

Woraus besteht ein Stoff ? Vergangenheit und Gegenwart einer Fragestellung*

Karlheinz Ballschmiter, Universität Ulm, Abteilung Analytische Chemie und Umweltchemie, Albert-Einstein-Allee 11, Postfach 4066, 89081 Ulm/Donau

Analysieren wird heute wie schon bei der Entwicklung der Gesetze der Logik vor über zweitausend Jahren als eine Methode des richtigen Schlußfolgerns auf der Basis eines Zerlegens in Bestandteile, eines Gliederns von Zusammenhängen, verstanden. Analysieren kann man philosophische Aussagen, das Verhalten eines Menschen wie auch die Zusammensetzung von Goldmünzen. Letzteres war einer der Anfänge der zerlegenden, der "analysierenden" Chemie. Was ist das? Woraus besteht ein Stoff? Es sind die uralten Fragen der Neugierde, des Nachdenkens, der Wissenschaft. Analytische Chemie ist das Teilgebiet der Chemie, das den Fragen des Trennens und Nachweisens nachgeht, um daraus Antworten auf Fragen zusammenzusetzen.

Die Geschichte der Analytischen Chemie ist untrennbar verbunden mit der Geschichte der Chemie überhaupt. Chemie ist als Fach entstanden aus den Bereichen der Heilmittelkunde, der Erzgewinnung und beide vereind aus der Suche nach dem Lebenselixier sowie der Möglichkeit Unedles in Edles z.B. Kupfer in Gold zu verwandeln. Diese Träume früherer Ärzte, Apotheker, Alchemisten und Metallurgen setzten voraus, daß Stoffe getrennt, zerlegt, bestimmt werden konnten, um danach wiederum zusammengeführt zu werden. Jede Synthese setzte voraus, daß man die Elemente, die Bausteine der Synthese, in möglichst definierter Form vorliegen hatte und ihre Eigenschaften bestimmen konnte. Sehr früh ist auch, was heute dem Chemiker Basiswissen ist, die Lehre von den Proportionen, in das Denken der Naturdeuter eingegangen.

Die Suche nach Erzen, die Nutzung von Erzen beginnt im Vorderen Orient um 2 500 v. Chr. mit der Bronzezeit. Diese dauerte über 1 000 Jahre. Ihr folgte um 1 500 v. Chr. die Eisenzeit. Die Phönizier, die im Küstenbereich des heutigen Syriens als Seefahrervolk herrschten, unterschieden bereits im vierten Jahrhundert v. Chr. zwischen Gold, Silber, Kupfer, Zinn, Blei. Sie kannten vor allen Dingen auch Quecksilber, ein Metall das seinem Namen nach, ein quickes, ein bewegliches Silber darstellt.

Zur Herstellung der Metalle war die Kenntnis und Gewinnung ihrer Vorläufer, der Mineralien, der Erze notwendig. Und hier beginnt ein weiterer Ansatz der Analytischen Chemie. Derjenige, der Steine wertloser Art von

* Vortrag zum 20-jährigen Bestehen des Faches Chemie an der Universität Ulm. Kolloquium "Chemie im Spiegel der Jahrhunderte", 15. - 17.12.1992.

Steinen wertvoller Art - Erze - unterscheiden konnte, analysieren konnte, war bei der Erzgewinnung im Vorteil. Eine andere Quelle ist in dem steten Bemühen um den Nachweis von Giften zu sehen. Die Kenntnis eines nicht nachweisbaren Giftes bedeutete Macht, politische Macht. Selbst im Jahre 1992 können Umwelt"gifte" als politische Faktoren wirken und Motor für langandauernde Forschungsprogramme sein.

