

МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

© 2021 г. Ю. А. Золотов^{a, b, *}

^aМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет
Ленинские горы, 1, стр. 3, Москва, 119991 Россия

^bИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук
Ленинский просп., 31, Москва, 119991 Россия

*E-mail: zolotov.32@mail.ru

Поступила в редакцию 23.06.2020 г.

После доработки 15.07.2020 г.

Принята к публикации 22.07.2020 г.

Автор рассматривает дефиницию аналитической химии, обсуждает вопросы о том, какая это наука — фундаментальная или прикладная. Приведены соображения о стимулах, драйверах развития аналитической химии, о месте ее в системе научного знания, о ее внутренней структуре. Обсуждается и вопрос о том, что название “аналитическая химия” часто заменяется другими терминами, более соответствующими современному состоянию этой науки.

Ключевые слова: аналитическая химия, химический анализ, философия науки, фундаментальные и прикладные исследования, дефиниция наук, стимулы развития науки, методология аналитической химии.

DOI: 10.31857/S0044450221010175

Первоначальное название этой статьи — “Философские вопросы аналитической химии”, но от него автор решил отказаться. И не только потому, что в статье рассматриваются только общеметодологические аспекты, но и в связи с тем, что слово “философия” многих естествоиспытателей оставляет равнодушными, а у некоторых из них вызывает скептические чувства и определенное недоверие. Однако есть и научные работники, наоборот, проявляющие внимание к философским проблемам науки вообще или своей области знания. Тезис “наука должна познать и самое себя” имеет немало сторонников; более того, есть (и были) крупные ученые, активно “познающие”, — физики, химики, биологи; среди выдающихся ученых это, например, А. Гельмгольц, А. Пуанкаре или В.И. Вернадский. В среде же профессиональных философов в XX столетии сформировалось крупное направление, получившее название “философия науки”; в этой области есть свои классики — К. Поппер, Т. Кун, И. Лакатос, П. Фейефабэнд [1–5]. Работы классиков, да и не только их, освещены во многих книгах, появившихся в России после введения учебных курсов и экзаменов по истории и философии науки для аспирантов [6–14].

Немало публикаций посвящено философским вопросам отдельных наук, особенно физики и математики. При этом решаются относительно скромные с точки зрения философской науки за-

дачи, поскольку обычно дело ограничивается рассмотрением методологических аспектов определенной области знания. Это рассмотрение важно и нужно не столько для философов, сколько для тех, кто активно работает в самой конкретной науке или изучает ее. В настоящей статье такой наукой является аналитическая химия. Обсуждаются вопросы дефиниции этой области знания, ее принадлежности к фундаментальной или прикладной наукам, рассматриваются стимулы развития, связи с другими науками, внутренняя структура, даже вопрос о названии науки.

Под названием “Философские аспекты аналитической химии” была в свое время опубликована серия статей австрийского химика-аналитика Х. Малисса [15–17]. Особенно много публикаций по общеметодологическим вопросам аналитической химии напечатал за последние 20–30 лет испанский химик-аналитик М. Валкарсель; к этим статьям мы будем обращаться не раз, в них много интересного. Автор этой статьи тоже неоднократно ранее обращался к методологическим проблемам; его соображения, хотя и скорректированные, отражены ниже.

ДЕФИНИЦИЯ

До сих пор иногда вспоминают (с улыбкой, а то и всерьез) “дефиницию”, принадлежащую

американцу Рейлли¹: “Аналитическая химия – это то, чем занимаются химики-аналитики” (Analytical chemistry is what analytical chemists do). И отвяжитесь, мол. Да нет, отвязаться не получится.

Обсуждение, точнее поиск, адекватного, четкого и более или менее согласованного определения аналитической химии проводится уже в течение нескольких десятилетий, в международном масштабе. Трудности в формулировании такого определения имеют объективную основу: проблемы с дефинициями характерны для наук, динамично развивающихся, корректирующих по ходу этого развития свои парадигмы, отчасти даже целеполагания. Это в значительной степени относится и к аналитической химии.

Почему нужна дефиниция. Для давно и активно работающих аналитиков четкое и более или менее согласованное определение аналитической химии, может быть, и не очень нужно; они и так знают, что такое аналитическая химия. Определение, однако, необходимо в преподавании – для студентов, выбирающих специализацию, да и просто изучающих курс аналитической химии; для преподавателей, отбирающих материал для изучения, расставляющих акценты или, тем более, пишущих учебники или учебные пособия. Понимание того, что есть аналитическая химия, весьма желательно для разного рода руководителей – ректоров и деканов университетов, директоров исследовательских институтов и даже начальников на многих производствах. Чтобы не считали, что аналитическая химия – это, как в далеком прошлом, только “мокрый” (wet) химический анализ, а вот, скажем рентгенофлуоресцентный или масс-спектрометрический – это что-то другое.

Современные представления о том, что такое аналитическая химия, в общих чертах должны иметь руководители и эксперты разного рода фондов и вообще держатели денежных средств, решающие судьбу заявок на гранты, распределяющие средства на научные исследования. Непонимание или неполное понимание ими контура аналитической химии наших дней может привести, например, к тому, что средства на развитие пусть той же масс-спектрометрии будут выделены молекулярным биологам или геохимикам, т.е. специалистам, *использующим* метод, а не масс-спектрометристам как таковым, *создающим и совершенствующим* масс-спектрометрические методы и приборы.

Практически каждый учебник аналитической химии начинается с определения этой науки. Ес-

ли приводимая дефиниция – не цитата с указанием источника, то едва ли мы найдем дефиниции одинаковые. Это отражает, во-первых, тот факт, что более или менее согласованного и принятого определения действительно нет. Во-вторых, и это более важно, разнообразие, многоплановость самих подходов к определению аналитической химии говорит о быстром развитии, повышенном пульсе самой науки, об изменении даже ее парадигм.

Обзор дефиниций. Сказанное выше служило и служит побудительной причиной многочисленных попыток предложить адекватное определение аналитической химии, причем, как уже сказано, это движение международное. Многие аналитики, представляющие свои определения аналитической химии, называли ранее опубликованные дефиниции “пробами”, “набросками”, “предварительными попытками” (tentatives). Так, испанский химик-аналитик М. де ла Гардия отмечал [18]: “Тот факт, что дефиниция – не просто фраза, но что она исключительно важна для развития и преподавания дисциплины, легко иллюстрируется набросками Каммана, Валкарсея, Цукермана и Жон Нана”. Эти “наброски”, различающиеся варианты дефиниции были опубликованы в рамках конкурса на лучшее определение аналитической химии, объявленного в начале 1990-х гг. журналом “Fresenius Journal of Analytical Chemistry”. Некоторые из этих “прикидок”, т.е. дефиниций, которые М. де ля Гардии явно не нравятся, будут процитированы ниже.

Важно обозначить исходные позиции: мы рассматриваем определение *науки аналитическая химия*, а не химического анализа. В англоязычной литературе иногда проскальзывает даже тенденция различать понятия analytical chemist (исследователь) и chemical analyst (аналитик-практик). В этой связи позволю себе пространную цитату из учебника Д. Хэрви [19]. “Мы начинаем этот раздел с обманчиво простого вопроса. Что такое аналитическая химия? Как и все другие области химии, аналитическая химия – дисциплина слишком широкая и активная, чтобы можно было ее легко и всесторонне определить во вводном курсе. Вместо этого мы попытаемся немного сказать о том, чем является аналитическая химия, и немного о том, чем аналитическая химия не является.

Аналитическую химию часто представляют как область химии, ответственную за выяснения состава вещества, как качественного (что именно присутствует), так и количественного (сколько присутствует). Но это представление вводит в заблуждение. В конце концов, почти все химики рутинным образом осуществляют качественные или количественные измерения. Высказывалось соображение, что аналитическая химия является не отдельной ветвью химии, но просто примене-

¹ Charles N. Reilly (1925–1981), химик-аналитик, профессор университета Северной Каролины в Чапел-Хиллс. Удостоен награды им. Фишера (Fisher Award in Analytical Chemistry); выступая в 1965 г. при вручении этой награды, и дал приведенную “дефиницию”.

нием химических знаний. Действительно, вы, вероятно, проводили количественные и качественные анализы в других химических курсах. Например, многие вводные курсы химии включают схемы качественного анализа для обнаружения неорганических ионов и количественные анализы, включая титрование.

К сожалению, такое понимание игнорирует уникальный факт: аналитическая химия обеспечивает само изучение химии², функция аналитической химии – не в проведении рутинного анализа рутинной пробы (что более подходящим способом называют химическим анализом), а в улучшении методов, распространении принятых методов на новые виды объектов и разработке новых методов для измерения *химических* явлений.

