

A IMPORTÂNCIA DO QUÍMICO ANALÍTICO

Paschoal Senise

Instituto de Química da Universidade de São Paulo

(Recebido em 25/03/83)

Recentemente, tivemos oportunidade de falar sobre o papel da Química Analítica na formação do químico e abordar assuntos correlatos em razão de certo descuido havido no preparo de pessoal qualificado para enfrentar problemas analíticos, quer no campo profissional, quer no científico. Focalizamos, então, principalmente a situação americana pelas características e proporções que assumiu nos Estados Unidos a carência de químicos analíticos de alto nível (Química Nova, 5(4) 137 (1982).

Ao tratar agora do tema proposto, não poderemos deixar de repetir alguns conceitos emitidos na ocasião, como também voltar a tecer, em parte, considerações da mesma ordem.

Como é evidente, os resultados proporcionados pela análise química sempre forneceram dados necessários e, muitas vezes indispensáveis para o desenvolvimento não apenas do trabalho químico, mas também do de outros e variados campos de atividade.

O empirismo que por muito tempo caracterizou o processo de condução da análise química contribuiu para generalizar a idéia de que a tarefa seria essencialmente técnica e de natureza auxiliar, idéia que em grande parte permaneceu durante muitos anos, apesar dos enormes esforços envidados por eminentes pesquisadores para imprimir bases científicas à Química Analítica.

O advento e rápido desenvolvimento da instrumentação também levaram a reforçar o entendimento de muitos de que o bom conhecimento dos princípios físicos e físico-químicos relativos ao funcionamento da aparelhagem seria praticamente suficiente para alcançar os objetivos perseguidos pela análise. Em conseqüência, não apenas se relegou a plano secundário, em muitas universidades, o ensino da Química Analítica mas, principalmente, se descuidou do cultivo da pesquisa científica, em particular da metodologia.

Vimos, em nossa última palestra, como esse tipo de atitude se mostrou contraproducente com o surgimento de novos e variados problemas de relevância, não apenas científico-tecnológicos, mas também sociais, para cuja abordagem correta se percebeu ser necessário treinamento adequado e específico. Assim, já há algumas décadas, iniciaram-se movimentos no intuito de procurar inverter a situação e têm sido despendidos esforços, cada vez mais acentuados, no sentido de se estimular o interesse pela Química Analítica, principalmente para incentivar o doutoramento nessa disciplina, em virtude da falta generalizada de especialistas capazes de desempenhar trabalho criativo. Nos Estados Unidos, por exemplo, instituíram-se prêmios e estão em curso programas que visam atrair maior contingente de pós-graduandos para

a área analítica, em particular para a pesquisa, fato por nós já mencionado e de que a revista *Analytical Chemistry* em setembro e outubro p.p. nos dá novamente notícia, mostrando o progresso do grupo de Allerton, cuja ação se estende a outros centros, bem como a produção de teses de doutoramento em química analítica, no período de janeiro de 1979 a dezembro de 1980, quando alcançou a média de 23% na área de química, valor este obtido a partir de dados de 21 universidades de alto nível. (*Anal.Chem.*, 54(11) 1665; (12) (1921).

Enquanto o número de Ph.Ds em outras áreas da química vem decrescendo naquele país e a projeção até o fim da década indica continuidade da tendência descendente, na de química analítica ocorre o oposto, embora o aumento efetivo e a estimativa para o futuro mostrem que as necessidades estão longe de serem satisfeitas. A situação não difere muito em outros países, notando-se escassez geral, fato que deixa aberto campo para estudo e trabalho fértil em várias direções.

A pesquisa da química analítica, seja básica ou aplicada, continua a ser centrada em dois aspectos fundamentais, como sempre foi: a identificação ou caracterização química e a medida quantitativa. E o químico analítico persegue esses dois objetivos procurando contribuir para o avanço dos conhecimentos teóricos e o aperfeiçoamento dos métodos e das técnicas. Busca assim, dar maior solidez e sentido mais racional ao seu trabalho.

O que poderia ser outrora considerado essencialmente analítico, passa muitas vezes a ser apenas parte da tarefa, a qual somente se conclui com a complementação obtida de outros setores da química, ou então da física, da matemática, da biologia ou de engenharia e, muitas vezes, da conjugação de informações que todas essas modalidades da ciência podem proporcionar.