Die Wissenschaft von der Natur als philosophische Fragestellung

Die Wandlung der Stoffe, ihr scheinbares Verschwinden und ihr Wiederentstehen, wie es ganz besonders leicht und frühzeitig für das Quecksilber beobachtet wurde, führte dazu, daß im weitesten Rahmen Philosophen - Naturphilosophen - sich um die Zusammenfassung und Deutung der Einzelercheinungen des Geschehens in der Natur bemühten und nach Allgemeingültigem, nach Gesetzmäßigem suchten. Es ist danach nicht verwunderlich, daß in den Anfängen der Naturdeutung Begriffe geprägt wurden, im wesentlichen deduktiv, die heute noch Bestandteile, ja Grundlagen chemischen Denkens sind. Der Begriff Element, der Begriff Mischung - heute mit Verbindung gleichzusetzen - der Begriff Atom oder der Begriff Atomkomplex - heute mit Molekül zu übersetzen - sind sehr früh als philosophische Elemente des Naturverständnisses geprägt worden. Aristoteles (384 - 322 v. Chr.) war es vorbehalten, die vier Elemente Luft, Feuer, Erde, Wasser mit den Eigenschaften warm, trocken, kalt, feucht als die Grundlagen jeglicher Materie zu definieren. Aus der Paarung der vier Elemente in den unterschiedlichsten Proportionen entstehen letztlich die Stoffe, das Sichtbare.

Auch der für uns heute als Grundlage des Aufbaus der Materie geltende Begriff des Atoms, von *atomos* - unteilbar - entstammt griechischer Naturphilosophie. Leukipp von Milet sowie Demokrit von Abdera haben ihn im fünften Jahrhundert v. Chr. geschaffen. In der indischen Naturphilosophie aus etwa der gleichen Zeit sind gleichfalls atomistische Vorstellungen, das Zurückführen der Vielfalt auf Unteilbares, auf Grundlegendes bekannt. Leukipp von Milet leitete die Notwendigkeit der Existenz von Atomen aus Überlegungen über die Teilbarkeit der Stoffe bis ins Unendliche ab, die er für unmöglich hielt. Diese rein philosophische Vorgabe einer Grenze der Teilbarkeit bildeten letztlich die unteilbaren Teilchen, die Atome, denen als Gegensatz das Leere, der leere Raum, gegenüberstand. Aus Atomen und leerem Raum sahen Leukipp und Demokrit alle Stoffe der Welt aufgebaut.

Da der Begriff "goldmachender Saft" im Chinesischen *chimia* heißt, glaubt man, daß damit das Stammwort des Begriffes Alchemie (*al chimia*) gegeben ist. Die chinesische Alchemie brachte in das Naturverständnis die Prinzipien Yin und Yang ein. Im Idealfall Gold sind beide im Gleichgewicht ausgebildet, dagegen liegt z.B. in Quecksilber und Zinn Yin, im Blei oder in Bronze dagegen Yang im Überschuß vor. Das Yang-Prinzip wurde als Ursache des Männlichen, des Aktiven, des Trocken, des Lichten, Reinen, Heißen charakterisiert, während das Yin-Prinzip das Weibliche, Inaktive, Feuchte, Schwere, Unreine, Kalte hervorbringt. Yang und Yin stehen in der altchinesischen Lehre der Alchemie im Widerstreit. Die Suche nach dem Gleichgewicht zwischen beiden ist ein

Prinzip für den idealen Zustand, wie ihn das Gold durch seinen Glanz und seine Unveränderlichkeit in Feuer und Wasser zeigt.

Die Kunst des Stoffwandels war eine der "Geheimen Wissenschaften" und nur den Wissenden zugänglich. Schriftliche Zeugnisse des chemischen Arbeitens bedienen sich sehr variabler Geheimzeichen und Decknamen. Der chinesische Alchemist Lei Po-Yang (100 - 170 n. Chr.) nennt in seinen Büchern Schwefel; Sonne, Goldene Krähe, gelber Sprößling, grüner Drache; Quecksilber heißt: weißer Tiger, Mond, zierliche Dame, weißes Kaninchen.

Ein Satz wie "Die zierliche Dame an der Flußseite ist höchst geheimisvoll. Sobald sie das Feuer sieht, fliegt sie davon" ist deutlich poetischer und geheimnisträchtiger als die profane Aussage: Quecksilber verdampft beim Erhitzen.