Вот один пример этого различия между аналитической химией и химическим анализом. Горные инженеры оценивают экономическую эффективность добычи руды, сопоставляя стоимость добычи руды с ценностью содержащегося. Чтобы оценить эту ценность, они анализируют образец руды. Разработка же и проверка метода, который обеспечивает получение такой информации, – ответственность (далее кавычки мои – Ю.А.З.) “аналитического химика” (analytical chemist). Если метод разработан, то его рутинное, ежедневное применение становится делом химика-аналитика (chemical analyst).³

Трудность ясно и однозначно определить аналитическую химию отражается и в том, что один и тот же аналитик, пишущий об этом, с годами меняет свои дефиниции, иногда существенно. Вот пример “из старых”. Ю.А. Клячко (вместе с М.Л. Чепелевецким и Ю.Ю. Лурье) писал в 1947 г. “Как для всякой отрасли науки, для аналитической химии характерно специфическое единство объекта и метода. Объект аналитической химии – материал, состав которого, элементарный³ или молекулярный (фазовый)⁴, необходимо установить; метод – характерная химическая реакция. Этим определяются границы аналитической химии, конечно не всегда в действительности четкие” [20]. Хотя дальше говорится о физических методах анализа, здесь все-таки ставка делается на “характерную химическую реакцию”. В еще более определенной форме привязка к химии чувствуется в статье того же автора 1955 г. [21]. “Аналитическая химия как наука охватывает все вопросы, связанные с осуществлением аналитических химических реакций. Так, к аналитической химии не относится спектральный анализ – в той мере, в какой он возможен без осуществления химических реакций; однако, как только

спектральный анализ используется в качестве физического метода измерения после того или иного объема аналитически необходимых физико-химических операций, – он уже входит в область аналитической химии. Поэтому центральной проблемой современной аналитической химии является вопрос об условиях образования, составе и свойствах химических соединений, т.е. вопрос о специфической реакции и о специфической аналитической форме”.

Со временем, однако, химический аспект у Ю.А. Клячко затушевывается. В курсе качественного анализа (1960 г.) читаем: “Аналитическая химия обычно определяется как наука о методах исследования химического состава вещества” [22]. Или в той же книге (с. 5): “Задачей аналитической химии является изучение методов определения состава различных веществ...”. В другой книге (1978 г. [23]): “Аналитическая химия – наука о принципах и методах идентификации и определения атомного (или молекулярного, вещественного и фазового) состава веществ или материалов, а также их химической структуры”. Здесь только небольшая неувязка с “идентификацией ... состава”. И, наконец, в короткой публикации, специально посвященной дефиниции аналитической химии [24], Юрий Аркадьевич дает такое вот определение: “Аналитическая химия – наука о принципах и технологии качественного и количественного анализа химического состава и химической структуры веществ и материалов”.

Другой пример такой лабильности. Еще один крупный испанский химик-аналитик, уже упоминавшийся М. Валкарсель, входил в состав группы, разработавшей в 1990-х гг. определение аналитической химии, одобренное затем Отделением аналитической химии Федерации европейских химических обществ. Это определение⁵ вошло в “европейский учебник” аналитической химии [25], одним из редакторов которого был М. Валкарсель. Все это не помешало ему уже в 1997 г. опубликовать другой вариант дефиниции, который будет приведен ниже.

Меняли со временем, шлифовали свои определения и другие ученые, включая автора этой статьи [26–28].

Ключевые позиции опубликованных ранее определений аналитической химии часто сильно различаются, начиная с пункта об отнесении аналитической химии к химии (или об одновременном отнесении к химии и метрологии, а то и вовсе

² Не очень ясное место.

³ Теперь мы говорим “элементный”.

⁴ Молекулярный и фазовый – это, конечно, не одно и то же.

⁵ “Analytical chemistry is a scientific discipline which develops and applies methods, instruments and strategies to obtain information on composition and nature of matter in space and time”. “Аналитическая химия – это научная дисциплина, которая развивает и применяет методы, средства и общую методологию получения информации о составе и природе вещества в пространстве и времени”.

к метрологии). В ряде дефиниций при формулировании целей аналитической химии упор делается на получение химической информации, точнее, на развитие средств и способов такого получения (слова “химическая информация” или “биохимическая информация” присутствуют в нескольких определениях, предложенных известными аналитиками).

Но пора привести конкретные определения, предложенные за последние 25–30 лет. Начнем как раз с тех, в которых громко говорится о химической информации.

К. Данцер [29] (1992 г.): “Цель аналитической химии – *получение химической информации* о материалах в части, касающейся их качественного и количественного состава и структуры. Аналитическая химия изучает природу и количество компонентов и структурные отношения между составляющими. Аналитические исследования направлены на решение общих проблем и, для этой цели, на разработку и совершенствование аналитических методов, включая пробоотбор, пробоподготовку, оценку полученных данных и на применение статистики и обработки данных для интерпретации результатов анализа”.

К относительно обстоятельному разговору о химической информации обратимся позже, а сейчас о других вопросах, затронутых в приведенном определении. Изучает ли аналитическая химия “структурные отношения между составляющими”? *Получение* химической информации это, скорее, цель химического анализа, а цель аналитической химии как науки – создание (совершенствование и т.д.) методов и средств для такого получения, о чем дальше и говорится в этом определении.

Упомянутое выше определение, которое давал М. Варкарсель в 1997 г. [30], звучало так: “Аналитическая химия – это метрологическая наука, которая развивает, оптимизирует и применяет материальные, метрологические и стратегические средства самой разнообразной природы (химические, физические, математические, биохимические, биологические и т.д.), материализованные в процессах измерения, направленных на извлечение *качественной (био)химической информации* частного [присутствие – концентрация – структура био(химического) аналита или отдельной его формы] и общего (химического, биохимического и биологического) характера в пространстве и времени, дабы решать измерительные задачи, возникающие при решении научных, технических или социальных проблем”. Фиксируем в памяти слова о “качественной (био)химической информации”, дабы к ним вернуться, а сейчас обращаем внимание на то, что аналитическая химия названа метрологической наукой, что существенный акцент сделан на процессах измерения.

М. Валкарсель и потом не раз публиковал свои варианты определения аналитической химии. Вот один из последних (2016 г.) [31]: “Аналитическая химия может быть охарактеризована как химическая метрологическая дисциплина, которая развивает, оптимизирует и использует средства и процессы, чтобы увеличить ее возможности извлекать информацию – в особенности получать качественную (био)химическую информацию об объектах и системах природного или искусственного происхождения, дабы удовлетворять специфические нужды и требования с целью содействовать принятию обоснованных и своевременных решений в научной, технологической, экономической или социальной сферах”.

Не будем обращать внимания на некоторую громоздкость фразы с нанизыванием “чтобы” (в переводе пришлось изошряться, а все равно тяжело). Но дело не в стилистических трудностях. Не столько из этой дефиниции, сколько из по сути посвященной ей статьи [31], можно сделать вывод, что Валкарсель не очень четко различает аналитическую химию как науку и химический анализ как службу, ремесло, сферу практики, не различает “analytical chemist” и “chemical analyst” (см. выше). И это определение в значительной степени рассматривает аналитическую химию как метрологическую науку (Валкарсель пишет о дисциплине, но по контексту статьи ясно, что речь идет, конечно, не только об учебной дисциплине). Ключевые слова – получение информации, “в особенности (био) химической” (а какой еще?).

В определении аналитической химии, которое М. Варкарсель и его коллеги приводят в недавнем учебнике “Основы аналитической химии” [32], прямо сказано: “*Аналитическая химия – это метрологическая дисциплина*, имеющая целью разработку, оптимизацию и применение процессов измерения для получения качественной (био)химической информации о природных и/или искусственных системах с целью удовлетворения информационных запросов и содействия принятию надежно обоснованных и своевременных решений в научной, технической, экономической и социальной сферах”.

В ответ на объявленный журналом “Fresenius Journal of Analytical Chemistry” конкурс на лучшее определение аналитической химии откликнулись тогда многие; соответствующие статьи были, как уже отмечалось, опубликованы [33]. Приведенное выше определение Данцера – из этого набора. Первое место заняла тогда дефиниция К. Каммана [34], которую стоит привести: “Аналитическая химия определяется как самодостаточная (self-reliant) химическая дисциплина, которая развивает и предоставляет подходящие (appropriate) методы и средства для получения информа-

ции о составе и структуре вещества, особенно касающейся типа, числа, энергетического состояния и геометрического расположения атомов и молекул в образце либо в любом его заданном объеме”. Отметим, что здесь говорится о локальном, распределительном анализе.

