

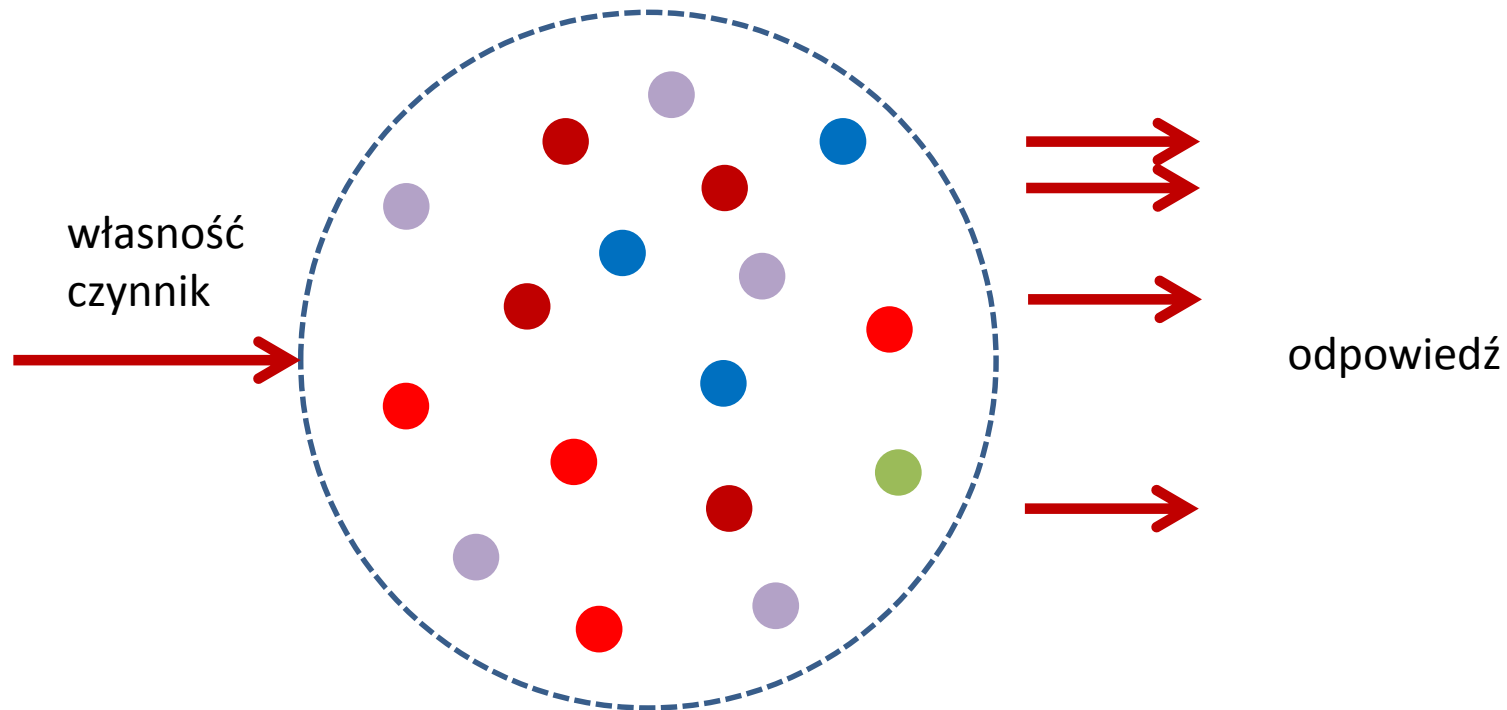
# Nieselektywne sygnały analityczne

Michał Daszykowski

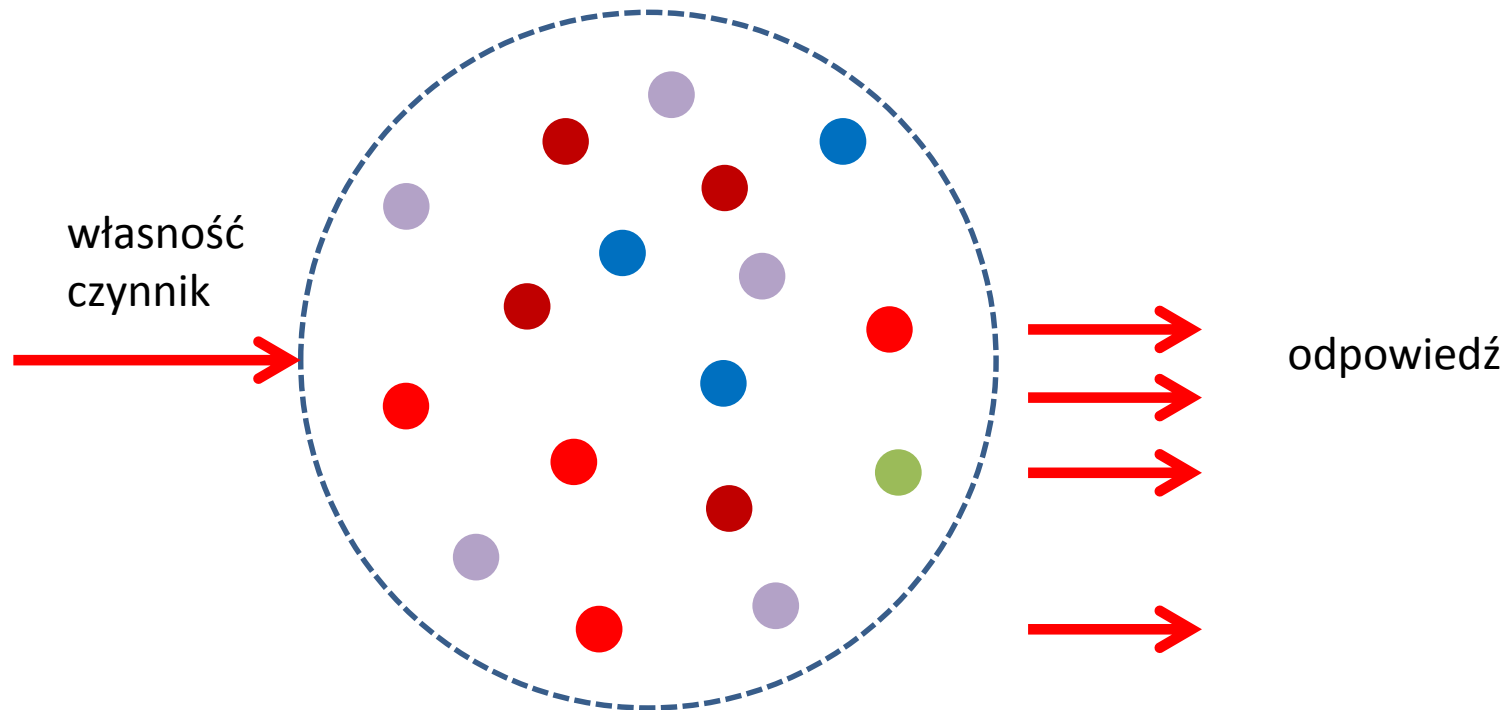
Instytut Chemii  
Zakład Chemii Teoretycznej  
Uniwersytet Śląski w Katowicach

# Sygnal analityczny

- Sygnal analityczny: w analizie chemicznej wielkość, której pomiar pozwala na wykrycie lub oznaczenie składnika w układzie; może być uzyskany w wyniku reakcji chemicznej lub na podstawie pomiaru fizycznych właściwości układu
- Sygnal instrumentalny: zbiór pomiarów pewnej własności fizyko-chemicznej w funkcji zmieniającego się w równych odstępach parametru (np. temperatura, długość fali, czas elucji)
- Selektywność (metody, odczynnika, reakcji): możliwość zastosowania do wykrywania lub oznaczania tylko pewnej niewielkiej liczby składników



