

МЕТОДОЛОГІЧНІ ПИТАННЯ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

ЕЛЕКТРОННІ МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ І. І. МЕЧНИКОВА
ФАКУЛЬТЕТ ХІМІЇ ТА ФАРМАЦІЇ
КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ТА ТОКСИКОЛОГІЧНОЇ ХІМІЇ

МЕТОДОЛОГІЧНІ ПИТАННЯ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

ЕЛЕКТРОННІ МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
для здобувачів третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
спеціальності ЕЗ Хімія, ОНП Хімія

ОДЕСА
ОНУ
2025

УДК 543:001.89
M545

Укладачі:

Д. В. Снігур, кандидат хімічних наук, доцент кафедри аналітичної та токсикологічної хімії;

О. М. Гузенко, кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри аналітичної та токсикологічної хімії.

Рецензенти:

С. В. Топоров, кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри аналітичної та токсикологічної хімії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова;

Л. А. Раскола, кандидат хімічних наук, доцент, доцент кафедри неорганічної хімії та хімічної освіти Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

*Рекомендовано вченою радою факультету хімії та фармації
ОНУ імені І. І. Мечникова.
Протокол № 7 від 24 квітня 2025 р.*

M545 **Методологічні** питання аналітичної хімії [Електронний ресурс] : електрон. метод. вказівки для здобувачів третього (освіт.-наук.) рівня вищ. освіти спец. ЕЗ Хімія, ОНП Хімія / уклад.: Д. В. Снігур, О. М. Гузенко. – Одеса : Одес. нац. ун-т імені І. І. Мечникова, 2025. – 41 с. – 1 МБ.

Пропоновані методичні вказівки стануть у нагоді хімікам-аналітикам для розширення наукового кругозору, що необхідно для професійного усвідомленого підходу до вирішення актуальних методологічних завдань та аналітичних проблем загалом при вивченні дисципліни «Методологічні питання аналітичної хімії», яка викладається здобувачам третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти при вивченні дисципліни спеціальності ЕЗ Хімія факультету хімії та фармації Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

УДК 543:001.89

ЗМІСТ

	Стор.
ВСТУП	4
1. МЕТОДОЛОГІЯ НАУКИ ТА ЇЇ ПРАКТИЧНА ЗНАЧУЩІСТЬ	5
2. АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ: ВАЖЛИВІСТЬ ТА ПРОБЛЕМА ДЕФІНІЦІЇ	9
3. ОБ'ЄКТ І ПРЕДМЕТ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ	17
3.1. Об'єкт досліджень	17
3.2. Предмет досліджень	18
4. СТРУКТУРА РЕЧОВИНИ ЯК ПРЕДМЕТ ДОСЛІДЖЕНЬ АНАЛІТИКІВ	21
5. ЦІЛІ І ЗАВДАННЯ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ	24
5.1. Створення методик	24
5.2. Розвиток методів	26
5.3. Загальноаналітичні дослідження	27
6. АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ – ФУНДАМЕНТАЛЬНА ЧИ ПРИКЛАДНА НАУКА?	28
7. АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ В СИСТЕМІ НАУК ТА ЇЇ МІЖДИСЦИПЛІНАРНИЙ ХАРАКТЕР	33
7.1. Аналітика та метрологія	35
ПИТАННЯ ДО ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ	38
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	40

ВСТУП

І наука в цілому, і окремі науки повинні вивчати самі себе, таке «самопізнання» є дуже важливим для їхнього розвитку. Методичні вказівки покликані сформулювати чіткі уявлення про внутрішню єдність історії виникнення, становлення та розвитку наукової дисципліни «аналітична хімія» з історією системи хімічних дисциплін, з розвитком практичного використання хімічного знання відповідних історичних епох для цілей хімічного аналізу як засобу отримання інформації про хімічний склад. Курс призначений для розширення наукового кругозору хіміків-аналітиків, що необхідно для професійного усвідомленого підходу до вирішення актуальних методологічних завдань та аналітичних проблем загалом.

У межах методологічної частини курсу розглянуто взаємозв'язок найважливіших понять, концепцій та моделей, що використовуються в аналітичній хімії для вирішення практичних завдань, а також їх зв'язки з особливими акцентами у цій хімічній науці. В історичному аспекті простежено розвиток та зміну змісту аналітичної хімії на основі формування її «дефініцій», обґрунтованості виділення в окрему галузь хімічної науки, а також взаємодію з основними елементами загальної методології природознавства. Виховний момент курсу підкреслять відомостями про життя і творчість найбільших вчених, про наукові школи, що внесли принциповий, визначальний внесок у розвиток теорії та застосування аналітичної хімії від минулих часів до сучасності. Особливу увагу приділено історії вітчизняної аналітичної хімії, зокрема, її розвитку у XX столітті, обумовленому об'єктивними потребами розвитку науки та промисловості.

1. МЕТОДОЛОГІЯ НАУКИ ТА ЇЇ ПРАКТИЧНА ЗНАЧУЩІСТЬ

Термін «методологія» багатозначний, тобто його можна розуміти по-різному, залежно від контексту. В загальнофілософському плані методологія – вчення про структуру, логічну організацію, методи і засоби якої-небудь діяльності. У контексті наукової діяльності методологію вважають вивченням шляхів збільшення та упорядкування знань. Конкретизуючи це визначення, можна сказати, що це наука про способи та засоби раціоналізації наукової діяльності. Загальна методологія науки – частина філософії. Вона розглядає існування та досяжність об'єктивної наукової істини, критерії істинності знань, способи пізнання (індуктивний і дедуктивний). Філософи обговорюють способи систематизації наукових знань, принципи створення та перевірки наукових гіпотез, емпіричний і теоретичний рівні знань тощо. Далі ці питання не розглядаються.

Методологічні аспекти окремих наук не є частиною філософії, вони обговорюються в рамках цих наук. Методологічні дослідження проводять не філософи, а фізики, хіміки, математики, біологи та інші фахівці, що мають досвід наукової діяльності і здатні підніматися до філософських узагальнень. Склад дослідників визначає вибір і рівень узагальнення вихідних даних, характер висновків, понятійний апарат, мову і стиль відповідних публікацій. Звісно, філософи та історики також намагалися займатися методологічними аспектами окремих наук, але, як правило, їхні висновки та рекомендації виявлялися нечіткими, а інколи й помилковими. Причина – недостатнє знання специфіки відповідних наук. Як писав Оствальд: «Філософія ніколи не повинна посягати на завдання спеціальних наук; якщо вона намагається це зробити, то необхідними наслідками є одразу чи через деякий час найбрутальніші помилки».

Кваліфіковані спеціалісти цілком здатні ефективно вирішувати методологічні проблеми своїх наук. Справді, хто краще за астрономів може судити про цілі, напрямки та методи астрономічних досліджень? Разом з тим, думки вузьких спеціалістів з методологічних питань суб'єктивні, не завжди обґрунтовані і, як правило, не збігаються між собою. Іноді спеціалісти сперечаються навіть щодо того, як називати ту чи іншу науку, чи має вона право на самостійне існування або є розділом іншої науки. Вирішувати, хто правий, більшістю голосів у науці неможливо, «більшість» досить часто помиляється.

Які ж методологічні проблеми своєї науки повинні обговорювати спеціалісти? Для будь-якої окремої науки (як і для кожної конкретної роботи, наприклад, кандидатської дисертації) повинні бути чітко визначені об'єкт, предмет, мета та завдання дослідження. Потрібно дати дефініцію цієї науки; визначити її структуру та зміст, виявити взаємозв'язки з іншими науками і практикою. Для кожної науки бажано виявити і охарактеризувати притаманні їй рівні дослідницької діяльності. Важливо також виявити основні поняття цієї науки; зазвичай вони утворюють єдину ієрархічну систему. Так, для хімії в цілому основними поняттями є «елемент», «сполука» і «хімічна реакція». Для органічної хімії такими поняттями стали «хімічне будова» та «реакційна здатність». Аналітична хімія також має свій набір основних понять. На нашу думку, до цього набору входять поняття «хімічний склад», «аналітичний сигнал», «метод аналізу».

Виникає природне питання: чи потрібно спеціалістам (астрономам, хімікам, археологам, інженерам) займатися методологічними проблемами своїх наук? Можливо, від спеціалістів вимагаються лише конкретні досягнення в їхніх вузьких областях? Зневажливе ставлення до методології (емпіризм) досить поширене. Особливо характерний емпіризм для початківців, які не встигли розібратися навіть у своїй вузькій області. Їм не до узагальнень, та й психологічно вони до таких узагальнень ще не готові. Але, крім молоді, в нашій країні відторгає філософію і методологію чимало учених зрілого віку, але вже з іншої причини. Справа в тому, що в радянський період одну з філософських систем (марксизм) у свідомість учених впроваджували насильно. Як захисна реакція у багатьох виробилось відторгнення будь-якої філософії та методології.

Однак відмова від розгляду методологічних проблем не менш небезпечна, ніж підміна справжньої науки порожніми розмовами на методологічні теми; вакуум у свідомості буде заповнений випадковим набором помилкових уявлень.

Як вже зазначалося, нехтування методологією, як і помилки при вирішенні методологічних проблем, призводять до небезпечних наслідків. Це особливо помітно у сфері взаємин науки і державної влади. Найяскравіший приклад – осуд деяких окремих наук як «шкідливих» і «неправдивих» з подальшими заборонами і репресіями. У античний період у ряді країн забороняли хімію, в Середньовіччі – анатомію і фізіологію, а в XX столітті в нашій країні – генетику і кібернетику. Це робилося з різних причин, але найчастіше через непорозуміння методології науки. Окремі

наукові теорії можуть бути правильними чи помилковими, але це ніяк не пов'язано з філософськими поглядами, політичними переконаннями чи анкетними даними їх авторів. Адекватність і значущість наукових теорій перевіряється експериментами і ефективністю практичних рекомендацій, а не рішеннями державних діячів і не голосуваннями академіків.

Розвиток науки в цілому вимагає логічної, очевидної і загальноприйнятої класифікації наук, встановлення деяких демаркаційних ліній, правильної організації взаємодії суміжних наук. Для цього окремі наукові спільноти повинні чітко визначити предмет, об'єкт і зміст своїх наук. «Імпорт» теоретичних уявлень або експериментальних методів із суміжних наук можливий і бажаний, але чужі досягнення повинні бути творчо перероблені з урахуванням специфіки власної науки, дотично до предмету і рівня своїх досліджень.