На этом обзор опубликованных определений аналитической химии можно остановить, хотя многие остались за бортом.

Выбор и рекомендации. Для начала надо определиться с соотношением аналитической химии и метрологии. Можно ли считать аналитическую химию метрологической наукой? Во-первых, аналитическая химия — это не только количественный анализ, это и анализ качественный, и идентификация объекта как такового, а в этих случаях измерения играют меньшую роль. Во-вторых, при таком подходе не просматривается различие между аналитической химией и химическим анализом, для которого метрологические аспекты действительно очень важны. В-третьих, жесткое отнесение аналитической химии к метрологии оставляет в стороне огромные пласты творческой деятельности аналитиков. Вот, например, Я. Ружичка, о котором еще будет речь, изобрел способ автоматизации анализа растворов (проточно-инжекционный анализ); ну причем здесь метрология? Л.А. Чугаев обнаружил, что диметилглиоксим избирательно взаимодействует с никелем; где здесь метрология? Даже при разработке электронного носа или электронного языка, где измерения, разумеется, есть, не в них суть; существенную роль играет хемометрическая обработка сигналов, а это уже не совсем метрология.⁶

Во многих приводившихся выше дефинициях упор делается на получение химической информации [или (био)химической]. Здесь снова не просматривается дифференциация аналитической химии как науки и химического анализа как практики, сервиса, службы. Но дело не только и не столько в этом. Химическая информация — это весьма широкое понятие; слишком широкое, чтобы его с таким упорством использовать по отношению к аналитической химии. Конечно, сведения о составе и (частично) химическом строении — это химическая информация, но только относительно небольшая часть химической информации. Мне уже приходилось об этом писать [35]. Накопление сведений о соотношении “структура—свойство”, используемых, например, при поиске новых лекарственных веществ органической природы, разве это не “получение химической информа-

ции”? А обнаружение, что бром, в отличие от хлора и йода, не дает кислоты типа хлорной, — это разве не химическая информация? И т.д. и т.п.

Что же главное в аналитической химии как области науки? То, что она создает (находит, придумывает, совершенствует) *общие подходы* к анализу (теорию и методику пробоотбора, способы обеспечения и проверки правильности результатов анализа, пути и способы автоматизации, подходы к локальному и дистанционному анализу и т.д.), *принципы создания методов анализа* (зависимость относительно легко измеряемых свойств от состава; использование не столько общих, сколько индивидуальных, характеристических свойств аналита; “всеядность” по отношению к явлениям, свойствам, закономерностям, которые могут быть положены в основу метода и т.д.), разрабатывает и совершенствует сами *методы анализа* (химические, физико-химические, физические, биохимические) и *средства* для их использования (приборы, реактивы, компьютерные программы, стандартные образцы и т.д.), создает (или адаптирует заимствованные) *способы обработки аналитических сигналов* и собственно *результатов* анализа.

Общей целью всего этого является обеспечение способности устанавливать химический состав объекта анализа, т.е. способность узнать, какие компоненты присутствуют (качественный анализ), какова их концентрация или масса (количественный анализ), а также — в какой форме они присутствуют (вещественный анализ), как распределены (распределительный анализ) и нередко — каково отношение между компонентами (выяснение химического строения).

Но и это еще не все. Объектов анализа огромное число, они очень сильно отличаются по множеству показателей, начиная с агрегатного состояния. Все это накладывает серьезный отпечаток на исследования, например, на разработку методов анализа. Специфика объектов анализа настолько значительна, что складываются отдельные “аналитические химии” — почв, металлов, биомедицинских объектов, пестицидов и т.д.

При учете всего сказанного выше можно сформулировать дефиницию, которая будет выглядеть следующим образом:

“Аналитическая химия — это наука, создающая и развивающая общую методологию, методы и средства установления химического состава и химического строения вещества и разрабатывающая способы химического анализа конкретных материальных объектов”.

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ И ПРИКЛАДНОЙ АСПЕКТЫ

Задается вопрос: фундаментальная наука аналитическая химия или прикладная? Ответить

⁶ В 1950–1960 гг. заведующий кафедрой аналитической химии Харьковского университета Н.П. Комарь переименовал кафедру в кафедру химической метрологии. Название сохранилось и до сих пор. Однако последователей по такому переименованию не оказалось. К Н.П. Комарю мы еще вернемся.

можно, лишь определившись по более общим вопросам: 1) оправдано ли вообще деление наук на фундаментальные и прикладные; 2) если оправдано, какие науки можно считать фундаментальными, какие прикладными; 3) могут ли фундаментальные науки включать прикладную часть, а прикладные — фундаментальную; 4) если могут, не лучше ли говорить не о *науках*, а о фундаментальных и прикладных *исследованиях*?

Фундаментальные и прикладные науки, фундаментальные и прикладные исследования. Деление наук на фундаментальные и прикладные казалось вполне обоснованным [36]: фундаментальные науки “узнают” объективно существующее в природе, обществе, в человеке, прикладные “создают” технологии, методы, программы и т.д. Цель фундаментальной науки — поиск истины, цель прикладной — поиск эффективности. Фундаментальные науки пытаются понять мир и то, как он устроен, прикладные науки используют полученную информацию, чтобы облегчить жизнь. Фундаментальные науки накапливают факты, систематизируют их, обобщают, формируют гипотезы и теории, позволяющие обнаруживать и интерпретировать новые факты. Прикладные науки формируют знание, нацеленное на то, чтобы что-то создать; эти знания дают возможность делать то, чего не существует (технологии, методы, компьютерные программы, изделия и т.д.).

С этой точки зрения анатомия и физиология — фундаментальные науки, а медицина, создающая и использующая методы и средства профилактики, диагностики и лечения, — прикладная. И в свете приведенной выше дефиниции аналитической химии обсуждаемая нами наука — прикладная.

Критерий значимости сюда никак не относится, он из других классификаций, да и вообще относителен. По только что выбранной схеме, как мы уже говорили, анатомия наука фундаментальная, а медицина — прикладная. Будем спорить, которая важнее?

Однако есть и точка зрения, что делить науки на функциональные и прикладные не следует; говорят, что есть наука и ее приложения. Обычно так считают те, кто ближе к технологиям, к технике, в том числе и весьма авторитетные ученые. Кроме того, на государственном уровне, да в среде многих науковедов предпочитают говорить не о фундаментальных и прикладных науках, а о фундаментальных и прикладных исследованиях [37]. (Выделяют еще поисковые и ориентированные фундаментальные исследования.)

То, что разделение фундаментальных и прикладных исследований целесообразно, в настоящее время больших споров не вызывает. Эти две сферы по-разному организуются (институируют-

ся), управляются и финансируются, у них разная история⁷, хотя между ними много и общего.

Э.М. Миркин [38] давал такую характеристику фундаментальным исследованиям: “Фундаментальные исследования направлены на усиление интеллектуального потенциала общества путем получения нового знания и его использования в общем образовании и подготовке специалистов практически всех современных профессий. Ни одна форма организации человеческого опыта не может заменить в этой функции науку, выступающую как существенная составляющая культуры”.

Есть важный довод в пользу того, что фундаментальные и прикладные исследования надо различать. Прикладные исследования в конечном счете нацелены на решение проблем, важных для отраслей экономики, обороны, культуры и т.д. Затраты на них составляют 80–90 процентов всех затрат на науку. Финансировать прикладные исследования должен прежде всего заказчик, потребитель добываемого здесь знания. В результатах же, получаемых фундаментальными науками, заинтересованы в общем-то все, но никто в частности; эти результаты идут в мировую копилку знаний. Финансировать фундаментальную науку должно, как правило, общество в целом, конкретно — государство. Что обычно и имеет место.

Аналитическая химия в этой системе координат. В основном, конечно, исследования в области аналитической химии носят прикладной характер. Формально этот вывод вытекает из дефиниции аналитической химии, а по существу — из всего того, что мы знаем об этой науке, в том числе из собственного опыта.

Что делает аналитик-исследователь? Он разрабатывает методики, совершенствует методы, ищет способы, приемы более эффективного применения методов и методик, пытается распространить использование методов и методик на новые объекты, отыскивает, совершенствует способы обработки данных, разрабатывает стандартные образцы и т.д. Все это вписывается в разряд прикладных исследований.

Однако существенная часть проводимых в аналитической химии исследований носит, несомненно, фундаментальный характер. Так, чтобы существенно улучшить метод анализа, желательно проникнуть в суть явлений и процессов, лежащих в его основе. В период широкого распространения фотометрических методов анализа с использованием органических реагентов аналитики выполнили огромный объем работ по изучению

⁷ Фундаментальные исследования проводятся на протяжении всего периода существования науки. Прикладные исследования как специфическая сфера научной деятельности начали формироваться лишь в середине XIX в., хотя и до этого было немало единичных изобретений и эффективных приложений.

