

Κινητά Αναλυτικά Όργανα

Το μέλλον της Αναλυτικής Χημείας

του Μιλτιάδη Σταθερόπουλου

Εισαγωγή

Η Αναλυτική Χημεία είναι ο κλάδος της Χημείας που έχει ως αντικείμενο την επίλυση προβλημάτων που αφορούν το χαρακτηρισμό της ύλης. Τα προβλήματα αυτά είναι ποιοτικά και ποσοτικά. Στην ποιοτική ανάλυση σκοπός είναι ο προσδιορισμός του είδους των συστατικών που υπάρχουν σε ένα δείγμα, ενώ στην ποσοτική ανάλυση, σκοπός είναι ο προσδιορισμός του ποσού ενός ή περισσοτέρων συστατικών. Τα προς προσδιορισμό συστατικά μπορεί να είναι μόρια, στοιχεία, ιόντα ή χαρακτηριστικές ομάδες και ο τρόπος με τον οποίο επιτυγχάνεται η ποιοτική και ποσοτική ανάλυση αποτελεί την αναλυτική μέθοδο με την οποία επιλύεται ένα αναλυτικό πρόβλημα.

Στη συνέχεια θα παρουσιαστεί μία ιστορική αναδρομή των φάσεων της εξέλιξης της Αναλυτικής Χημείας και θα περιγραφεί μία από τις μελλοντικές της τάσεις, αυτή των κινητών αναλυτικών οργάνων. Θα επεξηγηθούν οι βασικές έννοιες-κλειδιά που αφορούν τη νέα τεχνολογία των κινητών αναλυτικών οργάνων και θα περιγραφούν αναλυτικά και λειτουργικά χαρακτηριστικά τους. Θα αναφερθούν χαρακτηριστικές περιπτώσεις υπαρχόντων κινητών αναλυτικών οργάνων και θα δειχθούν οι σημερινές και μελλοντικές εφαρμογές τους. Τέλος, θα παρουσιαστούν οι μελλοντικές τάσεις στο σχεδιασμό και την ανάπτυξη των κινητών αναλυτικών οργάνων.

Αναλυτική Χημεία, μία ιστορική αναδρομή

Η αναλυτική χημεία αυτό τον αιώνα, πέρασε διάφορες φάσεις ανάπτυξης που σχηματικά μπορούν να περιγραφούν ως εξής:

Η περίοδος μέχρι το 1950

Σε αυτή την περίοδο το αντικείμενο της αναλυτικής χημείας ήταν η κατάλληλη χρησιμοποίηση των χημικών

αντιδράσεων, ώστε να μπορέσουν να δώσουν ποιοτικούς προσδιορισμούς και ταυτοποιήσεις αλλά και ποσοτικούς προσδιορισμούς στοιχείων, χαρακτηριστικών ομάδων και μορίων [1]. Στην περίοδο αυτή, αναπτύσσονται μέθοδοι που χρησιμοποιούν την επιλεκτικότητα των χημικών αντιδραστήρων και που προσδιορίζουν ομάδες ενώσεων και/ή επιμέρους ενώσεις.

Πίνακας 1:

Κλασικές Χημικές Μέθοδοι Ανάλυσης (αναλύσεις πάγκου)
Οξυμετρία - Αλκαλιμετρία (αντιδράσεις οξεός-βάσεων)
Συμπλοκομετρία (αντιδράσεις συμπλόκων)
Σταθιμή Ανάλυση (καταβύθιση ίζημάτων)
Προσδιορισμοί με βάση οξειδοαναγωγικές αντιδράσεις

Πίνακας 2:

Βασικές Ενόργανες Χημικές Μέθοδοι Ανάλυσης (Φυσικές Μέθοδοι Ανάλυσης)
Οπτικές Μέθοδοι (π.χ. Φασματομετρία IR, UV, MS, NMR)
Χρωματογραφικές Μέθοδοι (π.χ. αέρια και υγρή χρωματογραφία)
Θερμικές Μέθοδοι (π.χ. Διαφορική θερμιδομετρική ανάλυση, θερμική ανάλυση)
Ηλεκτροχημικές Μέθοδοι (π.χ. πολαρογραφία, εκλεκτικά ηλεκτρόδια).

