

LA QUÍMICA ANALÍTICA AL LLINDAR DEL SEGLE XXI

Miquel Valcárcel

Els canvis de segle han estat tradicionalment considerats com unes èpoques especials on s'originen inflexions a l'evolució de la humanitat. Les prediccions de futur proliferen i van des dels enfocaments catastrofistes fins als més positivistes, que preveuen un món ideal. En realitat, els veritables canvis que suposin importants variacions en els àmbits social, econòmic, científic i tècnic es produeixen amb independència de les xifres dels anys, tinguin o no dos zeros.

Ja es comença a percebre aquesta tendència davant la imminent entrada del nou segle, que també coincideix amb l'inici del tercer mil·lenni. Llibres, estudis, informes, resums, seminaris i conferències tenen com a objectiu la predicció de la situació al segle XXI en diferents àmbits. A la majoria d'ells es reflexiona i es fan propostes de millora, cosa que sempre és positiva.

En aquest treball ens qüestionem com serà la química analítica al segle XXI considerant la seva evolució, situació actual, així com les tendències (figura 1). Es tindran en compte no només les demandes d'informació química de la societat, la indústria i la tecnologia, sinó també els previsibles avenços a altres àrees científicotècniques. Les necessàries extrapolacions es faran amb una barreja ponderada d'objectivitat i de, inevitablement, subjectivitat. No es pretén dogmatitzar, sinó expressar un enfocament obert a la discussió on s'abordaran tendències genèriques i bàsiques en detriment de les específiques (p. ex. en les diferents tècniques analítiques).

EVOLUCIÓ DE LA QUÍMICA ANALÍTICA

Des que es va fer el primer mesurament d'un paràmetre químic fins als nostres dies, l'evolució de la química analítica pot considerar-se dividida en tres etapes: clàssica, moderna i contemporània, els límits de les quals són difícils d'establir amb precisió. Es caracteritzen, respectivament, per l'ús de la balança, la bureta i els sentits humans; per l'aparició i l'ús massiu d'instrumentació; i per la irrupció de la informàtica i dels sistemes de qualitat.¹ A cada etapa les estratègies i eines han estat molt diverses, tot i que l'evolució no implica en tots els casos que s'abandonin sistemes o objectes que són vàlids ahir, avui i demà, encara que amb característiques (i prestacions) cada vegada millors. Així, per exemple, la tendència actual a la miniaturització ha existit també al passat (microanàlisi) i la balança s'ha utilitzat, s'utilitza i s'utilitzarà sempre. A vegades, aspectes inherents a la química analítica, com la traçabilitat i els estàndards, s'han revitalitzat i fins i tot es *venen* com a nous. A altres aspectes (per exemple,

1. M. VALCÁRCCEL, «Analytical Chemistry Today», *Química Analítica*, núm. 3 (1990), p. 215-233.

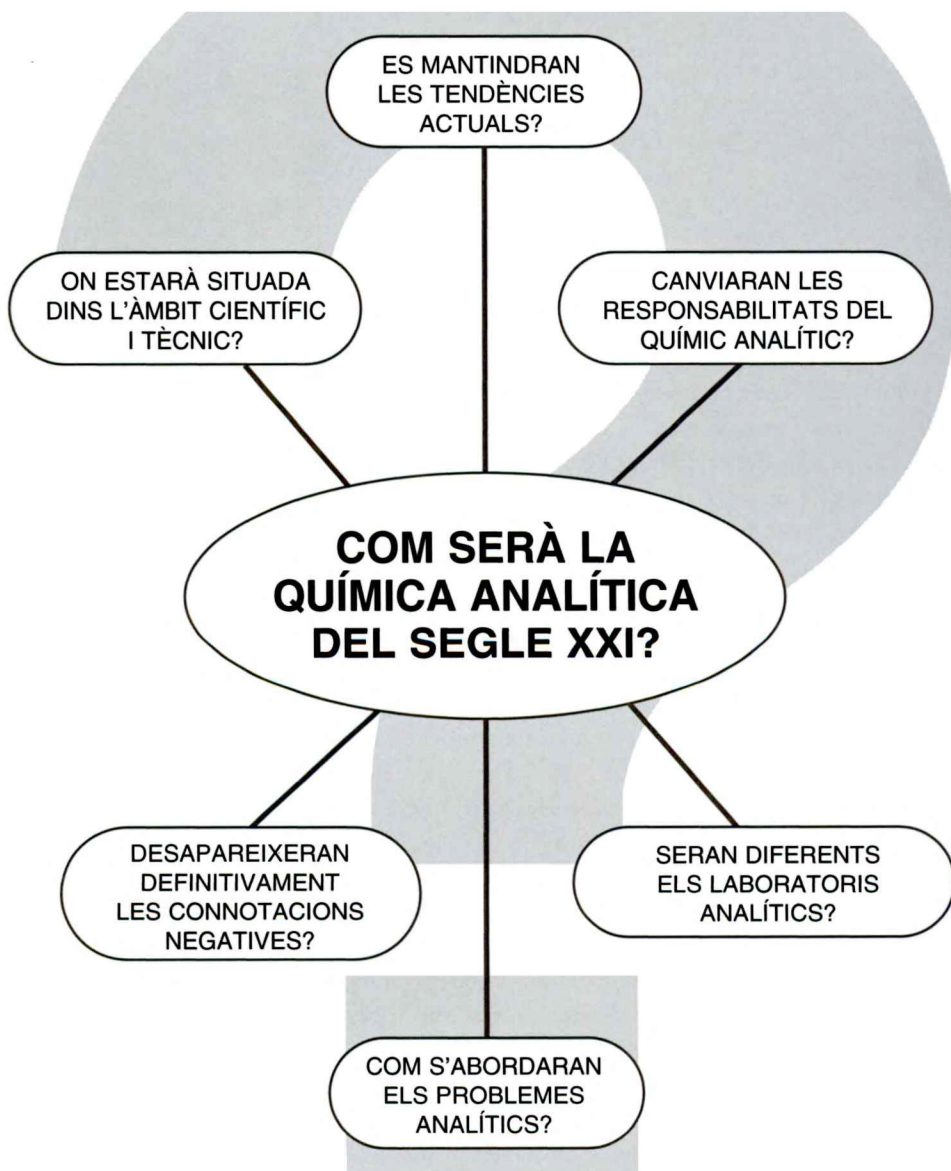


FIGURA 1. Qüestions que es plantegen en considerar com serà la química analítica al segle XXI