процессов комплексообразования в растворах, влиянию гидролиза, строения молекул органических реагентов, изменений этих молекул и т.д. Специалисты по рентгеновским методам анализа углубляются в физику рентгеновского излучения. Масс-спектрометристы изучают слабые места в молекуле органического соединения, чтобы понять пути фрагментации молекул при воздействии электронов. Хорошие специалисты по электрохимическим методам анализа часто считаются и хорошими электрохимиками, изучающими тонкие процессы на электродах. Таких примеров можно приводить сколько угодно, но еще от одного примера автор не может уйти: занимаясь применением жидкость-жидкостной экстракции для аналитических целей, автор приобрел имя как специалист по экстракции вообще (отсюда медаль им. Хансена, членство в международной организации, крупная международная конференция в Москве и т.д.).

Еще раз подчеркнем, что раскладка по схеме “фундаментальные—прикладные” никак не соотносится с раскладкой “важные—неважные”.

Исследования в области аналитической химии можно разделить на несколько уровней (эту тему развивал В.И. Вершинин [39]: 1) уровень разработки и совершенствования методик, 2) уровень развития, совершенствования методов и разработки методик, 3) уровень расширения набора и теоретического обоснования методов, развития систем методик, некоторых общепаналитических исследований и 4) уровень формирования общей теории анализа, развитие других общепаналитических направлений, развития системы методов, развитие систем методик. Развитие методов предполагает также разработки и совершенствование средств анализа, а общепаналитические исследования включают метрологию, хемометрику, автоматизацию и многое другое. Вот здесь можно говорить уж если не о важности, то по крайней мере о степени общности, охватности (а значит в какой-то мере и о значимости).

ДРАЙВЕРЫ РАЗВИТИЯ

У большинства современных наук два главных стимула развития: 1) собственная, внутренняя логика; интерес, любопытство, смелость, а то и авантюризм исследователя и 2) потребности, запросы практики — экономики, медицины, военного дела, систем безопасности и т.д. Ясно, что для разных наук значимость этих стимулов различается, иногда сильно; сопоставление, например, поиска новых галактик и сопротивления материалов (“сопромата”) это ясно демонстрирует. Попробуем оценить относительную роль этих факторов для аналитической химии, хотя результат такой оценки многим может показаться известным априори.

Внутренняя логика развития науки, любопытство ученого. Аналитическая химия всегда стремилась и стремится к расширению своих возможностей, в том числе, да и в первую очередь, к созданию общих подходов, методов анализа, технических, математических и других средств для этого, способов обработки результатов и т.д. Оригинальные идеи обычно рождаются в голове одного человека, способного, образованного и мотивированного, реализация же идеи нередко, а лучше сказать, довольно часто, требует в наше время участия и других людей.

Одно из направлений развития аналитической химии — снижение предела определения. Ну разве не захватывает мысль о том, чтобы можно было определять (считать) единичные атомы или молекулы? На практике, может быть, это никому особенно не нужно, кроме изошренных физиков и столь же изошренных молекулярных биологов. Но если вы научились точному определению единичных частиц, это наполнит вас гордостью, ваши результаты будут не только замечены, но и непременно отмечены; удовлетворение, радость, гордость ученого — что может быть ценнее?⁸ Или стремление к селективности. Каждый новый шаг в физических методах анализа, например в лазерной спектроскопии, обеспечивающий все большую и большую избирательность определений, — большая победа разума, умения, настойчивости. Соответствующую статью возьмут в любой журнал.

Создатель проточно-инжекционного анализа Я. Ружичка рассказывал, как он придумал подход к такому своеобразному способу автоматизации ряда методов анализа растворов. В начале 1970-х гг. Ружичка работал в одной бразильской аналитической лаборатории агрохимического профиля, делая ежедневно однотипные анализы растворов. Человек творческий, он стал думать, нельзя ли такие анализы автоматизировать. Вообще говоря, определенные достижения в этой области были и раньше, но, возможно, Ружичка о них не знал, или, более вероятно, автоматизация с использованием известных к тому времени технических средств требовала, как минимум, возможности эти средства приобрести. Поэтому Ружичка как бы начал с нуля, поэтому и придумал оригинальный способ, который потом, вместе И. Хансенем, назвал проточно-инжекционным анализом.

Б.В. Львов описал процесс разработки им электротермического варианта метода атомно-абсорбционной спектроскопии [40]. Лучше всего предоставить слово самому разработчику. “Поступив в начале 1955 г. на место младшего научного сотрудника в Государственный институт прикладной химии (ГИПХ) в Ленинграде, я оказался на много лет связанным со спектральным анали-

⁸ Пример, может быть, и не самый удачный, поскольку задача обнаружения единичных частиц, в сущности, уже решена.

зом материалов, меченных радиоактивными и стабильными изотопами. Подрабатывая написанием рефератов в Реферативном журнале “Химия”, в конце 1955 г. я случайно натолкнулся на статью Уолша... Возможность разработки метода абсолютного анализа, свободного от необходимости применения стандартных образцов состава, о которой упомянул Уолш, показалось мне настолько привлекательной, что я решил посвятить все свободное от основных обязанностей время этой проблеме. Летом 1956 г., воспользовавшись своим отпуском и отсутствием в лаборатории других сотрудников, я провел первые опыты по визуальному наблюдению абсорбции D-линий натрия. Для этого была использована разборная трубка с полым катодом, собранная мною для проведения изотопного анализа, графитовая трубчатая печь, нагреваемая на стенде для фракционной отгонки легколетучих примесей из трудноретучих основ, и призменный монохроматор. Впечатления от постепенного затухания и полного исчезновения ярких линий натрия по мере нагрева печи оказались столь потрясающими, что определило на многие годы мои научные интересы и во многом мою личную жизнь”.

Не обязательно иметь перед глазами цель, например, упомянутое повышение чувствительности или, скажем, уменьшение трудоемкости анализа: иногда открытия делаются почти случайно, без ясно и заранее сформулированной цели.

Я. Гейровский, физико-химик, изучал процессы на поверхности ртутной капли. В ходе своих экспериментов он прикладывал к капле ртути потенциал и измерял электрический ток, возникший между этой каплей и ртутью на дне сосуда. Гейровский заметил, что сила этого тока зависит от концентрации восстанавливающего вещества, находящегося в растворе. Более того, он увидел, что разные вещества начинают восстанавливаться при разных потенциалах. Гейровский сообразил, что это, по-видимому, можно использовать для целей анализа. Главное тут именно это “сообразил”. Ученый отодвинул в сторону “физическую химию” и вплотную занялся аналитическим аспектом. Уже в следующем году был сконструирован прибор. Получился метод полярографии. И награда была высшая – Нобелевская премия.

Радиохимик Д. Хевеши догадался обратить на пользу химическому анализу ядерные реакции образования дочерних элементов из облучаемых исходных. По количеству образовавшегося радиоактивного дочернего элемента можно определить количество материнского нерадиоактивного. Метод, впервые описанный в 1936 г. Хевеши вместе с его аспиранткой Х. Леви, получил название радиоактивного анализа. Д. Хевеши – лауреат Нобелевской премии.

Любопытство, легкий авантюризм – замечательные качества творческого человека. А что, если попробовать так? или вот так? а если сочетать как бы несочетаемое? Чаще всего ничего интересного не получается, но под лежащий камень вода не течет. Американский аналитик П. Дасгупта попытался использовать в качестве средства химического анализа ... мыльные пузыри, даже опубликовал статью об этом [41]. Чтобы придумывать нестандартное, помимо определенных личных качеств (любопытность, интуиция, знания, известное честолюбие), желательно иметь и некоторые условия – хоть немного свободного времени, чтобы подняться над повседневностью, более или менее налаженный быт, иногда доступ к материалам, изделиям и минимальным снабженческим и техническим услугам. Хотя для формирования “голой” идеи ничего этого, может быть, и не нужно. “По-видимому, природа скрывает в глубинах нашей души способности и дарования, о которых мы и сами не подозревали; только страсти пробуждают их к жизни и порой сообщают нам такую пронизательность и твердость, каких при обычных условиях мы никогда не могли бы достичь” (Ф. де Ларошфуко) [42].