τα) και επεκτείνονται στα υλικά (αναλύσεις δομής, καθαρότητας, σύστασης), στα βιοπολυμερή (αναλύσεις μεγάλου μοριακού βάρους ενώσεων), στη χημεία περιβάλλοντος (αναλύσεις αερίων, προσδιορισμός πολύ χαμηλών συγκεντρώσεων) και στην τοξικολογία (αναλύσεις σε μη υδατικό φορέα).

Η περίοδος μέχρι σήμερα

Η φάση που προηγήθηκε επηρέασε σημαντικά το ερευνητικό αντικείμενο και το περιεχόμενο της αναλυτικής χημείας. Η έντονη ερευνητική ενασχόληση με την ενόργανη ανάλυση δημιούργησε μεθόδους με τις οποίες αναπτύχθηκε η επιστήμη των μετρήσεων συνολικά. Σαν αποτέλεσμα, πολύπλοκα φαινόμενα, όπως οι ταχύτατες αντιδράσεις, ο προσδιορισμός χημικών δομών σε επίπεδο επιφάνειας υλικού, αποτέλεσαν μερικά νέα αντικείμενα με τα οποία απασχολούνται οι αναλυτικοί χημικοί. Σε πολλές πειρατώσεις, η ανάγκη για συνδυασμό μετρήσεων από διαφορετικές αναλυτικές μεθόδους δημιούργησε νέες μεθόδους «συνδυασμένων τεχνικών» (π.χ. GC/MS, GC/IR, LC/MS, TG/GC/MS). Η επεξεργασία του τεράστιου όγκου δεδομένων και μετρήσεων που συσσωρεύει μια σύγχρονη ενόργανη χημική μέθοδος δημιούργησε την ανάγκη για την αξιοποίηση όχι μόνο των απλών στατιστικών μεθόδων αλλά και προσωρινών μαθηματικών μεθόδων. Με τον τρόπο αυτό αναπτύχθηκε ως κλάδος της αναλυτικής χημείας η χημειομετρία [4]. Η περίοδος που διατίνουμε σήμερα συνοδεύεται από την εκρηκτική ανάπτυξη

Ο Μ. Σταθερόπουλος είναι επίκ. καθηγητής στο Τμήμα Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ.

Βασικές έννοιες-κλειδιά της νέας τεχνολογίας των κινητών αναλυτικόν οργάνων

Οι εκτός εργαστήριου αναλύσεις που μπορούν να γίνουν σε ανοικτούς (υπαίθριους) ή κλειστούς χώρους ονομάζονται χημικές αναλύσεις πεδίου χώρου.

Το πεδίο αυτού περιλαμβάνει:
ο χώρος προσκανούντων ενός απρόφρονου
η βούτη αποτελείται
πλέοντα ρεύμα νέρων
η ποικιλία δομών πρόσθιου
μηχανισμάτων
μεσογειικούς (μεσογεικούς καθηρώρους)
από απόστασης
κυριότερης τον κορυφών
αλλά και σε ανησυχίας προστορίαν
η περιοχή αποθήκευσης βιομηχανικών



Βασικές έννοιες-κλειδιά της νέας τεχνολογίας των κινητών αναλυτικόν οργάνων

Οι χημικές αναλύσεις πεδίου διακρίνονται σα επί τάπου (απεικονίζεται η πλήρης της θέσης συλλογής δεσμώσεων). Οι αναλύσεις πεδίου παράγουν αποτελέσματα σε χρονικό εύρος που επιβάλλει η συγκεκριμένη εφαρμογή, δηλαδή ανάλογα με την εφαρμογή το αποτέλεσμα καταγράφεται (κοινοποιείται) αμέσως ή μετά από κάποιο χρονικό διάστημα. Στην πρότη περίπτωση η ανάλυση ονομάζεται ανάλυση πραγματικού χρόνου.