Рішення методологічних проблем важливо для об'єднання і ефективної взаємодії вчених. На жаль, часто люди, які вирішують одні й ті ж завдання, але використовують різні методи або вивчають різні об'єкти, вважають себе діячами різних наук, мало спілкуються і не використовують досягнень один одного.

У науковому середовищі, яке прагне до однієї і тієї ж мети, зазвичай складаються певні методичні прийоми проведення досліджень. Їх потрібно знати і використовувати, щоб отримані результати були зрозумілі і прийняті колегами. Це не суперечить доцільності застосування нових методичних прийомів, самостійно розроблених дослідником. Йому потрібно лише довести, що нові прийоми в даному випадку доречні та ефективні.

Оволодіння методологією певної науки допомагає спланувати експеримент, правильно провести його та осмислити результати дослідження. Першим кроком повинно бути усвідомлення проблемної ситуації, виявлення деякої суперечності (наприклад, між потребами суспільства та можливостями відомих методів або теорій). Потім необхідно правильно сформулювати мету та завдання майбутнього дослідження, а також визначити його рівень. Зазначимо, що правильно поставити задачу та скласти логічний план її вирішення часто набагато складніше, ніж вирішити задачу, вже поставлену керівником. Неточність вихідних положень або неправильний вибір об'єктів дослідження не можна компенсувати великим обсягом експерименту або застосуванням найсучасніших (зазвичай складних і дорогих) приладів. Іноді формулювання вихідної задачі підганяють під звичні прийоми вирішення замість того, щоб шукати нові

прийоми, адекватні вихідній задачі. Очевидно, кожен дослідник повинен застосовувати ті схеми експерименту (зокрема, способи моделювання), які найбільше підходять для завдань цього типу.

Методологічні аспекти окремих наук особливо важливі при інтерпретації результатів експерименту. Дослідник завжди формулює свої висновки на основі обмеженого обсягу даних. При цьому навіть велика кількість спостережень і експериментів не доводить істинність і універсальність гіпотези, що базується на цих спостереженнях. Як писав філософ К. Поппер, скільки б прикладів появи білих лебедів ми не спостерігали, все це не виправдовує висновок «Усі лебеді білі». Водночас без подібних індуктивних узагальнень наука, а й взагалі людська діяльність, були б неможливі.

Фахівці в галузі точних наук звикли до визначеності висновків, доказовості аргументів, об'єктивних та безсумнівних кількісних оцінок. Але в галузі методології, як і в філософії, неможливо щось остаточно довести чи спростувати, оскільки неможливо провести контрольний експеримент. Пропоновані тим чи іншим автором методологічні рекомендації завжди будуть мати відносний і певною мірою суб'єктивний характер. Досягти єдиної думки з методологічних проблем науки набагато важче, ніж з конкретними питаннями, що вивчаються цією наукою. Саме тому з методологічних проблем деяких конкретних наук періодично виникають дискусії, які часто не приводять до загального рішення. Але навіть незавершені дискусії не є безплідними. Вони дозволяють, хоча й повільно, рухатися до єдиного розуміння основних понять, знаходити рішення, прийнятні для всіх учасників дискусії. Самі учасники спорів починають враховувати існування інших точок зору, висувати дедалі точніші та зваженіші аргументи, більш продумано формулювати свої позиції та висновки. Але необхідні не тільки дискусії, але й глибокі філософсько-методологічні дослідження в області часткових наук.

Методологічні аспекти різних наук викликають неоднаковий інтерес. Велика увага завжди приділялася проблемам теоретичної фізики (особливо квантової механіки), широко обговорювалися проблеми генетики, молекулярної біології, всесвітньої історії, педагогіки та кібернетики. В цьому ж ряду наук знаходиться аналітична хімія. Методологічні проблеми нашої науки були предметом численних публікацій та усних дискусій; їх обговорюють частіше, ніж методологічні аспекти інших хімічних наук.

Змінюються не тільки методи аналізу, але й основні поняття та ідеї, тобто парадигма аналітичної хімії.

Далі будуть розглянуті наступні методологічні проблеми:

- характеристика аналітичної хімії як науки (дефініція, об'єкт і предмет, цілі та завдання);
- рівні та спрямованість досліджень, фундаментальні та прикладні аспекти нашої науки, взаємозв'язок аналітичної хімії та аналітичної служби;
- положення аналітичної хімії в системі наук і доцільність зміни назви цієї науки;
- внутрішня структура аналітичної хімії як науки та як навчальної дисципліни.

2. АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ: ВАЖЛИВІСТЬ ТА ПРОБЛЕМА ДЕФІНІЦІЇ

Систематичний розгляд методологічних проблем аналітичної хімії логічно почати з її дефініції (чіткого та короткого словесного визначення певного поняття). У науці не так вже й багато незмінних дефініцій; із розвитком науки всі дефініції шліфуються, уточнюються, розширюються і навіть зазнають радикальних змін. Як правило, дефініції є суб'єктивними. Однак кожна конкретна наука повинна виробити єдину та загальноприйнятну термінологію; особливо важливо єдине розуміння основних понять цієї науки. Цього досягають через широке обговорення дефініцій (а також інших термінологічних питань) у пресі та на наукових конференціях. Важливість чітких дефініцій неодноразово підкреслювали багато мислителів, починаючи з Платона і Конфуція. Є й інша точка зору, що займатися дефініціями не варто, є інші, більш конкретні справи; хай дефініціями займаються науковці, якщо їм це цікаво. Таку позицію не можна вважати правильною, вона відображає не стільки неймовірну зайнятість серйозних людей, скільки примітивне незнання, як піднятися над повсякденними завданнями, перейти на рівень філософських узагальнень.

Пошук адекватного, чіткого та прийнятного для всіх визначення аналітичної хімії триває вже кілька десятиліть. Це не дивно: проблеми з дефініціями характерні для всіх наук, які періодично змінюють свій зміст і

навіть основні ідеї. Звичайно, всі аналітики інтуїтивно знають, який саме зміст вони вкладають у поняття «аналітична хімія».

Чітке та єдине визначення аналітичної хімії як науки необхідне для студентів, які вивчають курс аналітичної хімії або обирають таку спеціалізацію. Ще важливіше воно для викладачів, особливо тих, хто пише навчальні посібники. Не випадково найбільший інтерес до методологічних проблем нашої науки виявляють викладачі кафедр аналітичної хімії.

Про це добре сказав відомий український хімік-аналітик В. П. Антонович: «...ефективність викладання та засвоєння будь-якої наукової дисципліни залежить від того, наскільки чітко і адекватно (бажано лаконічно) сформульовано визначення предмета вивчення. Особливо необхідні однозначні визначення понять, які складають предмет спору. Строгі та логічно обґрунтовані формулювання мети, предмета, об'єкта дослідження, наукової новизни та практичної цінності його результатів, висновків служать показником кваліфікації здобувача наукового ступеня і сприяють успішному захисту дисертації. У випадку класичних розділів хімії (неорганічної, фізичної, органічної) дефініції відповідних предметів сформульовані досить давно і в різних підручниках, енциклопедичних статтях загального характеру наведені з деякими акцентами, доповненнями, які не мають принципового характеру. Принаймні ці різниці, як правило, не викликають дискусій на сторінках спеціалізованих наукових видань. І тільки у випадку аналітичної хімії давно ведуться і не припиняються суперечки щодо дефініції цієї затребуваної галузі науки».

Єдине та добре обґрунтоване визначення нашої науки необхідне не тільки викладачам. Система атестації фахівців вищої кваліфікації не може базуватися на інтуїтивних або суб'єктивних міркуваннях. Дисертаційні роботи перевіряються на відповідність їх змісту вказаній автором науковій спеціальності, при цьому враховують дефініцію відповідної часткової науки. Дуже бажано, щоб розуміння того, що таке сучасна аналітична хімія, з'явилося і у тих керівників, хто зацікавлений у розробці та застосуванні нових методик (потенційні замовники або спонсори). Щоб вони не думали, що аналітики розбираються тільки в хімічних реакціях, а сучасними методами аналізу займаються фізики. Зазначимо, що деякі спектроскопісти та хроматографісти самі не вважають себе аналітиками, оскільки, як вони запевняють їхня робота не пов'язана з хімічними реакціями. Очевидно, застаріле і надто вузьке розуміння терміна «Аналітична хімія», що прив'язує

нашу науку до проведення хімічних реакцій, штучно роз'єднує фахівців, які вирішують одні й ті самі завдання, але розвивають різні методи аналізу.

Суперечки щодо того, що таке аналітична хімія і якою вона повинна бути, зазвичай спалахували в періоди кардинальних змін у її змісті.

Можна зазначити дискусії щодо співвідношення якісного та кількісного аналізу за часів Лавуазьє, а також необхідності теоретичного обґрунтування хімічних методів аналізу (за часів Оствальда).

Особливо гострою була дискусія, що розпочалася в 1970-х роках, до якої долучилися Х. Малисса (Австрія), М. Валкарсель (Іспанія), К. Данцер (Німеччина), Д. Массар (Бельгія), а також І. П. Алімарин, В. П. Антонович, Ю. А. Золотов та інші. У ході цієї дискусії обговорювались не лише дефініція науки «Аналітична хімія», але й проблема єдності цієї науки, її структура, зміст відповідної навчальної дисципліни та багато іншого. Ця дискусія завершилася лише на початку ХХІ століття.

Дискусії, пов'язані з методологічними проблемами нашої науки, виникають не випадково; їхньому виникненню сприяють наступні фактори:

1. Науки про процеси і методи (генетика, кібернетика, педагогіка) важче формують свої теоретичні основи і частіше викликають дискусії, ніж науки про конкретні матеріальні об'єкти (ботаніка, хімія полімерів, океанологія). До перших відноситься й аналітична хімія, яка розглядає процес аналізу і використовувані в ньому методи.
2. Хімічний аналіз – це і спосіб вивчення явищ і закономірностей у природі, і спосіб вирішення прикладних завдань (аналітичний контроль). Аналітики, що вирішують такі різні завдання, часто погано розуміють одне одного.
3. Для історії нашої науки характерна постійна зміна пріоритетних об'єктів і методів аналізу.
4. Характер досліджень різних представників аналітичної спільноти (наприклад, спеціалістів у галузі титриметрії, хроматографії та атомної спектроскопії) дуже специфічний; теоретичні основи відповідних методів та зв'язки з іншими науками також різні. Це обставина, яка характерна саме для аналітичної хімії. Багато інших наук є внутрішньо більш однорідними, в їх межах дискусії щодо методологічних питань не виникають. Прикладом може бути колоїдна хімія або ботаніка.