М. Валкарсель [43] систематизировал “аналитические характеристики” (analytical properties), к достижению которых аналитик стремится; он разделил их на три группы: капитальные (capital), основные (basic) и дополнительные (accessory). К капитальным он отнес точность (accuracy) и представительность (representativeness). Под точностью он понимал соответствие полученных результатов истинному содержанию анализа в частной анализированной пробе; представительность же, по Валкарселю, характеризует соответствие между полученными результатами и анализированным объектом в целом, а также между полученными результатами и решаемой аналитической задачей. Основные характеристики определяют качество аналитического процесса как в самой лаборатории, так и вне ее в ходе пробоотбора. К этим характеристикам относятся чувствительность, селективность, воспроизводимость и надежность пробоотбора. Наконец, дополнительные характеристики очень важны с практической точки зрения, они включают стоимость анализа, факторы, связанные с персоналом, возможность внелабораторного применения (expeditionness).

Запросы практики. Совершенно очевидно, что жизненные потребности, требования экономики, медицины, охраны окружающей среды, вооруженных сил, служб безопасности – мощнейший стимул развития научной аналитической химии.

Вот один пример научного продвижения, участником которого был и автор. В 1950–1970 гг. интенсивно развивалась микроэлектроника на полупроводниках. Используемые полупроводни-

ковые соединения должны обладать очень высокой чистотой, соответственно нужно определять в них ничтожные концентрации примесей. Перед аналитической химией встала острейшая задача — научиться такие примеси определять. Конечно, чуть раньше подобная же задача встала при решении атомной проблемы, но в том случае число объектов анализа и число определяемых примесей были меньше, да и требования к чистоте не всегда были чрезвычайно высокими. Как же отвечала аналитическая химия?

Движение началось в двух направлениях. Первое: создание новых методов анализа, обещающих очень высокую чувствительность. На этом пути были достижения: появилась искровая масс-спектрометрия, сильно был продвинут радиоактивационный анализ, наклеивалась лазерная спектроскопия. Эти замечательные методы имели один только недостаток — они были мало доступны из-за сложности, дороговизны, ограниченного числа необходимых устройств. Обеспечивая, в принципе, высокую чувствительность, эти методы не могли стать массовыми. И здесь на помощь пришел другой, параллельный, путь развития. Заключался он в создании новых способов концентрирования примесей, чтобы можно было использовать для их определения в концентрате более или менее массовые, отлаженные и относительно недорогие методы, прежде всего атомно-эмиссионный, отчасти рентгенофлуоресцентный и даже фотометрические и электрохимические. На этой волне в СССР появились так называемые химико-спектральные методы анализа — атомно-эмиссионные методы с предварительным химическим концентрированием микроэлементов, например сорбционно-атомно-эмиссионные, получили значительное развитие экстракционно-фотометрические и инверсионно-вольтамперометрические методы. Был налажен аналитический контроль на предприятиях электронной промышленности, опубликовано огромное число статей и книг. Аналитическая химия Советского Союза была по этому направлению одной из самых развитых в мире. Группа ведущих аналитиков была отмечена Государственной премией СССР.

Еще пример. Один из самых массовых анализов — определение глюкозы в крови. Еще совсем недавно этот анализ делали только в лаборатории. Лабораторные методы совершенствуются уже более ста лет, они со временем становились надежнее и экспресснее. Однако существовало стремление сделать анализ внелабораторным, домашним, т.е. относительно простым и по возможности недорогим, была потребность в портативных устройствах для этого. Было бы хорошо, если бы такие устройства еще и обходились минимальным объемом забираемой крови, а в идеале обеспечивали бы неинвазивный анализ, т.е. вообще без отбора крови. Многие пытались решить эту важную за-

дачу, и решали тем или иным способом. Лучшее решение нашел А. Хеллер⁹, американский инженер-химик, он же организовал вместе с сыном производство глюкометров. Его глюкометр требовал всего 300 нанолитров крови и был основан на использовании кулонометрической системы. Президент США Дж. Буш наградил Хеллера в 2007 г. Национальной медалью “за технологии и инновации”.

Практическая потребность в химическом анализе огромна, в анализе постоянно нуждается промышленность, особенно химическая и нефтехимическая, металлургическая, электронная, фармацевтическая, пищевая. Агрехимические анализы необходимы сельскому хозяйству. Не могут обходиться без химического анализа и контроля охрана окружающей среды и медицина, криминалистика, система обеспечения безопасности и вооруженные силы. Все эти сферы ставили и ставят перед аналитической химией новые задачи, как правило, все более сложные. И это, конечно, мощнейший фактор, способствующий развитию аналитической химии как науки, тем более что реализация запросов практики часто подкрепляется соответствующей поддержкой: создаются институты, лаборатории, выделяются средства на разработку аналитической техники, готовятся кадры.

Помимо масштабности использования химического анализа в различных сферах, надо отметить периодически (а на самом деле почти постоянно) возникающие относительно острые, почти безотлагательные нужды. Массовые отравления меланином в Китае и США в первое десятилетие нашего века потребовали создания простых и эффективных методов и средств определения этого соединения. Загрязнение мышьяком огромного числа колодцев в Бангладеш, а потом и в соседних странах поставило задачу разработать подобные же экспрессные методы определения этого элемента, желательны в разных формах, хотя бы отдельно мышьяка(III) и мышьяка(V). Разлив нефти из потерпевшего крушения танкера в Персидском заливе потребовал быстрого решения вопроса — что за нефть, откуда она? Не из Ирана ли, у которого нефть покупать нельзя из-за наложенных на страну санкций? Нефть надо надежно анализировать, от результатов анализа зависит многое уже в политической плоскости.

Последний пример заостряет еще один аспект практического применения достижений аналитической химии — ответственность за надежность результатов. В этом отношении особенно важны

⁹ Адам Хеллер родился в 1933 г. в Румынии в еврейской семье, во время Второй мировой войны семья попала в гетто, чудом спаслась. Хеллер учился в Израиле, долгое время работал в университете Техаса в Остине. Почетный член Израильского химического общества (2019).

не только криминалистические, но и медицинские анализы, а также некоторые наиболее ответственные анализы в технических областях, например при подготовке космических экспедиций. М. Валкарсель опубликовал несколько статей о “социальной ответственности аналитической химии” [44, 45].

В последние годы все узнали, как важен допинг-контроль, как значительны последствия со-ответствующих анализов. Все также почувствовали необходимость надежного и достаточно мас-сового контроля питьевой воды и продуктов питания, причем контроль за содержанием хлора в воде или нитратов и пестицидов в сельхозпро-дуктах – это только самые известные примеры. Во многих случаях важен фактор времени, аналитические результаты должны быть получены и переданы клиенту вовремя и в понятной, интер-претированной форме, да еще с оценкой неопре-деленности.

Работа десятков тысяч контрольно-аналити-ческих лабораторий по всему миру стимулируется и регламентируется не только национальными запросами и национальным законодательством, но также международными стандартами, особен-но стандартами Международной организации стандартизации (ISO). Стремление, а чаще обя-занность, отвечать требованиям этих стандартов оказывает косвенное влияние и на развитие аналитической химии как науки. Это относится к бо-лее глубокой проработке вопросов градуирова-ния, алгоритмов сличения и обработки результа-тов, сдвига к “зеленой аналитической химии” и т.д. [46].

Практика анализа и контроля требует подго-товки большого числа квалифицированных спе-циалистов-аналитиков; более того, просто хими-ки (а также, скажем, биологи, геологи или фарма-цевты) должны владеть современными методами анализа.

МЕСТО АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ В СИСТЕМЕ НАУК

Цель оправдывает средства. Вопрос о месте аналитической химии в системе наук всплывает, когда мы начнем думать о том, как именно, какими средствами решает аналитическая химия свои задачи. А это ведь ключевой вопрос, вспомним дефиницию: “аналитическая химия – наука о принципах, методах и средствах...”. Дело в том, что и принципы (и общие подходы), и методы, и средства могут быть вовсе не химическими; со-здавать, совершенствовать эти подходы, методы и т.д. могут исследователи, далекие от химии, – фи-зики-спектроскописты, физики-ядерщики, спе-циалисты по лазерной технике, молекулярные биологи, инженеры-прибористы и т.д. Их разра-

ботки существенно, а чаще в решающей степени расширяют возможности аналитической химии. Современная аналитическая химия аккумулирует достижения множества наук и областей техники. И это совершенно правильно.

Чтобы создать оригинальный и эффективный способ химического анализа, творческий иссле-дователь-аналитик готов заключить союз хоть с дьяволом, готов использовать достижения всех наук и всех областей техники. Поэтому арсенал методов и средств химического анализа получает-ся богатым, включающим методы и средства само-го разного происхождения. Как писал М. Валкар-сель в одном из своих определений обсуждаемой науки (оно приводилось выше), “аналитическая химия ... развивает, оптимизирует и применяет ма-териальные, метрологические и стратегические средства самой разнообразной природы (химиче-ские, физические, математические, биохимиче-ские, биологические и т.д.)”. Происхождение подхода, метода, устройства не имеет значения, важно, чтобы они решали задачи обнаружения тех самых химических частиц, определения их концентрации или количества либо могли бы идентифицировать образец в целом. Существен-на лишь эта способность, все остальное – на вто-ром плане. Цель оправдывает средства.