Βασικές έννοιες-κλειδιά της νέας τεχνολογίας των κινητών αναλυτικόν οργάνων



Κινητό αναλυτικό οργάνων είναι ένα ειδικό σχεδιασμένο αναλυτικό οργάνων το οποίο μεταφέρεται εκτός εργαστήριου προκατέλευτον να εκτελείται επί τόπου αναλύσεις πεδίου

Βασικές έννοιες-κλειδιά της νέας τεχνολογίας των κινητών αναλυτικόν οργάνων

Ειδική περιπτωση
κινητό
αναλυτικό
οργάνου όποτεξεπλα
το φέρεται
αναλυτικό οργάνων



Βασικές έννοιες-κλειδιά της νέας τεχνολογίας των κινητών αναλυτικόν οργάνων

ο τρόπος επικοινωνίας του χρήστη:
τεχνολογία αναγνώρισης ομιλίας ή με heads-up οθόνες



Αναλυτική χημεία - το μέλλον

Οι συνέπεια των όσων παρουσιάστηκαν προηγουμένων οι μελλοντικές κατευθύνσεις εξέλιξης της αναλυτικής χημείας καθορίζονται και από την ανάπτυξη της τεχνολογίας διαφόρων επιστημονικών περιοχών. Μεταξύ αυτών η πιο ελπιδοφόρα είναι αυτή

των κινητών αναλυτικών οργάνων, δηλαδή η μεταφορά των αναλυτικών οργάνων από τον πάγκο του αναλυτικού εργαστηρίου στον τόπο όπου απαιτείται να γίνει χημική ανάλυση. Αυτή η τάση οδηγεί στην αναβάθμιση των αναλυτικών οργάνων από απλούς χημικούς αναλυτές σε εργαλεία επιλύσης προβλημάτων και τούτο διότι στην

επιτόπια χημική ανάλυση απαιτείται συχνά να δοθεί αμέσως απάντηση ώστε να ληφθούν αποφάσεις που καθοδηγούν με τον τρόπο αυτό ανθρώπινες δραστηριότητες (π.χ. βιομηχανικές, επιχειρησιακές). Ανάγκη για επιτόπια άμεση χημική ανάλυση υπάρχει σε τομείς όπως η περιβαλλοντολογική ανάλυση, η υγιεινή και ασφάλεια διερ-

Πίνακας 3:

- Τα βασικά χαρακτηριστικά ενός φορητού αναλυτικού οργάνου
- α) Βάρος μικρότερο των 5 Kg
 - β) Λειτουργία με μπαταρία ή με συνεχές ρεύμα 24 V.
 - γ) Ενσωματωμένο σύστημα δειγματοληψίας
 - δ) Δυνατότητα αυτοελέγχου, αυτοδιόρθωσης και αυτοβαθμονόμησης.
 - ε) Ασφάλεια κατά τη χρήση.
 - στ) Δυνατότητα επιτόπου επεξεργασίας αποτελεσμάτων και έκθεσης (προβολής) τους
 - ζ) Δυνατότητα τηλεχειρισμού.

γασιών, η τοξικολογία και οι δασικές πυρκαγιές.