el mostreig) se'ls està donant una gran importància en l'actualitat, tot i que en realitat l'han tinguda sempre.

L'evolució de la química analítica també pot ser estudiada examinant diversos aspectes conceptuals i tècnics. Els principis bàsics de la química analítica eren fonamentalment termodinàmics; en l'actualitat la cinètica, tant química com física, ha adquirit una importància equiparable. La naturalesa de les mostres/analits és ara tant inorgànica com orgànica i bioquímica i les eines són químiques, físiques, bioquímiques i biològiques. Els límits de detecció han minvat des del nivell gram/molar fins a nivells impensables fa pocs anys (pico/femto). També s'ha ampliat el nombre d'analits que poden determinar-se en una sola mostra de manera senzilla i ràpida.

En resposta a les necessitats plantejades també s'ha ampliat la informació sobre analits (des de la globalitat fins a l'especialització i la distribució temporal i/o espacial), així com les dimensions de la informació (des de puntal fins a polidimensional). La qualitat genèrica sistematitzada en les propietats analítiques ha evolucionat fins a l'establiment sistemàtic de sistemes de qualitat. Les fronteres tradicionals de la química analítica (les parets del laboratori) s'han ampliat notòriament en l'actualitat a fi que sigui coherent amb les demandes d'informació.

LA QUÍMICA ANALÍTICA, AVUI

Les definicions actuals de la química analítica^{2,3} possibilitaran descriure les fites fonamentals d'aquesta, que es pot considerar una ciència, una disciplina o una part d'elles, segons la denominació que adquireixi.

La química analítica avui es pot descriure de forma simple i directa mitjançant frases tals com: «ciència de la informació química»; «ciència de les mesures químiques»; «ciència metrollògica química»; «tercer puntal bàsic de la química (a més de la síntesi i la teoria)»; «ciència que té com a objectiu obtenir més i millor informació química utilitzant menys material, temps, esforç, despeses i riscos.» Totes elles descriuen aspectes essencials, però sense cap dubte necessiten ser complementades amb una definició més convencional:

La química analítica és una ciència metrollògica que desenvolupa, optimitza i aplica eines estratègiques, metodològiques i materials per a la implantació de processos de mesura, amb l'objectiu d'obtenir informació química de qualitat de materials i sistemes (en l'espai i en el temps) per resoldre problemes analítics generats per problemes científicotècnics i economicosocials.

En aquesta definició es caracteritza la química analítica com a ciència metrollògica amb un doble caràcter: bàsic i aplicat. S'introdueix per primer cop la diferenciació entre les *eines* (estratègiques, metodològiques i materials d'àmplia naturalesa) i els processos de mesura en si mateixos. L'objectiu bàsic és l'obtenció d'informació química tant de la matèria en el seu conjunt (global) com dels components-analits (parcial), tant en l'espai com en el temps. La qualitat de la informació implica qualitat de les eines i els processos emprats, així com la capacitat de contribuir a la resolució dels problemes plantejats.

2. M. VALCÁRCEL, «Analytical Chemistry. Definition and Interpretation», *Fresenius Journal of Analytical Chemistry*, núm. 343 (1992), p. 814-818.

3. M. VALCÁRCEL, «A Modern Definition of Analytical Chemistry», *Trends in Analytical Chemistry*, núm. 16 (1997), p. 124-131.

Un altre aspecte d'interès és la introducció en la definició del *problema analític* orientat a satisfer les necessitats informatives científicotècniques i economicosocials.

A fi que la química analítica sigui coherent amb aquesta definició cal que tingui tres elements essencials. En primer lloc, una investigació i un desenvolupament eficaços per a desenvolupar eines de qualitat, base dels processos de mesura en la química, que proporcionin resultats de qualitat; aquest element la converteix en ciència/disciplina bàsica. En segon lloc, el conjunt d'eines i processos analítics ja desenvolupats, que constitueixen l'aspecte aplicat. En tercer lloc, l'educació, que és un component essencial de la química analítica, ja que assegura la continuïtat d'aquesta concepció moderna.⁴ Òbviament, aquests tres elements estan relacionats entre si: la I+D alimenta i enriqueix el segon element, que també suporta tècnicament el primer; ambdós deuen ser font informativa per al material pedagògic; s'ha d'evitar que l'educació es limiti a ser només una descripció de les eines i els processos analítics.

La consideració de la química analítica com a ciència/disciplina independent implica l'existència d'uns fonaments propis materialitzats en tres paraules clau: informació, traçabilitat i problema analític, relacionades entre elles. La informació analítica generada és el punt essencial, que està suportat per la traçabilitat, concepte inherent a la metrologia. Aquesta informació ha de ser coherent amb el problema analític, que és el nexa d'unió entre el procés analític i les necessitats informatives plantejades. La qualitat analítica es relaciona intrínsecament amb les propietats analítiques, que caracteritzen tant la informació com el procés analític;⁵ al mateix temps, la qualitat pot referir-se als estàndards implícits en la traçabilitat.

