

Badacze z IChF PAN oswoiili widmo

Pierwiastki i ich związki nie ukryją się już dłużej w mieszaninach - nawet tych wieloskładnikowych. Nowy algorytm analizy widmowej, który pozwoli na sprawniejsze identyfikowanie substancji chemicznych, opracowali badacze z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie.

W czystej postaci pierwiastki i związki chemiczne istnieją właściwie tylko w laboratoriach. Świat przyrody to świat wieloskładnikowych domieszek i mieszanin, których skład nie zawsze jest dobrze znany. Dotychczas naukowcy do rozpoznawania pierwiastków w mieszaninach posługiwali się np. tzw. metodami analizy widmowej. One jednak nie zawsze pozwalały na ustalenie wszystkich składników, a czasem nawet sugerowały obecność związków, których w mieszaninach nie było. Teraz - dzięki naukowcom z Instytutu Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie - wykrywanie składników mieszanin może być znacznie trafniejsze. Badacze opracowali nowy algorytm analizy widmowej, o dokładności znacznie większej niż metody stosowane do tej pory. O badaniach poinformowali w przesłanym PAP komunikacie przedstawiciele IChF PAN.

W komunikacie wyjaśniono, że światło niesie informację o budowie materii - o atomach i cząsteczkach, z którymi oddziaływało. Analiza cech promieniowania emitowanego lub pochłanianego przez badane substancje jest świetnym sposobem na ustalenie ich składu chemicznego. Wystarczy wiedzieć, jak poszukiwany związek oddziałuje ze światłem, i w analizowanym świetle wykryć podobny ślad. W teorii sprawa jest prosta. Rzeczywistość jednak to świat wypełniony skomplikowanymi mieszaninami najróżniejszych związków chemicznych. Sygnały od wszystkich nakładają się i detekcja konkretnych pierwiastków i związków staje się niezwykle trudna.

„Gdy rozmawiamy z kimś sam na sam, nie mamy kłopotów ze zrozumieniem przekazu. Spróbujmy jednak wyłowić głos znajomego w tłumie fanów na koncercie rockowym... W podobnej sytuacji są naukowcy zajmujący się spektroskopią: ze świetlnych +wrzasków+ tłumy związków chemicznych próbują wyłowić +krzyki+ pochodzące tylko od znajomych. Jakby tego było mało, niektórzy znajomi mogą zupełnie niespodziewanie mówić ciszej, a nawet zachrypnąć” - mówi dr Sylwester Gawinkowski z IChF PAN.

Gdyby problemem było wyłącznie nakładanie się „świetlnych wrzasków”, wyłuskanie sygnatury konkretnej substancji chemicznej nie byłoby specjalnie trudne. W rzeczywistych pomiarach sprawy się jednak mocno komplikują. Nieuniknione błędy pomiarowe - w tym wynikające z samej fizyki oddziaływania światła z materią - powodują, że zarejestrowane promieniowanie, nawet jeśli pochodzi tylko od jednej substancji, zawsze ma strukturę nieco inną niż teoretyczny wzorzec. Na dodatek poszukiwanym nie musi być jeden związek, a kilka ze znanej puli. Jakby tego było mało, wkład każdego ze związków w strukturę analizowanego światła może być różny: w przypadku jednej substancji - słabszy, w przypadku innej - silniejszy.

„Przy badaniu struktury zarejestrowanego światła - a więc podczas analizy spektralnej - cała sztuka polega na tym, aby w widmie mieszaniny wychwycić tylko najistotniejsze elementy charakterystyczne dla danej substancji. Takie podejście przypomina nieco metody automatycznego wykrywania twarzy, stosowane np. w systemach kontroli na lotniskach. Nie porównuje się tam wyglądu każdego szczegółu twarzy, lecz szuka podobieństw w prostych zależnościach, np. w rozstawie oczu, położeniu ust czy końca nosa. Wtedy przestaje być ważne, czy poszukiwany ma czapkę czy nie, czy się opalił lub zgolił wąsy” - wyjaśnia dr inż. Tomasz Roliński z IChF PAN.

Kierując się tą ideą, fizycy z IChF PAN skonstruowali metodę analizy, która jest wrażliwa nie na intensywność linii widmowych światła przechodzącego przez mieszaninę, a na ich wzajemne położenia i kształty. Aby sprawdzić jej skuteczność, przeprowadzono szereg testów. Jeden z naukowców przygotowywał mieszaniny złożone z kilku aminokwasów wybieranych losowo ze znanej puli 20 związków. Liczba składników każdej mieszaniny wahała się od dwóch do ośmiu, przy czym objętości składników były podobne (co wcale nie oznacza, że wszystkie substancje jednakowo silnie oddziaływały ze światłem). Tak przygotowaną mieszaninę analizował inny naukowiec. Testowane mieszaniny poddano najpierw analizie spektralnej z zastosowaniem dotychczasowej, popularnej metody najmniejszych kwadratów, znanej także jako NLS. W siedmiu przypadkach na 20 nie wykryto w mieszaninach jednego składnika, w jednym nawet dwóch. Co więcej, w dwóch mieszaninach analiza wykazała obecność aminokwasów, których w nich nie było.

„W przypadku naszej metody wyniki analizy tych samych widm były jakościowo lepsze” - podkreśla dr Roliński i precyzuje: „Na 20 przebadanych mieszanin ich skład zidentyfikowaliśmy poprawnie w 18 przypadkach. W dwóch pozostałych mieszaninach, jednej złożonej z pięciu składników, a drugiej z ośmiu, nie wykryliśmy pojedynczego składnika. Ani razu nie zidentyfikowaliśmy związku, którego w mieszaninie nie było”.

Nowa metoda analizy widm mieszanin znajdzie zastosowanie m.in. w tak wyrafinowanych technikach badawczych, jak wzmocniana powierzchniowo spektroskopia ramanowska (Surface Enhanced Raman Spectroscopy, SERS). Szczególny charakter spektroskopii SERS wynika z faktu, że sygnały emitowane przez cząsteczki chemiczne mogą zostać tu wzmocnione setki tysięcy, a nawet miliony razy. Tak duże wzmocnienie pozwala myśleć o konstruowaniu detektorów zdolnych do wykrywania pojedynczych cząsteczek chemicznych.

Badania sfinansowano z grantu „Kwantowe nanostruktury półprzewodnikowe” w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka na lata 2007-2013.

[PAP - Nauka w Polsce](#)