Розглядаючи дефініції окремих наук, потрібно заздалегідь уточнити, який саме аспект науки мається на увазі. Адже неможливо дати точне

визначення терміну «коса», якщо одна людина має на увазі жіночу зачіску, друга – сільськогосподарський інвентар, а третя – виступ суші. Термін «наука» також позначає три різні речі: науку як соціальне явище (спільноту вчених, сукупність наукових установ); науку як результат досліджень (систему наукових знань); науку як процес (вид діяльності).

Термін «аналітична хімія» також має кілька значень. «Аналітичною хімією» можна назвати систему знань в галузі хімічного аналізу. Зміст цієї системи знань всі фахівці уявляють собі приблизно однаково, і спроба дати визначення цієї науки в цьому аспекті навряд чи викликала б суперечки. Аналітичну хімію можна розглядати як процес, як вид наукової діяльності. Ось у цьому питанні існують серйозні розбіжності в думках, саме вони й призводять до різних відповідей на питання «Що таке аналітична хімія?», тобто до різних дефініцій нашої науки (див. табл. 2.1).

На жаль, безсумнівної, загальновизнаної та усталеної дефініції не існує. Не випадково редакція журналу *Fresenius Journal of Analytical Chemistry* оголосила у 1991 році конкурс на найкращу дефініцію. Відгукнулося 23 фахівця з різних країн, було прийнято компромісне визначення, однак дискусії не припинилися. У літературі можна знайти кілька десятків різних дефініцій науки «аналітична хімія». У табл. 2.1 наведено лише деякі з них, створені практично одночасно – у 70- 80-х рр. XX ст., тобто під час останньої дискусії.

Можна виділити чотири основні групи дефініцій:

1. **Аналітична хімія – наука про визначення хімічного складу.** Однак слід зазначити, що окрім визначення складу інколи в предмет аналітичної хімії включають встановлення хімічної будови або, ще ширше, структури речовини.
2. **Аналітична хімія – наука про методи хімічного аналізу.** Це прагматичне визначення, при цьому в деяких дефініціях додатково підкреслюється завдання розробки теоретичних (фундаментальних) основ методів.
3. **Аналітична хімія – наука про отримання і формування сигналів, що несуть інформацію про хімічний склад.** Це визначення пов'язане з інформатикою та кібернетикою. На початку XXI століття дефініції цієї групи почали включати й метрологічні аспекти науки, прикладом можуть бути роботи іспанського аналітика М. Валькарсея.
4. **Аналітична хімія – наука про вимірювання хімічної форми руху матерії.** Це визначення філософське.

Проаналізуємо ці дефініції. Філософське визначення (4) можна відразу відкинути, оскільки вимірюванню підлягають тільки фізичні величини, а не форми руху матерії, які є чисто філософським поняттям. До того ж будь-який процес вимірювання вимагає одиниць і еталонів, які в цьому випадку відсутні. Виміряти можна кількість речовини, але це виключає важливу частину науки – якісний аналіз.

Інформаційно-кібернетичні дефініції (3) заслуговують на увагу. Можливо, в майбутньому вони привернуть більше уваги, але наразі вони залишаються неприємними для багатьох аналітиків, оскільки не охоплюють важливу частину хіміко-аналітичних досліджень, такі як інтерпретація сигналів, ідентифікаційні та класифікаційні завдання, локальний аналіз та вивчення структури речовин.

Таблиця 2.1

Дефініції аналітичної хімії

Ключова ознака	Дефініція	Авторство
Наука про визначення хімічного складу	Наука про визначення хімічного складу речовини	А. Б. Шасевич, 1964
	Наука, що займається розділенням і визначенням хімічних речовин. Завданням аналітичної хімії традиційно вважалося визначення хімічного складу речовини, однак наразі все більше значення набувають визначення хімічної структури та вимірювання фізичних властивостей речовини	Дж. Фрітц, Г. Шенк, 1978
Наука про методи визначення складу (про методи аналізу та їх теоретичні основи)	Наука про методи вивчення складу речовини	Ю. А. Клячко, 1970
	Наука про методи аналізу речовини	А. П. Крешков, 1979
	Наука про методи (способи) визначення складу речовини	А. І. Бусєв, 1953, 1961
	Галузь хімічної науки, що розробляє методи встановлення складу речовини	Ю. В. Морачевський, 1956
	Наука про хімічні та фізичні методи вивчення складу неорганічних і органічних речовин та їхніх сумішей.	І. П. Алімарин, 1970

Ключова ознака	Дефініція	Авторство
	Наука про способи ідентифікації хімічних сполук, про принципи та методи визначення хімічного складу речовин і їхньої хімічної структури	Ю. А. Золотов, 1977
	Наука про принципи, методи ідентифікації та визначення атомного (або молекулярного, речовинного та фазового) складу речовин і матеріалів, а також їхньої хімічної структури	Ю. С. Ляліков, 1978
	Наука, що розвиває теоретичні основи аналізу хімічного складу речовин та розробляє методи ідентифікації, виявлення, визначення і розділення хімічних елементів, їх сполук, а також вивчення хімічної будови	І. П. Алімарин, 1983
	Наука, що розвиває теоретичні основи хімічного аналізу та розробляє методи визначення хімічного складу речовин і, в певній мірі, хімічної будови сполук	Ю. А. Золотов, 1980
	Наукова дисципліна, що вивчає характерні властивості речовин, які є проявом їх хімічного складу, створюючи та розвиваючи методи хімічного аналізу	Л. М. Москвін, 1990
Інформаційний аспект	Наука про формування аналітичних сигналів, що несуть інформацію про хімічний склад проби, та про подавлення впливу шумів, які обмежують точність і межі виявлення методів аналізу	Ю. І. Беляєв, 1977
	Наука, що займається отриманням інформації про склад окремих видів речовини та методів аналізу, що використовуються для цього	К. Данцер, 1975
	Наука про отримання та інтерпретацію сигналів, що містять інформацію про склад і структуру речовин та матеріалів	П. Марке, 1987
Філософський аспект	Наука про вимірювання хімічної форми руху (хімічна метрологія)	М. П. Комарь, 1963

Перше визначення (1) викликає найменше дискусій, воно універсальне. Однак його використання зіграло б негативну роль, оскільки стосується не тільки аналітичної хімії як галузі науки, але й аналітичної служби, яка виконує масові аналізи за стандартними методиками. Ці галузі часто плутають. Декілька вчених, навіть лауреати Нобелівської премії, заявляли, що аналітична хімія – це практично дуже важлива справа, аналізи робити, звісно, треба, але особлива наука для цього не потрібна, такої науки й не існує! Недооцінка аналітичної хімії часто пов'язана з певним методологічним стереотипом: вважається, що кожна наука характеризується предметом і методом, причому предмет – головне; а метод – це засіб, він змінюється, він на другорядних ролях. Але цей стереотип не універсальний. В неорганічній чи органічній хімії методи справді грають роль засобу, вони не визначають суті цих наук. А от аналітична хімія – наука про методи, саме вони є головним у предметі цієї науки. Є й інші науки про методи: медицина – наука про методи лікування (передусім, але не тільки), педагогіка – наука про методи навчання.

З методологічної та утилітарної точки зору найбільш прийнятними здаються визначення типу (2), автори яких вважають аналітичну хімію наукою про методи хімічного аналізу. Звісно, поняття «аналіз» має бути розкрито в самій дефініції. Саме таке визначення було прийнято VIII Європейською конференцією з аналітичної хімії (Euroanalysis VIII, Единбург, вересень 1993 р.). Проект був підготовлений групою провідних спеціалістів-аналітиків з різних країн Європи (В. Фрезеніус, М. Грассербауер, Р. Кельнер, Х. Малісса, Л. Нійністе і Е. Пунгор) і потім схвалений Відділом аналітичної хімії Федерації європейських хімічних товариств. В оригіналі дефініція виглядає так: «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». У перекладі це може виглядати наступним чином: «Аналітична хімія – наукова дисципліна, яка розвиває і застосовує методи, засоби і загальну методологію отримання інформації про склад і природу речовини».

Звісно, це визначення – суттєвий етап на шляху до «ідеального», тим більше що воно схвалене міжнародним об'єднанням аналітиків. Однак навряд чи слід думати, що проблема дефініції вирішена; можливо, вона ніколи і не буде остаточно вирішена. Наведене визначення також викликає

сумніви. Зокрема, застосування методів – це справа не стільки науки, скільки аналітичної служби. Варто уточнити, що йдеться саме про хімічний склад речовин. Автори дефініції не врахували необхідності вивчення будови і структури речовин (на додаток до вивчення їх складу). Не все ясно з обставинами місця і часу (ймовірно, автори мали на увазі локальний і динамічний аналіз). Більш прийнятним визначення, дуже близьке до наведеної вище дефініції, але дещо уточнює її:

Аналітична хімія – це наука, яка створює і розвиває загальну методологію, методи і засоби встановлення хімічного складу, хімічної будови і природи речовин і розробляє способи хімічного аналізу конкретних матеріальних об'єктів.

Ймовірно, це визначення відповідає будь-яким методам, видам і об'єктам аналізу. Перша частина визначення відповідає фундаментальному, а друга – прикладному аспекту нашої науки. Зазначимо, що це визначення (як і багато інших) містить поняття «хімічний склад» і «хімічне будова», які потребують додаткового розгляду та чіткого визначення.

Слід звернути увагу на присутнє в прийнятій дефініції поняття «природа речовин». У попередніх дефініціях нашої науки «природа речовин» не згадувалася. Справа в тому, що в 1980-1990-х роках багато аналітиків стали вирішувати ідентифікаційні та класифікаційні завдання (віднесення досліджуваних об'єктів до того чи іншого класу), не визначаючи компоненти проби та не визначаючи кількісні вмісти її компонентів. Ці аналітики вимірювали деякі фізичні властивості проби і порівнювали їх з аналогічними властивостями об'єктів відомої природи, що складають навчальну вибірку. Прикладом можуть бути віднесення проби кави до того чи іншого сорту за допомогою потенціометричної мультисенсорної системи або виявлення фальсифікованих лікарських препаратів за їх спектрами поглинання в ближній ІЧ-області. У таких випадках класифікаційні завдання вирішуються з використанням хемометричних алгоритмів, а критерії віднесення проби до того чи іншого класу формуються на основі теорії ймовірностей. Відповідні прості та експрес-методи розпізнавання речовин стали дуже зручним інструментом аналітичного контролю, особливо в нафтохімічній, фармацевтичній та харчовій промисловості. Новий напрям досліджень став настільки важливим і популярним, що в дефініцію аналітичної хімії включили «встановлення природи речовин» поряд з «встановленням хімічного складу», і це правильно. Фактично відбулося суттєве розширення меж нашої науки, ще не цілком усвідомлене

більшістю аналітиків. Але, наскільки нам відомо, ніхто не заперечує проти включення класифікаційних завдань (в тому числі завдань лабораторної діагностики) до переліку завдань, які вирішують аналітики. В історії аналітичної хімії цей перелік вже неодноразово розширювали; колись йшлося лише про елементний аналіз, а в XIX столітті до нього додали молекулярний. У XX столітті до того ж переліку включили локальний та структурно-груповий аналіз. В даний час до числа завдань аналітичної хімії все частіше відносять вивчення будови або навіть структури речовин. Зокрема, в США до аналітики відносять рентгеноструктурний аналіз і ЯМР-спектрометрію, хоча ці методи спрямовані не стільки на визначення складу речовин, скільки на вивчення їх кристалічної структури та/або встановлення будови молекул.