Η ανάλυση εκτός παραδοσιακού εργαστηρίου μπορεί να γίνει με μεμονωμένα φορητά ή κινητά αναλυτικά όργανα αλλά και με κινητά χημικά εργαστήρια. Σε πολλές περιπτώσεις η εφαρμογή απαιτεί την επιτόπου επεξεργασία. Σε όλες απαιτείται η μετάδοση των μετρήσεων σε εργαστηρικόντο ελέγχου, προκειμένου αυτές να υποστούν επεξεργασία για να δοθούν οι κατάλληλες υποδείξεις. Για παράδειγμα στην περίπτωση χημικών αυτοχημάτων υπάρχει ανάγκη για άμεση επιτόπου έλεγχο της ποιότητας του αέρα προκειμένου να δοθούν κατάλληλες εντολές στο προσωπικό. Άλλο παράδειγμα είναι η περίπτωση δασικής πυρκαγιάς όπου υπάρχει ανάγκη να ελεγχθεί επιτόπου η ποιότητα του αέρα στα όρια της δασικής πυρκαγιάς προκειμένου να δοθεί εντολή για ασφαλή προσέγγιση των επίγειων πυροσβεστικών δυνάμεων. Και στις δύο περιπτώσεις η χημική ανάλυση θα πρέπει να γίνει επιτόπου ή δε επεξεργασία των μετρήσεων να ολοκληρωθεί επιτόπου ή να προηγηθεί μετάδοση, σε κατάλληλο κέντρο, και στη συνέχεια να ληφθούν οι κατάλληλες αποφάσεις. Σε όλες περιπτώσεις η επιτόπου χημική ανάλυση έχει οικονομικά και επιχειρησιακά πλεονεκτήματα σε σχέση με τη συλλογή δειγμάτων και τη μεταφορά τους προς ανάλυση στο εργαστήριο, δηλαδή το κόστος συλλογής αντιπροσωπευτικών δειγμάτων, της μεταφοράς τους στο εργαστήριο και της διατήσης τους είναι μεγαλύτερο από μια επιτόπου ανάλυση. Τέτοια περίπτωση επίσης είναι ο έλεγχος απόρριψης ρυπανότων υλικών των οποίων η σύνθεση συνεχώς μεταβάλλεται και για τα οποία είναι απαραίτητος ο συνεχής προσδιορισμός των συγκεντρώσεων

τους σε έναν ευρύτερο γεωγραφικό χώρο. Υπάρχουν επίσης περιπτώσεις που η ανάλυση πρέπει να γίνει αμέσως και επιτόπου για λόγους ασφαλείας. Τέτοια είναι η περίπτωση ελέγχου εκρηκτικών, χημικών όπλων ή εμπορηστικών ουσιών. Για παράδειγμα σε περίπτωση δασικής πυρκαγιάς, όπου το αιτίο είναι εμπρησμός ή επιτόπου χημική ανάλυση, είναι δυνατόν υπό ορισμένες συνθήκες να οδηγήσει σε χρήσιμα συμπεράσματα. Άλλο παράδειγμα είναι ο έλεγχος αποσκευών και κιβωτίων στα τελωνεία για τοξικές ή ναρκωτικές ουσίες.

Σε όλες τις περιπτώσεις που αναφέρθηκαν προηγουμένως είναι δυνατόν το χειρισμό του κινητού αναλυτικού οργάνου να τον κάνει εξειδικευμένο ή μη προσωπικό. Αυτός είναι ένας από τους λόγους για τους οποίους υπάρχει απαίτηση, τα κινητά αναλυτικά όργανα να είναι απλά στο χειρισμό ή να γίνεται τηλεχειρισμός τους. Ιδιαίτερη περίπτωση τηλεχειρισμού είναι η ενσωμάτωση του κινητού αναλυτικού οργάνου σε μη επανδρωμένο όχημα.

Οι ανάγκες που περιγράφηκαν προηγουμένως, οδηγούν στο συμπέρασμα ότι τα κινητά αναλυτικά όργανα θα χρειαστεί να συνευχθούν με εφαρμογές της τηλεμετρίας (ασύρματη επικοινωνία, μετάδοση μετρήσεων), των γεωγραφικών συστημάτων προσδιορισμού θέσεως (GPS) καθώς και των συστημάτων απομακρυσμένου ελέγχου (remote control systems). Με τον τρόπο αυτό το αναλυτικό όργανο θα γίνει ένας αναβαθμισμένος σύνθετος χημικός αισθητήρας ο οποίος μπορεί να δώσει επιτόπου χημικές αναλύσεις ή να μεταβιβάσει αυτές στο χημικό εργαστήριο προς επεξεργασία.