É claro, pois, que se há de considerar a posição do químico analítico atual à luz da evolução havida no desenvolvimento da química bem como da ciência e da tecnologia em geral para compreender o papel que lhe cabe desempenhar nesse novo contexto em que se defronta com problemas de maior amplitude e complexidade do que ocorria anteriormente.

As exigências passaram a ser muito maiores, não apenas quanto à sensibilidade, seletividade, rapidez, precisão e exatidão dos métodos de trabalho mas também e principalmente no sentido do aumento crescente de informações, a um tempo mais abrangentes e mais pormenorizadas.

Como assinalamos anteriormente, dando destaque ao que Laitinen acentua com muita ênfase, o químico ana-

* Conferência proferida, em 18 de novembro de 1982, durante o I Encontro Nacional de Química Analítica, Rio de Janeiro, RJ.

lítico deve voltar-se muito mais para o problema que a amostra lhe apresenta do que para a amostra em si. Não é mais suficiente, via de regra, a indicação percentual pura e simples dos constituintes; exigem-se respostas que requerem enfoque mais global e exame mais profundo. Conseqüentemente, o trabalho depende cada vez mais da interpretação adequada de dados obtidos por mais de uma via, para a compreensão efetiva do problema em seus aspectos primordiais e o campo vai se tornando crescentemente multidisciplinar.

Passou assim a merecer particular interesse a determinação das espécies químicas ou estados físico-químicos definidos, isto é, a forma em que se encontra um dado elemento em determinado meio.

Exemplo muito ilustrativo nos parece o da identificação e determinação de espécies de traços de elementos vários em águas, assunto de grande importância atual e que foi objeto de interessante artigo de revisão publicado em maio deste ano por T. M. Florence (Talanta, 29, 345 (1982)).

Apesar de vários dos colegas presentes, mormente os que se dedicam a estudos ambientais, estarem familiarizados com esses problemas, parece-nos válido referirmo-nos a alguns aspectos assinalados por Florence. Assim, de início, diz o autor estar hoje bem estabelecido que a determinação das espécies é necessária para o estudo da toxicidade dos metais para organismos aquáticos e para compreender o transporte de traços de metais em rios e estuários. A medida da concentração total de um elemento-traço não proporciona nenhuma informação a respeito de seu aproveitamento biológico ou de sua interação com sedimentos e partículas em suspensão.

Alguns elementos são essenciais à vida, como ferro, iodo, cobre, manganês, zinco, etc. Para todos eles, porém, existe uma faixa de concentração bastante estreita entre o nível essencial e o tóxico. Um elemento indispensável ao funcionamento normal de um organismo, pode ser altamente tóxico em teores mais altos, assim como elementos essenciais, por exemplo, selênio e vanádio, são muito mais tóxicos do que outros não essenciais como mercúrio e tálio.

Talvez o aspecto mais importante que distingue de outros poluentes tóxicos os metais reside no fato de não serem estes biodegradáveis e assim, uma vez que tenham penetrado no ambiente, a sua toxicidade potencial é controlada em grande parte pelas características físico-químicas da espécie. A cobalamina (vitamina B₁₂) é a única forma química assimilável de cobalto. O crômio (III) é um elemento essencial, ao passo que o crômio (VI) é altamente tóxico. Mudanças apreciáveis da dieta alimentar podem também diminuir o aproveitamento biológico de traços de metais, por exemplo, alimentos de fibras longas e proteínas de grãos de soja adsorvem elementos essenciais e podem causar deficiências minerais.

Florence lembra que a concentração total de muitos metais pesados e outros elementos em águas naturais situa-se, muitas vezes, abaixo de 1 µg/l e até mesmo abaixo de 0,1 µg/l. Ora, a determinação analítica de concentrações dessa ordem já constitui objeto de trabalho científico altamente especializado, não só pela aplicabilidade de técnicas como pelos seríssimos problemas de contaminação

de fontes variadíssimas e ainda pelas perdas que podem ocorrer por adsorção nas paredes do vasilhame, etc. A caracterização e determinação de espécies provenientes da subdivisão de concentrações totais tão baixas é por certo tarefa que desafia a perícia do químico analítico e indubitavelmente dos métodos.

