

试论我国分析化学学科发展战略

金钦汉*

(吉林大学化学学院分析科学研究所, 吉林大学吉林省光谱仪器工程技术研究中心 长春 130023)

摘要 分析化学经历了二次重大的变革。分析科学是分析化学发展的新阶段,使分析化学迎来了第二个春天。分析科学与传统分析化学有重大区别,是多学科交叉而成的新学科。从人才培养的角度出发,有必要在大学中设立独立的、理工结合的分析科学专业。分析仪器创新是分析化学创新的重要内容。分析化学的主要应用领域正向生命科学转移,分析方法发展的重点应有相应的变化。

谈一门学科的发展战略,不能不弄清这一学科的发展历程和趋势,因此,为了正确探讨我国分析化学的发展战略,有必要先回顾和研究一下它的历史发展和发展趋势。

1 分析化学发展简史

关于分析化学的发展史,比较普遍的看法是认为它经历了 3 次重大的变革(或革命),即:第一次变革发生在 19 世纪末 20 世纪初,分析化学从分析化学家的“手艺”(art)变成了“科学”(science);第二次变革发生在第二次世界大战前后,分析化学从以溶液化学分析为主的经典分析化学发展成了以仪器分析为主的现代分析化学;第三次变革则从 20 世纪 70 年代末开始直到现在,分析化学发展到了分析科学阶段^[1,2]。作者自 1981 年开始曾多次宣传过这种观点^[3-5],但经过最近较深入的学习和研究后却发现,虽然在经典分析化学和现代分析化学之间可用所依赖的主要方法加以区分。但就其所回答的问题(即“有什么?”“有多少?”)和所起的历史作用(只出数据,不出产品)看,这两个阶段并没有根本的区别。因此,从分析化学发展的历史着眼,把分析化学看成经历了二次重大变革的观点似乎更符合实际情况,即:19 世纪末和 20 世纪初发生的第一次大变革和 20 世纪末开始发生的第二次大变革。第一次大变革使“现代化学之母”^[6]的分析化学沦为了化学和许多其他学科的“配角”,使分析化学落到了近百年受冷遇的境地。第二次变革则使分析化学重新焕发青春,迎来了分析化学家重新“当家作主”的第二个春天。

1.1 经验分析化学阶段——分析化学的第一个春天

分析化学是最早发展起来的化学分支学科,而且在早期化学的发展中一直处于前沿和主要的地位,因为在早期化学发展的一个很长历史阶段中,化学的前沿一直是发现新元素、鉴定和研究新元素;发现和合成新的化合物、鉴定和研究新的化合物。这里最主要的显然是分析化

* 金钦汉:吉林大学教授,博士生导师。

学工作。正因为这样,分析化学被称为“现代化学之母”^[6]。我国的化学先驱者徐寿先生认为:“考质求数之学,乃格物之大端,而为化学之极致也”^[7],意思是说,定性(考质)和定量(求数)分析是物质科学(physical science)的主体,是化学的最高境界。正因为当时学术界对分析化学有这样高的认识和重视,所以当时一大批著名的化学家都是分析化学家,也创制了许多精巧的分析仪器,如天平、容量仪器、显微镜、分光仪等。实际上,自然界存在的近 90 种元素的发现,主要都是分析化学家的功劳。正因为这样,尽管这一阶段的分析化学还主要靠分析化学家的经验和“手艺”(art),还没有系统的理论指导(故可称其为经验分析化学),但分析化学家对当时化学的贡献却是十分巨大的,是许多其他化学分支学科所难以比拟的。因此,当时分析化学家在化学界乃至整个科学界都享有崇高的威望。这一时期是分析化学的真正春天,第一个春天。

1.2 分析化学的第一次大变革——从“手艺”到“科学”,从主角到“配角”

19 世纪末 20 世纪初溶液化学的发展,特别是四大平衡(沉淀-溶解平衡;酸-碱平衡;氧化-还原平衡;络合反应平衡)理论的建立,为以溶液化学反应为基础的经典分析化学奠定了理论基础,使分析化学实现了从“技艺”到“科学”的飞跃,这是分析化学的第一次大变革。