LA QUÍMICA ANALÍTICA, DEMÀ

Es descriuen a continuació les tendències més significatives de la química analítica en el lliardar del segle XXI. Moltes d'elles ja s'estan consolidant i d'altres han començat a esbossar-se. Es fa una distinció (figura 2) entre les que tenen directament relació amb la definició anunciada (les quals s'anomenen *genèriques*) i les que tenen un caràcter bàsic i estan relacionades amb les anteriors, tot i que amb un major nivell de concreció. No es consideraran les tendències específiques en aspectes puntuals (p. ex. mostreig, tècniques de separació, tècniques electroanalítiques, tècniques de raigs X, etc.), que suposarien un segon nivell de concreció, ja que excedeixen els límits d'aquest treball.

TENDÈNCIES GENÈRIQUES

Una aproximació teoricopràctica a la química analítica exigeix un *tractament com a ciència informativa*, ja que la informació és el seu punt essencial. Recentment, Malissa ha dit⁶ que «la química analítica té com a objectiu genèric fer evident, assequible, mesurable, veritable i útil la informació latent intrínseca d'un objecte o sistema» (figura 3). Aquesta definició filosòfica es basa en l'ús d'una sèrie d'adjectius de la paraula *informació* que la concreten (bio)química, especifiquen el seu origen (latent, intrínseca), la caracteritzen tècnicament (evident, assequible, mesurable) i fixen la seva qualitat des d'un punt

4. M. VALCÁRCCEL, «Education in Analytical Chemistry», *Química Analítica*, núm. 16 (1997), p. S7-S13.

5. M. VALCÁRCCEL i A. RÍOS, «Analytical Chemistry and Quality», *Trends in Analytical Chemistry*, núm. 13 (1994), p. 17-23.

6. H. MALISSA, *Paper presented at the Symposium on Philosophy and Education in Analytical Chemistry*, Vienna, WPAC (FECHEM), 1995.

TENDÈNCIES

GENÈRIQUES

BÀSIQUES

ESPECÍFIQUES

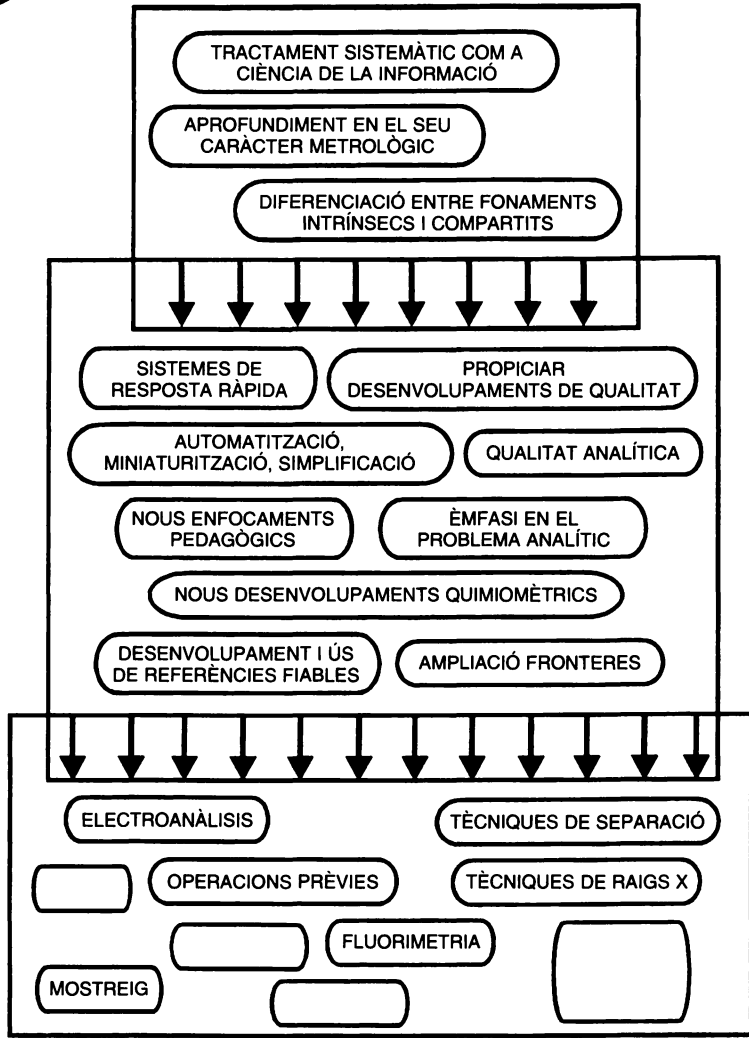


FIGURA 2. Distinció entre les tendències de la química analítica segons el seu grau de concreció. Observeu la relació d'influència entre elles. Cada una de les tendències anomenades específiques tenen altres nivells de major concreció que no apareixen a l'esquema

de vista bàsic (veritable) i aplicat (útil). Així doncs, la química analítica té com a fi primordial la reducció o l'eliminació de la incertesa sobre la informació química (qualitativa, quantitativa i estructural) d'un objecte o sistema amb la finalitat que puguin prendre decisions fonamentades i eficaces. No hem d'oblidar que la informació és considerada actualment com el quart poder de la societat (a més del judicial, el legislatiu i l'executiu), el quart component d'una economia moderna (a més del treball, el capital i les matèries primeres) i una fita substancial en els desenvolupaments científics i tecnològics.