Desenvolvendo considerações desse tipo, Florence põe em evidência todos os aspectos que devem ser levados em conta, decorrentes das próprias peculiaridades do meio de trabalho, das operações de amostragem, filtração, armazenagem, dos vários métodos experimentais aplicáveis com suas vantagens e limitações conforme os casos específicos, para concluir que há ainda muito por fazer, tanto na pesquisa como na parte técnica, salientando também a necessidade de treinamento de pessoal especializado. Florence não deixa de dizer incisivamente que muitos resultados constantes da literatura, de determinações de espécies formadas por traços de metais, são indubitavelmente inexatos devido à contaminação ocorrida durante a coleta de amostras ou ao subseqüente procedimento analítico.

Estas afirmações nos lembram recomendações e comentários feitos quando da publicação, em dezembro de 1980 (Anal. Chem., 52 (14) 2241-49 (1980)), pela comissão competente da American Chemical Society, do "Guia para aquisição e avaliação da qualidade de dados na química do meio ambiente" em que foi enfatizado o fato de que a exatidão de análises químicas ambientais não pode ser baseada exclusivamente na capacidade do aparelho e do método em responder a baixas concentrações de amostra, mas o campo da análise de traços requer químicos analíticos hábeis e bem treinados, dentro de uma adequada disciplina de trabalho. Assim a moderna análise de traços, enfatizam as conclusões, se compõe de três estratégias interdependentes: o desenvolvimento de métodos analíticos, sensíveis, específicos e convalidados; o uso de protocolos que descrevam os pormenores dos procedimentos de medida e de amostragem; e o emprego de procedimentos que assegurem qualidade para a monitoragem dos dados. Nenhum laboratório ou indivíduo deve dispor-se a prover dados analíticos ambientais sem estar consciente da importância de usar enfoque abrangente e sistemático e empenhado em obter medidas confiáveis. É necessário que se apresentem os resultados dessas medidas de tal maneira que possibilitem o exame pleno de seus pontos altos e de suas debilidades.

Todas essas considerações nos levam a refletir seriamente sobre um aspecto de alta relevância e que cresce de magnitude à medida em que se consegue elevar a sensibilidade dos métodos. É o problema da confiabilidade dos resultados.

Mencionamos ligeiramente este assunto em nossa palestra anterior ao nos referirmos ao relato de Sidney Abbey, do "Geological Survey do Canadá", de abril de 1981 (Anal. Chem. 53, (4) 5294 (1981)), a respeito de discrepâncias chocantes nos resultados obtidos por diferentes operadores em análises de rochas e minerais, que levaram Abbey a conferir especial importância ao preparo individual adequado do analista para concluir que "a confiabilidade de um resultado depende mais de quem o produz do que

como é obtido.”

Dentro dessa linha de pensamento, não queremos deixar de nos referir à controvérsia que nos impressionou bastante, surgida sobre o conteúdo de sílica cristalina nas cinzas vulcânicas do Monte Santa Helena no Estado de Washington, após a grande erupção de maio de 1980 e que foi objeto de relatos e críticas em *Anal. Chem.* 52(11) 1136A e 52(12) 1272A (1980).

A possível presença de sílica em forma cristalina, em partículas de dimensões respiráveis, da ordem de 10 μm , causou grande apreensão pela ameaça de silicose e de outras doenças graves. Entretanto, dois grandes grupos distintos, um constituído por elementos do Departamento do Trabalho e Indústria do Estado de Washington e do Departamento de Saúde Ambiental da Universidade do mesmo Estado e outro integrado por especialistas do Departamento de Geologia da Universidade do Estado de Washington, dos Laboratórios Battelle de Richland, Estado de Washington e do U. S. Geological Survey de Menlo Park, California, chegaram a conclusões bem diferentes. O primeiro grupo usando principalmente espectrometria no infravermelho acusou a presença, em média, de 5-10% de sílica cristalina, enquanto o segundo, mediante difração de raios X encontrou teores insignificantes ou praticamente nulos.

