарному знаменателю, аналогичному таким областям, как спектрометрия, материаловедение или экология. Химия остается основой развития аналитической химии, и ее применение в химическом анализе присутствует во всей этой научной сфере. Аналитическое оборудование и аналитические методики эффективно востребованы наукой и обществом. В некотором смысле аналитическая химия подобна эмигранту, мигранту (а не беглецу): она имеет свои корни в химии, но ее амбиции и перспективы распространены по всей науке, предназначены для промышленности и общества.

Коротко об авторах



Фредди Адамс был профессором химии в Университете Антверпена (UA) (Бельгия), где преподавал аналитическую химию и радиохимию. Его исследования включали фундаментальную аналитическую химию и прикладные науки в области материаловедения, экологии, искусства и археологии. Он был соучредителем и директором Центра микро- и следового анализа в университете и был ректором UA в течение 12 лет. В настоящее время он остается почетным профессором, занимается своей прежней профессиональной деятельностью и наукой в целом.

Мике Адрианс – старший полный профессор в области аналитической химии в Университете Гента (Бельгия). Она уже несколько лет занимается разработкой и оптимизацией спектроэлектрохимического оборудования (т. е. сопряжением электрохимических и спектроскопических методов), изучением ингибирования коррозии металлов, в том числе разработкой защитных покрытий. Она имеет опыт работы более 25 лет в междисциплинарной области науки и культурного наследия.

Таблица 3. *Недавние Нобелевские премии, связанные с аналитической химией*

Год	Дисциплина	Кому присуждена	Мотивировка (тематика)
2014	Химия	Эрик Бетциг, Стефан Хелл, Уильям Мернер (Eric Betzig, Stefan Hell, William Moerner)	Флуоресцентная микроскопия со сверхразрешением
2017	Химия	Жак Дюбоше, Иоахим Фрэнк, Ричард Хендерсон (Jacques Dubochet, Joachim Frank, Richard Henderson)	Криоэлектронная микроскопия для определения структуры биомолекул в растворе с высоким разрешением
2018	Физика (совместно)	Артур Ашкин (Arthur Ashkin)	Оптические пинцеты и их применение в биологической системе
		Жерар Муру, Донна Стрикленд (Gérard Mourou, Donna Strickland)	Метод генерации высокоинтенсивных ультракоротких лазерных импульсов

Аналитическая химия новой эпохи больших данных не повторяет традиционные концепции аналитической химии; она является олицетворением, аватаром, новой концептуальной формой. Она все еще нуждается в полной интеграции в концептуальные рамки дисциплины. Направления технологии больших данных не могут развиваться, полагаясь на цели и перспективы, основанные на обеспечении качества отдельных измерений. Будущее должно опираться на связь множества аналитических результатов в сочетании с другой соответствующей информацией. Интегрированные данные в этом случае больше, чем просто сумма их частей, потому что способ их объединения порождает иное качество. Это древняя концепция, которая, как предполагается, берет свое начало у Аристотеля.

Главным в понимании и принятии дисциплины в ее новой форме является то, какую практическую пользу она приносит обществу и науке. Аналитическая химия больших данных не может полагаться на человеческие суждения. Люди восприимчивы к когнитивным предубеждениям; они склонны искать информацию, подтверждающую их прежние взгляды. Но и применение искусственного интеллекта не лишено риска [47]. В мире все более автономных компьютерных систем программные ошибки становятся еще большей угрозой, чем когда-либо прежде. Предстоит проделать большую фундаментальную работу по обеспечению качества сбора, обработки и сокращения данных. Использование хемометрии необходимо для преобразования данных в полезную информацию. В конечном счете, «умная метрология» сыграет свою роль во всем этом.

Только время покажет, когда приоткроется занавес над тем, как, в конечном счете, будет развиваться дисциплина и какие новые, теперь уже совершенно неожиданные метаморфозы она претерпит в долгосрочной перспективе.

Благодарность

Автор Freddy Adams выражает свою благодарность отделу аналитической химии Европейской ассоциации химиков Химических и молекулярных наук за премию DAC-EuChemS 2019 года. Эта премия лежит в основе настоящего документа.

Соблюдение этических норм

Эта глава не содержит никаких исследований с участием людей или животных, выполненных кем-либо из авторов.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет никакого конфликта интересов.