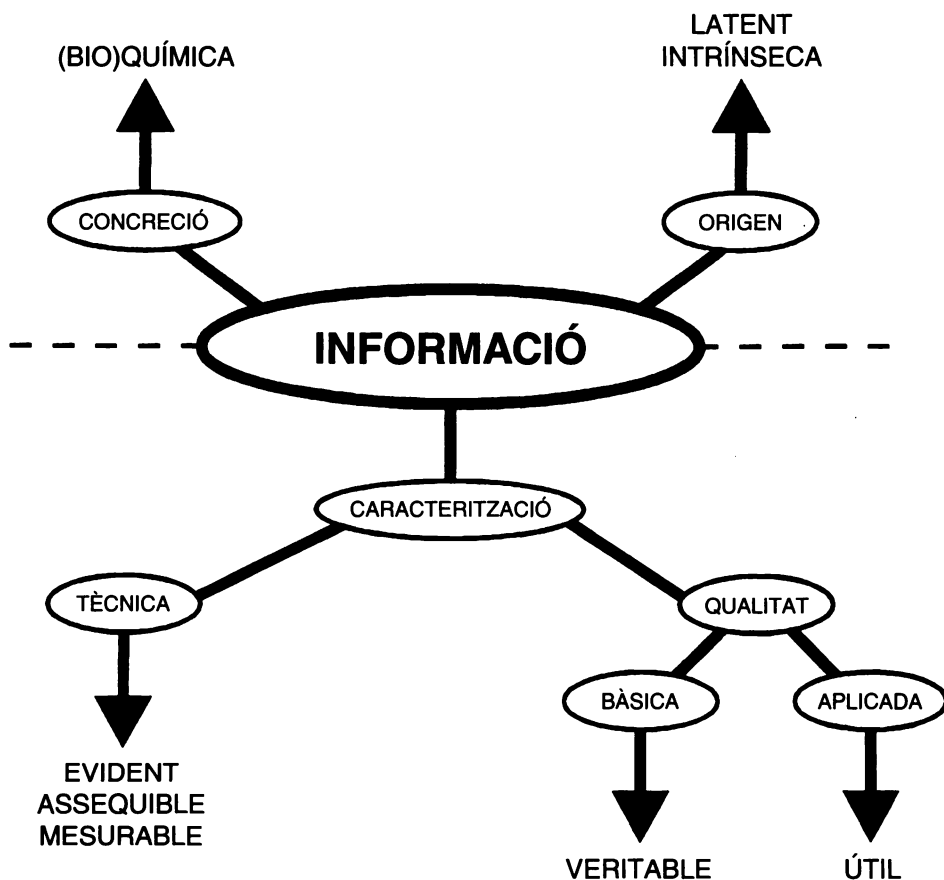


FIGURA 3. Aproximació filosòfica a la química analítica formulada pel prof. Malissa basada en la caracterització de la informació per mitjà de vuit adjectius

A fi que la química analítica de demà sigui coherent amb la seva definició moderna és necessari continuar *un aprofundiment del seu caràcter metrollògic*. La metrologia química o la química metrollògica ha de desenvolupar-se significativament i desprendre's d'aquelles connotacions derivades de la metrologia clàssica (mesures físiques) que l'allunyen de la realitat, tot i que ha d'aprofitar els desenvolupaments bàsics ja consolidats. La traçabilitat de les mesures químiques és un tòpic genèric directament relacionat amb la qualitat dels estàndards i el seu ús adequat, que constitueix el fonament de la qualitat de la informació química generada.⁷ A la figura 4 es fa palès el canvi que implica el tractament sistemàtic de la química analítica com a ciència metrollògica en una sèrie de facetes concretes que, en definitiva, suposen una evolució positiva cap a la qualitat analítica. En realitat, no s'introdueixen innovacions fonamentals, però s'enriqueix científicament i tècnicament la química analítica. Els plantejaments clàssics