Custa a acreditar, como foi dito no comentário publicado, que nesta época de emprego de aparelhos de meio milhão de dólares, especialistas não chegassem a um acordo quanto ao teor de sílica cristalina em uma amostra de cinzas. No entanto, parece que a maior parte da controvérsia se deveu aos méritos de um tratamento preliminar por via úmida, para evitar interferências, que um grupo empregava e o outro teimava em não utilizar.

Como comenta George Morrison em editorial (*Anal. Chem.* 52 (12) 1973 (1980)), situações desse tipo podem ser constrangedoras, mas a melhor maneira de resolvê-las é fazer com que os participantes de um e outro lado se reúnam para, em conjunto, encontrar as diferenças metodológicas, à semelhança do que ocorreu, por exemplo, na determinação de impurezas em urânio durante o desenvolvimento do Projeto Manhattan na segunda guerra mundial, em que a controvérsia entre vários laboratórios foi desfeita quando os químicos dos diferentes grupos foram postos a trabalhar juntos no mesmo laboratório. A presença de erros sistemáticos se tornou então logo evidente. Algo análogo ocorreu vinte e cinco anos mais tarde com algumas amostras de solo lunar, analisadas por grande número de laboratórios com o emprego de ampla variedade de técnicas.

Mas há aspectos que transcendem o âmbito da química analítica e da própria ciência, para assumirem importância de ordem social, ou sócio-política, refletindo-se sobre decisões que levam a estabelecer normas de legislação ou posições de organismos oficiais, às vezes de maneira inadequada se não totalmente incorreta.

Não podemos esquecer que todo e qualquer dado científico tem inerente em si um certo grau de incerteza e que, portanto, as conclusões a que pode conduzir devem estar subordinadas aos limites dessa incerteza.

Nesse sentido, parece-nos muito oportuno fazer refe-

rência e transcrever alguns trechos do excelente editorial publicado em 1980 (*Analyt. Letters* 13 (A1), 1 (1980) por L. A. Currie do Centro de Química Analítica do “National Bureau of Standards” de Washington.

Currie acentua que o reconhecimento, durante a última década, da relação intrínseca entre informação científica e problemas complexos da sociedade cresceu extraordinariamente. Mas também se tornou evidente que decisões consideradas inadiáveis são tomadas com base em dados científicos incompletos ou incertos.

Em virtude dos perigos que se apresentam por decisões baseadas estritamente em teorias e como as espécies químicas, muitas vezes em nível de traços, em meios complexos desempenham um papel central em muitos desses problemas da sociedade, o químico analítico tem especial responsabilidade bem como oportunidade para atuar.

Pode ele proporcionar relevante contribuição para a validade das teorias e a demonstração dos seus efeitos, ajudando a definir as necessidades analíticas e a metodologia inicial, e ainda pode prestar inestimável serviço pela indicação de estimativas realistas quanto à incerteza dos dados científicos subsequentes.

Currie cita problemas abordados pelo Congresso dos Estados Unidos e algumas decisões tomadas, como por exemplo no caso de uma emenda de lei sobre alimentos, drogas e cosméticos que, segundo ele, não levou em conta o fato de que a “capacidade” de detectar produtos químicos em alimentos é dinâmica, dependendo diretamente da incerteza da medida, e portanto, função do “estado da arte” dos procedimentos analíticos.

Lamenta que a concepção do “fato científico” por parte da nova geração, ou seja, pelos que concluíram pelo menos o ciclo colegial, é extremamente deficiente, havendo apenas 12 por cento nessa faixa na nação americana que estão conscientes de que “toda medida contém erro”.

Corre-se o risco de decisões de política científica, tomadas em condições de apreciável incerteza, terem graves conseqüências não apenas em termos regionais amplos mas também com repercussões por mais de uma geração.

Os grupos sociais e as instituições, diz Currie, raramente respondem antes que sejam ameaçados, fato que passa a constituir pesado fardo para o cientista. O público frequentemente espera uma resposta instantânea com a informação científica necessária para enfrentar uma nova ameaça. Em tais circunstâncias, a melhor maneira do cientista servir a política pública é a de ater-se aos princípios éticos da ciência admitindo a magnitude da incerteza de seus dados e sua ignorância. É pois de vital importância a filosofia básica que deve orientar o químico analítico, ou seja, insistir no axioma de que nenhum resultado analítico tem sentido sem a indicação completa e quantitativa da incerteza que lhe é inerente.