Badany układ



własność  
czynnik

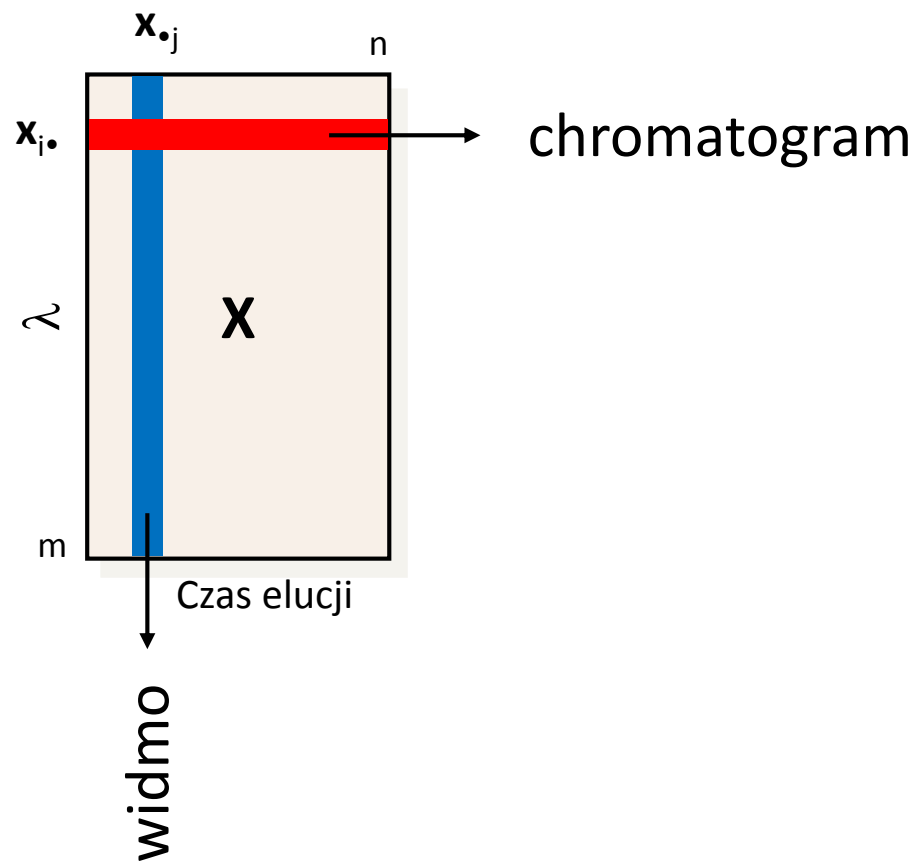
odpowiedź

Badany układ

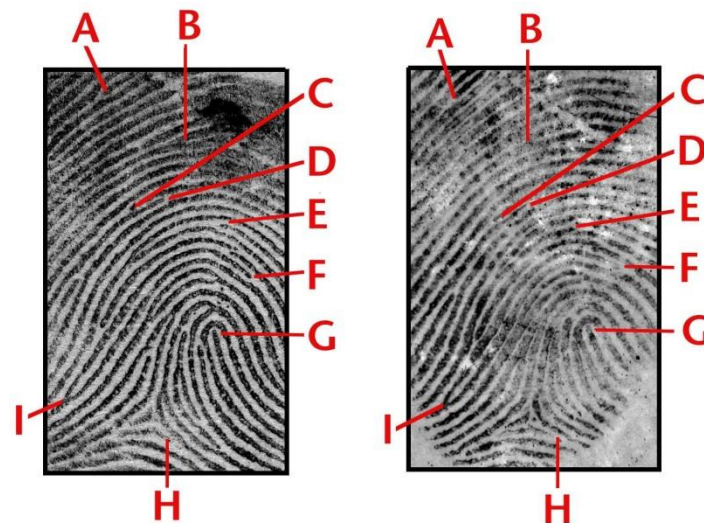
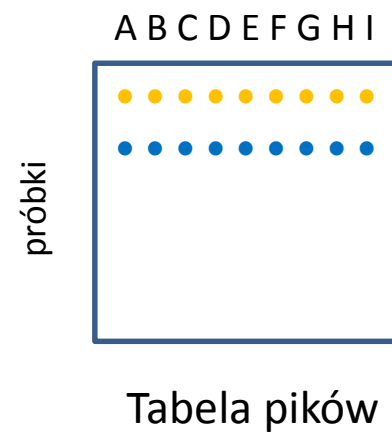
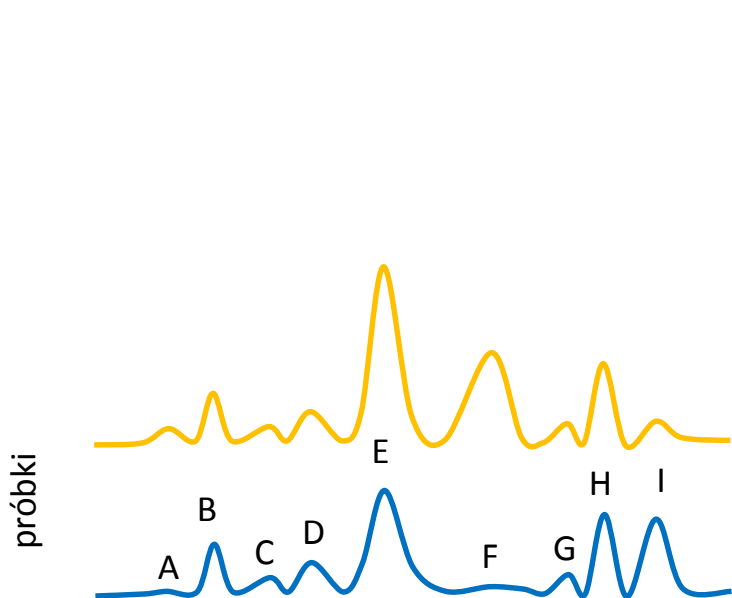
# (Nie)selektywny sygnał

- widma UV-Vis
- widma MS
- $^1\text{H}$ NMR
  
- chromatogramy HPLC, GC, ...
- widma synchronicznej spektroskopii fluorescencyjnej
- chromatogramy HPLC-DAD, LC-MS, GC-MS, CE-MS, ...
- 2D-PAGE, LC $\times$ LC-MS, GC $\times$ GC-MS, ...