7. M. VALCÁRCEL i A. RÍOS, «Traceability in Analytical Chemistry», *The Analyst*, núm. 120 (1995), p. 2291-2297.

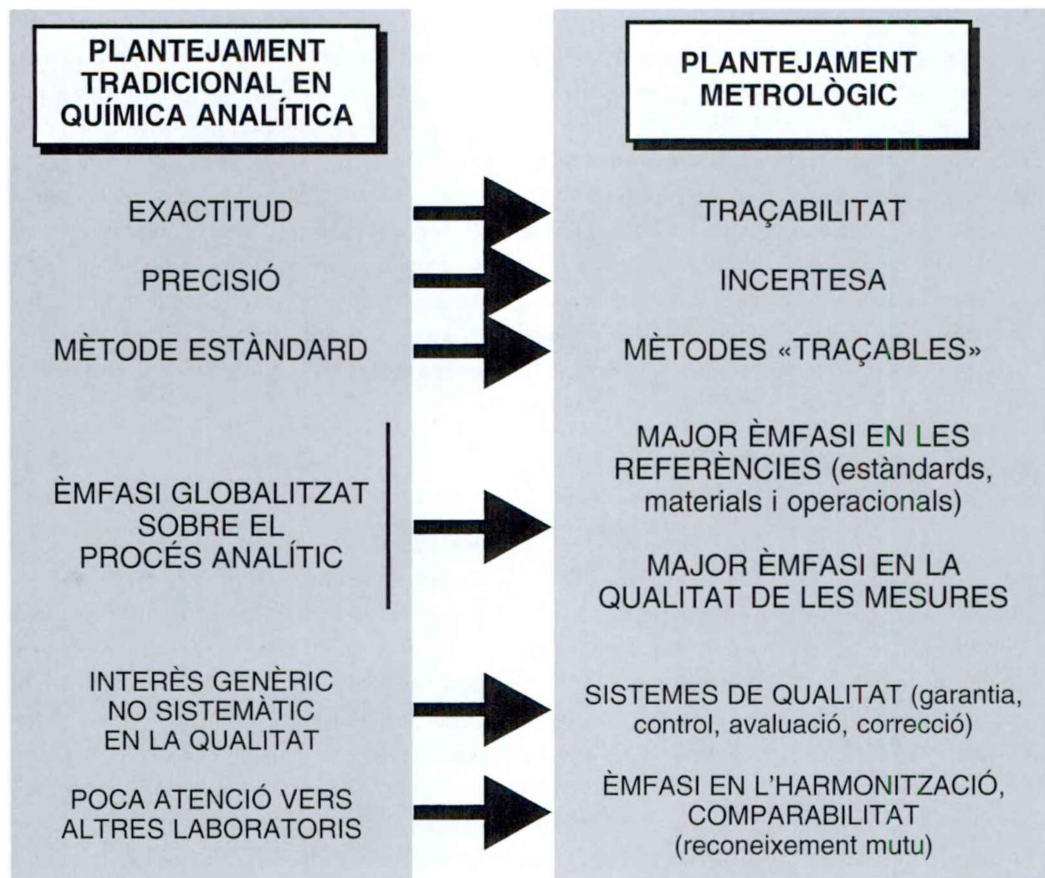


FIGURA 4. Avaluació d'una sèrie de facetes genèriques de la química analítica clàssica cap a facetes metroològiques

no desapareixen, sinó que es complementen. En aquest context, s'ha de fer ressaltar la urgent necessitat d'un desenvolupament específic de la metrologia a la química que tingui present les grans diferències d'ordre pràctic entre els processos de mesura a la química en referència al mesurament de paràmetres físics, que ha de conduir a la redacció d'un vocabulari específic, a l'elaboració de noves normes que siguin coherents amb les mesures químiques i així tractar la traçabilitat de manera coherent amb les connotacions pràctiques de la metrologia química. Això implica un major èmfasi a la faceta de rastreig, l'extensió i l'ús del terme com a atribut d'altres aspectes analítics (a més d'un resultat) relacionat entre ell mateix mitjançant una jerarquia d'importància i extensió.⁸

Al llindar del segle XXI els químics analítics han estat conscients de la importància de les *connotacions inherents de la química analítica* per a consolidar-la com una ciència/disciplina amb característiques

8. M. VALCÁRCEL i A. RÍOS, «An Extended Approach to Traceability in Chemical Analysis», *Fresenius Journal of Analytical Chemistry* (1997).

pròpies. En el passat s'han confós dos tipus de fonaments: els inherents o intrínsecs i els compartits amb altres àrees científicotècniques. Els primers coincideixen amb les paraules clau enunciades anteriorment (informació, metrologia, traçabilitat, propietats analítiques, problema analític, etc.) que donen a la química analítica els seus senyals d'identitat propis. L'altre grup de fonaments és el compartit amb la física, les matemàtiques, la biologia, altres àrees de la química, etc., i que suposa el suport tècnic per als instruments, mètodes, reactius, etc. Ambdós tipus de fonaments són de gran transcendència, però el problema és en la seva importància relativa. Dedicar els esforços I+D als fonaments compartits pot suposar una distorsió dels objectius de la química analítica i proporcionar arguments a aquests que encara defenen l'absència de les bases intrínseques a elles mateixes. Tampoc és correcte posar èmfasi de forma exclusiva als fonaments intrínsecs sense aprofitar els avenços científicotècnics a altres àrees. Una situació intermèdia que suposi un balanç flexible i compensat entre els dos tipus de fonaments, segons el tema tractat, és l'aproximació més apropiada.

TENDÈNCIES BÀSIQUES

Els *desenvolupaments de la química analítica* propiciats per estímuls interns i externs poden ser de desigual qualitat, segons el grau d'investigació bàsica i la capacitat de resolució de problemes. Al segle XXI caldrà reforçar aquells desenvolupaments que siguin coherents amb la definició de química analítica. La investigació, si té com a objectius els fonaments intrínsecs de la química analítica, pot considerar-se de qualitat dins l'àmbit dels estímuls interns, en els quals són de baixa qualitat aquells que suposen un escàs o nul nivell d'investigació, basats en lleus variacions del que ja s'ha desenvolupat. Són dos els *motors* externs dels desenvolupaments de la química analítica: els problemes analítics i els avenços a altres àrees científicotècniques. En el primer cas, el problema origina o no investigació bàsica i investigació aplicada, que genera eines i processos per a produir la informació requerida per al problema. En el segon cas, els nous desenrotllaments a altres àrees propicien una investigació doble (bàsica i aplicada) que desemboca en noves eines i processos o en la millora dels que ja existeixen.

L'automatització, la miniaturització i la simplificació, que són tendències bàsiques de la ciència i la tecnologia, constitueixen uns elements essencials en la majoria de les tendències específiques de la química analítica, així com en altres tendències bàsiques. Afecten el desenvolupament de les eines i, per tant, els processos analítics, tant globalment com de forma parcial a una o dues de les seves macroetapes (operacions prèvies, mesurament/transducció del senyal acústic i presa/tractament de dades). Aquestes tendències bàsiques no són independents entre elles (p. ex. l'automatització implica quasi sempre un cert grau de miniaturització, així com simplificació), la qual cosa implica una acumulació d'avantatges. La seva introducció sistemàtica està suposant i suposarà una revolució tècnica de la química analítica, així com un canvi espectacular en les prioritats tradicionals en els necessaris compromisos de qualitat que impliquen les propietats analítiques. En aquests moments de transició, molts autors utilitzen aquestes paraules en descriure nous desenvolupaments analítics, quan en realitat són aproximacions parcials.