Referindo-se ao espaço de tempo normalmente longo para se concretizarem mudanças sensíveis em sistemas associados com atividades humanas, justifica a necessidade de se lançar mão de modelos como recurso para a avaliação de efeitos potenciais. A validade dos modelos e seu grau de precisão certamente dependem dos dados a partir dos quais são construídos. Assim por exemplo, acentua Currie, apesar de que os nossos modelos prevêm um aumento

secular de carbono inorgânico dissolvido na água do mar (" ΣCO_2 "), de cerca de 0,35 por cento por década e a diminuição de ozona na atmosfera de cerca de 1 por cento, a nossa capacidade de poder confirmar tais previsões é inadequada, pois a falha é de uma ordem de grandeza. Tal fato significa que a não ser que consigamos melhorar substancialmente a nossa capacidade de medida, sérias mudanças de longo prazo terão ocorrido antes que tenhamos a possibilidade de detectá-las experimentalmente.

Apesar de que as decisões correntes devam apoiar-se em modelos teóricos o fato de que tais modelos são representações imperfeitas da realidade não pode ser ignorado. A base teórica inadequada e a falta de medidas seguras podem levar a surpresas como tem ocorrido em vários casos.

A solução para esses problemas, frisa Currie, somente pode vir com a pesquisa básica, proporcionando o avanço dos conhecimentos fundamentais, combinados com o progresso das técnicas de medida e de sua exatidão e sensibilidade.

Alguns exemplos são citados em que as conclusões passaram a ser invertidas ou parcialmente mudadas ao se descobrirem falhas no procedimento analítico e mostram abundantemente como as fontes de erro podem estar localizadas na amostragem, no método ou na execução da medida, no tratamento numérico e interpretação dos dados, na falta de atenção para com erros sistemáticos. O tratamento inadequado de erros sistemáticos, aliás, diz o autor, é talvez hoje a mais séria deficiência, para a qual tem que ser voltada toda a atenção.

Currie conclui pelo inestimável valor da Química Analítica na solução de muitos problemas científicos da sociedade e acentua que a pesquisa básica metodológica, incluindo progressos em exatidão, resolução e sensibilidade, continuará a ser compensadora para auxiliar a resolver velhos problemas e por em evidência novos.

Ao dizer que a responsabilidade do analista na cooperação que presta na abordagem de aspectos científicos dos problemas da sociedade atual é refletida claramente na filosofia de comportamento do químico analítico clássico, destaca Currie alguns pontos que julga essenciais, na atitude do profissional, a saber: a) deve voltar-se para o problema como um todo desde o início, procurando entender a natureza das questões que são levantadas e empenhar-se para encontrar exatamente como a análise química pode contribuir para a sua solução, sendo indispensável a comunicação e colaboração com elementos de outras disciplinas desde o estágio inicial de planejamento e amostragem até a interpretação dos resultados; b) deve conscientizar-se da importância de medidas confiáveis em amostras "verdadeiras" (isto é, do mundo real) em oposição a medidas que apenas são válidas para meios ideais, de laboratório; c) deve manter-se permanentemente alerta em relação a tendências provenientes de fontes estranhas, tais como valores sociais, conjecturas implícitas, amostragens não representativas, etc.; d) deve fornecer resultados com incertezas significativas incluindo limites para erros sistemáticos; e) deve prover graus de liberdade adicionais e análises confirmatórias para reduzir ao mínimo erros não previsíveis.

Na verdade, todas essas considerações de Currie constituem preocupações sérias dos pesquisadores e profissionais mais responsáveis e contribuíram para abrir e desenvolver todo um leque de atividades que visam a aprimorar e racionalizar os procedimentos de execução e de avaliação do trabalho analítico.