Все это можно рассмотреть конкретнее, по-дробнее. В самом деле, сколько сейчас на воору-жении аналитической химии физических методов анализа! Вот только спектроскопические: гамма-спектрометрические, рентгеновские, атомно-эмис-сионные, атомно-абсорбционные, флуориметри-ческие, спектрофотометрические (УФ и видимая области спектра), инфракрасная и рамановская спектрометрия, радиоспектрометрические мето-ды (ЯМР, ЭПР, ЯКР). Другая группа физических методов – масс-спектрометрические и методы, основанные на ионной подвижности. А еще есть термические, ядерно-физические. Физическими методами решается огромное число аналитиче-ских задач, намного больше, чем химическими. Другой пласт важных методов – биохимические, включая иммунохимические, ферментативные, методы, основанные на использовании ДНК и др.

Задача состоит в том, чтобы выявлять находки, разработки других наук, интегрировать их под об-щей крышей аналитической химии, включать в систему аналитических методов (под методами мы – для краткости – понимаем не только соб-ственно методы анализа, но и общие подходы к анализу, способы пробоподготовки и обработки данных и т.д.). Очень важная задача профессио-нальных аналитиков, решаемая при приеме мето-дов в общую систему, – распространить на новые методы общепаналитическую методологию: под-готовку представительных проб, выполнение метрологических требований – получение образ-

цов сравнения, градуирование, обеспечение повторяемости результатов, статистическая обработка их и т.д.

Соответственно, аналитики в наше время — это не только химики, но и физики, физико-химики, биохимики и иногда биологи, фармацевты, многочисленные специалисты, представляющие технические науки.

Но это мы рассмотрели только часть проблемы (проблемы места аналитической химии в общей системе наук). Мы говорили о движении от других наук к аналитической химии. Рассмотрим и другие аспекты.

Является ли аналитическая химия частью химии? Часто цитируют слова американского аналитика Г.А. Либхавски (1960 г.): “Нравится вам это или нет, но химия уходит из аналитической химии”. Слова эти нравились не всем; точнее, не все были с ними согласны. Дж. Тайсон озаглавил в 1992 г. свою статью так: “Возвращая химию в аналитическую химию”¹⁰ [47].

Аналитическая химия не только родилась в недрах химии, но и была на протяжении полутора столетий основной частью химии (до первых десятилетий XIX века); она плоть от плоти химии. И остается химической наукой, поскольку занимается обнаружением и определением “химических частиц” — ионов, атомов, молекул, фрагментов молекул, фаз. За ней стоит Анализ, один из трех краеугольных камней химии; два других — Синтез и Теория. Аналитическую химию преподают на химических факультетах. Да название как бы говорит само за себя: аналитическая *химия*. Ну и о чем разговор, вопрос исчерпан? Ниже мы попробуем показать, что нет, разговор только начинается.

Поскольку цель аналитической химии — создание, совершенствование и т.д. подходов к анализу, методов и средств его, а эти подходы, методы и средства вовсе не обязательно химические, а часто совсем не химические, одной химии сейчас недостаточно. Современная аналитическая химия — это и химия, и далеко не только химия.

Есть и почти противоположная точка зрения, заключающаяся в том, что аналитическую химию можно рассматривать как всю химию (поскольку она использует неорганическую, органическую и особенно физическую химию, включая коллоидную, электрохимию и др.). Де ла Гардия [18] написал: “В основном я думаю, что Аналитическая химия представляет собой скорее точку зрения на вещество, чем часть или субдисциплину Химии. Очевидно, что Аналитическая химия — это химия, но не совсем часть химии. Она — вся Химия,

от неорганической до органической, да еще надо принять во внимание биохимические аспекты”. При таком подходе, правда, не ясно, что делать с физическими методами анализа, а также с биологическими. А некоторые специалисты-химики, далекие от аналитической химии наших дней, склонны считать, что научной области под названием “аналитическая химия” вообще нет, что это просто приложение химической науки. Разумеется, с этим нельзя согласиться.

Аналитическую химию отличает от других химических наук интерес к различиям, к непохожестям, к проявлениям индивидуального, в то время как, скажем, неорганическая химия стремится, напротив, к поиску общих проявлений, аналогий (вершина — периодический закон), органическая — к закономерностям в реакциях, в строении молекул. Историк химии М. Джуа [48] писал: “В современный период ... отдельные ветви химии ... приобрели признаки независимых наук”. И уж аналитическая химия — точно приобрела.

Донорство по отношению к другим наукам. Не раз говорилось, что успехи науки определяются используемыми методами, а создание нового эффективного метода эквивалентно крупному открытию. Не случайно за новые методы анализа присуждено более десяти Нобелевских премий.

Г. Бокль¹¹ писал: “Во всех высших отраслях знания самую большую трудность представляет не открытие фактов, но открытие верного метода, согласно которому законы и факты могут быть установлены” [49]. Есть немало наук, само существование которых зиждется на результатах химического анализа: геохимия, химическая кинетика, в значительной степени молекулярная биология; гораздо больше наук тоже используют результаты химического анализа, но в несколько меньшей степени.

Так, созданные в недрах аналитической химии методы, методики, приборы широко используют геохимики. Многие выводы, делаемые при развитии геохимии, основываются на результатах химического анализа, причем некоторые анализы в силу сложности объектов, сложности приборов, их ограниченных возможностей приобретают черты научно-методического исследования. Это, например, относится к использованию рентгено-спектрального микроанализа (электронного зонда) при изучении минералов и горных пород. В этом случае нужен и аналитик, специалист по методу, и геохимик или минералог, иначе трудно грамотно оценить надежность результатов и интерпретировать их. Проблему определения пороодообразующих элементов для целей геохимии и смежных наук в значительной степени решает рентгенофлуоресцентный метод; ушел в прошлое длительный силикатный химический анализ,

¹⁰ “Putting the chemistry back into analytical chemistry.” Julian Tyson — профессор университета штата Массачусеттс в г. Амхерст, США, специалист по атомно-абсорбционной спектроскопии, проточным методам пробоподготовки.

¹¹ Генри Томас Бокль (1821—1862) — английский историк и социолог.

проводившийся химическими методами; ушло в прошлое и комплексометрическое титрование, применявшееся позднее. Насколько важны для геохимии современные аналитические решения, показала почти драматическая история анализа углеродсодержащих горных пород на благородные металлы, когда долгое время результаты разных лабораторий расходились принципиально.

Не меньший вклад внесла и вносит аналитическая химия в молекулярную биологию и смежные области. Известно, что геном человека расшифровали, используя электрофоретические методы, масс-спектрометрию и некоторые другие аналитические методы. Иммунохимические и другие биохимические аналитические методы позволяют решать многие медицинские (диагностические) задачи. Аналитики-исследователи помогают решать археологические и искусствоведческие задачи. Впрочем, эта тема неисчерпаема.

СТРУКТУРА НАУКИ

Систематизация как элемент формирования науки. Путем наблюдения или эксперимента наука добывает факты, но факты только тогда становятся работающим знанием, когда они встроены в систему, когда за фактами появляются обобщения, гипотезы, закономерности, теории. Систематизация знаний очень важна, классификации необходимы, причем обычно классификаций бывает несколько, иногда много, в зависимости от выбранного критерия, от признака, рассматриваемого в данный момент в качестве ключевого.

Систематизация – понятие, относящееся в основном не к переднему краю науки, а к научной дисциплине, которую можно представить как систему отстоявшегося, упакованного знания, с более или менее четко обозначенными границами; это прочный тыл науки. О научной дисциплине – цитаты из работы, специально посвященной дисциплинарной структуре науки [18]:

“Научная дисциплина образует инвариантную, относительно устойчивую структуру знания. Следует подчеркнуть, что дисциплинарные структуры науки инвариантны не сами по себе, а лишь по отношению к определенной совокупности изменений науки, а именно относительно постоянно изменчивого переднего фронта научных исканий ... В сложном взаимоотношении инвариантных и вариантных характеристик развивающегося научного знания научная дисциплина предстает как относительно устойчивая структура, темпы изменения которой гораздо медленнее, чем скорость изменения на переднем крае научных исследований. Функция таких инвариантных структур науки заключается в обеспечении устойчивости науки, преемственности знания при смене исследовательских программ, научных результатов и

поколений ученых. Передний край предстает как противоборство и конкуренция множества исследовательских программ. Это множество постепенно стягивается в альтернативу, а из альтернативных программ лишь одна получает социальное признание в виде научной дисциплины.