No hi ha cap dubte que el desenvolupament de *sistemes analítics (eines i processos) de resposta ràpida* és una tendència bàsica de gran repercussió en el futur, ja que aquests sistemes ocuparan un lloc important en ser coherents amb les demandes informatives, economicosocials i científicotècniques. A la figura 5 es mostren de manera esquemàtica els objectius, l'ús i alguns exemples característics d'aquesta tendència bàsica que està íntimament relacionada amb la reducció de la intervenció humana, la reducció de grandària i la simplificació de les operacions analítiques. Suposen una revitalització de l'anàlisi qualitati-

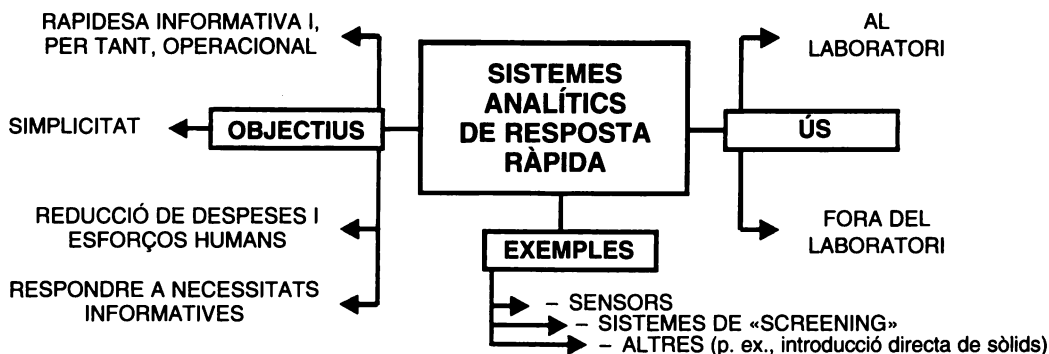


FIGURA 5. Detalls sobre els sistemes analítics de resposta ràpida

va, ja que persegueixen una resposta binària SÍ/NO de qualitat. És d'especial interès la generació d'índexs globals, que és una de les demandes més creixents d'informació analítica. Però aquests sistemes estan encara lluny d'una consolidació definitiva. En realitat, constitueixen una de les línies *calentes* d'I+D en química analítica ja que s'ha d'avançar en una sèrie d'aspectes tals com: suport quimiomètric a la resposta binària, robustesa, selectivitat (per a un analit o per a un grup d'analits), estabilitat, especialment quan s'utilitzen eines bioquímiques o biològiques, sensibilitat (que permeti assolir límits de detecció inferiors als umbrals requerits) i ampliació del camp d'aplicació als nous analits i nous tipus de mostres.

En ser la química analítica la ciència de les mesures químiques, i com que per a mesurar és necessari comparar amb referències fiables, és òbvia la importància del *desenvolupament i l'ús adequat de referències analítiques de qualitat*, que són doncs una fita substancial, inherent a la química analítica, sense els quals no té sentit. Malgrat la seva importància intrínseca, s'ha de reconèixer que aquesta temàtica no ha estat considerada de forma sistemàtica fins fa pocs anys. Al segle XXI caldrà abordar problemes tals com: l'escassa disponibilitat d'estàndards de mesura en química (solament el 8/10 % de les necessitats estan perfectament coberts) i les dificultats per al seu ús adequat i fiable. Sens dubte es tracta del punt bàsic més dèbil de la química analítica en aquests moments, que ha de requerir l'atenció preferencial de la I+D en aquesta ciència. S'hauran de distingir estàndards interns o externs (respecte al laboratori), així com materials i procediments (respecte a la seva naturalesa). L'establiment d'una jerarquia consensuada dels estàndards utilitzats en química analítica, que tingui en compte aquestes distincions i el grau de traçabilitat a unitats del SÍ, és de vital importància per resoldre sistemàticament aquest problema.

Per coherència amb les seves característiques i objectius, la química analítica ha d'*expandir les seves fronteres tradicionals*. Per interès o desconeixement ha estat tancada dins les parets del laboratori i en els llibres o manuals. La química analítica del segle XXI desplaçarà el seu centre d'interès exclusiu des del laboratori i la biblioteca cap a l'exterior en tres dimensions generals:

- a) participació sistemàtica en la presa de mostra;
- b) generació d'informació analítica *in situ* (motorització de processos industrials o naturals, control clínic *in vivo*, anàlisi química espacial, etc.);
- c) ampliació de les relacions exteriors, tant en àrees científicotècniques per a incorporar avenços al context analític, com en àrees socioeconòmiques per a respondre a les seves necessitats informatives.

És evident la necessitat de posar *més èmfasi en el problema analític*, tot i que la majoria de les definicions de la química analítica de l'últim quart de segle l'inclouen directament o indirectament. És necessari un major aprofundiment en la seva importància estratègica. El problema analític es pot definir⁹ com una interfase entre el *client* i la química analítica, que el materialitza en relacions binàries entre la necessitat informativa i els resultats generats en el procés analític; les característiques de la informació química requerida i les propietats analítiques i metroològiques; i la qualitat del client (externa al laboratori) i la qualitat analítica. Les etapes més rellevants en la resolució del problema analític són: confirmació de les necessitats informatives, definició de la informació analítica requerida, planificació de les estratègies analítiques, validació intrínseca i extrínseca dels resultats generats i, si cal, accions correctores. Un dels objectius bàsics del problema analític és evitar la divergència entre la informació requerida i l'analítica subministrada; quan són equiparables al problema analític s'ha resolt, però si la informació subministrada és diferent, major o menor (cosa que és bastant freqüent en l'actualitat), és obvi que el problema analític necessita una redefinició i correcció. Plantejar correctament el problema analític és crucial; ha de ser una part substancial en els sistemes analítics de qualitat i de l'educació, on ara és amb prou feines considerat.