Começou assim a se desenvolver a Quimiometria que abrange várias modalidades e que, conforme relatado por B. R. Kowalski e J. E. Frank em artigo de revisão de abril p. p. (Anal. Chem. 54 (5) 222R (1982)), é definida pela Sociedade Internacional de Quimiometria como "a disciplina química que usa métodos matemáticos e estatísticos para delinear e selecionar procedimentos de medida e experimentos mais favoráveis e proporcionar o máximo de informação química pela análise de dados químicos. No campo da Química Analítica, a Quimiometria é a disciplina que usa métodos matemáticos e estatísticos para a obtenção de informações relevantes da maneira mais favorável sobre sistemas materiais".

Os autores vêem a quimiometria como uma interface entre a química e a matemática. As ferramentas são veículos que podem ajudar o químico mais eficientemente a seguir no caminho das medidas, para a informação e para o conhecimento. A Química Analítica começa a alcançar grau mais elevado de amadurecimento como ciência de informação e espera-se que a quimiometria analítica venha a contribuir para mudar a forma pela qual os métodos analíticos são desenvolvidos.

São muitos os tópicos que constituem a quimiometria e é ainda muito cedo para decidir quais os que virão proporcionar vantagens mais significativas para merecer maior ênfase.

Kowalski, em outra oportunidade (Anal. Chem. 53 (6) 706A (1981)), faz nítida distinção entre a concentração determinada a partir de uma curva de calibração e a verdadeira concentração. Se desejarmos apenas fazer calibrações para determinar concentrações, diz ele, não há muita ajuda que a quimiometria possa prestar, mas se estivermos interessados na *verdade*, ou seja, em saber quanto de um analito está efetivamente presente na amostra, então a ciência da informação terá muito para oferecer". Vamos seguramente voltar-nos em direção à verdade em química analítica, arremata Kowalski, para concluir "não podemos ter o químico analítico construindo uma curva de calibração sabendo muito bem que a água empregada para o seu gráfico de referência não tem nada a ver com a amostra real e que está ele sujeito a tremendos efeitos de matriz". Há métodos proporcionados pela ciência da informação que deverão possibilitar ao químico chegar às concentrações verdadeiras mesmo na presença de efeitos de matrizes e de interferências.

Em artigo muito recente, de autoria dos cientistas checoslovacos K. Eckschlager e V. Stepánek, publicado em setembro p. p. (Anal. Chem., 54 (11) 1115A (1982)) é ilustrada a importância da teoria da informação em Química Analítica e são desenvolvidas expressões matemáticas aplicáveis a vários tipos de análise.

Os autores afirmam que o emprego da teoria da informação em química analítica se origina da idéia de que cada análise é um processo de obtenção de informações a respei-

to da composição qualitativa, quantitativa ou estrutural da substância analisada.

A importância de expressões e relações dadas pela teoria da informação deve ser preponderantemente considerada quanto ao uso para a avaliação e otimização dos métodos e procedimentos analíticos. É sabido que a teoria da informação possibilita julgar métodos de análise quantitativa, bem como avaliar melhor e mais objetivamente métodos de análise estrutural, qualitativa e de identificação.

Pode-se demonstrar que a incerteza "a posteriori" ou a quantidade de informação está estritamente ligada a propriedades dos métodos analíticos, tais como seletividade, especificidade de determinação, sensibilidade, precisão e exatidão. Assim, se se otimizar um método analítico pelo emprego de adequada medida de informação, também se otimizarão, simultaneamente, essas propriedades. Por exemplo, o montante de informação obtido de uma análise quantitativa é tanto maior quanto mais precisos e exatos são os resultados e no caso da análise de traços esse montante é afetado pelo limite de determinação.

Assinale-se ainda que o rápido e contínuo desenvolvimento da automação impõem a utilização de técnicas cada vez mais aperfeiçoadas para o processamento de dados a fim de se alcançarem resultados de alta confiabilidade e de sentido global. A automação combinada com método quimiométricos adequados deverá levar a informações químicas exatas. É o que dizem Kowalski e Frank em sua recente resenha acima citada, sem antes, porém, deixar de alertar contra a aceitação indiscriminada dos resultados proporcionados por instrumentos automáticos. É verdade, dizem eles, que os aparelhos automáticos podem geralmente propiciar melhor precisão do que a obtida na operação normal e a exatidão — primeira meta analítica — não pode prescindir de precisão, mas todo e qualquer analista sabe que elevada precisão somada a um erro determinado ou a um método inadequado de calibração leva a resultado desastroso.