Дисциплинарная организация науки осуществляется тем каналом, который обеспечивает социализацию достигнутых результатов, превращение их в научные и культурные образцы, в соответствии с которыми составляются учебники, излагается и передается знание в системе образования. Дисциплинарно оформленное и социальное признание оказывается такой формой организации науки, которая обеспечивает устойчивый и воспроизводимый характер научной деятельности, задает предметное, концептуальное и методологическое единство в изучении данной области, позволяет ученому идентифицировать себя с научным сообществом”.

Классификация имеет прямое влияние на социальную организацию науки – на профиль подготовки специалистов; на профиль и название научных учреждений, лабораторий, на тематику конференций, характер общественных объединений и т.д.; массив научной литературы также структурируется в соответствии с элементами систематизации.

Подходы к структурированию аналитической химии. Знание аналитической химии можно представить собранным из таких скрепленных между собой блоков: 1) общие подходы к анализу, 2) методы и средства анализа и 3) аналитическая химия отдельных объектов и их групп. В отношении методов (средств) анализа и аналитической химии отдельных объектов все более или менее ясно; в пояснении, вероятно, нуждаются только общие подходы (о которых, впрочем, выше уже кое-что говорилось). Их много: покомпонентный анализ vs. идентификация на пути распознавания образа; многоступенчатый анализ со скринингом проб; использование обобщенных показателей вместо того же покомпонентного анализа; оценка целесообразности и пути автоматизации анализа; способы накопления аналитических сигналов; обеспечение представительности проб и анализа в целом; общие подходы и неразрушающему анализу; методология химических сенсоров; абсолютный и относительный (с образцами сравнения) анализ и т.д.

В качестве критериев классификации резонно использовать главные задачи химического анализа. Речь идет о качественном, количественном, структурном анализе; можно отдельно назвать вещественный (speciation) анализ, хотя в сущности это особая часть трех названных выше видов анализа.

На виды анализа можно взглянуть с другой точки зрения. Можно выделять пары анализов: валовый и распределительный (локальный); деструктивный (с разрушением образца) и недеструктивный; контактный и дистанционный (removed); дискретный и непрерывный; “ручной” и автоматизированный.

В качестве классификационных признаков можно иметь так называемые аналитические характеристики, относящиеся в первую очередь к методам и методикам анализа и тем более к конкретным анализам. В качестве основных аналитических характеристик названием представляется пробы и анализа в целом, правильность, воспроизводимость, селективность, чувствительность; в практике анализа существенную роль играют также время анализа, его стоимость и безопасность (об аналитических характеристиках уже шла речь).

Самое ходовое деление – деление методов анализа по их природе, для профессиональных аналитиков оно привычно: методы делят на химические, физико-химические, физические, биохимические, биологические.

НАЗВАНИЕ НАУКИ

Термин “аналитическая химия” существует и широко используется третье столетие; впервые его применил, по-видимому, В.А. Лампадиус в своей книге 1801 г. Так называются учебные курсы в университетах, учебники, конференции, многочисленные монографии и т.д. И тем не менее дискуссия о названии науки о химическом анализе было необходимо внести в перечень обсуждаемых здесь методологических вопросов.

Есть ли вопрос? Вопрос, конечно, есть, и он обсуждается уже более пятидесяти лет. Но главное не в дискуссии, а в реалиях: сейчас вместо названия “аналитическая химия” широко используют и другие термины.

Задачу создания методов и средств химического анализа, приемов осуществления анализа, способов подготовки проб, обработки аналитических сигналов, обработки результатов анализа решают, как уже не раз говорилось, далеко не только химики, но также физики, математики, специалисты по теории информации, инженеры разного профиля. Еще 30 лет назад Х. Малисса писал [15]: “Принимая во внимание, что очень скоро мы столкнемся с тем фактом, что большая часть практической работы в аналитической химии будет выполняться автоматами, используя больше “реагентов” из физики, чем из химии, и все большее количество информации будет генерироваться из все меньшего анализируемого объема, мы должны сделать вывод, что все более важ-

ными становятся общие соображения”. Название науки – из этих “общих соображений”.

С одной стороны, наука о методах и средствах химического анализа, конечно, наука химическая, – в том смысле, что она (как это уже подчеркивалось раньше) нацелена на обнаружение, на количественное определение, оценку расположения химических частиц – ионов, атомов, молекул, фаз. С другой стороны – инструментарий ее далеко не только химический, и даже не столько химический, сколько физический, биохимический или какой-либо еще. Ну и, казалось бы, что? Астрономия или геология не перестают быть астрономией и геологией, пользуясь достижениями самых разных наук и самых разных областей техники. Однако разница есть. Для астрономии и геологии инструментарий – средство, для аналитической химии инструментарий, точнее его создание, – цель.

Заведующий кафедрой аналитической химии Харьковского университета Н.П. Комарь, активно занимавшийся расчетом химических равновесий в растворах, имеющих значение для аналитической химии, получивший, помимо химического, еще и математическое образование, считал, что аналитическая химия должна быть не “рецептурной” (его термин), а основанной на расчетах, на использовании метрологии. По его предложению и настоянию кафедры переименовали, она стала называться кафедрой химической метрологии. Не очень ясно, что Н.П. Комарь имел в виду: то ли он считал, что аналитическая химия есть химическая метрология, то ли просто химическая метрология становилась тематикой научных работ кафедры, ее профилем (в этом случае, правда, не понятно, что преподавать студентам). Тем не менее многие посчитали, что Н.П. Комарь как бы переименовал аналитическую химию в химическую метрологию.

В англоязычной литературе вместо термина “аналитическая химия” мелькали термины “Analytical Technology”, “Analytical Methodology”. Довольно часто используется термин “Analytical Science” (или “Analytical Sciences”). Так называется издаваемый в Японии на английском языке широкопрофильный журнал (“Analytical Sciences”), этот термин мы видим в названии журналов открытого доступа “Journal of Analytical Science and Technology” (Springer), “Analytical Science Advances” (Wiley-VCN). Издательство “Wiley and Sons” присуждает награду, которая называется “Wiley Analytical Sciences award”. Термин “Analytical Science” присутствует в названиях ряда конференций. На русском языке эти названия не приживаются.

Другое получившее широкое распространение название – “аналитика” (англ. “Analytics”, нем. “Analytik”). На русском языке (подробнее чуть

ниже) “аналитика” используется давно, термин предложен автором этой статьи в конце 1970-х гг. [26, 50]. К. Данцер и его соавторы назвали свою книгу “Analytik – Systematischer Überblick” (русский перевод 1981 г. [51]); вообще на немецком языке термин “Analytik” применяется давно.

Даже аналитик старшего поколения уже упоминавшийся Х. Малисса принимал это название еще в начале 1990-х гг., вот, например, цитаты из его статей о философии аналитической химии: “Аналитика, наука и искусство анализировать “субстанцию” (thing) – это одна из четырех колонн в каждой науке (другие это синтез, теория и практика” [15]. “Хотя эксклюзивные отсылки к аристотелевской “Аналитике”... для самоутверждения Аналитики в науке кажутся преувеличением, это правильный старт к пониманию превращения Аналитической химии в аналитику” [17]. Можно отметить польский журнал “Analityka”.

Что же касается русского языка, к которому мы возвращаемся, то термин “аналитика” стал почти повседневным. Он в названиях двух российских журналов (“Аналитика и контроль” и “Аналитика”), большого числа конференций (“Экоаналитика”, “Аналитика Сибири и Дальнего Востока” и др.), выставки “Аналитика Экспо”, ряда книг, в том числе учебников [52].

Выбор и рекомендации. Русский термин “аналитика”, конечно, немного занят; дело не в труде Аристотеля “Аналитика”, а в использовании этого слова в совсем далеких сферах – финансово-экономической, журналистской и других. И тем не менее из рассмотренных в предыдущем разделе терминов, он, конечно, самый подходящий. Да и сама жизнь так решила, именно “аналитика” прижилась.