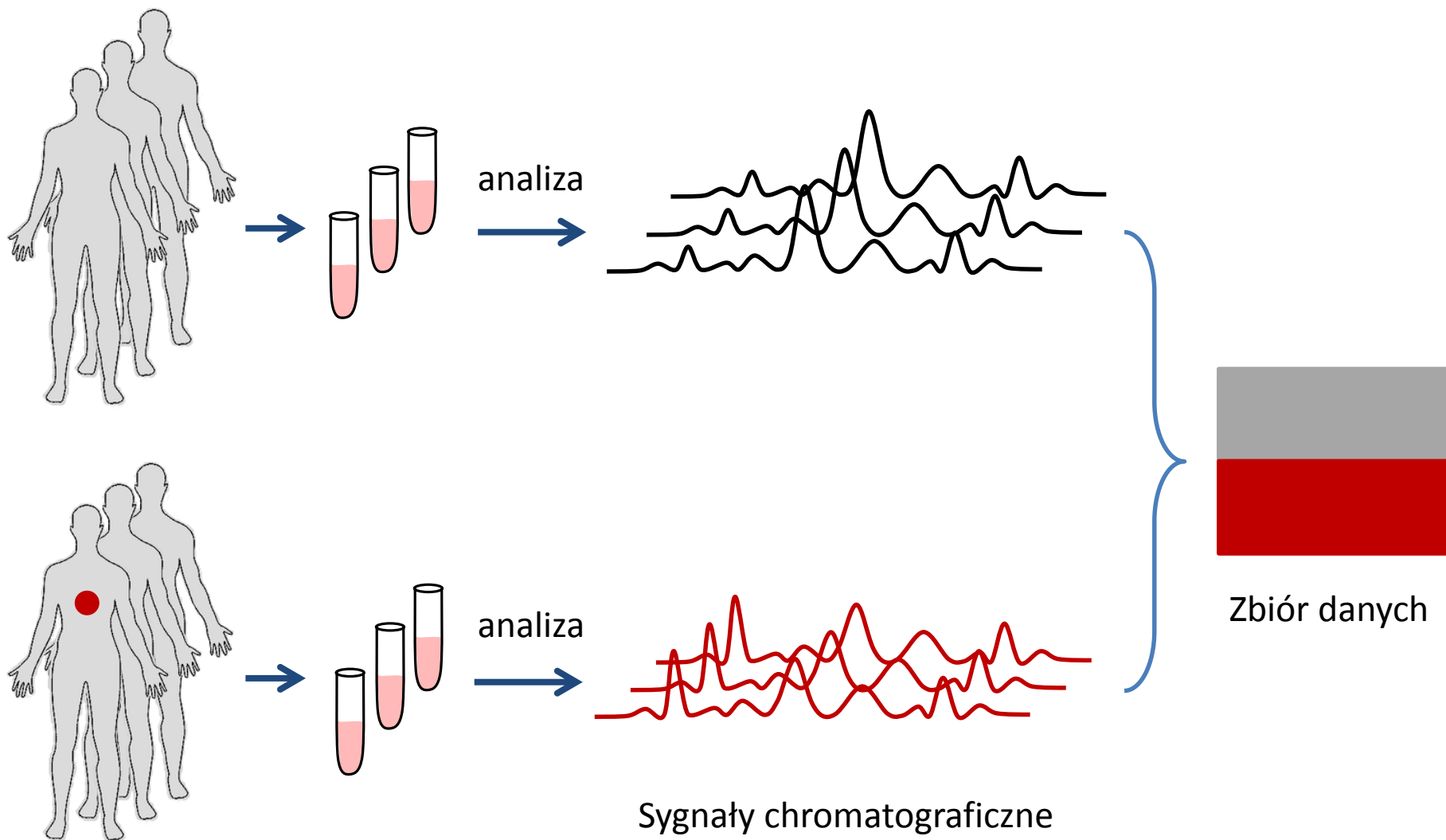
# HPLC-DAD



# Dane analityczne



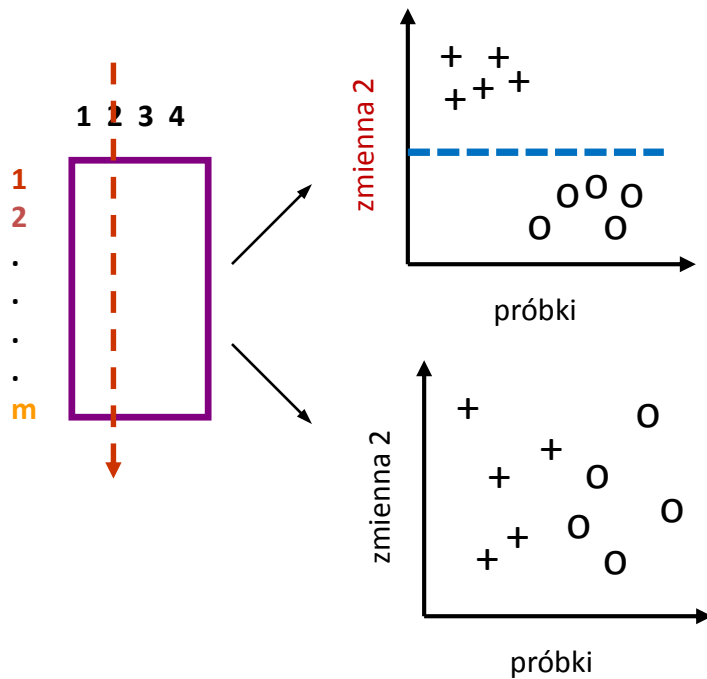
# Eksperyment: zdrowi vs. chorzy



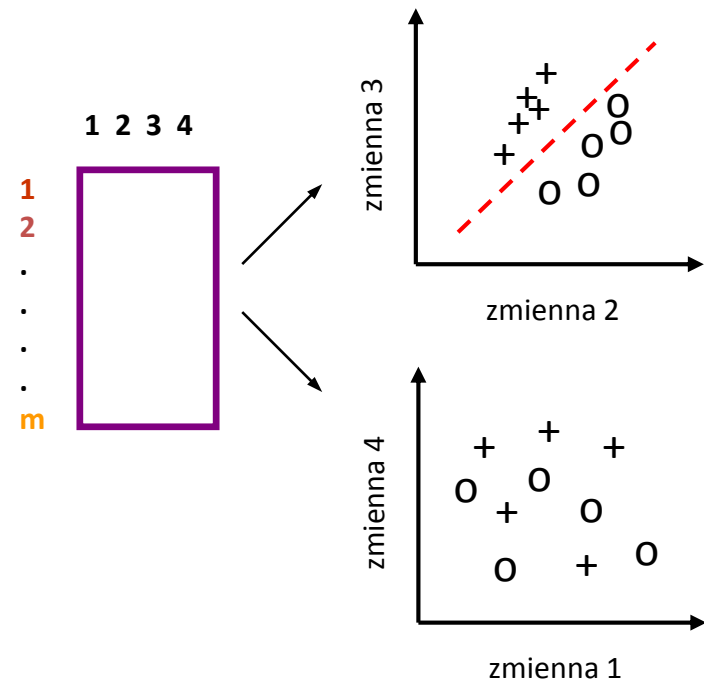


# Interpretacja obserwowanych różnic

## Jedna zmienna



## Wiele zmiennych



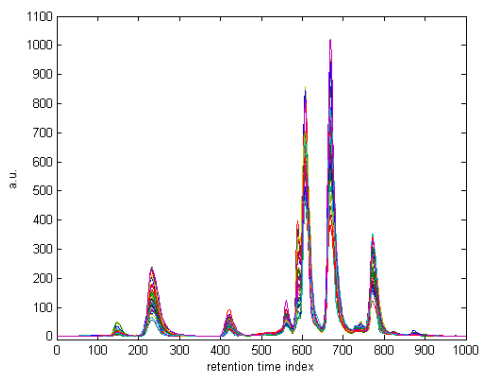
# Chemometria

„Chemometrics is the chemical discipline that