A esta altura, não podemos deixar de lembrar, por exemplo, interessante observação que Laitinen fazia há cerca de dez anos atrás (*Z. Anal. Chem.*, 263, 307 (1973)), quando procurava mostrar a diferença entre automação e mecanização e se referia à tendência de muitos em considerar a automação simplesmente como a adoção de dispositivos para aumentar a rapidez e possivelmente a confiabilidade de uma análise pela substituição do trabalho humano. Tais objetivos, dizia ele, não são triviais e na verdade desempenham papel importante na tarefa de muitos laboratórios em que milhares de testes e determinações de rotina devem ser executados em enormes séries de amostras. Tal passagem operacional do homem para a máquina eu a chamaria mecanização, enfatizava Laitinen, enquanto a automação, por outro lado, implica algo mais, principalmente o uso do computador não apenas para dirigir a seqüência de operações, mas para tomar decisões sobre observações preliminares de modo a controlar o instrumento de tal forma que conduza a otimizar o resultado analítico. Assim, por exemplo, o computador pode ser orientado de maneira a efetuar repetidas medidas

com sucessivas tomadas de uma amostra até que a análise estatística dos dados demonstre que o desejado grau de precisão foi alcançado.

Após vários anos de vertiginoso progresso, em que tem havido enorme utilização de minicomputadores e posteriormente microprocessadores, vamos encontrar Kowalski e Frank citando Stochwell e Telford para dizer que o objetivo primacial da automação é o aperfeiçoamento do desempenho global que somente pode ocorrer quando as especificações das verdadeiras necessidades analíticas precedem a automação. Assim, também é interessante notar, como mostrava, há pouco mais de dois anos, M. Bos em *Anal. Chim. Acta* 122, 193 (1980) que, embora a ênfase na automação tenha ocorrido com métodos instrumentais, também métodos clássicos de análise química passaram a ser automatizados recuperando parte do terreno perdido em relação às técnicas instrumentais, e que o efetivo sucesso neste campo depende da integração de conhecimentos de química analítica, eletrônica e ciência da computação.

Focalizamos alguns aspectos que nos pareceram ilustrativos do trabalho analítico quando conduzido em profundidade, embora talvez por nos termos alongado demasiadamente em certos tópicos deixamos de cuidar de vários outros igualmente de alta relevância. Tentamos, contudo, realçar a importância do químico analítico no que diz respeito ao papel que lhe cabe desempenhar e, por via de consequência, mostrar a necessidade de sua valorização como cientista e profissional.

Ao concluir, desejamos novamente enfatizar que, se métodos e técnicas analíticas são empregados abundante e crescentemente em todas as áreas da química e em muitos outros campos de atividade, o progresso decorrente da inovação, que abre outras perspectivas e estabelece novos marcos no caminho do conhecimento, depende principalmente da atuação de especialistas que, por sua formação e treinamento, são levados de maneira natural a enfrentar, com enfoque apropriado, determinados tipos de problemas.

A complexidade cada vez maior da tarefa analítica constitui motivo de sadio desafio e, por isso mesmo, torna mais atraente o campo de pesquisa, acentua a importância dos conhecimentos hauridos em outras ciências e sua consequente utilização, mas não exime o analista de se aprofundar nos conhecimentos de química, pois, como dizíamos anteriormente, citando Laitinen, quanto mais nos voltarmos para a totalidade do processo analítico mais a química permanecerá como necessidade essencial.

Nesse sentido, também nos apraz finalizar lembrando Lars Kryger quando ao concluir a sua interessante resenha sobre métodos de reconhecimento de espécimens ("pattern recognition") na interpretação de informações analíticas (*Talanta*, 28 (12) 871 (1981)) deixava consignadas incisivas palavras do seguinte teor: não há realmente substituto para a habilidade experimental e para os conhecimentos químicos fundamentais, sendo pois de importância primordial que o químico analítico, mesmo no futuro, quando o acesso aos dados for extremamente facilitado pelos bancos de dados e pelas redes de computadores, saiba avaliar criticamente a qualidade dos resultados e não perca o contato com o trabalho de laboratório.