А как быть с термином “аналитическая химия”? По-видимому, в течение определенного времени термины будут сосуществовать. В названиях научных конференций, в которых находит отражение то, что делается на переднем крае науки (frontier), где участвуют химики-аналитики, физики-аналитики, биохимики-аналитики, лучше, очевидно, использовать название “аналитика”. Учебные курсы в химических университетах и на химических факультетах продолжать называть аналитической химией, как и учебники для этих курсов. В названиях практических руководств для работающих аналитиков, видимо, во многих случаях больше подойдет “аналитика”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Поппер К.* Логика и рост научного знания. М.: Прогресс, 1983. 605 с. (*Popper K.* The Logic of Scientific Discovery. Routledge, 2005. 544 p.)
2. *Кун Т.* Структура научных революций. Сост. Кузнецов В.Ю. М.: Изд-во АСТ, 2003. 605 с. (*Kuhn T.* The Structure of Scientific Revolutions. 2nd ed. Chicago, London: University of Chicago Press Ltd., 1970. 210 p.)
3. *Лакатос И.* Фальсификация и методология научно-исследовательских программ. М.: Медиум, 1995. (*Lakatos I.* Fabrication and Methodology of Scientific Research Programmes / Criticism and the Growth of Knowledge / Eds. Lakatos I., Musgrave A. Cambridge: Cambridge University Press, 1970. P. 91.)
4. *Лакатос И.* Избранные произведения по философии и методологии науки. М.: Академический проект; Трикста, 2008. 475 с.
5. *Фейерабенд П.* Избранные труды по методологии науки. М.: Прогресс, 1986. 543 с.
6. Философия науки. Учебник для магистратуры / Под ред. Липкина А.И. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Изд-во Юрайт, 2015. 512 с.
7. *Степин В.С., Горохов В.Г., Розов М.А.* Философия науки и техники. М.: Гардерики, 1996.
8. Философия и методология науки. Учебник для вузов / Под ред. Кузнецова В.И. М.: Аспект-Пресс, 1996. 392 с.
9. *Никифоров А.Л.* Философия науки: история и методология. Учебное пособие. М.: Дом интеллектуал. книги, 1998. 280 с.
10. *Рузавин Г.Н.* Философия науки. Учебное пособие для студентов вузов. М.: ЮНИТИ-ДАНА, 2008. 182 с.
11. Современная философия науки. Знание, рациональность, ценности в трудах мыслителей Запада. Хрестоматия. Изд. 2-е, перераб. и доп. / Сост. Печенкин А.А. М.: Логос, 1996. 400 с.
12. *Кезин А.В.* Наука в зеркале философии. М.: Общво “Знание”, 1990. 43 с.
13. *Огурцов А.П.* Дисциплинарная структура науки. Ее генезис и обоснование. М.: Наука, 1988. 256 с.
14. *Родный Н.И.* Очерки по истории и методологии естествознания. М.: Наука, 1975. 424 с.
15. *Malissa H.* Some philosophical fundamentals of Analytical Chemistry // *Fresenius J. Anal. Chem.* 1990. V. 337. P. 159.
16. *Malissa H.* Philosophical aspects of Analytical Chemistry. II // *Fresenius J. Anal. Chem.* 1992. V. 343. P. 836.
17. *Malissa H.* Philosophical aspects of Analytical Chemistry. III // *Fresenius J. Anal. Chem.* 1993. V. 347. P. 3.
18. *de la Gardia M.* An integrated approach of analytical chemistry // *J. Brazilian Chem. Soc.* 1999. V. 10. № 6. <https://doi.org/10.1590/50103-5013199900060002> (20.07.2020)
19. *Harvey D.* Modern Analytical Chemistry. New York: McGraw Hill Co., 2000. P. 2.
20. *Клячко Ю.А., Чепелевецкий М.Л., Лурье Ю.Ю.* 30 лет аналитической химии в СССР // Заводск. лаборатория. 1947. Т. 13. № 11. С. 1280.
21. *Клячко Ю.А.* Состояние и задачи современной аналитической химии // Заводск. лаборатория. 1955. Т. 21. № 4. С. 387.
22. *Клячко Ю.А., Шапиро С.А.* Курс химического качественного анализа. М.: ГНТИХЛ, 1960. С. 3.
23. *Ляликов Ю.С., Клячко Ю.А.* Теоретические основы качественного химического анализа. М.: Химия, 1978. С. 9.

24. *Клячко Ю.А.* Еще раз о дефиниции аналитической химии // Журн. аналит. химии. 1996. Т. 51. № 5. С. 569.
25. Analytical Chemistry. 2nd ed. / Eds. Kellner R., Mermet J.-M., Otto M., Valcarcel M. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
26. *Золотов Ю.А.* Очерки аналитической химии. М.: Химия, 1977. 239 с.
27. *Золотов Ю.А.* Методологические вопросы аналитической химии / История и методология естественных наук. Вып. 35. Философские проблемы химии. М., 1988. С. 5.
28. *Золотов Ю.А.* Введение в аналитическую химию. М.: Лаборатория знаний, 2016. 263 с.
29. *Danzer K.* Analytical Chemistry – today's definition and interpretation // Fresenius J. Anal. Chem. 1992. V. 343. P. 827.
30. *Valcarcel M.* A modern definition of analytical chemistry // Trends Anal. Chem. 1997. V. 16. № 3. P. 124.
31. *Valcarcel M.* Qua vadis, Analytical Chemistry? // Trends Anal. Chem. 2016. V. 408. P. 13.
32. *Valcarcel Cases M., Lopez-Lorente A.I., Lopez Jimenez M.A.* Fundamentals of Analytical Chemistry. A Teaching-Learning Approach. Berlin: Springer, 2018.
33. *Fresenius J.* Anal. Chem. 1992. V. 343.
34. *Cammann K.* Analytical Chemistry – today's definition and interpretation // Fresenius J. Anal. Chem. 1992. V. 343. P. 812.
35. *Золотов Ю.А.* Что же такое химический анализ? // Журн. аналит. химии. 2015. Т. 70. № 7. С. 782.
36. *Кедров Б.М.* О науках фундаментальных и прикладных // Вопросы философии. 1972. № 10. С. 40.
37. *Чешев В.В.* Фундаментальные науки или фундаментальные исследования? // Эпистемология и философия науки. 2014. Т. 15. № 2. С. 34.
38. *Мирский Э.М.* Фундаментальные и прикладные исследования / Электронная библиотека Института философии РАН. Новая философская энциклопедия. iphlib.ru/library/collection/newphilenc/documents/HASH01a9e2fa79561f7107da73a9 (21.07.2020).
39. *Вершинин В.И.* // gusanalytchem.org/events/School-Conf2006/Вершинин_ВИ_презентация%20доклада.pdf (21.07.2020).
40. *Львов Б.В.* Пятьдесят лет атомно-абсорбционной спектроскопии // Журн. аналит. химии. 2005. Т. 60. № 4. С. 434. (*Львов В.В.* Fifty years of atomic absorption spectrometry // J. Analyt. Chem. 2005. V. 60. № 4. P. 382.)
41. *Kanyanee T., Borst W.L., Jakmunee Ja., Grudpan K., Li Jianzhong, Dasgupta P.* Soap bubbles in analytical chemistry. Conductometric determination of sub parts per million level of sulfur dioxide with a soap bubble // Anal. Chem. 2006. V. 78. P. 2786.
42. *de Ларошфуко Ф.* Максимумы. Харьков: Litera-Nova, 2013. С. 146.
43. *Valcarcel M., Rios A.* The hierarchy and relationships of analytical properties // Anal. Chem. 1993. V. 65. № 18. P. 781A.
44. *Valcarcel M., Lucena K.* Synergistic relationships between Analytical Chemistry and written standards // Anal. Chim. Acta. 2013. V. 788. July 25. P. 1.
45. *Valcarcel M., Rios A.* Required and delivered analytical information: The need for consistency // Trends Anal. Chem. 2000. V. 19. № 10. P. 593.
46. *Valcarcel M., Christian G. D., Lucena R.* Teaching social responsibility in analytical chemistry // Anal. Chem. 2013. V. 85. № 13. P. 6152.
47. *Tyson Ju. F.* Putting the chemistry back into analytical chemistry // Microchem. J. 1992. V. 45. № 2. P. 143.
48. *Джуа М.* История химии. М.: Мир, 1966.
49. *Бокль Г.* Цит. по книге: Мудрость столетий. Энциклопедия афоризмов. Автор-сост. Векшин Н. М.: Столетие, 1997. С. 78.
50. *Золотов Ю.А.* Некоторые методологические вопросы аналитической химии // Журн. аналит. химии. 1976. Т. 31. № 9. С. 1770.
51. *Данцер К., Тан Э., Мольх Д.* Аналитика. Систематический обзор. М.: Химия, 1981. 280 с. (*Danzer K., Than E., Molch D.* Analytik. Ein systematischer Überblick. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest und Portig K.G., 1976. 316 S.)
52. *Харитонов Ю.Я.* Аналитическая химия. Аналитика. Общие теоретические основы. Качественный анализ. Изд. 6-е. М.: ГЕОТАР, 2014. 688 с.