uses mathematical, statistical and other methods employing formal logic to design or select optimal measurement procedures and experiments, and to provide maximum relevant chemical information by analyzing chemical data”

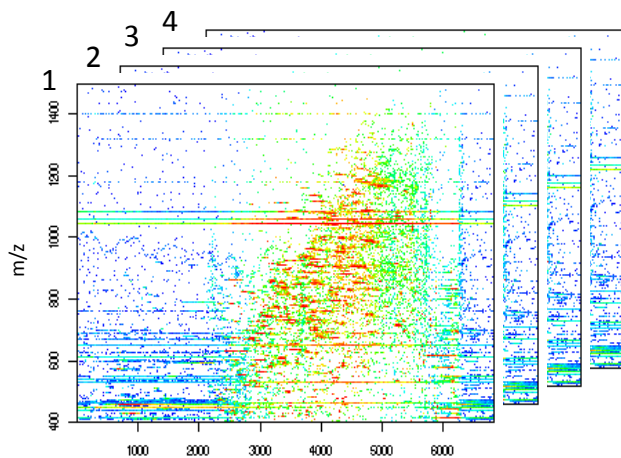
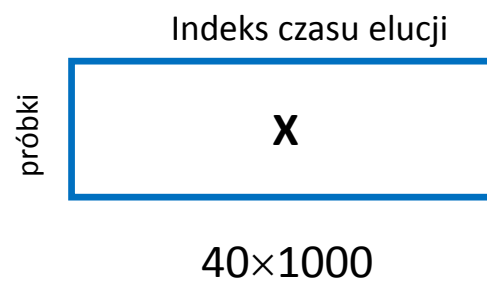
- D.L. Massart



# Chemiczne odciski palca



Sygnaty HPLC



Sygnaty LC-MS