Der arabische Kulturraum als Mittler zur Neuzeit

Das Erbe der altorientalischen und antiken Kultur und Wissenschaft fand besondere Pflege im 4. - 7. Jahrhundert in Byzanz, in Teilen Persiens und Indiens. Von dort gelang es im 8. Jahrhundert durch die Eroberungszüge der Araber in die islamische Wissenschaft und Kultur insbesondere unter der Dynastie der Abbasiden, die über 500 Jahre von 750 bis 1258 in Bagdad herrschte. Zwei Namen sind als Überlieferer wie aber auch Neuformer aus dieser Zeit zu nennen. Abu Musa Djabir ibn Hajjan, auch Gabir oder Geber genannt, ist der berühmteste arabische Chemiker. Er lebte von etwa 726 bis etwa 812. Als Sufi, als Mitglied einer kontemplativen Sekte von Asketen, die dem Kabbalismus anhing, hat er für lange Zeit die Systematik der Chemie im Denken wie im Experimentieren geprägt. Die Kabbalisten huldigten einer Geheimlehre, die den Zahlen geheime Bedeutung und magische Kräfte zuschreibt. Djabir war der Hauschemiker, was auch gleichbedeutend war mit Hausarzt, des bekannten Kalifen Harun al Raschid. Neben vielen philosophischen und chemischen Büchern hat Djabir ein Buch über Waagen geschrieben. Jeder Substanz ordnete er im Sinne der griechischen Naturphilosophie definierte Anteile der Baseigenschaften Hitze, Trockenheit, Feuchtigkeit und Kälte zu. Er kennt bereits die Beilsteinprobe (Grünfärbung der Flamme) als Kupfernachweis, unterscheidet Metalle durch die Farben ihrer Sulfide, und nimmt auch organische Stoffe als Bestandteile seiner Experimente auf.

Das von Djabir durch Zahlenproportionen geprägte Bild der Natur, der Elemente, der Chemie wird von einem seiner späteren Schüler Abu Bakr Muhammed ibn Zarkaja, genannt ar-Razi, der aus der Nähe von Teheran stammte und über die Dichtkunst und Musik zur Medizin und Pharmazie und danach zur Chemie kam, umfassend ergänzt. Er erweiterte die Alchemie im Grundsätzlichen um die Beweiskraft des Experiments. ar-Razi unterschied fünf ewige Prinzipien: Schöpfer, Seele, Natur, Zeit und Raum. Aus Raum und den Elementen Feuer, Wasser, Luft und Erde entstehen auch für ihn die Stoffe, die er in zahlreichen Experimenten ineinander umwandeln, transmutieren kann. ar-Razi stellt neben die Spekulation, neben die Theorie, gleichwertig das Experimentieren und

läßt dieses letztlich über Spekulation und Philosophie entscheiden. Er kennt Trennen und Lösen und stellt diesen Verfestigen, Koagulieren gegenüber. ar Razi setzt mit seinem Buch "Geheimnis der Geheimnisse" den Beginn einer rationalen chemischen Wissenschaft. Er schildert alle bekannten chemischen Stoffe und fügt sie in eine Systematik ähnlicher bis gleicher chemischer Eigenschaften ein. Er beschreibt Bau und zweckmäßigen Einsatz chemischer Geräte in experimentellen Verfahren und er schildert die theoretischen Grundlagen der Vorgänge aus der Sicht der Naturphilosophie, die aber jederzeit vom experimentellen Ergebnis zu widerlegen ist. Die "christliche" Wissenschaft hat lange danach diesen Grundsatz für Jahrhunderte aufgegeben.

Eine ganze Serie von alchemistischen Schriften wird als lateinische Übersetzungen - der "Geber-Korpus" - Djibir zugeschrieben. Die Schriften sind aber über einen längeren Zeitraum entstanden und enthalten auch eine sachliche Entwicklung. Es sei der Schluß erlaubt, daß nur unter dem großen Namen des arabischen Chemikers viele Mönche oder andere Gelehrte ihrer Tätigkeit nachgehen zu können glaubten.