经典分析化学研究的是物质的化学组成,回答的是“有什么(what)?”和“有多少(how much)?”这两个问题,所用的定性和定量方法主要是以溶液化学反应为基础的方法,即所谓化学分析法。由于有了系统的理论指导,化学分析法得到了空前的繁荣和发展,分析化学从此确立了作为化学的一个分支学科的地位。但由于有关的基础理论已基本奠定,分析化学工作者的主要任务变成了扩展其应用范围和完善现有的分析方法,“分析化学只出数据,不出产品”不幸成了分析化学界的“共识”。学术界也把分析化学家看作化学分析程序(procedure)和数据的提供者,是大家的“服务员”。分析化学从此进入了一个配角时代:美国许多著名大学拒不设立分析化学教授席位;几乎没有以分析化学家为主的重大科学基金项目;尽管分析化学家占了美国化学会会员总数的 1/5 以上,是人数最多的一个化学分支学科,但美国科学院几乎没有一位分析化学家出身的院士(Kolthoff 是唯一的例外,但那也是在他的晚年才当上的),这方面情况在前苏联及东欧要稍好一些。

第二次世界大战前后,由于许多新技术(如 X 射线、原子光谱、极谱、红外光谱、放射性等)的广泛应用,使分析化学家拥有了一系列以测量物理或物理化学性质为基础的仪器分析方法,分析质量得以大大提高,分析速度也大大加快。但分析化学家的配角地位却始终没有根本改变,不仅外界,就是分析化学家自身对分析化学的认识也离不开“服务”二字。直到 1980 年美国《分析化学》主编 Laitinen 在定义分析化学时还说:“分析化学是一门测量和表征的科学 (Analytical chemistry is a science of measurement and characterization)”^[8]。这一观点被广为接受,对我国学术界的影响更是根深蒂固。这一定义明显地把分析化学家的任务放在了对物质进行测量和表征这两件服务性任务上(实际上,表征也是一种测量,所以实质上是一件任务)。当然也可引伸到测量和表征方法的研究方面。但在一般人的心目中,这种方法的研究也仅限于对现有测量方法的改进(提高灵敏度、准确度、精密度等等)和推广应用范围(比如从地质样品,到材料,到环境样品等等)方面(即建立新的 procedure),而不是对新的测量原理的研究——这被认为是物理学家或物理化学家的事,以致出现物理学家或物理化学家可以申请新分析方法(或分析仪器)的研究项目,而分析化学家往往难以获得相应资助的可悲情况。至于具体测量内容,又仅限于物质的化学组成,即化合物和元素的组成,因此在许多化学家(包括

分析化学家)眼里,甚至结构分析也不是分析化学家的任务,分析化学家成了纯粹的化学分析师,自然只能当“配角”,而且一当就是近百年。

1.3 分析化学的第二次大变革——“当家作主”的第二个春天

进入 20 世纪 70 年代,随着科学技术的突飞猛进和人们生活质量的迅速改善,客观上对分析化学提出了许多空前的要求,同时又为解决这些新问题提供了许多空前的可能性(详见参考文献[5])。分析化学逐渐突破原有的框框,开始介入形态、能态、结构及其时空分布等的测量,开始为进行这些测量而大量采用各种非化学的方法:包括物理的、数学和统计学的、乃至生物医学的方法。不仅如此,还有越来越多的分析化学家开始觉悟到“工欲善其事,必先利其器”,而这个“器”也不能完全靠别人来提供,要解决世界上从未解决过的分析化学问题,必须采用从未有过的分析仪器或方法。分析化学家必须参与到创造这种仪器和方法的过程中去,甚至主导这种创造过程。1990 年开始的人类基因组计划(HGP)给分析化学家证明自身价值和发挥这种主导作用提供了一个绝好的机会。该计划原定 15 年时间完成,开始时由于急功近利,大量经费用于基因图谱,DNA 测序新技术的研究没有获得足够的经费,进展缓慢,成为整个计划进展的“瓶颈”。1993 年重新制定计划,明确规定此后每年要拿出一半(1 亿美元)的经费用于研究和开发 DNA 测序新技术^[9],分析化学家终于走到前台中心位置。从此 DNA 测序技术不断推陈出新,从板凝胶电泳到凝胶毛细管电泳、线性高分子溶液毛细管电泳、到阵列毛细管电泳,直至全基因组鸟枪测序(whole genome shotgun sequencing)技术,终于使人类基因组计划得以提前到 2001 年完成。因此有人认为是分析化学家“拯救了人类基因组计划”^[10]。