3. ОБ'ЄКТ І ПРЕДМЕТ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

3.1. Об'єкт досліджень

Філософи називають об'єктом те, що протистоїть пізнаючому суб'єкту, зокрема досліднику, який працює в тій чи іншій області науки. Якщо немає об'єкта дослідження – немає і відповідної науки. Прикладом може бути псевдонаука «уфологія»: якщо прибульців з космосу немає, то вивчати їм нема чого. Для природничих наук характерні матеріальні об'єкти дослідження (для астрономії – небесні тіла, для зоології – тварини, для органічної хімії – сполуки вуглецю тощо). Об'єкти хіміко-аналітичних досліджень також матеріальні. Це будь-які речовини – неорганічні та органічні, природні та синтетичні, низькомолекулярні та високомолекулярні, в будь-якому агрегатному стані та за будь-яких умов. Коло таких об'єктів постійно розширюється. Ще три століття тому воно включало здебільшого мінерали та метали, пізніше до нього потрапили органічні речовини та об'єкти навколишнього середовища, потім біооб'єкти, космічні об'єкти і багато іншого. Природно, увага дослідників перемикається то на одні, то на інші об'єкти аналізу. Змінюється при цьому і набір об'єктів визначення або виявлення (аналітів).

Методологічне поняття «об'єкти дослідження» для нашої науки включає поняття «об'єкти аналізу», але не співпадає з ним. Методологічне поняття значно ширше. Як об'єкт дослідження розглядають не тільки об'єкти аналізу, але й аналіти, і сам процес аналізу. Аналогічні концепції

прийняті в інших науках. Наприклад, об'єкт дослідження палеонтологів – не стільки рештки вимерлих тварин, скільки процес біологічної еволюції.

В історії нашої науки спостерігається цікава тенденція: в XVIII і XIX століттях, коли вона лише формувалася, процес аналізу ще не вважався об'єктом досліджень. За часів Лавуазьє могла б з'явитися стаття під назвою «Аналіз гіпсу методом зважування», але навряд чи могла б з'явитися робота «Шляхи підвищення точності вагового аналізу». Починаючи з Фрезеніуса, аналітики-дослідники все більше займалися осмисленням і оптимізацією процесу аналізу. Наприклад, порівнянням і узагальненням окремих методик, формуванням системи методів і, зрештою, вирішенням аналітичних проблем, загальних для різних методів і об'єктів. А конкретні об'єкти все частіше стали «передавати» практикам із контрольно-аналітичних лабораторій або фахівцям суміжних наук. Діяльність дослідників і практиків в XXI столітті стала настільки різною, що в англійській літературі стали розрізняти поняття analytical chemist (аналітик-дослідник) і chemical analyst (аналітик-практик).

В даний час процес аналізу вважається основним об'єктом досліджень аналітиків, хоча вони й продовжують визначати склад різних матеріальних об'єктів. Роботи, не пов'язані з розробкою методик або розвитком методів аналізу, багато хто навіть не вважає хіміко-аналітичними.

3.2. Предмет досліджень

Одні й ті самі об'єкти можна вивчати з різних боків, цим займаються різні науки. Так, сільськогосподарське виробництво – об'єкт досліджень агрономів, тваринників і економістів, навчальний процес – об'єкт досліджень педагогів, психологів і педіатрів. Тому в методології науки на додаток до поняття «об'єкт дослідження», з'явилося важливе поняття «предмет дослідження». Так називають сукупність властивостей об'єкта, яка цікавить цього дослідника і безпосередньо пов'язана з метою його роботи. Будь-який вчений вивчає свій об'єкт з якоїсь однієї сторони, виділяє ті ознаки об'єкта, які найбільш суттєві для його науки. При дослідженні бензину аналітика цікавить його хімічний склад і особливо методи визначення цього складу. Інші властивості бензину вивчають інші науки. Токсичністю бензину займаються гігієністи, виробництвом бензину – технологи, собівартістю бензину займаються економісти і т. д.

Осмислення предмета окремої науки, а також предмета конкретного дослідження, дуже важливе. Розмитість, невизначеність предмета певної

науки (наприклад, екології) ускладнює її розвиток. Часто спостерігається поділ науки, єдиної за своїм об'єктом (наприклад, медицини), на низку окремих наукових дисциплін (диференціація), кожна з яких має окремий предмет. Ці науки поступово втрачають зв'язки між собою, що ускладнює їх розвиток.

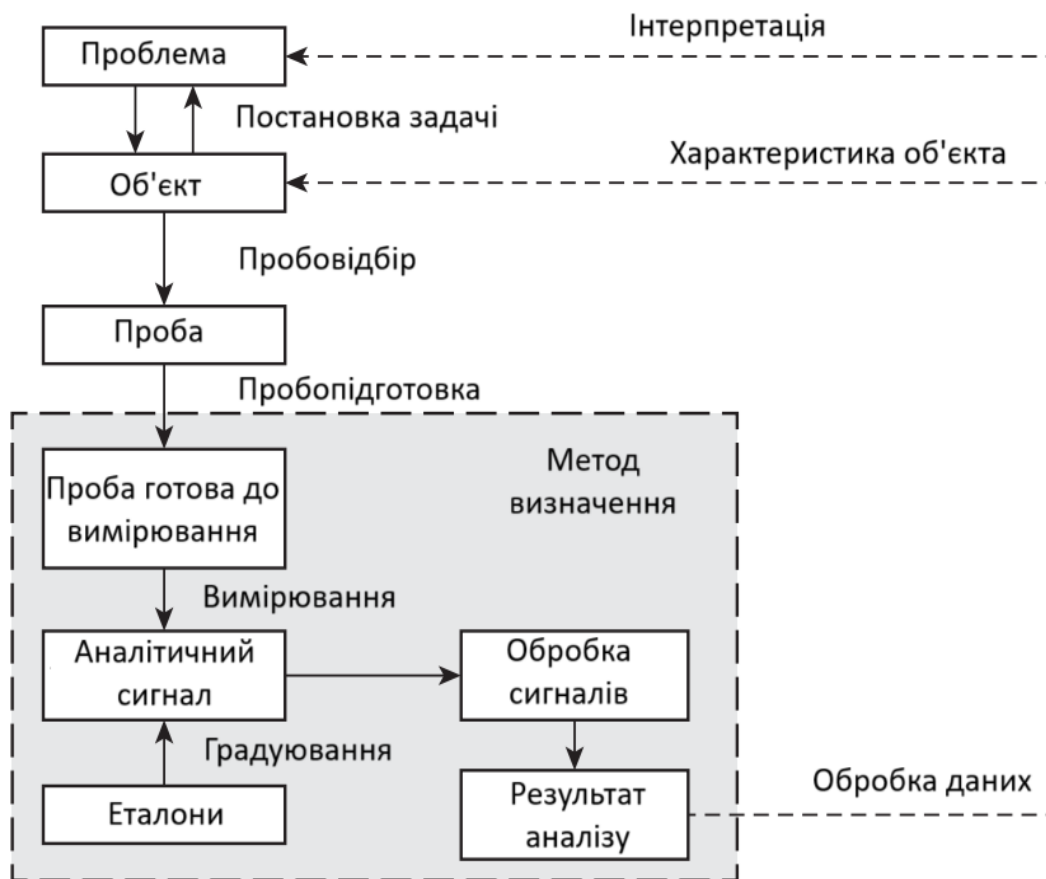


Рис. 3.1 Основні етапи аналізу

Незважаючи на очевидну важливість визначення предмета аналітичної хімії, в літературі це питання обговорюється рідко і поверхнево. В першому наближенні можна вважати, що предметом аналітичної хімії як науки є хімічний склад речовин і методи його встановлення. Причому основним предметом нашої науки є саме методи. Дослідники створюють нові методи якісного і кількісного аналізу, розвивають їх, уточнюють або розширюють межі їх застосування і порівнюють різні методи. Саме тому поняття «метод аналізу» входить до більшості дефініцій нашої науки.

Деталізуючи поняття «хімічний склад», зазвичай уточнюють, що йдеться як про встановлення природи його компонентів і об'єкта в цілому, так і про встановлення кількісного вмісту всіх або деяких компонентів. Можливі різні рівні виділення компонентів (ізотопи, елементи, молекули,

фази, а також групи молекул схожої будови) і відповідно різні рівні встановлення хімічного складу.

Перелічені положення не викликають особливих дискусій, з таким розумінням предмета нашої науки погоджуються, здається, всі аналітики. Однак воно все ж є недостатнім, занадто вузьким. Аналітична хімія – це далеко не сума методів аналізу. В предмет аналітичної хімії входять і ті етапи аналізу, які не пов'язані з вибраним методом (рис. 3.1). Це відбір і підготовка проб; обробка отриманих даних, метрологічна оцінка невизначеності результатів аналізу, а також інтерпретація отриманих результатів.

Предметом нашої науки є також організація роботи аналітичної служби і способи контролю якості аналізу; характеристичні властивості аналітів; будова аналітів і способи її встановлення. Термін «характеристична властивість» використовують, щоб виділити ті властивості аналіту, за якими він суттєво відрізняється від своїх аналогів або інших компонентів проби. Саме ці властивості дозволяють впізнавати і визначати аналіт у присутності сторонніх речовин. Характеристичні властивості аналітів враховують і в кількісному аналізі при виборі умов вимірювання сигналів. Зокрема, в атомно-емісійному аналізі такими властивостями є довжини хвиль, на яких випромінюють (після збудження) лише атоми визначуваного елемента. Зокрема, поява в спектрі проби характерного дублету ліній (589,0 і 589,6 нм) є специфічною і достовірною ознакою наявності атомів натрію. Інші елементи, в тому числі хімічні аналоги натрію, такою властивістю не володіють.