Βασικές έννοιες-κλειδιά της νέας τεχνολογίας των κινητών αναλυτικών οργάνων

Στη συνέχεια, προκειμένου να γίνει κατανοητή η νέα τεχνολογία των κινητών αναλυτικών οργάνων, θα οριστούν οι βασικές έννοιες-κλειδιά που χρησιμοποιεί. Ας σημειωθεί ότι πέρα από προβλήματα που υπάρχουν στην απόδοση των όρων της νέας αυτής τεχνολογίας στην ελληνική γλώσσα και σε διεθνές επίπεδο, οι αντίστοιχοι όροι δεν έχουν γενική αποδοχή από τα μέλη της επιστημονικής κοινότητας.

Οι εκτός εργαστηρίου αναλύσεις που μπορούν να γίνουν σε ανοικτούς (υπαίθριους) ή κλειστούς χώρους, ονομάζονται χημικές αναλύσεις πεδίου

(χώρου). Το πεδίο αυτό μπορεί να είναι ο χώρος αποσκευών ενός αεροδρομίου, η μονάδα διύλισης ενός πετροχημικού συγκροτήματος, κάποιο υπόγειο ρεύμα νερού, η αιθουσα μιας μονάδας πολυμερισμού, μια χωματερή, οι θέσεις εκβολής μιας μονάδας βιολογικού καθαρισμού, ένα πεδίο μάχης, ένα δάσος που καίγεται, ένας δρόμος υψηλής κυκλοφορίας, μια περιοχή κατοικιών, η περιοχή απόθεσης βιομηχανικών αποβλήτων κ.ά. Οι χημικές αναλύσεις πεδίου διαχρίνονται σε επί τόπου (σημειακές) ή πλησίον της θέσης συλλογής δειγμάτων. Οι αναλύσεις πεδίου παράγουν αποτελέσματα σε χρονικό εύρος που επιβάλλει η συγκεκριμένη εφαρμογή, δηλαδή ανάλογα με την εφαρμογή το αποτέλεσμα καταγόφεται (κονιοποιείται) αμέσως ή μετά από κάποιο χρονικό διάστημα. Στην πρώτη περίπτωση η ανάλυση ονομάζεται ανάλυση πραγματικού χρόνου.

Μεταφερόμενο αναλυτικό όργανο είναι ένα όχημα πάγκου, το οποίο μεταφέρεται εκτός εργαστηρίου με ειδικά διαρρυθμισμένο (ή και απλό) όχημα, προκειμένου να εκτελέσει αναλύσεις πεδίου. Γενικά το μεταφερόμενο αναλυτικό όργανο δεν έχει κάποιου τύπου ειδικό σχεδιασμό, που να το κάνει κατάλληλο για αναλύσεις εκτός εργαστηρίου. Το μόνο που έχει είναι ειδική μέριμνα για ασφαλή μετακίνηση και χρήση. Χωρίς όμως ειδικό σχεδιασμό η μετακίνηση και χρήση του παρουσιάζει προβλήματα που συνδέονται με το μέγεθός του, το βάρος του, την αντοχή του, τον ασφαλή χειρισμό του, την τροφοδοσία του (ηλεκτρική παροχή, διαλύτες και αέρια μετρητος), το σύστημα εισαγωγής δειγμάτως, τη βαθμούμησή του και την αξιοπιστία των μετρήσεών του.

Κινητό αναλυτικό όργανο είναι ένα ειδικά σχεδιασμένο αναλυτικό όργανο το οποίο μεταφέρεται εκτός εργαστηρίου προκειμένου να εκτελέσει επί τόπου αναλύσεις πεδίου. Ο ειδικός σχεδιασμός γίνεται με σκοπό την επίλυση των προβλημάτων που παρουσιάστηκαν προηγουμένως. Η επίλυση βεβαίως αυτών των προβλημάτων δεν θα πρέπει να είναι περιοριστική των λειτουργιών και αναλυτικών χαρακτηριστικών του. Για παράδειγμα δεν θα πρέπει ένα κινητό όργανο να έχει μειωμένη ευασθησία, διαχωριστική ικανότητα και επαναληφθύπτητη.