分析化学家的主导作用还在环境保护和食品安全、突发事件处理等许多涉及人们健康和生命安全的领域得到了充分发挥。前几年发生在比利时的二噁英中毒事件,就是由 Ghent 大学的分析化学家 P. Sandra 教授帮助弄清事件的真相和来龙去脉的(即二噁英与多氯联苯的关系及其解决办法)。因此,这位教授被称为“拯救了比利时的分析化学家”。在今后与各种恐怖袭击和重大疾病的斗争中,分析化学家显然也将起到同样的作用。在疾病诊断中已有人经过调查证实:在美国,疾病诊断有 70% 靠的是分析化验,只有 30% 靠医生经验。分析化学的这种重要而又崇高的作用,是别的化学分支学科所不具备的。正因为如此,分析化学家又一次获得了人们的尊重,一些美国著名大学终于突破长期的偏见开始设立分析化学教授席位:目前加州大学伯克利分校已有 6 名分析化学教授,曾担任过美国总统科学顾问和美国国家自然科学基金会主席的斯坦福大学教授 R. Zare 也经常以分析化学家的名义积极参加学术活动。

由美国科学院组织的以 Pimentel 教授为首的 350 位专家,经过调研和综合分析后,编写出版了《化学中的机会:今天和明天》(Opportunities in Chemistry: Today and Tomorrow)一书,把分析化学列为美国化学 7 个需要优先发展的领域之一,并指出分析化学在推进人们弄清环境和生命有关的化学问题中起着关键作用^[11]。

据英国 2001 年 1 月公布的资料,全英国有半数科学家为化学家,其中近 1/4 为分析化学家。目前对分析化学家的需求很旺盛,全英国化学方面的招聘广告中有一半都指明要求懂得分析化学。

更令人兴奋的是 2002 年的 3 位诺贝尔化学奖得主全都是分析化学家^[12]。这也是诺贝尔奖历史上第一次把化学奖授予自称为分析化学家的学者。

在我国,国家自然科学基金委在新世纪中启动的第一项重大基金也是给分析化学家的(微流控芯片技术的基础研究),并且在新千年的第一年(2001 年)就批准成立了两个分析化

学方面的国家重点实验室。可以看到,分析化学在经历了第二次大变革进入分析科学阶段后终于迎来了朝气蓬勃、“当家作主”的第二个春天。我们真的应该大声地说:“It is a great time to be an analytical chemist”^[13]!

2 分析化学的发展趋势

关于这个问题,我已在近几年发表的一些文章中做过多次探讨^[5,14-19],在此仅根据最近的研究简述如下。

2.1 分析仪器已成为分析化学研究的重要内容

前已述及,长期以来为大家所接受的关于“分析化学是一门测量和表征的科学”的定义并不确切,不仅未能全面反映分析化学所具有的特殊性,而且还在实践中把分析化学引向了“只出数据,不出产品”的纯服务方向,使分析化学家变成了纯粹的“服务员”,其不良后果已十分明显。

那末分析化学到底是一门什么样的科学呢?关于“分析化学已经发展到了分析科学阶段”,“分析化学已经发展成为一门多学科为基础的综合性学科”^[1]的论述无疑是正确的,但这是就分析化学的发展阶段而论的;称“分析化学是一门信息科学”的论点^[20]也类似,是就其所起的作用而言的。这些都并不是对分析化学作为一门科学的内涵所下的定义。在这方面,我个人认为前不久美国《分析化学》杂志发表的由 G. M. Hieftje 教授撰写的“编者的话”中所下的定义,较好地反映了当今分析化学或者分析科学的内涵。他说:“分析化学是一门仪器装置和测量的科学 (Analytical chemistry is a science of instrumentation and measurements)”^[21]。这一定义与 Laitinen 的定义虽然只有一字之差,即把“表征”(characterization)换成了仪器装置(instrumentation),并在与测量的顺序上作了一下换位,但却把分析化学从一个纯粹的“服务员”变成了兼有“主人”和“服务员”双重身份、可以大有作为的一门科学。实际上,由于“表征”也是一种“测量”,所以在 Laitinen 的定义中这两者是重复的。在 Hieftje 的定义中,明确地把“仪器(装置)”作为分析化学的主要研究内容,并放在“测量”之前,这反映了当今分析化学发展的动向。英国科学家 H. Pavy 曾经说过:“Nothing begets good science like development of a good instrument”^[21]。上述观点也已在一定程度上被不久前出版的、由全世界 30 位国际著名的分析化学家合作编著的教材 *Analytical Chemistry*^[22,23] 所接受。该书对分析化学的定义是“分析化学是发展和应用各种方法、仪器和策略以获得有关物质在空间和时间方面组成和性质信息的一门科学”(Analytical Chemistry is a scientific discipline that develops and applies methods, instruments and strategies to obtain informations on the composition and nature of matter in space and time)。也就是说,发展仪器是分析化学的一个重要内容。科学发展史也证明,仪器是现代科学发展的基础。许多重要的科学分支,特别是分析化学的许多分支学科都是从某项重要的仪器装置的研制成功而建立和发展的。例如,极谱仪的发明产生了极谱学;光谱仪的发明产生了光谱学;色谱仪的发明产生了色谱学;质谱仪的发明产生了质谱学,等等。由此可见仪器创新在分析化学的发展中的重要地位和作用。如果把眼光更放开一些,则可以看到分析仪器还是现代工农业生产中不可缺少的一部分,并且起着“指导者”和“把关者”的作用。在保护环境、打击违法犯罪和与恐怖主义作斗争中则是人们手中强大的技术武器。在保障人们健康、防病、治病、预防灾害发生等方面也都起着重大作用。把分析仪器的研究作为分析化学的一个主要内容,无疑将促进分析化学的迅速发展。那种把分析化学看成“只出数据,不出产品”的观点