Eine 1343 von König Philip von Frankreich erlassene Normvorschrift zur Durchführung der Kupellations- oder Aschenprobe zur Bestimmung des Goldgehaltes von Münzen geht auf die Schrift von ar Razi "Über die Proben" zurück. In dieser beschreibt er zwölf Nachweise für Gold, u.a. auch die Cineritium-Probe mit Bleiglätte und Asche.

Die Chemie als quantitative Wissenschaft

Wie ein roter Faden zieht sich durch die Frühzeit der Chemie neben der Einheit mit der Heilkunde die Unterscheidung zwischen Trennen und Vereinigen. Paracelsus (1493-1541), der bekannte Wissenschaftler und Philosoph, streitbarer Mediziner und Alchemist, nennt die Alchemie auch die "spagirische Kunst". Das Wort spagirisch bildet er aus den griechischen Verben spaîn - trennen und ageirein - vereinigen, was dem altem alchemistischen Wahlspruch solve et coagula - trenne und verbinde - entspricht. Paracelsus, mit seinem vollem Namen Philippus Aureolus Theophrastus Paracelsus Bombastus von Hohenheim, ist der Sohn eines Arztes und Metallurgen. Sein Vater ging als Arzt nach Kärnten, wurde danach Bergwerksingenieur in Tirol.

Neben der Entwicklung, die für etwas mehr als zweihundert Jahre Schwindlern und Goldmachern erlaubte, Furore, Ansehen aber auch Geringschätzung durch chemische Künste zu erzeugen, gab es nach Paracelsus eine nachvollziehbare Kette seriöser Wissenschaftler, die der Chemie aus Leidenschaft und ohne kommerzielle Umsetzung zugeneigt waren. Diese häufig nicht sehr bekannten Professoren, Lehrer, Apotheker, Mediziner haben das Wissen um Stoffe und Stoffwandlungen bis in die moderne Zeit gebracht. Bekannt ist dagegen Robert Boyle (1627 - 1691), der Mitbegründer der Royal Society. Er gab auch der Analytischen Chemie den Namen: Chemical Analysis. Ferner gehen auf ihn die Begriffe wie Reagens, Reaktion und Fällungsmittel zurück. Schon Robert Boyle beschäftigte sich intensiv mit der Nachweisgrenze - er prägte auch diesen Begriff - verschiedener Nachweisverfahren.

Im letzten Drittel des 18. Jahrhunderts erlebte die Alchemie eine der größten Umwälzungen; und mit ihr schlägt auch die Geburtsstunde der modernen Chemie. Sie erhielt eine neue Theorie, sie erhielt neue Terminologien und eine einheitlichen Nomenklatur. Der Vorang reproduzierbarer Experimente vor philosophischer Stoffwandlung legte den Grundstein für die moderne Chemie als Naturwissenschaft. Mit den Arbeiten von Antoine Laurent Lavoisier (1743-1794) wird üblicherweise der Zeitpunkt des Beginns der modernen Chemie verbunden. Er führte die Waage ein; er zeigte die Proportionen der Umsetzung bei Reduktion und Oxidationsvorgängen und er setzte den Maßstab dafür, daß in der Chemie die Beweisbarkeit durch qualitative und quantitative Experimente als Kriterium für die Richtigkeit aller Theorie zu gelten hat. Die Einführung des quantitativen Aspektes in die Chemie, auch bereits von Robert Boyle in seinen Arbeiten immer wieder betont, läßt ihn als einen der Begründer der Analytischen Chemie im selbst modernen Sinne verstehen. Nach Lavoisier wurde mit der Aufstellung der Atomhypothese durch J. Dalton (1766-1844) die Basis für die moderne Chemie der Elemente und ihrer Umwandlungen gelegt.

Aus jener Zeit stammt auch die Einführung des Begriffes Hypothese als Arbeitsprinzip und die Definition der Theorie als einer durch Experimente belegten Hypothese, die zu neuen Experimenten und Überlegungen führen kann. Gleich, wie eine Theorie häufig auch Hypothetisches enthält, enthält jede Hypothese im modernen Sinne einen rationalen Kern, eine Annahme, die sich auf Experimente gründet. In der Entwicklung eines Bereichs der Wissenschaften ist jeder Endpunkt zugleich Ausgangspunkt neuer Überlegungen.