References

1. **Harvey D.** Analytical chemistry 2.0. 2009. http://dpuadweb.depauw.edu/harvey_web/eTextProject/version_2.0.html. Accessed 26 Aug 2019.
2. **Murray R. W.** An editor's view of analytical chemistry (the discipline). Annu Rev Anal Chem. 2010; 3: 1–18.
3. **Brenner S.** The revolution in the life sciences. Science. 2012; 338: 1427–8.
4. **Dyson F. J.** Is science mostly driven by ideas or by tools? Science. 2012; 338: 1426–1427.
5. **Schumpeter J. A.** Capitalism, socialism and democracy (original edition 1942). London: Routledge; 1994.
6. **Adams F., Barbante C.** Chemical imaging analysis. Amsterdam: Elsevier; 2015.
7. **Adams F., Collingwood J.** Atomic spectrometry | imaging methods. In: Worsfold P., Poole C., Townshend P., Miró M., editors. Encyclopedia of analytical science. 3rd ed. Amsterdam: Elsevier; 2019. P. 239–46.
8. **Alexandrov T., Chernyavsky I., Becker M., von Eggeling F., Nikolenko S.** Analysis and interpretation of imaging mass spectrometry data by clustering mass-to-charge images according to their spatial similarity. Anal Chem. 2013; 85(23): 11189–95.
9. **Kalinin S. V., Sumpter B. G., Archibald R. K.** Big-deep-smart data in imaging for guiding materials design. Nat Mater. 2015; 14: 973–80.
10. **Raes J., Bork P.** Molecular eco-systems biology: towards an understanding of community function. Nat Rev Microbiol. 2008; 6: 693–9.
11. **Ibrahim Y. M., Hamid A. M., Deng L., Garimella S. V., Webb I. K., Baker E. S., et al.** New frontiers for mass spectrometry based upon structures for lossless ion manipulations. Analyst. 2017; 142: 1010–2017.
12. **Teschendorff A. E.** Avoiding common pitfalls in machine learning omic data science. Nat Mater. 2019; 18: 422–7.
13. **Doan M., Carpenter A. E.** Leveraging machine vision in cell-based diagnostics to do more with less. Nat Mater. 2019; 18: 414–8.
14. **Gorrochategui E., Jaumot J., Lacorte S., Tauler R.** Data analysis strategies for targeted and untargeted LC–MS metabolomics studies. Trends Anal Chem. 2016; 82: 425–42.
15. **van der Maaten L.J.P, Hinton G. E.** Visualizing nonmetric similarities in multiple maps. Mach Learn. 2012; 8: 33–55.
16. **Walt D. R.** Optical methods for single molecule detection and analysis. Anal Chem. 2013; 85: 1258–63.
17. **Fleischmann M., Hendra P. J., McQuillan A. J.** Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. Chem Phys Lett. 1974; 26: 163–6.
18. **Zhang R., Zhang Y., Dong Z. C., Jiang S., Zhang C., Chen L. G., et al.** Chemical mapping of single molecules by plasmon enhanced Raman scattering. Nature. 2013; 498: 82–6.
19. **Graefe C. T., Punihaole D., Harris C. M., Lynch M. J., Leighton R., Frontiera R. R.** Far-field super-resolution vibrational spectroscopy. Anal Chem. 2019; 91: 8723–31.
20. **Feynman R. P.** There's plenty of room at the bottom. Eng Sci Mag. 1960; 23(5): 22–36.
21. **Van Aert S., De Backer A., Martinez G. T., den Dekker A. J., Van Dyck D., Bals S. et al.** Advanced electron crystallography through model based imaging. IUCrJ. 2016; 3: 71–83.
22. **Locquet J. P., Perret J., Fompeyrine J., Mächler E., Seo J. W., Van Tend eloo G.** Doubling the critical temperature of La1.9Sr0.1CuO4 using epitaxial strain. Nature. 1998; 394: 453–6.
23. **Feynman R. P., Gates B., Leighton R.** Surely you're joking, Mr. Feynman! Adventures of a curious character. New York: W. W. Norton & Company; 1985.