应该被彻底地抛弃了。

2.2 分析化学的主要应用领域正在向生命科学领域转移^[16]

进入 20 世纪 90 年代,随着人们生活质量的提高,人们更加关注自身的健康、长寿,分析化学的重点应用领域开始向医学和生物工程等生命科学领域转移。人类基因组计划就是这方面最典型的例子。食品安全、疾病预防、诊断和治疗、反恐斗争等等无不向分析化学提出了许多前所未有的挑战,要求分析化学家提供在分子水平上实时研究生命过程、了解基因改造的影响、筛选组合化学方法合成的药物、现场监测化学和生物武器等的新技术。这种转移的倾向在近年召开的美国匹兹堡会议上已反映得十分明显,例如,2000 年的 200 个分会中有 42 个分会与生命科学有关,2001 年的 212 个分会中有 53 个分会与生命科学有关,而 2002 年的 227 个分会中有 75 个分会与生命科学有关了。

2.3 适应应用领域的转移,分析方法研究的热点正在和将要发生相应的变化

由于生命体系中元素都不以游离状态发挥作用,加上元素成分分析技术已趋成熟。因此元素成分分析方法的研究将不再成为热点,但综合形态分析(comprehensive speciation)有可能加强。

生命过程大都与溶液中分子或基团(当然还有其他分子片)的化学反应有关,因此分子光谱,特别是可作为在线和非侵入检测的振动光谱方法及可同时获得组成和结构信息的质谱法将成为分析化学研究的重点。电分析方法由于其在溶液电化学和界面性质研究方面的明显优势也已主要集中于生命过程的研究。分离技术则将侧重于样品前处理及与各种检测技术的联用(也包括合成-分离-检测技术的联用)。成像技术,特别是化学成像技术,由于可以得到多维的分子化学信息而将受到越来越多的重视。有人甚至已认定显微镜技术和各种光谱方法的结合(即化学成像技术)是“一种探测分子化学的理想工具”^[16]。

生命过程都是空间和时间的函数且受到生理甚至心理因素的影响。因此宜采用在体、原位、实时,且最好是非侵入的方法进行检测。这就要求不断采用各种高新技术以解决分析化学所面临的各种越来越复杂的挑战,这显然也会是今后分析化学发展过程中一个明显的特点。这些新技术包括:计算机技术、激光技术、纳米技术、芯片技术、光纤技术、仿生技术、微电子技术、生物技术等等。

2.4 分析化学的发展主要依靠溶液化学反应的时代一去不复返了

尽管许多生命过程都在溶液(特别是水溶液)中进行,溶液化学反应也还是一些现代仪器方法(如电化学方法、化学发光法等)赖以获得信号的基础,许多样品制备过程(包括分离、富集等)离不开化学反应,多数待测组分是化学研究的对象,但就目前和今后面临的大量极富挑战性的分析问题的解决所能依赖的方法而言,化学的作用显然将越来越少。人们甚至已可完全不作任何化学处理而获得样品成分、结构乃至能态及空间和时间分布的信息(如非侵入式 NIR 法,电子鼻,X 射线光谱法,NMR 法等等)。从这个意义上讲,离化学越来越远将是今后分析化学发展的又一个很重要的趋势。