З виявлення хімічних реакцій, характерних для тих чи інших металів, колись (ще в епоху ятрохімії) починалася історія хімічних методів аналізу. З установлення характеристичності ліній в атомних спектрах (Р. Бунзен, Г. Кірхгоф) починалася історія фізичних методів. Безліч чудових досліджень було присвячено пошуку характеристичних властивостей різних аналітів. Це не така проста задача, оскільки характеристичними є лише небагато властивостей аналіта, а решта є загальними для багатьох речовин. Зокрема, електропровідність розчину майже не залежить від природи розчиненого електроліту (різні катіони і аніони мають досить близькі рухливості, за винятком іонів H^+ і OH^-). Отже, електропровідність розчину не є характеристичною властивістю окремих електролітів. Не є характеристичною властивістю розчинених речовин і показник заломлення їх розчинів. Саме тому прямий кондуктометричний і рефрактометричний

аналізи аналітики використовують лише в найпростіших випадках (аналіз однокомпонентних розчинів), на відміну від атомно-емісійного або рентгенофлуоресцентного аналізу.

Вивчення характеристичних властивостей індивідуальних аналітів безумовно відноситься до предмета аналітичної хімії, тоді як предметом неорганічної чи органічної хімії переважно є вивчення групових (типових) властивостей речовин. Однак потрібно зробити важливе зауваження. В тих випадках, коли аналітик прагне оцінити сумарний вміст однотипних аналітів (наприклад, фенолів), його переважно будуть цікавити загальні властивості цих аналітів. Характеристичність і внутрігрупова селективність аналітичних сигналів будуть перешкоджати отриманню точних результатів групового аналізу. Ця ситуація виникає не дуже часто, оскільки груповий аналіз проводиться значно рідше, ніж визначення індивідуальних аналітів, але забувати про специфіку групового аналізу не слід.

На важливість виявлення характеристичних властивостей аналітів звертали увагу небагато вчених (І. П. Алімарін, Л. М. Москвін, Б. І. Набиванець, Т. А. Теплицька та ін.), але цей підхід дуже важливий для розвитку методів аналізу. Адже характеристичність властивостей аналітів можна цілеспрямовано підвищувати.

4. СТРУКТУРА РЕЧОВИНИ ЯК ПРЕДМЕТ ДОСЛІДЖЕНЬ АНАЛІТИКІВ

Зазвичай вважають, що дослідження структури речовин повинні здійснювати не аналітики, а інші вчені, наприклад, спеціалісти в галузі органічної хімії, хімії високомолекулярних сполук, хімії твердого тіла. Однак незрозуміло, де закінчується «склад» і де починається «структура». Звісно, аналітиків мало цікавлять такі аспекти структури речовин, як будова атомного ядра, розподіл електронної густини в атомах, дефекти кристалічної решітки і т. п. Але взаємне розташування атомів у молекулі аналіта (будова молекули) надзвичайно важливо. Особливо, коли треба аналізувати суміші ізомерів або впізнавати певну органічну речовину. А для аналізу полімерів (особливо біополімерів) важливо виявити послідовність елементарних ланок у макромолекулі. Ідентифікація тієї чи іншої ДНК, що є чисто аналітичним завданням вимагає не виявлення природи нуклеотидів, а надійного встановлення їх послідовного розташування. Те ж стосується

амінокислотного складу білків, і там проблема ще складніша – потрібно з'ясувати не тільки первинну, але й вторинну, третинну, навіть четвертинну структури білка. Лише охарактеризувавши кожен білок у досліджуваній суміші, можна проводити його кількісний аналіз на молекулярному рівні. Це стосується не тільки білків. Встановлення будови аналітів стало складовою частиною процесу аналізу лише в кінці ХХ століття. Цим займається багато аналітиків-практиків, особливо хроматографісти та мас-спектрометристи. Сучасна аналітика стерла протиріччя між поняттями «склад» і «структура», так характерне для недавнього минулого. Але в підручниках хімії та методологічній літературі це протиріччя залишається.

Ця ситуація має два можливих виходи. Можна вважати, що з'ясування структури речовин – це такий самий предмет аналітичних досліджень, як і визначення елементного або фазового складу. Це має бути відображено і в дефініції нашої науки. Або слід дати нові, більш сучасні визначення самим поняттям «склад» і «структура», розширивши перше за рахунок другого. Тобто вважати молекулярну структуру (хімічну будову) речовини однією з характеристик її складу. За другим шляхом йдуть у багатьох закордонних країнах. З'ясування будови молекул органічних речовин розглядається там як розділ аналітичної хімії, цей матеріал викладається у відповідних підручниках. Спеціалісти в галузі ЯМР вважають себе аналітиками, публікують свої наукові роботи саме в аналітичних журналах.

Роботу аналітичної служби та конкретних аналітичних лабораторій, тобто їх структуру, оптимальну організацію праці та методичне забезпечення теж треба вивчати науковими методами. Досліджень з порівняння та вибору стандартних методик для вирішення тих чи інших аналітичних завдань поки що небагато, але вони дуже потрібні. У довгому ряді наукових напрямів, що складають предмет аналітичної хімії, слід назвати і роботи з методології цієї науки. Зокрема, аналітики неодноразово обговорювали співвідношення між методами та об'єктами аналізу. Очевидно, вибір методу визначається природою об'єкта, але не навпаки. Однак з методологічної точки зору правильніше розглядати тріаду проблема–об'єкт аналізу–метод аналізу. Багато досліджень у нашій науці відповідають областям перетину елементів такої тріади, взятих попарно (рис. 4.1).



Рис. 4.1 Відношення між проблемою, об'єктом та методом аналізу

Розробку окремих методик, оптимізацію пробовідбору та пробопідготовки потрібно розглядати як пристосування методу під аналіз конкретних об'єктів. Можлива також адаптація методу для вирішення конкретної проблеми. Прикладом можуть бути дослідження, націлені на підвищення чутливості або на підвищення точності спектрального аналізу. А на стику проблеми та об'єкта опиниться цілий ряд питань: з якими аналітичними проблемами пов'язаний аналіз тих чи інших об'єктів; з якими модельними об'єктами найкраще працювати, щоб знайти рішення проблеми; що треба визначати в цьому об'єкті, щоб вирішити якусь наукову проблему (наприклад, пошук хімічних маркерів захворювань або пошук індикаторних речовин для оцінки забруднення навколишнього середовища). Таким чином, предмет сучасної аналітичної хімії багатогранний, він включає:

- хімічний склад об'єктів аналізу;
- структуру об'єктів аналізу (будову молекул органічних аналітів);
- характеристичні властивості аналітів;
- методи та методики встановлення хімічного складу, природи і будови речовин;
- організацію аналітичної служби, забезпечення якості аналізів.

Відносна значимість зазначених аспектів має суб'єктивний характер. Роботою аналітичної служби вчені довго зневажали, але в останні роки ситуація змінилася. Зростає увага і до структурних досліджень (другий пункт наведеного вище списку). Але методи аналізу були і, ймовірно, завжди будуть найважливішим предметом досліджень аналітиків.

5. ЦІЛІ І ЗАВДАННЯ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

Кінцева мета діяльності будь-якого аналітика – отримання достовірної інформації про хімічний склад речовин. Ця мета об'єднує всіх – від професора, який займається теоретичними аспектами аналітичної хімії, але не виконує жодних аналізів, до лаборантки, яка щодня виконує однотипні аналізи і не думає про науку. Якщо ж обмежитися порівняно вузьким колом дослідників-аналітиків (*analytical chemists*), то основною метою їх діяльності буде більш фундаментальна. Цією метою є отримання нових знань про процес аналізу та вдосконалення цього процесу. Можливий, звісно, й малоприємний випадок, коли ця глобальна мета науковцями не усвідомлюється, і вони проводять дослідження лише заради отримання зарплати чи наукового ступеня. Але навіть такі роботи, якщо вони добросовісно виконуються, приносять нові знання, об'єктивно корисні для науки.

5.1. Створення методик

Створення хорошої методики, яка перевершує за своїми характеристиками відомі аналоги та підходить для аналітичного контролю, є зовсім не простим завданням. Тому в багатьох вищих навчальних закладах майбутніх аналітиків навчають розробляти методики з урахуванням складу та властивостей об'єкта аналізу, вибирати відповідний метод, реагент чи спосіб вимірювання, розраховувати або емпірично знаходити оптимальні умови аналізу тощо. З'явилися стандартні прийоми досліджень, наприклад, способи оцінки меж виявлення або методи перевірки правильності результатів аналізу. А процедуру метрологічної атестації методики навіть закріпили в нормативних документах (ДСТУ, стандарти ISO, рекомендації СІТАС).



Рис. 5.1 Відношення між аналітичною хімією та аналітичною службою

Щодо досліджень першого рівня постає питання: чи можна вважати розробку методики аналізу науковим дослідженням? Можливо, цю роботу слід віднести не до сфери науки, а до сфери аналітичної служби, так само як і виконання серійних аналізів за готовими методиками? Відповідь на це питання не може бути однозначною. Сфери, про які йдеться, до певної міри перехрещуються (рис. 5.1).

Розробку окремих методик та деякі інші прикладні роботи можна розглядати як наукові дослідження, також як і завдання аналітичної служби. Потрібно враховувати, про яку роботу йдеться, методика методики різна. Припустімо, в статті йдеться: «Ми встановили, що методика фотометричного визначення метилфенолу в його модельному розчині з допомогою реактиву Грісса застосовна і для визначення етилфенолу. Розроблена нова методика аналізу». Можливо, в даному випадку автори отримали корисний для своєї лабораторії результат, але нічого нового в нашу науку вони не внесли! Будь-якому аналітику ясно, що метилфенол і етилфенол повинні реагувати з реактивом Грісса схожим чином, утворюючи подібні продукти, а отже, ці феноли можна визначати однією й тією ж методикою. «Створити» методику таким легким способом, шляхом перенесення відомих прийомів з одного об'єкта на інший, заздалегідь аналогічний, вдається рідко. Частіше розробка методики вимагає тривалих

і трудомістких досліджень, що включають вибір методу, перевірку селективності сигналів, усунення перешкод, визначення метрологічних характеристик нової методики на різних концентраційних рівнях тощо. Який результат буде отримано в ході всієї цієї роботи, навряд чи можна сказати заздалегідь. Це справжнє наукове дослідження, хоча йому не вистачає фундаментального аспекту. Для науки значно більший інтерес представляють дослідження, в яких автори отримують і теоретично пояснюють деякі раніше невідомі факти, несподівані нові закономірності. Тим не менш, чисто прикладні роботи також мають право на існування.