Ειδική περίπτωση κινητού αναλυτικού οργάνου αποτελεί το φορητό αναλυτικό όργανο που έχει προδιαγραφές, όπως παρουσιάζονται στον παρακάτω

πίνακα:

Στις αναλύσεις πεδίου, οι ποιοτικοί και ποσοτικοί προσδιορισμοί αποκτούν μία ακόμη διάσταση: το χώρο. Επιπλέον αυτού, εφόσον η εφαρμογή απαιτεί μετρήσεις πραγματικού χρόνου είναι δυνατόν στις αναλύσεις πεδίου να παράγεται μεγάλος όγκος δεδομένων σε μικρό χρόνο. Αποτέλεσμα όλων αυτών είναι η ανάγκη εισαγωγής νέων εννοιών και τρόπων για την παρακολούθηση και παρουσίαση των ποιοτικών και ποσοτικών μετρήσεων. Τέτοιες έννοιες είναι η χροτογράφηση των συγκεντρώσεων και οι βαθμίδες τους. Η παράσταση των μετρήσεων γίνεται με διαγράμματα, όπως οι υπομετρικές καμπύλες στηγεντρώσεων, καθώς και με διαγράμματα στα οποία παρουσιάζεται η κατεύθυνση της μέγιστης μεταβολής των συγκεντρώσεων.

Μεταξύ των νέων τρόπων για την παρουσίαση των μετρήσεων είναι τα γραφήματα τριών διαστάσεων (πραγματικά ή ψευδή), καθώς και η χρήση animation. Παραδείγματα ψεύδο3D γραφημάτων είναι τα *contour plot* για την παρουσίαση μετρήσεων κινητού GC/IMS, ενώ παράδειγμα λογισμικού με τεχνικές animation (3D studio) είναι η απεικόνιση μεγάλου όγκου δεδομένων που παράγονται σε μετρήσεις πραγματικού χρόνου (π.χ. 100 MB δεδομένων σε 40 sec).

Επισημαίνεται ότι σε αναλύσεις πεδίου, στις οποίες υπάρχει ανάγκη για μετρήσεις πραγματικού χρόνου και παράγεται μεγάλος αριθμός μετρήσεων σε σύντομο χρονικό διάστημα (π.χ. μετρήσεις αερίων ωραίτων σε κατοικημένες περιοχές), απαιτείται χροτογράφηση συγκεντρώσεων τόσο συναρρήσει του χώρου όσο και του χρόνου. Στην περίπτωση αυτή η έκθεση των αποτελεσμάτων είναι δυνατόν να περιλαμβάνει μεταξύ των άλλων και το γεωγραφικό χάρτη του αναλυόμενου πεδίου.

Στα κινητά αναλυτικά όγανα ο τρόπος επικοινωνίας του χρήστη με αυτά διαμοφώνει νέες έννοιες. Η επικοινωνία του χρήστη με το όργανο μπορεί να γίνει με τεχνολογία αναγνώσης ομιλίας ή με heads-up οθόνες. Οι heads-up οθόνες είναι πολύ μικρά διαφανή monitor που στηρίζονται κατάλληλα στο κεφάλι του χρήστη, ώστε να βρίσκονται στην προέκταση του ενός ματιού.

Τα κινητά αναλυτικά όγανα έχουν ως κύριο χαρακτηριστικό την παραγωγή μεγάλου αριθμού δεδομένων σε

Πίνακας 4:

Εφαρμογές των κινητών αναλυτικών οργάνων.