Die "Scheidekunst" wird zur Analytischen Chemie

Die Analytische Chemie entwickelte sich immer parallel zur allgemeinen Chemie, hatte jedoch schon früh ihre eigenständige experimentelle Kunst und auch ihre experimentelle und damit chemische Arbeitsrichtung. Christian E. Weigel veröffentlichte bereits 1788 ein Buch "Einleitung zur allgemeinen Scheidekunst", und in allen Handbüchern der Allgemeinen Chemie und der gesamten Chemie nimmt die Analytische Chemie einen breiten Raum ein. J.J. Berzelius (1779 - 1848) schreibt z. B. "bei der qualitativen Untersuchung muß man in der Probe alle die Stoffe suchen, welche man darin zu vermuten Ursache hat, und zugleich beweisen, daß sich keine anderen darin befinden".

Der schwedische Chemiker Torbern Bergman, 1735 in Westgotland in Schweden geboren, übernahm 1767 nach einem Studium von Jura, Medizin und Mathematik den Lehrstuhl für Chemie der Universität Uppsala. Er begründete mit seiner Experimentierkunst viele Grundoperationen und letztlich auch die Systematik der "analytischen" Chemie. Er kommt von den Einschnittoperation weg und führt, was man heute als den Analysengang bezeichnet, ein.

Bergman war es auch, der das analytische Prinzip in die Wissenschaft einführte, nach dem Generationen von Chemikern in den Grundlagen der

Chemie der Elemente ausgebildet wurden: Trennung der Substanz in einzelne Gruppen, die danach in unlösliche Verbindungen überführt werden. Der H_2S -Trennungsgang nach Fresenius, erstmals 1841 beschrieben, ist letztlich die Vervollkommnung dieses Prinzips.

Bergman schrieb 1780, daß sein Analysengang zwar mehr Zeit und Mühe erfordere als die Analyse auf trockenem oder gemischtem Wege, die sog. Lötrohranalyse, daß er aber doch zu sicheren und eindeutigeren Ergebnissen führe. Der Traum einer Analyse ohne Probenvorbereitung ist selbst heute noch nicht ganz ausgeträumt. Der Widerspruch von Traum und Realität ist alt, warum sollte er nicht auch in der Analytischen Chemie zu finden sein.

Einer der großen Praktiker der sich formenden analytischen Chemie war Martin Heinrich Klaproth (1743 - 1817). Er war Professor für Chemie bei der Königl. Preuss. Artillerie-Akademie in Berlin. Von ihm stammen Techniken wie der KOH-Aufschluß im Silbertiegel oder der Sodaaufschluß im Platintiegel. Sein besonderer Verdienst ist es, daß er einen neuen Stil für die Veröffentlichungen prägte. Stand vorher allein das Ergebnis im Vordergrund, beschreibt er erstmals mit hoher Detailtreue die experimentelle Vorgehensweise und macht damit seine Ergebnisse für andere nachvollziehbar.

Zur etwa gleichen Zeit lehrte Jöns Jacob Berzelius (1779 - 1848) Chemie an der Universität Stockholm. Er ist nicht nur der Entdecker der Elemente Se, Si, Th und Zr, er prägte erstmals den Begriff "Organische Chemie" und führte in diesem Zusammenhang die Elementaranalyse ein. Er ist auch der erste, der über Fehlergrenzen beim analytischen Arbeiten nachdachte. Seiner Aussage

Die beste Methode ist diejenige, bei welcher die Genauigkeit am wenigsten von der Gewandtheit des Analytikers abhängt. Bei Gesamtanalysen begeht auch der geübteste Chemiker Fehler von 1 - 1,5 %. Sind nur zwei bis drei Komponenten voneinander zu trennen, darf der Fehler 0,5 % nicht überschreiten

ist auch 150 Jahre später nichts hinzuzufügen. Man kann es auch das "Paradoxon der Analytik" nennen: Erst als unbeteiligter Zuschauer ist der Analytiker der perfekte Akteur im analytisch-chemischen Geschehen. Dies macht verständlich, warum häufig nicht alle Einzelheiten der "Probierkunst" verraten werden. Auch der scheinbar logische Umkehrschluß: perfekte Analytik erfordert den Nichtanalytiker, rührt aus diesem Paradoxon her.