5.2. Розвиток методів

В історії аналітичної хімії було немало досліджень, спочатку націлених не на створення методик аналізу, а на розвиток певного методу аналізу без прив'язки до того чи іншого об'єкта. Ймовірно, перші дослідження такого типу проводили Берцеліус (підвищення точності гравіметрії), Мор (розвиток титриметрії) та Бунзен (створення спектрального аналізу). «Чемпіоном» за увагою аналітиків у 1950–1960 рр. був фотометричний аналіз, а в 1980–1990 рр. – хроматографічний аналіз.

Розробка нового методу кількісного аналізу розпадається на кілька етапів. Початковим етапом є пошук та вивчення характерних для цього методу залежностей типу «склад–властивість». Необхідно знайти кількісне вираження знайдених залежностей, тобто рівняння зв'язку між вмістом шуканих компонентів та їх аналітичними сигналами. Моделювання цих залежностей може бути як статистичним, так і змістовним, що ґрунтується на відомих теоретичних положеннях. У будь-якому випадку дослідник повинен прийти до адекватних моделей, а потім використовувати їх для оптимізації методик і розуміння теоретичних основ цього методу. Саме аналітики створюють теорії, які моделюють градуйовані залежності в різних умовах і дозволяють прогнозувати можливості методу при вирішенні тих чи інших часткових завдань. Одночасно досліджуються процеси, що лежать в основі методу; зокрема, механізм формування аналітичного сигналу, виявляються джерела фону.

Далі потрібно розробити способи та пристрої для реєстрації сигналів, оптимізувати умови їх вимірювання, виявити та усунути перешкоди з боку сторонніх речовин, які можуть потрапити в склад проби. Бажана розробка стандартних алгоритмів пошуку оптимальних умов аналізу як у традиційному, так і в комп'ютерному експерименті. Необхідно підвищити

чутливість і селективність нового методу, зменшити шуми і перешкоди, скоротити трудомісткість і вартість вимірювань, порівняти різні варіанти досліджуваного методу, спростити апаратуру. Крім того, аналітики повинні створити схеми градуїровки, стандартні зразки та, зрештою, методики аналізу реальних об'єктів для визначення різних аналітів. Потрібно оцінити метрологічні характеристики методик визначення різних аналітів цим методом. Йдеться про показники прецизійності та правильності, коефіцієнти чутливості і селективності, межі виявлення та визначення, а також уточнення кола об'єктів аналізу.

Прикладом можуть бути роботи А. К. Бабка та інших учених 1960-х рр. (А. Т. Пилипенко, В. М. Пешкова, В. А. Назаренко, В. І. Кузнецов, В. Ф. Барковський, М. П. Комарь), присвячені розвитку фотометричного аналізу. Використовуючи створену Я. Бьерррумом та іншими скандинавськими фізико-хіміками теорію ступінчастого комплексоутворення, зазначені дослідники розробили нову теорію фотометричного аналізу. Вона дозволяє підбирати підходящі реагенти для переведення визначуваної речовини в забарвлену форму, розраховувати оптимальні умови визначення тієї чи іншої речовини, передбачати і навіть кількісно розраховувати ступінь впливу сторонніх речовин на результати аналізу. Тепер навіть студенти-хіміки можуть апіорно (по відомим константам рівноваги) розрахувати необхідну концентрацію фотометричного реагенту чи оптимальне значення рН фотометрованого розчину.

5.3. Загальноаналітичні дослідження

В історії аналітичної хімії лише небагато робіт були спочатку спрямовані на вирішення завдань, присвячених загальним питанням нашої науки. Як правило, це були дослідження теоретичного характеру. Але в ході цих досліджень зазвичай вимагався і експеримент, хоча б для підтвердження висунутих авторами теоретичних положень. Вище ми вже перелічували деякі проблеми нашої науки, не пов'язані з тим чи іншим методом аналізу. Це організація пробовідбору, розвиток метрологічних аспектів аналізу, створення хемометричних алгоритмів обробки багатовимірних даних, вибір критеріїв для порівняння та відбору методик, автоматизація і комп'ютеризація аналізу, історія та методологія аналітичної хімії, а також деякі інші проблеми. До третьої групи можна також віднести дослідження, в яких автори розвивають теоретичні основи аналізу тієї чи

іншої групи об'єктів. Так, аналіз особливо чистих речовин має свою специфіку, яку потрібно досліджувати та враховувати незалежно від того, які аналіти та яким саме методом ми збираємося визначати в цих об'єктах. Свою специфіку мають методи аналізу біооб'єктів, нафтопродуктів або мінералів.

Багато досліджень загального характеру націлені на встановлення закономірностей хімічних та фізичних процесів, що використовуються в аналізі, а також на виявлення характеристичних властивостей визначених компонентів. Загальнотеоретичні та метрологічні дослідження є важливим засобом інтеграції аналітиків, які працюють у різних напрямках, розвиваючи різні методи. Загальна методологія аналізу формується саме в таких дослідженнях. Однак не слід думати, що будь-яке дослідження загального характеру є цінним «по визначенню». Часто авторам загальнотеоретичних досліджень не вистачає конкретики, а ще частіше – оригінальності ідей.

Розглядаючи дослідження, націлені на вирішення завдань різного типу, їх теоретичну та практичну цінність, слід зазначити, що зовсім не кожне аналітичне дослідження повинно одночасно приводити і до теоретичних досягнень, і до практично важливих прикладних результатів.

6. АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ – ФУНДАМЕНТАЛЬНА ЧИ ПРИКЛАДНА НАУКА?

Нерідко виникає непросте питання: «До яких наук – фундаментальних чи прикладних – слід віднести аналітичну хімію?» Загальновизнаних критеріїв для однозначного поділу наук на фундаментальні та прикладні, ймовірно, не існує. Часто використовують такий критерій: фундаментальні науки «вивчають» те, що об'єктивно існує в природі та суспільстві, а прикладні науки «створюють» і застосовують щось нове – технології, методи, засоби, пристрої. Якщо вважати, що аналітична хімія – це наука про методи визначення хімічного складу речовини, то, керуючись цим критерієм, її слід віднести до прикладних наук. Однак більш правильним є твердження, що у більшості наук, в тому числі й в аналітичній хімії, є як фундаментальний, так і прикладний аспект. Таку позицію займає більшість аналітиків. Якщо прийняти цю точку зору, то питання, чи є аналітична хімія фундаментальною наукою чи прикладною, втрачає сенс. Замість цього

виникає інше питання: які саме аналітичні дослідження мають переважно фундаментальний, а які – в основному прикладний характер?

Практичне завдання нашої науки – забезпечувати аналітичну службу новими методиками, приладами та реагентами. Очевидно, дослідження першого рівня, безпосередньо спрямовані на вирішення цієї задачі, слід вважати прикладними. Роботи, виконані на другому чи третьому рівнях, тобто спрямовані на розвиток окремих методів або на вирішення загальноаналітичних проблем, також можуть мати прикладний характер (розробка нових приладів). Але в рамках нашої науки всі дослідження другого та третього рівня мають і фундаментальний аспект, причому часто він переважає. Обидва напрямки досліджень (прикладне та фундаментальне) перебувають у нерозривному діалектичному єдності. Саме такий підхід може забезпечити подальші успіхи нашої науки.

Аналітичну службу (систему аналітичного контролю) часто розглядають як практичну частину нашої науки. Це явна помилка, оскільки працівники контрольно-аналітичних лабораторій науковими дослідженнями як правило не займаються.

До цього часу ми розглядали аналітичну хімію як вид діяльності, як сукупність досліджень, спрямованих на вирішення тих чи інших задач («передній край», *frontier*). Однак важливо розглянути і цілісну систему знань, накопичених у результаті діяльності вчених-аналітиків. Тут приблизно рівнозначно представлені дві обширні області:

1. Теоретичні основи окремих методів аналізу;
2. Результати досліджень, не пов'язаних із окремими методами. Цю область можна умовно назвати загальнотеоретичними основами аналізу.

Безперечно, теоретичні основи окремих методів або їхніх груп, розглянутих у розділі 4, багато в чому базуються на досягненнях інших наукових дисциплін, насамперед фізичної хімії, фізики, математики тощо. Зазвичай із них запозичується певне рівняння зв'язку, яке показує, як повинен аналітичний сигнал залежати (в ідеальних умовах) від природи та концентрації аналіту. Прикладами таких рівнянь є формула Фарадея для кулонометрії, рівняння Нернста для потенціометрії чи закон Бугера–Ламберта–Бера для спектрофотометрії. Із інших наук запозичується необхідний математичний апарат, інколи спосіб вимірювання аналітичного сигналу й навіть апаратура.

Існує така точка зору: аналітична хімія – наука вторинна, у неї немає власної теоретичної бази; адже те, що відносять до теоретичних аспектів аналітичної хімії, це, по суті, розділи з інших областей знань, наприклад, із фізичної хімії. Зрозуміти історичні та психологічні корені такої точки зору можна, але погодитися з нею не можна. Відзначимо, що далеко не все, що потрібно для обґрунтування та розвитку методів аналізу, дають суміжні науки. Чимало інформації про процеси, що лежать в основі того чи іншого методу, аналітики отримують самостійно. Хто, окрім аналітиків, вивчає теорію дії органічних аналітичних реагентів? Що ж до загальнотеоретичних розділів нашої науки, то тут запозичувати теоретичний матеріал взагалі немає в кого.

Величезний обсяг теоретичних узагальнень із загальних питань аналітичної хімії логічно розпадається на кілька відносно самостійних вчень.

Об'єкти аналізу

Аналітиками накопичено значний обсяг знань про склад, структуру та властивості багатьох можливих об'єктів аналізу; про способи та правила відбору проб для об'єктів різних типів; про методи, які зазвичай використовуються під час аналізу кожного об'єкта, та особливості проведення аналізу таких об'єктів.

Об'єкти визначення

У рамках цього вчення розглядаються самі об'єкти виявлення або визначення – їхні види, що виділяються на різних рівнях; структура, характерні властивості; різні форми існування аналітів і способи їхнього переведення у потрібну форму під час підготовки проб (включаючи маскування сторонніх речовин). У цьому ж контексті або як окреме вчення можуть і повинні розглядатися хімічні реакції, які використовуються під час аналізу, способи керування їхньою рівновагою та швидкістю протікання, використання хімічних реакцій і процесів у різних методах аналізу.

