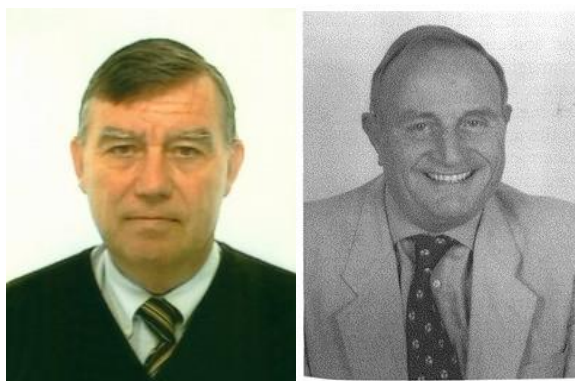


FONDAMENTA PER LA CHIMICA ANALITICA

1 - Il processo chimico-analitico

Michele Forina



Luc Massart – Fabrizio Bruner

1 - IL PROCESSO CHIMICO-ANALITICO

Nella attività del chimico si distinguono essenzialmente quattro momenti, quello sintetico (in cui prepara un composto chimico o una miscela di composti), quello applicativo (in cui studia l'utilizzazione di composti chimici), quello teorico (in cui spiega i fenomeni chimici e/o cerca le leggi che governano fenomeni chimici) e quello analitico (in cui raccoglie informazione rilevante ai fini di un problema chimico o parzialmente chimico).

La Chimica Analitica riguarda appunto la raccolta della informazione in chimica; essa è pertanto la Scienza della Informazione Chimica.

La raccolta della informazione chimica viene attuata mediante tecniche che in minore o maggiore misura utilizzano conoscenze relative a discipline non chimiche. Alcune di queste discipline sono di particolare importanza: la fisica (in quanto ogni misura diretta è possibile solo nel caso di grandezze fisiche [p.e., lunghezza, massa, tempo]), la informatica (in quanto disciplina che riguarda la gestione della informazione, soprattutto nel caso di grandi masse di informazione), la statistica (in quanto disciplina che studia le leggi che governano gli esperimenti il cui risultato è affetto da errore).

Ovviamente, quale disciplina chimica, la Chimica Analitica necessita di conoscenze generali della Chimica; alcune di queste conoscenze sono particolarmente importanti.

Lo studio della Chimica Analitica si articola lungo le fasi del Processo Chimico-Analitico, la successione delle operazioni che consentono di ottenere la informazione chimica rilevante in relazione ad un determinato **Problema Chimico**.

In sistemi non omogenei (in cui la composizione di una parte del sistema varia nello spazio e/o nel tempo) vi sono Fattori che influenzano questa composizione. La definizione di questi fattori fa parte di questa fase del processo chimico-analitico.

b) **Definizione delle specie chimiche**, dei livelli e della accuratezza. È l'elenco delle specie chimiche che in partenza si considerano rilevanti ai fini del problema, i livelli di concentrazione (generalmente quello inferiore) entro i quali la determinazione della specie chimica è considerata di interesse, la accuratezza con cui la concentrazione deve essere determinata.

In certi casi non è necessario conoscere direttamente quali specie chimiche sono contenute nel sistema né la loro quantità, ma si richiede una informazione di natura non chimica correlata in modo cieco (blind assays) con la informazione chimica rilevante.

c) **Formulazione di un disegno** sperimentale. È la fase in cui viene studiato il modo migliore (tenendo conto delle necessità imposte dal problema, della accuratezza richiesta, dei fattori che influiscono sulla composizione del sistema, quando questo è eterogeneo, degli aspetti economici ed eventualmente di quelli di urgenza) per raccogliere dal sistema uno o più campioni chimici, porzioni del sistema rappresentative di esso, eventualmente in un certo momento (sistema variabile nel tempo) o di una zona del sistema (sistema variabile nello spazio) o di una certa zona in un certo momento (sistema variabile nello spazio e nel tempo).

Più sono numerosi i fattori che influenzano la composizione chimica, maggiore è il numero di campioni che devono essere estratti dal sistema per avere informazioni sulla influenza dei fattori stessi. Le tecniche che ottimizzano la raccolta dei campioni fanno parte della Metodologia della Ricerca Sperimentale.

Ogni campione così raccolto è detto Grosso campione. Esso viene suddiviso, per rispondere ad una serie di necessità, sino ad ottenere piccoli subcampioni (ciascuno rappresentativo del grosso campione), alcuni dei quali sono i campioni per l'analisi. Questi sono generalmente sacrificabili, ma talora non è consigliabile la distruzione del campione e pertanto si ricorre a *metodi non distruttivi* o addirittura *non invasivi* (vale a dire che agiscono senza contatto diretto con il campione).

Questi tre punti definiscono il **Problema Chimico-analitico**, costituito appunto da sistema, specie da determinare e disegno di campionamento. Successivamente, il processo comprende le fasi di:

d) **Selezione dei metodi** (fisici) di determinazione. Eventuale SVILUPPO di metodi analitici nuovi o modificati adatti al particolare problema.

e) **Realizzazione dei trattamenti** chimici preliminari alla determinazione.

f) **Determinazione** vera e propria o MISURA. Fornisce i Dati grezzi. In questa fase si ottengono da misure di quantità fisiche le quantità chimiche di interesse. Generalmente la fase e) precedente ha lo scopo di portare il sistema in una condizione in cui sia possibile misurare una quantità fisica correlata univocamente con la quantità chimica da determinare. È tuttavia possibile arrivare ad una situazione in cui una o più quantità chimiche sono correlate con l'insieme di molte quantità fisiche misurabili.

I punti e) ed f) costituiscono la parte del processo nota come Analisi Chimica.

Questa parte comprende la ottimizzazione delle procedure analitiche e la calibrazione.

Scopo della calibrazione è ricavare la legge matematica che esprime la relazione univoca tra quantità chimica e quantità fisica, nonché la incertezza sulla relazione e la incertezza conseguente sulla quantità chimica determinata.

In un primo ciclo di attuazione del problema chimico analitico, la Analisi chimica può consistere semplicemente nella raccolta di informazioni che permettono una conoscenza superficiale del sistema atta a formulare in modo ragionato il problema chimico-analitico.

g) **Elaborazione** dei dati grezzi. Fornisce, utilizzando la informazione grezza, informazione potenzialmente utile, in forma generalmente compatta (riduzione dei dati) con eliminazione di parte della informazione inutile o rumore (miglioramento dei dati).

h) **Combinazione ed interpretazione**. L'informazione potenzialmente utile viene combinata con informazione di natura non chimica ed interpretata. Il risultato è il:

Prodotto del processo CHIMICO-ANALITICO:

I N F O R M A Z I O N E U T I L E

Il processo chimico analitico non si esaurisce in un solo ciclo, dalla formulazione del problema chimico analitico all'ottenimento di informazione utile.

Generalmente vi sono più cicli di affinamento, in cui il problema chimico analitico viene riformulato, tenendo conto anche di quella parte della informazione raccolta che è risultata non rilevante o ridondante ai fini del problema.

Molte fasi del processo chimico analitico richiedono l'uso di tecniche provenienti dalla matematica applicata, dalla informatica e dalla statistica, generalmente adattate ai problemi chimico analitici.

L'insieme di queste tecniche, quando applicate alla informazione di natura chimica o riferentesi ad

un problema chimico, costituisce l'arsenale della CHEMIOMETRIA, la disciplina che ha come obiettivi:

A) la **estrazione della massima informazione chimica utile** dai dati di natura chimica, misurati o calcolati;

B) la **ottimizzazione dei procedimenti** chimico-analitici.