En ser la química analítica una ciència informativa, una de les tendències bàsiques és donar suport als *nous desenvolupaments quimiomètrics* imprescindibles per agrupar genèricament i específicament la qualitat analítica. Els avenços espectaculars en l'última dècada en els àmbits de tractament de dades (p. ex. càlcul d'incertesa, la discriminació de senyals, les multideterminacions, etc.) i de disseny/optimització/simulació d'eines i processos, han de consolidar-se i reforçar-se en el segle XXI. És necessari que la quimiometria doni suport a altres tendències tals com els sistemes de resposta ràpida i de resposta binària SÍ/NO (especialment en la definició dels índexs globals), automatització/miniaturització/simplificació d'eines i processos, etc. L'aplicació de tecnologies basades en la intel·ligència artificial obren insospitables perspectives.

L'establiment sistemàtic de la qualitat analítica ha de fonamentar-se en una aproximació clara i ben estructurada, que es basa en l'establiment d'una jerarquia d'importància/extensió dels diferents conceptes:⁵ qualitat externa, qualitat analítica (qualitat de resultats, de processos, d'eines), així com en l'establiment de relacions contundents entre aquests conceptes i les propietats analítiques,¹⁰ els problemes analítics i els problemes científicotècnics i economicosocials que els generen. El químic analític del futur ha de promoure els sistemes de qualitat basant-se en normes o guies (EN 45000, BPL) que han de conèixer i manejar amb soltesa. Ha d'augmentar considerablement la participació activa dels químics analítics amb un enfocament modern i real als comitès que redacten normes o guies de qualitat que afecten les mesures químiques perquè no siguin els principis bàsics, difícils d'adaptar directament a l'àmbit químic, els que estiguin subjacents en elles.

L'ensenyament de qualitat de la química analítica (no solament en la llicenciatura química) és una arma poderosa per a formar adequadament els responsables de la generació d'informació química al segle XXI. El factor humà és transcendental a la química analítica perquè pugui complir els seus objectius. Aquests ensenyaments han de basar-se en dues fites: posar èmfasi en els mateixos fonaments de la química analítica i evitar el divorci entre el material pedagògic i la realitat i la utilització de noves tecnologies en la transmissió teòrica i pràctica del coneixement analític. Per a això, és necessari:

9. M. VALCÁRCEL i A. RÍOS, «The Analytical Problem», *Trends in Analytical Chemistry*, núm. 16 (1997), p. 385-393.

10. M. VALCÁRCEL i A. RÍOS, «The Hierarchy and Relationships of Analytical Properties», *Analytical Chemistry*, núm. 65 (1993), p. 787-791.

a) Introduir tòpics bàsics (definició, propietats analítiques, estàndards, traçabilitat, procés analític, qualitat, etc.) en el primer contacte dels estudiants amb la disciplina per a evitar que ells adquireixin una concepció errònia, que és comuna quan es comença amb equilibris, tècniques i mètodes.⁴

b) Minimitzar o eliminar el que pràcticament està fora d'ús i introduir nous temes coherents amb el present i el futur, sense oblidar que hi ha temàtiques que segueixen i seguiran vigents.

c) Evitar errors d'enfocaments a l'estructura dels cursos i dels llibres de text.

d) Acompanyar generosament el material docent amb exemples trets de la realitat actual que demostrin l'impacte d'una informació analítica de qualitat.

CONCLUSIÓ

En aquest treball s'ha intentat respondre de forma genèrica i global a les qüestions que estaven plantejades a la figura 1. Com a resum de les tendències de la química analítica explicades, es comenta a continuació el seu impacte al laboratori, a la instrumentació, al químic analític i a les línies d'I+D.

GENERACIÓ DE LA INFORMACIÓ ANALÍTICA

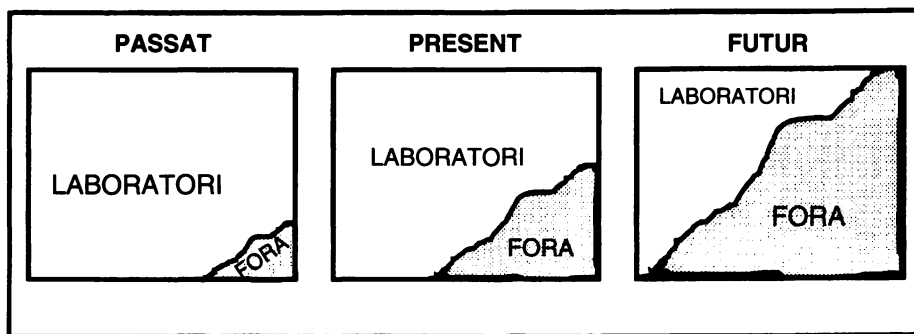


FIGURA 6. Evolució d'importància relativa dels focus de generació d'informació analítica

La configuració actual del laboratori analític variarà notablement, com a conseqüència dels canvis tecnològics (automatització, miniaturització, simplificació, sistemes de resposta ràpida, etc.) i dels canvis estratègics, que seran el resultat de la implantació dels sistemes de qualitat i del fet de no ser ja l'única font informativa. Una de les missions del laboratori del segle XXI serà el suport tècnic (manteniment, calibratge, validació, etc.) dels sistemes analítics que generen informació analítica *in situ*, és a dir, fora d'ell. Tal i com es pot comprovar a la figura 6, la importància relativa dels focus informatius analítics ha variat i variarà substancialment; aquesta tendència ha de ser assimilada perquè els canvis al laboratori siguin coherents amb ella.