Хіміко-аналітичні задачі

Сюди належать знання загального характеру про цілі, види, об'єкти та методи аналізу, про конкретні хіміко-аналітичні задачі, які виникають у практиці, про способи їхнього формулювання та уточнення, про стратегії проведення аналізу, вимоги до методик, критерії порівняння та вибору методик, про правила перевірки й метрологічної атестації методик. У рамках цієї ж теорії має розглядатися інтерпретація результатів – напрям, якому до останнього часу приділялося недостатньо уваги.

Якісний аналіз

Оснoву цього вчення складає загальна теорія ідентифікації. У рамках цього ж вчення слід розглядати способи встановлення структури чистих речовин, хімічні та фізичні методи ідентифікації компонентів проби, ідентифікаційні ознаки й відповідні бази даних; оцінку достовірності ідентифікації та способи її підвищення. Незважаючи на багатовікову історію якісного аналізу, його теоретичні основи недостатньо розвинуті. Основну увагу у ХХ столітті аналітики приділяли кількісному аналізу.

Аналітичний сигнал

Це поняття є центральним при розгляді фундаментальних аспектів і загальних питань кількісного аналізу. Йдеться про види аналітичних сигналів, способи та похибки їхнього вимірювання, а також про методи обробки сигналів і їхніх сукупностей (посилення й накопичення сигналів, усунення фону та шумів, виявлення сигналів окремих компонентів тощо). Сюди ж належать способи градування, способи оцінки межі виявлення, чутливості та селективності; використання сенсорів і мультисенсорних систем тощо.

Хеометрика

Особливо слід виділити хеометричні алгоритми обробки великих масивів даних, заснованих на застосуванні комп'ютерів. Цьому питанню (стосовно хімічного аналізу) присвячено багато публікацій. Іноді в аналітичній хімії навіть виділяли окремий розділ – COBAC (Computer Based Analytical Chemistry). Перша реакція на цю точку зору може бути негативною: адже комп'ютеризацію можна розглядати лише як ефективний засіб вдосконалення інструментальних методів. Однак на фізико-хімічні методи свого часу теж дивилися лише як на засіб удосконалення класичних методів. Не виключено, і навіть дуже ймовірно, що зараз так само йде справа із застосуванням комп'ютерів, баз даних і хеометричних алгоритмів. Ці засоби надають аналітикам абсолютно нові можливості. Хеометрика, зокрема, реалізує багатовимірний підхід. Наприклад, для визначення вмісту компонентів використовують багатовимірні градування, а як еталони застосовують не визначувані компоненти в чистому вигляді, а їхні суміші відомого складу. Під час якісного аналізу найбільш відомим хеометричним алгоритмом є метод головних компонент. Зазначимо, що без комп'ютерів використання хеометричних алгоритмів неможливе.

Методи розділення та концентрування

Це величезна й важлива сфера наукової аналітичної хімії, яка особливо інтенсивно розвивалася в другій половині XX століття. З точки зору загальної методології науки цю область знань можна розглядати як таку, що знаходиться поза аналітичною хімією. Адже для проведення аналізу ні поділ, ні концентрування компонентів проби не є обов'язковими операціями, проте вони є необхідними та широко використовуються в багатьох хімічних технологіях. Для аналітиків методи поділу та концентрування – це допоміжний інструмент, до якого вони звертаються, поки й оскільки прямі методи виявлення та визначення не дозволяють вирішити поставлене хіміко-аналітичне завдання. Строго кажучи, розвиток таких реєструючих пристроїв, як детектори на діодній матриці в спектрофотометрії або багатоканальні гамма-спектрометри в поєднанні з напівпровідниковими детекторами в активаційному аналізі повинен був би знизити потребу в поділі, але поки що це не дуже помітно. Крім того, методи поділу знайшли своє застосування в методах нового типу, заснованих на тісному поєднанні поділу та визначення; ці методи називають гібридними, комбінованими (hyphenated, coupled methods). Один із варіантів поділу – концентрування – виявився необхідним не тільки через недостатньо низькі межі виявлення низки методів, але й через негомогенність досліджуваних зразків і відсутність відповідних зразків порівняння для всіх можливих аналізованих проб.

Аналітична служба

Аналізування організації аналітичної служби формувалося пізніше, ніж методи аналізу, в міру зростання кількості контрольно-аналітичних лабораторій і підвищення ролі аналітичного контролю в промисловості та інших сферах. Багато зроблено в області автоматизації та комп'ютеризації аналітичного контролю, раціонального асортименту стандартних зразків та ін. Однак теорія раціональної організації аналітичної служби перебуває на початковому етапі свого розвитку. Має бути знайдено оптимальне співвідношення між лабораторними та поза лабораторними методами контролю, розроблені науково обґрунтовані нормативи оцінки якості виконання аналізів і методи атестації лабораторій. Потрібні підходи, що дозволяють цілеспрямовано підвищувати ефективність роботи лабораторій. Тут виділяються проблеми чисел і асортименту аналізів, необхідної та достатньої точності, експресності, періодичності та інформативності серійних аналізів, раціонального асортименту обладнання і методичного

забезпечення лабораторій, оптимальної структури і кадрового складу лабораторій, економічних і правових аспектів аналітичного контролю.

Перелічені теоретичні знання, які вже накопичені або тільки формуються наукою, нагадують зміст підручника, і це не випадково. Структура підручників відображає структуру науки як системи знань. Однак при складанні підручників враховуються й інші фактори, зокрема можливість засвоєння того чи іншого матеріалу. У підручники потрапляє далеко не все, що накопичено наукою. На жаль, в них майже не з'являється матеріал з "переднього краю" науки. Варто зазначити, що в підручниках з аналітичної хімії основну увагу традиційно приділяють теоретичним основам окремих методів аналізу. І взагалі у викладанні аналітичної хімії багато уваги приділяється теоретичним основам інших дисциплін на шкоду її власній теорії.

7. АНАЛІТИЧНА ХІМІЯ В СИСТЕМІ НАУК ТА ЇЇ МІЖДИСЦИПЛІНАРНИЙ ХАРАКТЕР

Аналітична хімія – це самостійна наука, окрема наукова дисципліна. Однак вона має тісний зв'язок з іншими науками. Що стосується передового краю наукових досліджень, то тут реалізується міждисциплінарний підхід. Аналітичні дослідження за своєю суттю ведуть фахівці з різною базовою освітою, успішно застосовуючи інструменти з багатьох галузей науки. Це не створює труднощів чи непорозумінь. Проте при узагальненні, інтерпретації та публікації результатів часто виникають певні труднощі. До якої наукової спеціальності відносяться отримані результати? Де їх публікувати? Як повинні звучати висновки? Часом результати аналітичних досліджень їх автори (або керівники) вважають частиною суміжних наук, і самі автори іноді декларують свою приналежність до інших областей знань. Аналізуючи приклади, можна сказати, що фахівці, які займаються лазерними методами аналізу атмосфери (лідерами), можуть здивуватися, якщо їх віднесуть до аналітичної хімії, хоча насправді вони займаються цією наукою. Це один з багатьох фізичних напрямків в аналітичній хімії. Спеціалісти з імунохімічного аналізу часто відносять себе до біохімії або медицини, це один з біологічних напрямків. Таким чином, міждисциплінарність тепер характерна не лише для передового краю науки, а й для аналітичної хімії в цілому. Отже, можна зробити висновок:

аналітична хімія вже давно не є лише частиною хімії. Багато аналітиків прийшли до цього висновку ще в 1970-х роках. Фізико-хімік та науковець М. І. Шахпаронов ще в 1957 році писав: «...аналітична хімія – особлива наукова дисципліна... суттєво виходить за рамки хімії». Однак варто зазначити, що аналітична хімія завжди була і залишається частиною хімії. Аналітики ідентифікують та кількісно визначають елементи, сполуки, фази – все те, що є основним об'єктом інтересів хімії. З хімією аналітична хімія тісно пов'язана і через класичні методи аналізу, в яких використовуються досягнення таких розділів хімії як вчення про хімічне рівновагу, електрохімія, хімічна кінетика, неорганічна, органічна, колоїдна хімія.

Міжпредметні зв'язки успішно розвиваються також з біологією, математикою та комп'ютерними науками. Перелік наук, з якими безпосередньо пов'язана аналітична хімія, є надзвичайно великим.



Рис. 7.1 Аналітична хімія та інші науки

Навіть хімічні методи аналізу не зводяться лише до відповідних розділів хімії. У аналітика свій підхід і свій кут зору. Якщо хіміка-неорганіка або хіміка-органіка більше цікавлять загальні властивості однотипних елементів чи їх сполук, якщо в окремих випадках він шукає загальне, то хімік-аналітик, зазвичай, цікавиться зворотним. Його цікавлять характерні властивості окремих елементів і сполук; все те, що відрізняє їх одне від одного, оскільки він має намір визначати ці елементи та сполуки окремо. Крім того, у аналітиків є своє ставлення до точності вимірювань, достовірності ідентифікації, моделювання залежностей тощо.

7.1. Аналітика та метрологія

Необхідно виділити взаємозв'язки нашої науки з метрологією. Деякі спеціалісти (К. Дорфель, М. Валькарсель та ін.) навіть вважають, що аналітична хімія – це наукова дисципліна, що лежить між хімією та метрологією. Зв'язок цих наук обговорювався А. Б. Шаєвичем, Ю. А. Карповим, А. Б. Бланком, Ю. А. Олександровим, Л. Н. Філімоновим, В.П. Антоновичем та іншими авторами. Метрологія виникла дещо пізніше, ніж аналітична хімія (в середині XIX ст.), і виникла як технічна наука. Історики зазначають, що в аналітичній хімії та теоретичній метрології одні й ті самі ідеї часто виникали одночасно, відрізняючись лише термінологічним оформленням. У процесі становлення теоретичної метрології в неї увійшло чимало фундаментальних ідей, спочатку висунутих аналітиками, а також деякі технічні прийоми, апробовані в кількісному хімічному аналізі. Наприклад, способи оцінювання та виключення систематичних похибок. Однак ще більшою мірою відбувався зворотний процес – перенесення в аналітичну хімію понять і алгоритмів, спочатку виниклих у рамках метрології.

Неодноразово підкреслювалась важливість метрологічних аспектів нашої науки, вказували на особливий характер аналізу як вимірювального процесу, що включає специфічні етапи та прийоми, не характерні для інших вимірювальних процесів. Стадії аналізу, зовсім не пов'язані з вимірювальними приладами, часто є основним джерелом похибок хімічного аналізу! Аналітики неодноразово підкреслювали, що для забезпечення точності результатів аналізу потрібні не лише спеціальні засоби вимірювань (прилади, стандартні зразки тощо), але й особлива методологія оцінки та мінімізації похибок.