Die analytische Chemie war mit dem Beginn des 19. Jahrhunderts ein etabliertes Teilgebiet der Chemie. 1821 brachte C.H. Pfaff, Professor für Chemie und Medizin an der Universität zu Kiel sein "Handbuch der analytischen Chemie für Chemiker, Staatsärzte, Apotheker, Oekonomen und Bergwerks-Kundige" in Altona heraus.

Carl Remigius Fresenius, 1818 - 1897, der Namensgeber des "Fresenius-Preises" der Gesellschaft Deutscher Chemiker, wurde 1841 bei Liebig in Gießen Assistent und übernahm dort die analytisch-chemische Ausbildung der Studenten. Fresenius gründete nicht nur das noch heute im

Familienbesitz befindliche "Laboratorium Fresenius" und im Jahre 1862 die "Zeitschrift für Analytische Chemie" und damit die erste Fachzeitschrift für dieses Teilgebiet der Chemie überhaupt, er faßte auch viele analytische Methoden systematisch zusammen und brachte stöchiometrische Betrachtungen in die Analytik ein. Er forderte die genaue Bestimmung der Elemente in organischen Stoffen, womit ein ungeahnter Aufschwung der organischen Chemie begann. Die Elementaranalyse einer organischen Verbindung ist auch 1992 immer noch eine wichtige Grundgröße für eine Stoffcharakterisierung. Auch die Spektralanalyse, die den Chemikern durch Kirchhoff und Bunsen grundsätzlich bekannt war, wurde von ihm als analytisches Hilfsmittel eingeführt. Seine Philosophie des Arbeitens im Bereich der Analytischen Chemie ist am besten durch folgendes Zitat von ihm beschrieben "das Wissen und das Können muß das Wollen, das redliche Streben nach der Wahrheit, die strengste Gewissenhaftigkeit ergänzen". Exaktheit und damit in heutiger Nomenklatur Richtigkeit war für ihn das Basiselement jeglichen analytischen Arbeitens.

Triumphe feierte die analysierende Chemie in der Phase der Entdeckung der chemischen Elemente. Diese wurden, auch das wird heute häufig übersehen, im Regelfall auf sog. klassischen Wegen der Analytischen Chemie durch Verifizierung der Nichtidentifizierung von 100 % der Bestandteile einer Probe, meistens eines Minerals, geführt. Und selbst die Entdeckung der Kernspaltung durch Hahn und Straßmann im Jahre 1937 beruhte auf der sorgfältigen analytischen Charakterisierung der von Straßmann durchgeführten Experimente. Der mit klassischer analytisch-chemischer Methodik geführte Nachweis von Barium und Lanthan im mit Neutronen bestrahlten Thorium anstelle der erwarteten Transurane belegte die Kernspaltung.

Nach und nach wurden alle grundlegenden Prinzipien der Chemie von der Elektrochemie hin bis zur Spektralanalyse auf ihre analytische Umsetzbarkeit im Sinne des Identifizierens wie der Quantifizierung eines Elements oder einer Verbindung in einem Stoffgemisch eingeführt. Wilhelm Ostwald (1853 - 1932) wurde nach Studium in Dopart 1887 Professor für Chemie an der Universität Leipzig. Er ist der Lehrer u.a. von Nernst, Tamman, Mittasch, Freundlich, Beckman, Bodenstein und Walden. Klassiker von den über 1 000 Veröffentlichungen und Büchern, die Ostwald geschrieben hat, sind die Bücher "Allgemeine Chemie", "Elektrochemie" und das 1894 erschienene nur 187 Seiten starke Bändchen "Die wissenschaftlichen Grundlagen der Analytischen Chemie". Ostwald will darin dem von ihm uneingeschränkt betonten hohen praktischen Wissensstand die notwendigen theoretischen Grundlagen geben. Er führt in die analytische Chemie das Verstehen der benutzten Phänomene auf der Basis der sich entwickelnden physikalischen Chemie ein. Verkürzt kann man sagen, die Stöchiometrie wird um das Gleichgewicht ergänzt. Das teilweise Umbiegen der Analytischen Chemie in ein Randgebiet der physikalischen Chemie blieb späteren Epigonen von Ostwald vorbehalten.