També es preveuen canvis substancials a la *instrumentació analítica* no solament com a conseqüència de les millores tecnològiques propiciades per l'automatització/miniaturització/simplificació, sinó també perquè serà necessari millorar i ampliar el desenvolupament d'analitzadors *in situ* i sistemes de resposta ràpida cercant robustesa i fiabilitat. També s'haurà d'adaptar al tipus d'informació demanada; així, els índexs globals cada vegada més sovint necessitats exigeixen canvis filosòfics i tècnics notables en

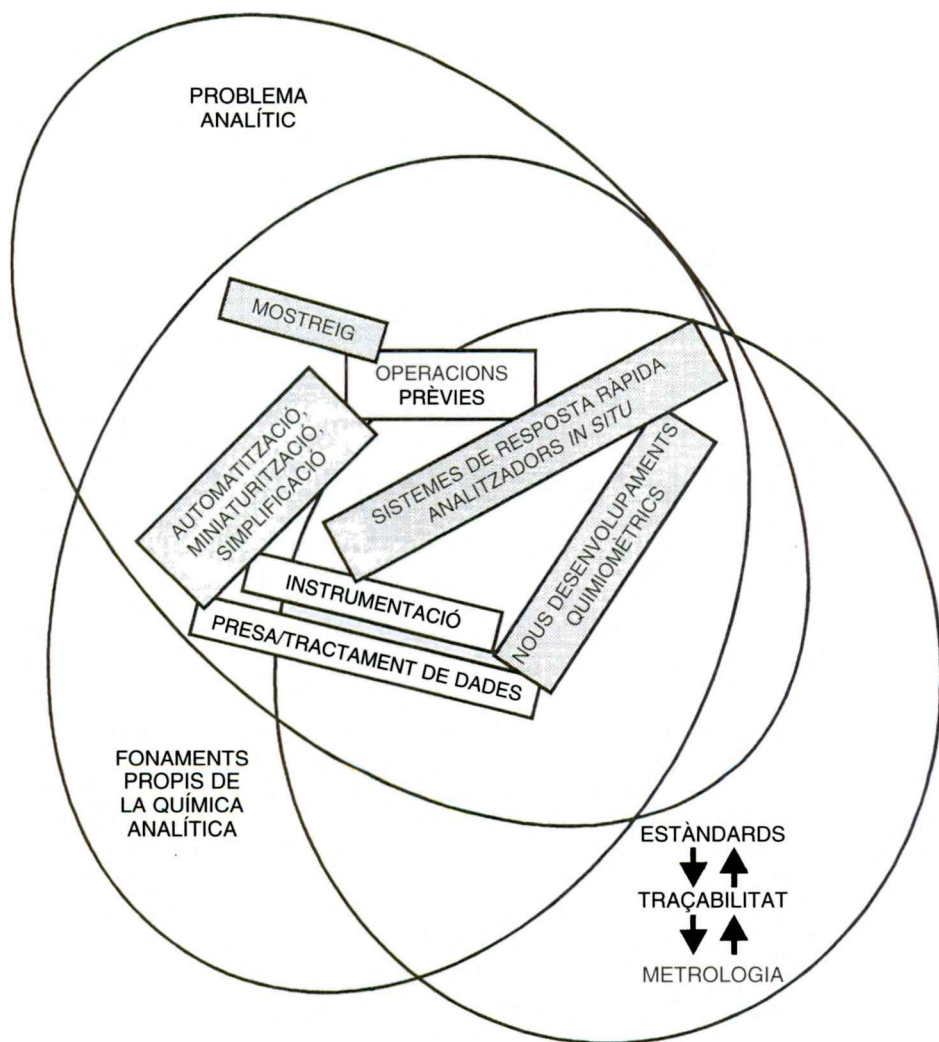


FIGURA 7. Línies d'actuació en I+D en química analítica i la seva coherència amb les fites bàsiques de la seva definició

la instrumentació actual. La instrumentació convencional (cromatògrafs, espectròmetres, etc.) no restarà obsoleta, sinó que haurà de millorar i adaptar-se als nous objectius, tals com:

- a) satisfer les necessitats informatives d'alt nivell (com ara exactitud, multideterminacions);
- b) constituir la *revegarda* des de sistemes de resposta ràpida i *in situ* per a confirmar, ampliar o millorar la qualitat de la informació *de xoc* en cas necessari (1-10 % de les mostres);
- c) solucionar els problemes analítics irresolubles utilitzant els sistemes informatius de *xoc* (p. ex., mostres molt complexes).

El *futur químic analític* haurà de posar un èmfasi compensat i flexible entre els fonaments intrínsecs

i compartits de la química analítica, així com establir un balanç apropiat entre les activitats pròpies relacionades amb els sistemes analítics dins/fora del laboratori i les activitats externes: establiment directe dels problemes analítics, incorporació d'avenços científicotècnics, etc. Això implica que el responsable de generar la informació química ha de penetrar en les necessitats del client que la demana. Haurà de tenir la suficient informació tècnica per a abordar les tendències bàsiques abans dites i adquirir experiència en la generació d'informació fora del laboratori, així com impulsar desenvolupaments analítics de qualitat. Per altra banda, una nova missió que s'està consolidant és la de convertir-se en impulsor/sostenidor/ guardià dels sistemes de qualitat analítica. També haurà de participar en organismes (ISO, CEN, EAL, ENAC, etc.) perquè les guies i normes sobre la qualitat siguin plenament coherents amb la realitat de la metrologia química.

Les línies candents d'I+D de caràcter genèric en química analítica a la transició entre els segles xx i xxi s'hauran de centrar en les tres etapes del procés analític (operacions prèvies, instrumentació i presa/tractament de dades) tal i com es mostra a la figura 7. Això implica emfatitzar en aspectes tals com el mostrari, l'automatització/miniatrització/simplificació, el desenvolupament de sistemes de resposta ràpida i analitzadors *in situ*, així com en nous desenvolupaments quimiomètrics. Aquestes orientacions investigadores bàsiques hauran de ser coherents amb els fonaments propis de la química analítica, la traçabilitat i els problemes analítics plantejats.