Як ми вже відзначали, в 1950–1960-ті рр. на стику аналітики з загальною метрологією виникла особлива (погранична) область – хімічна метрологія. М. П. Комарь сформулював для неї три основні задачі: а) передача розміру одиниці кількості речовини (моль) від первинного еталона в практику; б) використання математичної статистики для оцінки та мінімізації похибок результатів аналізу; в) оптимізація всіх стадій і умов аналізу з використанням фізико-хімічних параметрів відповідних процесів. На жаль, перший напрямок досліджень поки що не дав конкретних результатів, а другий і третій розвиваються досить успішно. Метрологи далеко не відразу зрозуміли специфіку хімічного аналізу як вимірювального процесу.

На стику аналітичної хімії та метрології розроблена ціла система технічних та організаційних заходів, що реалізуються для забезпечення єдності вимірювань при проведенні кількісного хімічного аналізу.

В останні роки ХХ ст. в рамках хімічної метрології була поставлена глобальна задача контролю і управління якістю хімічного аналізу і, відповідно, потребувалась оптимізація діяльності аналітичної служби. Звісно, вирішувати цю задачу мають самі працівники контрольно-аналітичних лабораторій, але способи її вирішення повинні підказати вчені-аналітики, метрологи, технологи, економісти, спеціалісти з управління та інформатики.

Історія взаємозв'язків аналітики та метрології підтверджує загальне положення про те, що взаємозв'язки різних наук, як правило, мають діалектичний характер. З одного боку, і про це вже йшлося, аналітична хімія отримує від різних наукових дисциплін принципи, закономірності, на основі яких створюються методи аналізу, а також технічні прийоми (наприклад, способи реєстрації та подальшої обробки аналітичних сигналів). З іншого боку, аналітична хімія забезпечує багато наук ідеями, методами, приладами, іноді визначаючи досягнення цих наук.

Використання терміна «аналітична хімія» має принаймні двовікову історію; цей термін загальноприйнятий, звичний і улюблений. Водночас багато хто вважає, що застосування цього терміна тепер завдає значної шкоди спільноті аналітиків і заважає розвитку нашої науки. Справа в тому, що ключовим тут є слово «хімія». Ця обставина разом з історією нашої науки, яка довгий час була в основному хімічною, породжує не зовсім правильне розуміння науки про хімічний аналіз; відштовхує від цієї науки багатьох спеціалістів і цілі їхні спільноти, що успішно займаються аналізом. Незнищене бажання пов'язувати з аналітичною хімією лише суто хімічні атрибути (бюретки, піпетки тощо), в найкращому випадку – фотометричні та електрохімічні методи.

Протягом багатьох років аналітики намагаються вийти з усталеної і практично незмінної ситуації. Намітилися два шляхи. Перший, прийнятий у США, полягає в тому, щоб досягти повсюдного нового розуміння терміна «аналітична хімія» та зберегти його. Термін старий, наповнення нове. Другий шлях – зміна назви, але не відразу, а поступово, методом витіснення. До речі, і в США іноді вдаються до цього шляху. Отримало розповсюдження назва «аналітичні науки», особливо в Японії: «Analytical Sciences» за аналогією з «Life Sciences» або «Earth Sciences». У 1991 році відбувся

великий конгрес з аналітичних наук, з 1985 року виходить журнал «Analytical Sciences». У Німеччині давно і широко використовується термін «Analytik», що можна перевести як «аналітика». Знайшло застосування також латинське слово *analytica*, воно присутнє в назвах кількох американських фірм і мюнхенських виставок аналітичного обладнання. У нашій країні вносились пропозиції щодо термінів «хімічна метрологія» та «аналітика», причому останнє отримало дуже широке розповсюдження, і не як елемент студентського сленгу. Пропонувалось також виокремити в межах єдиної науки «аналітика» дві її основні складові частини – хімічну аналітику і фізичну аналітику (або аналітичну хімію і аналітичну фізику). Однак ця пропозиція зустрічає набагато більше заперечень, ніж термін «аналітика». Оскільки погодитися на повсюдне введення якогось нового терміна, ймовірно, не вдасться, а використання тільки звичного терміна «аналітична хімія» і надалі погіршуватиме становище цієї науки, найкращим способом дій буде трактування термінів «аналітична хімія» та «аналітика» як синонімів.

ПИТАННЯ ДО ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ

1. Які питання розглядає загальна методологія науки? Які методологічні питання розглядаються в рамках окремих наук?
2. Для чого досліджують методологічні аспекти окремих наук? Хто цим займається?
3. Які методологічні проблеми аналітичної хімії ви вважаєте найбільш важливими з практичного погляду? Чому?
4. Вкажіть цілі досліджень в галузі аналітичної хімії.
5. Безліч дефініцій аналітичної хімії як науки чітко поділяється на кілька груп. Охарактеризуйте ці групи.
6. Яке визначення аналітичної хімії як науки здається вам найбільш точним?
7. З урахуванням рекомендованої дефініції науки «аналітична хімія» вкажіть, які дослідження, пов'язані з проведенням аналізів, слід відносити до числа хімічно-аналітичних, а які не слід.
8. Що є основним об'єктом хімічно-аналітичних досліджень? Чи є різниця між поняттями «об'єкт дослідження» та «об'єкт аналізу»?
9. Харчові продукти досліджуються представниками різних наук. Як, на вашу думку, в рамках яких наук проводяться ці дослідження? Що є предметом дослідження для кожної з цих наук?
10. Які характеристичні властивості інертних газів можна використовувати для їх розпізнавання та визначення в присутності інших? Які ще характеристичні властивості речовин використовують аналітики при розробці методик їх роздільного визначення?
11. Чи належать до аналітичної хімії дослідження структури речовин? Якщо так, то які саме структурні характеристики досліджують аналітики?
12. В історії аналітичної хімії було кілька дискусій, пов'язаних з методологічними проблемами нашої науки. Які питання обговорювались у ході кожної з цих дискусій?
13. Які об'єктивні причини викликають виникнення дискусій методологічного характеру в аналітичній хімії? Чи були подібні дискусії в інших науках?
14. Наведіть приклади досліджень різного рівня в аналітичній хімії.
15. В історії аналітичної хімії дослідження різного рівня з'являлись неодноразово. Вкажіть, коли саме аналітики почали проводити дослідження першого, другого та третього рівня.

16. Внутрішня структура аналітичної хімії як системи знань включає низку окремих учень. Які саме вчення (або теорії) ви можете згадати?
17. Охарактеризуйте місце аналітичної хімії в системі наук в різні періоди її історії.
18. Поясніть, чому сучасну аналітичну хімію вважають міждисциплінарною наукою.
19. Опишіть взаємозв'язок аналітичної хімії та метрології.
20. Як пов'язана наука «аналітична хімія» з аналітичною службою? Чи можна вважати аналітичну службу частиною науки «аналітична хімія»?
21. Які хімічно-аналітичні дослідження зазвичай вважаються фундаментальними, а які – прикладними?
22. Чим назва «аналітика» є кращою за назву «аналітична хімія»?

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Щербакова Т. М., Гузенко О. М., Рахлицька О. М., Снігур Д. В. *Аналітична хімія. Якісний та кількісний аналіз* : навчальний посібник для студентів II курсу факультету хімії та фармації спеціальності 226 «Фармація, промислова фармація». Одеса: Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2022. 292 с. 17,95 ум.-друк. арк. ISBN 978-617-689-456-8.
2. *Аналітична хімія в схемах та таблицях* [Електронний ресурс] : електрон. метод. посіб. для здобувачів ф-ту хімії та фармації другого (магіст.) рівня вищ. освіти спец. 226 «Фармація, пром. фармація» ОПП Фармація / уклад.: О. М. Гузенко, Т. М. Щербакова, Д. В. Снігур. Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2024. 106 с. 2,4 МБ.
3. *Аналітична хімія* : конспект лекцій в таблицях і схемах до модуля 1 «Теоретичні основи аналітичної хімії. Кислотно-основні реакції. Методи виявлення та ідентифікації іонів» для студентів ф-ту хімії та фармації першого (бакалавр.) рівня освіти / О. М. Рахлицька, Т. М. Щербакова, О. М. Гузенко, Р. Є. Хома. Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2023. 130 с. 7,67 ум.-друк.арк. ISBN 978-617-689-493-3.
4. Rosenberg E., Krska R. Analytical chemistry in front of the curtain! *Anal. Bioanal. Chem.* 416, 1787–1795 (2024). <https://doi.org/10.1007/s00216-024-05128-9>.
5. Чеботарьов О.М., Снігур Д.В. *Метрологічні основи хімічного аналізу* : підручник. Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2019. 229 с. ISBN 978-617-689-326-4.
6. Врублевська Т. Я., Ридчук П. В. *Пробопідготовка в аналізі об'єктів довкілля*: посібник. Львів: Вид. центр ЛНУ ім. Івана Франка, 2017. 382 с.
7. *Організація наукових досліджень* [Електронний ресурс] : електрон. метод. вказівки до практ. занять для здобувачів першого (бакалавр.) рівня вищ. освіти спец. 102 «Хімія» та другого (магіст.) рівня вищ. освіти спец. 226 «Фармація, промислова фармація» / уклад. Л. М. Солдаткіна. Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2024. 33 с.
8. Чеботарьов О. М., Гузенко О. М., Снігур Д. В. *Сорбційно-спектроскопічні та тест-методи в хімічному аналізі* : навчально-наочний посібник студентам факультету хімії та фармації другого (магістерського) рівня освіти, спеціальності 102 «Хімія». Одеса : Одес. нац. ун-т ім. І. І. Мечникова, 2021. 100 с. 4,53 ум. друк. арк. ISBN 978-617-689-451-3

Навчальне видання

МЕТОДОЛОГІЧНІ ПИТАННЯ АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ

ЕЛЕКТРОННІ МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

для здобувачів третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти
спеціальності ЕЗ Хімія, ОНП Хімія

Електронне практичне видання

Укладачі:

Снігур Денис Васильович
Гузенко Олена Михайлівна

В авторській редакції

Затв. авт. 02.09.2025. Шрифт Times New Roman.

Системні вимоги: операційна система сумісна з програмним забезпеченням
для читання файлів формату PDF.

Обсяг 1 МБ. Зам. № 2933.

Видавець і виготовлювач

Одеський національний університет імені І. І. Мечникова
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4215 від 22.11.2011 р.
вул. Університетська, 12, м. Одеса, 65082, Україна
Тел.: (048) 723 28 39, e-mail: druk@onu.edu.ua