24. **Bensaude-Vincent B., Simon J.** Chemistry – the impure science. 2nd ed. London: Imperial College Press; 2008.
25. **Bensaude-Vincent B.** The chemists' style of thinking. Ber Wiss. 2009; 32(4): 365–78.
26. **Paull B.** Analytical science – a complex and diverse union. Anal Methods. 2012; 4: 19.
27. Analytical Methods Committee. Chemical metrology. Anal Methods. 2016; 8: 8119–26.
28. **Dolmanova I. F.** Metrology in chemical analysis. In: Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS). 2018. https://www.eolss.net. Accessed 26 Aug 2019.
29. **Sweedler J. V., Armstrong D. W., Baba Y., Desmet G., Dovichi N., Ewing A., et al.** The scope of analytical chemistry. Anal Chem. 2015; 87: 6425.
30. **Andersen J. E., Buchberger W., Worsfold P.** European analytical column no 41. Anal Bioanal Chem. 2013; 405: 5361–4.
31. **Popper K.** The logic of scientific discovery (first English ed. 1959). London: Routledge; 2002.
32. **Sweedler J. W.** Reproducibility and replicability. Anal Chem. 2019; 91: 7971–2.
33. **Eklund A., Nichols T. E., Knutsson H.** Cluster failure: why fMRI inferences for spatial extent have inflated false-positive rates. Proc Natl Acad Sci. 2016; 113: 7900–5.
34. **Adam D.** The data detective. Nature. 2019; 571: 462–4.
35. **Lazzari A., Pou J. M., Dubois C., Leblond L.** Smart metrology: the importance of metrology of decisions in the Big Data Era. IEEE Instrum Meas Mag. 2017;17:1094–6969.
36. **Kitchin R.** Big data and human geography: opportunities, challenges and risks. Dialogues Hum Geogr. 2013; 3(3): 262–7.
37. **Schwab K.** Will the fourth industrial revolution have a human heart? In: World Economic Forum. 2015. https://agenda.weforum.org/2015/10/will-the-fourth-industrial-revolutionhave-a-humanheart-and-soul. Accessed 26 Aug 2019.
38. **Feist G. J.** Synthetic and analytical thought: similarities and differences among art and science students. Creat Res J. 1991; 4: 145–55.
39. **Johnson R. H., Hamby B.** A meta-level approach to the problem of defining critical thinking. Argumentation. 2015; 29: 417–30.
40. **King A. H.** Our elemental footprint. Nat Mater. 2019; 18: 408–9.
41. **Leito I., Teearu A., Bobacka J., Randon J., Bergquist J.** EACH (Excellence in analytical CHemistry), an Erasmus Mundus joint programme: progress and success. Anal Bioanal Chem. 2019; 411: 5913–21.
42. **Montes-Bayón M., Kneipp J., Panne U.** Report on KOSMOS Summer University at the School of Analytical Sciences Adlershof (Berlin): limits and scales in analytical sciences. Anal Bioanal Chem. 2015; 407: 4869–72.
43. **Guarin A.** Alexander von Humboldt and the origins of our modern geographical view of earth. In: Janelle DG, Warf B, Hansen K, editors. WorldMinds: geographical perspectives on 100 problems. Dordrecht: Springer; 2004. P. 607–11.
44. **Valcárcel M.** Quo vadis, analytical chemistry? Anal Bioanal Chem. 2016; 408: 13–21.
45. **Salzer R., Taylor P., Majcen N., De Angelis F., Wilmet S., Varella E., et al.** The professional status of European chemists and chemical engineers. Chem Eur J. 2015; 21: 9921–35.
46. **Asplund M. C., Johnson J. A., Patterson J. E.** The 2018 Nobel Prize in physics: optical tweezers and chirped pulse amplification. Anal Bioanal Chem. 2019; 411: 5001–5.
47. **Gauglitz G.** Artificial vs. human intelligence in analytics. Anal Bioanal Chem. 2019; 411: 5631–2.

КАЗАНЬ 2020

Электрохимические методы анализа (ЭМА-2020)

Уважаемые коллеги!

С 16 по 20 ноября 2020 г. в Казани пройдет X Юбилейная Всероссийская конференция по электрохимическим методам анализа **«ЭМА-2020»**. Казанский федеральный университет является одним из признанных отечественных лидеров в данной области аналитической химии и мы сделаем все, чтобы конференция прошла на высоком уровне.

Место проведения: г. Казань, санаторий «Крутушка» ***Тел.:*** +79173901888 ***E-mail:*** ema2020kazan@gmail.com

Оргкомитет конференции ЭМА-2020

Президиум:
- Золотов Ю.А., академик РАН, г. Москва
- Брайнина Х.З., д.х.н., профессор, Уральский экономический университет
- Галкин В.И., д.х.н., профессор, директор Химического института им. А.М. Бутлерова Казанского федерального университета

Сопредседатели:
- Будников Г.К., д.х.н., профессор, г. Казань
- Евтюгин Г.А., д.х.н., профессор, г. Казань

Ученый секретарь:
- Порфирьева А.В., к.х.н.

Члены Оргкомитета:
- Ермаков С.С., д.х.н., профессор, г. Санкт-Петербург
- Зиятдинова Г.К., д.х.н., доцент, г. Казань
- Карякин А.А., д.х.н., профессор, г. Москва
- Козицина А.Н., д.х.н., г. Екатеринбург
- Короткова Е.И., д.х.н., профессор, г. Томск
- Кулапина Е.Г., д.х.н., профессор, г. Саратов
- Майстренко В.Н., д.х.н., профессор, г. Уфа
- Михельсон К.Н., д.х.н., профессор, г. С-Петербург
- Слепченко Г.Б., д.х.н., профессор, г. Томск
- Стожко Н.Ю., д.х.н., профессор, г. Екатеринбург
- Супрун Е.В., д.б.н., г. Москва
- Темердашев З.А., д.х.н., профессор, г. Краснодар
- Шайдарова Л.Г., д.х.н., профессор, г. Казань
- Широкова В.И., к.х.н., г. Москва
- Шпигун Л.К., д.х.н., профессор, г. Москва

Рабочая группа:
- к.х.н. Белякова С.В.
- к.х.н. Иванов А.Н.
- к.х.н. Кузин Ю.И.
- к.х.н. Шамагсумова Р.В.