3 关于我国分析化学学科发展战略

3.1 应把分析仪器创新作为分析科学创新的重要内容

前面已经谈到,分析仪器的研究已经成为分析化学研究的重要内容,因此,当谈到分析化学的创新活动时就不能不把分析仪器的创新放在重要的位置上。正如王大珩先生所说,“能

不能创造高水平的科学仪器和设备体现了一个民族、一个国家的创新能力。发展科学仪器设备应当视为国家战略”^[21]。自然科学基金自然是应该资助这种创新活动的,因此,应把资助分析仪器的创新也纳入其资助范畴,并将其放在重要的位置上。学术界达成相应的共识当然也十分重要。

3.2 应大力发展生命科学有关分析仪器和方法的研究

既然分析科学的主要应用领域已经转移到生命科学。因此,有必要加强生命科学有关分析仪器和方法的研究。这里,我认为比较重要的有:各种振动光谱法,质谱法,各种联用技术,光谱成像技术,微流控芯片技术,适于现场、原位、实时、在线分析用的各种微分析系统,等等。

3.3 大学应设立独立的、理工结合的新兴学科——分析科学专业

在我国,长期以来都把仪器制造专业设立在工科,而理科的分析化学专业又不包含分析仪器研制的内容。实际上,工科的仪器制造专业也并没有把分析仪器放在应有的位置上。因此,分析仪器研制人才的培养实际上一一直处于空白状态,很大程度上限制了我国分析仪器水平的提高和分析科学的发展。许多国有大型分析仪器公司在市场经济条件下缺乏应有的竞争力,其中的一个重要原因,就是由于缺乏高水平的分析仪器的研究和开发人才。有鉴于此,为了迅速改变这种状态,在有一定条件的大学尽快设立独立的、理工结合的分析科学专业,特别是在研究生层次把分析科学作为一门独立的新兴学科加以发展,我认为已经迫在眉睫,十分必要。

参 考 文 献

- 1 高鸿. 大学化学, 1999, (4): 4
- 2 汪尔康主编. 21 世纪的分析化学. 北京: 科学出版社, 1999
- 3 金钦汉, 杨广德, 张寒琦, 等. 高教研究, 1983, (1): 13
- 4 金钦汉. 吉林冶金, 1986, (2): 42
- 5 金钦汉. 大学化学, 2000, (5): 1
- 6 Szabadvary F, Robinson A. History of Analytical Chemistry, Oxford: Pergamon Press, 1996
- 7 袁翰青. 中国化学史论文集, 三联书店, 1956
- 8 Laitinen H A. *Anal Chem*, 1980, 52: 605 A
- 9 Collins F S. *Proc Natl Acad Sci USA*, 1995, 92: 10821
- 10 Smith D, Felton M J. *Anal Chem*, 2002, 74(1): 22A
- 11 Pimentel G C, Coonrod J A. Opportunities in Chemistry: Today and Tomorrow, New York: The National Academic Press, 1987
- 12 Zubritsky E. *Anal Chem*, 2002, 74(22): 567 A
- 13 Hirsch R F. Analytical Science at the Center of Chemistry and Beyond its Frontier, Award Address, Aug. 21, 2000
- 14 金钦汉. 现代科学仪器, 1998, (3): 10
- 15 金钦汉. 分析仪器, 1999, (2): 1
- 16 金钦汉. 现代科学仪器, 2000, (3): 14
- 17 金钦汉. 现代科学仪器, 2001, (3): 21
- 18 金钦汉. 中国工程科学, 2001, 3(1): 85
- 19 张寒琦, 金钦汉. 原子光谱分析法的最新进展和发展趋势. 见: 汪尔康主编. 二十一世纪的分析化学, 北京: 科学出版社, 2000
- 20 Kowalski B R. *Trends in Analytical Chemistry*, 1981, 1: 71
- 21 Hieftje G M. *Anal Chem*, 2000, 72(9): 309A
- 22 Kellner R, Mermet J M, Otto M, et al. Analytical Chemistry, Weinheim, Wiley-VCH. 1998
- 23 Kellner R, Mermet J M, Otto M, et al. 分析化学. 李克安, 金钦汉译, 北京: 北京大学出版社, 2001
- 24 王大珩, 胡柏顺. 现代科学仪器, 2000, (3): 3