



Warszawa, 11 lutego 2015

Poszukiwane: twarze chemicznego tłumy

Pierwiastki i ich związki nie ukryją się już dłużej w mieszaninach, nawet jeśli te składają się z wielu składników. Koniec chemicznego incognito to efekt opracowania w Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie nowej, znacznie bardziej precyzyjnej od dotychczasowych metody identyfikowania „linii papilarnych” substancji chemicznych, odcisniętych w świetle rozproszonym przez mieszaniny.

W czystej postaci pierwiastki i związki chemiczne istnieją tylko w laboratoriach. Świat przyrody to świat wieloskładnikowych domieszek i mieszanin. Czy w tłumie związków chemicznych tworzących mieszaninę można precyzyjnie wykryć poszczególne składniki? Czy można to zrobić badając samo światło rozproszone przez mieszaninę? Dotychczasowe metody analizy widmowej nie tylko nie pozwalały na ustalenie wszystkich składników, ale nawet sugerowały obecność związków, których w mieszaninach po prostu nie było. Teraz wykrywanie składników mieszanin będzie znacznie pewniejsze – dzięki naukowcom z Instytutu Chemii Fizycznej PAN (IChF PAN) w Warszawie. Przeprowadzone przez nich badania, sfinansowane z grantu „Kwantowe nanostruktury półprzewodnikowe” w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka na lata 2007-2013, zakończyły się opracowaniem nowego algorytmu analizy widmowej, o dokładności znacznie większej niż metody stosowane do tej pory.

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 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 rocka... 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 (IChF PAN).

Gdyby problemem było wyłącznie nakładanie się „światlnych 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 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 (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 7 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 wzmacniana 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.

Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (<http://www.ichf.edu.pl/>) został powołany w 1955 roku jako jeden z pierwszych instytutów chemicznych PAN. Profil naukowy Instytutu jest silnie powiązany z najnowszymi światowymi kierunkami rozwoju chemii fizycznej i fizyki chemicznej. Badania naukowe są prowadzone w dziewięciu zakładach naukowych. Działający w ramach Instytutu Zakład Doświadczalny CHEMIPAN wdraża, produkuje i komercjalizuje specjalistyczne związki chemiczne do zastosowań m.in. w rolnictwie i farmacji. Instytut publikuje około 200 oryginalnych prac badawczych rocznie.

KONTAKT:

dr **Sylwester Gawinkowski**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel. +48 22 3433073
email: sgawinkowski@ichf.edu.pl

dr inż. **Tomasz Roliński**
Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
tel. +48 22 3433228
email: trolinski@ichf.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

„A new algorithm for identification of components in a mixture: application to Raman spectra of solid amino acids”; S. Gawinkowski, A. Kamińska, T. Roliński, J. Waluk; *Analyst*, 2014, 139, 5755; DOI: 10.1039/c4an01159g

POWIĄZANE STRONY WWW:

<http://www.ichf.edu.pl/>

Strona Instytutu Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk.

<http://www.ichf.edu.pl/press/>

Serwis prasowy Instytutu Chemii Fizycznej PAN.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

ICHF150211b_fot01s.jpg

HR: http://ichf.edu.pl/press/2015/02/ICHF150211b_fot01.jpg

Jak za pomocą światła zidentyfikować, które związki chemiczne ze znanej puli znajdują się w mieszaninie? W Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie opracowano nową metodę analizy widm, pozwalającą znacznie precyzyjniej niż dotychczas wykrywać składniki mieszanin chemicznych. (Źródło: IChF PAN, Grzegorz Krzyżewski)