Περιβάλλον:

Απόρριψη αποβλήτων
Δαινικές πυρκαγιές
Εκπομπές ρύπων
Βιολογικοί σταθμοί
Υγιεινή εργασίας
Χωματερές
Ποιότητα αέρα εσωτερικών χώρων
Ελεγχοί διαφροών
Ελεγχος πλοίων που μεταφέρουν cargo (δεξαμενόπλοια)
Χημικά - Βιολογικά όπλα

Επιτήρηση διεργασιών: (φυσικές - χημικές)

Ελεγχος χημικών ατυχημάτων
Ελεγχος ποιότητας πρώτων υλών
Αναλύσεις υγρών προϊόντων σε σωλήνες μεταφοράς
Αναλύσεις βιενέινης και πετρελαιοειδών στην ύπαιθρο
Αναλύσεις ποιότητας και πρώτων υλών τροφίμων, χωμάτων στις θέσεις εισόδου και εξόδου από το εργοστάσιο
Αναλύσεις φαρμακευτικών προϊόντων επιτόπου
Προσδιορισμός στοιχειών (Mg, V, Cr, Mn κ.ά.), σε στερεά Στοιχειακός έλεγχος εδάφους επί τόπου
Αναλύσεις υπογείων υδάτων
Αναλύσεις μολύνσεων σε τοιμέντο και δομικά υλικά

Άλλες εφαρμογές:

Γεωλογικές εκτιμήσεις
Πρόβλεψη σεισμών
Προσδιορισμός εκρηκτικών
Επιτόπου έλεγχος τροφίμων
Αναλύσεις σε αέριο, υγρό ή στερεό δείγμα
Προσδιορισμός πληκτικών και ημιπληκτικών ενώσεων (αλκάνια, αλκένια, αλκοόλες, αρωματικοί H/C, κετόνες, εστέρες, κ.ά.)
Προσδιορισμός εντομοκτόνων (γάλα, μπύρα κ.λπ.)

μικρό χρονικό διάστημα. Αυτά τα δεδομένα μπορούν να υποστούν επεξεργασία επιτόπου ή να μεταδοθούν σε κατάλληλο κέντρο. Σε κάθε περίπτωση είναι απαραίτητη η ελάττωση του όγκου των δεδομένων χωρίς απόλειμα της χημικής πληροφορίας και στη συνέχεια η ταχύτητα επεξεργασίας τους. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί με χρήση χημειομετρικών μεθόδων.

Μεταξύ των τεχνικών που χρησιμοποιούνται περιλαμβάνεται η Principal Components Analysis, η Discriminant analysis και η Canonical correlation analysis που είναι τεχνικές ανάλυσης πολυμεταβλητών δεδομένων και χρησιμοποιούν θεωρία πινάκων. Οι τεχνικές αυτές μαζί με την ανάπτυξη κατάλληλου λογισμικού συμβάλλουν στην ταχύτητα επεξεργασίας μεγάλου όγκου δεδομένων που αποτελεί το βαθύτερο στάδιο για τη δημιουργία αποτελεσμάτων και λήψη αποφάσεων.

Αναλυτική ικανότητα και λειτουργικά χαρακτηριστικά των κινητών αναλυτικών οργάνων

Τα κινητά αναλυτικά όγανα έχουν αναπτυχθεί σχετικά πρόσφατα. Συνεπώς δεν έχουν συνολικά χαρακτηριστικά καλύτερα από αυτά των οργάνων πάγκου. Σε πάρα πολλές, όμως, περιπτώσεις, οι δυνατότητες είναι συγκρισμές [10]. Πιο αναλυτικά:

