

十、分析化学发展趋势

分析化学学科的发展经历了三次巨大变革：第一次是随着分析化学基础理论，特别是物理化学的基本概念（如溶液理论）的发展，使分析化学从一种技术演变成为一门科学，第二次变革是由于物理学和电子学的发展，改变了经典的以化学分析为主的局面，使仪器分析获得蓬勃发展。目前，分析化学正处在第三次变革时期，生命科学、环境科学、新材料科学发展的要求，生物学、信息科学，计算机技术的引入，使分析化学进入了一个崭新的境界。第三次变革的基本特点：从采用的手段看，是在综合光、电、热、声和磁等现象的基础上进一步采用数学、计算机科学及生物学等学科新成就对物质进行纵深分析的科学；从解决的任务看，现代分析化学已发展成为获取形形色色物质尽可能全面的信息、进一步认识自然、改造自然的科学。现代分析化学的任务已不只限于测定物质的组成及含量，而是要对物质的形态（氧化-还原态、络合态、结晶态）、结构（空间分布）、微区、薄层及化学和生物活性等作出瞬时追踪、无损和在线监测等分析及过程控制。随着计算机科学及仪器自动化的飞速发展，分析化学家也不能只满足于分析数据的提供，而是要和其它学科的科学家的科学家相结合，逐步成为生产和科学研究中实际问题的解决者。近些年来，在全世界科学界和分析化学界开展了“化学正走出分析化学”、“分析物理”、“分析科学”等热烈议论，反映了这次变革的深刻程度。

本书根据中国《国家自然科学基金会》“自然科学学科（分析）发展战略调查报告”在美国、前苏联这两个发达国家分析化学发展情况的基础上，将现代分析化学学科的发展趋势和特点归纳为八个方面，以论述分析化学整体的发展：

（一）提高灵敏度

这是各种分析方法长期以来所追求的目标。当代许多新的技术引入分析化学，都是与提高分析方法的灵敏度有关，如激光技术的引入，促进了诸如激光共振电离光谱、激光拉曼光谱、激光诱导荧光光谱、激光光热光谱、激光光声光谱和激光质谱的开展，大大提高了分析方法的灵敏度，使得检测单个原子或单个分子成为可能。又如多元配合物、有机显色剂和各种增效试剂的研究与应用，使吸收光谱、荧光光谱、发光光谱、电化学及色谱等分析方法的灵敏度和分析性能得到大幅度地提高。

（二）解决复杂体系的分离问题及提高分析方法的选择性

迄今，人们所认识的化合物已超过 1000 万种，而且新的化合物仍在快速增长。复杂体系的分离和测定已成为分析化学家所面临的艰巨任务。由液相色谱、气相色谱、超临界流体色谱和毛细管电泳等所组成的色谱学是现代分离、分析的主要组成部分并获得了很快的发展。以色谱、光谱和质谱技术为基础所开展的各种联用、接口及样品引入技术已成为当今分析化学发展中的热点之一。在提高方法选择性方面，各种选择性试剂、萃取剂、离子交换剂、

吸附剂、表面活性剂、各种传感器的接着剂、各种选择检测技术和化学计量学方法等是当前研究工作的重要课题。

(三) 扩展时空多维信息

现代分析化学的发展已不再局限于将待测组分分离出来进行表征和测量，而是成为一门为物质提供尽可能多的化学信息的科学。随着人们对客观物质的认识的深入，某些过去所不甚熟悉的领域，如多维、不稳态和边界条件等也逐渐提到分析化学家的日程上来。例如现代核磁共振波谱、红外光谱、质谱等的发展，可提供有机物分子的精细结构、空间排列构型及瞬态等变化的信息，为人们对化学反应历程及生命过程的认识展现了光辉的前景。化学计量学的发展，更为处理和解析各种化学信息提供了重要基础。

(四) 微型化及微环境的表征与测定

微型化及微环境分析是现代分析化学认识自然从宏观到微观的延伸。电子学、光学和工程学向微型化发展、人们对生物功能的了解，促进了分析化学深入微观世界的进程。电子显微技术、电子探针 X 射线微量分析、激光微探针质谱等微束技术已成为进行微区分析的重要手段。在表面分析方面，电子能谱、次级离子质谱、脉冲激光原子探针等的发展，可检测和表征一个单原子层，因而在材料科学、催化剂、生物学、物理学和理论化学研究中占据重要的位置。此外，对于电极表面修饰行为和表征过程的研究，各种分离科学理论、联用技术、超微电极和光谱电化学等的应用，为揭示反应机理，开发新体系，进行分子设计等开辟了新的途径。

(五) 形态、状态分析及表征

在环境科学中，同一元素的不同价态和所生成的不同的有机化合物分子的不同形态都可能存在毒性上的极大差异。在材料科学中物质的晶态、结合态更是影响材料性能的重要因素。目前已报道利用诸如阳极溶出伏安法、X 射线光电子能谱、X 射线荧光光谱、X 射线衍射、热分析、各种吸收光谱方法和各种联用技术来解决物质存在的形态和状态问题。

(六) 生物大分子及生物活性物质的表征与测定

70 年代以来，世界各发达国家都将生命科学及其有关的生物工程列为科学研究中最优先发展的领域，在欧、美、日等地区和国家具有战略意义的宏大研究规划“尤利卡计划”，“人类基因图”及“人体研究新前沿”中，生物大分子的结构分析研究都占据重要的位置。我国在 2000 年前发展高技术战略的规划中，也把生物技术列为七个重点领域之一。一方面生命科学及生物工程的发展向分析化学提出了新的挑战。另一方面仿生过程的模拟，又成为现代分析化学取之不尽的源泉。当前采用以色谱、质谱、核磁共振、荧光、磷光、化学发光和免疫分析以及化学传感器、生物传感器、化学修饰电极和生物电分析化学等为主体的各种分析手段，不但在生命体和有机组织的整体

水平上，而且在分子和细胞水平上来认识和研究生命过程中某些大分子及生物活性物质的化学和生物本质方面，已日益显示出十分重要的作用。

(七) 非破坏性检测及遥测

它是分析方法的又一重要外延。当今的许多物理和物理化学分析方法都已发展为非破坏性检测。这对于生产流程控制，自动分析及难于取样的诸如生命过程等的分析是极端重要的。遥测技术应用较多的是激光雷达、激光散射和共振荧光、傅里叶变换红外光谱等，已成功地用于测定几十公里距离内的气体、某些金属的原子和分子、飞机尾气组成，炼油厂周围大气组成等，并为红外制导和反制导系统的设计提供理论和实验根据。

(八) 自动化及智能化

微电子工业、大规模集成电路、微处理器和微型计算机的发展，使分析化学和其它科学与技术一样进入了自动化和智能化的阶段。机器人是实现基本化学操作自动化的重要工具。专家系统是人工智能的最前沿。在分析化学中，专家系统主要用作设计实验和开发分析方法，进行谱图说明和结构解释。80年代兴起的过程分析已使分析化学家摆脱传统的实验室操作，进入到生产过程、甚至生态过程控制的行列。分析化学机器人和现代分析仪器作为“硬件”，化学计量学和各种计算机程序作为“软件”，其对分析化学所带来的影响将会是十分深远的。