- 1) **Επιλεκτικότητα:** Η ανάπτυξη ειδικού τύπου αερίων χρωματογράφων καθώς και χημικών αισθητηρίων δίδει τη δυνατότητα για επιλεκτικούς προσδιορισμούς αερίων όπως CO, CO₂, NO, H₂S, VOCs με χρήση αναλυτικών οργάνων. Οι υπάρχουσες διατάξεις δύον αφορά τους αέριους χρωματογράφους χρησιμοποιούν μικρού μήκους στήλες και κάνουν προσδιορισμούς συγκεντρώσεων της τάξης του ppb με χρόνο ανάλυσης 1-3 min. Οι χημικοί αισθητήρες που κατασκευάζονται στη σημερινή σε διάφορες αρχές και υλικά (ημιαγωγοί οξειδίων του κασσιτέρου) και προσδιορίζουν αέρια στην περιοχή των 100 ppm με χρόνους μέτρησης περίπου 5 sec.
- 2) **Διαχωριστική ικανότητα:** Τα υπάρχοντα κινητά GC-MS έχουν δυνατότητα για παρακολούθηση (SIM) στην περιοχή του ppm με χρόνους ανάλυσης μέχρι 20 sec και διαχωριστική ικανότητα μιας μονάδας μάζας.
- 3) **Όρια ανίχνευσης:** Ανάλογα με την περιπτώση για τα υπάρχοντα κινητά αναλυτικά όγανα (GC, GC-MS, GC-IMS, XRF, NIR) τα ορια ανίχνευσης είναι στην περιοχή του 1 ppb.
- 4) **Επαναληψιμότητα και ακρίβεια:** Η επαναληψιμότητα και ακρίβεια κυμαίνεται από 1% ως 20%, ανάλογα με το όγκο.
- 5) **Ταχύτητα ανάλυσης:** Η ταχύτητα ανάλυσης είναι στην περιοχή 1 sec ως 3 min, ανάλογα με το όγκο.

- 6) **Μέγεθος:** Αυτό κυμαίνεται από 20cm x 40cm x 20cm μέχρι 1m x 30cm x 50 cm.
- 7) **Κατανάλωση ισχύος:** Από 250 Watt έως 1200 Watt.
- 8) **Επίπεδο εξειδίκευσης χρήστη:** Στην παρούσα φάση πρέπει να είναι εξειδικευμένος χημικός. Αναμένεται με τη χρήση ασύρματης επικοινωνίας η δυνατότητα χειρισμού από μη εξειδικευμένο προσωπικό.

Τομείς εφαρμογών κινητών αναλυτικών οργάνων

Στον πίνακα που ακολουθεί δίνονται οι τομείς εφαρμογών κινητών αναλυτικών οργάνων.

Μελλοντικές εξελίξεις στα κινητά αναλυτικά όργανα

Η εντατική έρευνα που γίνεται στο πεδίο των κινητών αναλυτικών οργάνων αναμένεται σύντομα να αποδώσει.

Τα όργανα αυτά αναμένεται να έχουν δυνατότητες για ανάλυση μιγμάτων 50-100 ενώσεων, με χρόνο ανάλυσης την περιοχή των 10s.

Το μικρότερο μέγεθος, η ενεργειακή αυτονομία και η ευκολία χρήσης θα είναι οι βασικοί ερευνητικοί στόχοι. Παράλληλα η ανάπτυξη εξειδικευμένου λογισμικού και ο συνδυασμός με τηλεμετρία αναμένεται να αυξήσουν τις εφαρμογές τους.

Βιβλιογραφία

1. A textbook of Macro and Semimacro Qualitative Inorganic Analysis, A. I. Vogel, Longmans, London, 4th Ed. 1954.
2. Instrumentation in Scientific Research, Kurt S. Lion, McGraw-Hill, 1959.
3. Instrumental Methods of Chemical Analysis, G. W. Ewing, McGraw-Hill, New York 1975.
4. Chemometrics: a Textbook, D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, S.N. Deming, Y. Michotte and L. Kaufman, Elsevier, 1988.
5. Digital computers in analytical chemistry, part II, 1970-1978, J. B. Justice, and T.L. Isenhour, Hutchinson Ross Publishing Company, 1981.
6. Computer-Enhanced Analytical Spectroscopy, Volume 1, H.L.C. Meuzelaar and T.L. Isenhour, Plenum, 1987.
7. Computer-Enhanced Analytical Spectroscopy, Volume 2, H.L.C. Meuzelaar (ed.), Plenum, 1990.
8. Computer-Enhanced Analytical Spectroscopy, Volume 3, P. C. Jurs (ed.), Plenum, 1992.
9. Anal. Chemistry, vol 63, No 5, March 1, 1991, 271 A.
10. Proceedings of the Specialist Workshop On Field-Portable Chromatography & Spectrometry, June 3-5, 1996, Snowbird, Utah, U.S.A.