Die neue Dimension: Trennen und Detektieren im Verbund

Ein Sprung in neue Dimensionen der Analytischen Chemie, insbesondere der Analytik der organischen Verbindungen, begann mit der mit einem Nobelpreis für die Engländer Martin und Syngé im Jahre 1952 gekrönten Einführung des chromatographischen Prinzips - der Trennung von Verbindungen durch Verteilung zwischen einer mobilen und einer stationären Phase.

1855 trennte Runge bereits Pflanzeninhaltsstoffe auf Papier, aber erst mit der Arbeit von Tswett (1906 in den Berichten der deutschen Botanischen Gesellschaft erschienen) datiert man den Beginn der Chromatographie, der "Farbschreibung". Richard Kuhn und andere griffen die chromatographische Trennung in ihren Untersuchungen von Naturstoffen auf, ohne jedoch daraus eine grundlegende Systematik zu entwickeln. Verbunden wurde dieses neue Trennprinzip mit einem breitem Spektrum an Detektionsmethoden, vervollkommenet sowohl in Richtung Auflösung wie in Richtung Nachweisstärke, so daß heute die moderne Spurenanalyse organischer Verbindungen unter Nutzung "chromatographischer Methoden" Unvorstellbares nicht nur für den Laien, häufig auch für den Chemiker, zu leisten vermag.

Die Umsetzung und Kombination mehrerer analytischer Prinzipien und damit Erweiterung des linearen Vorgehens in einen mehrdimensionalen Raum erlaubt die Charakterisierung komplexester Stoffgemische. In gleichem Maße hat die systematische Nutzung aller Phänomene der Elektronenübergänge in der Atomhülle der Elemente zu einem breiten Spektrum von analytischen Methoden der Elemente geführt. Erwähnt werden muß in diesem Zusammenhang auch die Nutzung radiochemischer, kernchemischer Phänomene, von denen heute die Aktivierungsanalyse - letztlich der Traum, der uralte Traum der Alchemisten, die Elementumwandlung - einen hohen Stellenwert hat.

Mit dem modernen Potential der Analytischen Chemie können viele Fragestellungen aufgenommen werden, die für die Chemie neu sind, die sich im überwiegenden Maße an der Grenzfläche Chemie und Umwelt ansiedeln. Häufig sind allein über eine Schaffung richtiger, problemorientierter Fakten durch neue analytische Methoden, z.B. in der Dopingkontrolle, allgemeine Prinzipien der Fairness und Gleichheit der Bedingungen umzusetzen.

Wenn darüber hinaus heutzutage die Analytische Chemie mit ihren Methoden hinsichtlich der Stoffauflösung wie auch der Möglichkeit, geringste Stoffmengen nachzuweisen, den klassischen Methoden und Möglichkeiten der Bewertung biologischer Wirkungen davongelaufen ist, bedeutet das lediglich Herausforderung und Notwendigkeit für Biochemie wie Toxikologie und Okotoxikologie, Methoden der Einordnung der durch die Analytische Chemie aufgezeigten Fakten ergänzend bereitzustellen. Die Tatsache, daß im Mittelalter, ja bis in die Neuzeit hinein, der Nachweis eines Schadstoffes, eines Giftes, gleichzeitig bedeutete, daß es in ausreichender wirksamer Konzentration vorlag, ist durch den Fortschritt der Analytischen Chemie aufgehoben worden. Das

Ergebnis "Null", ein Nichtvorliegen einer Verbindung abgeleitet aus dem Unvermögen des analytischen Chemikers, die Verbindung nachzuweisen, gibt es nicht mehr. Die Analytische Chemie kann heute Konzentrationen von bekannten Schadstoffen, nicht nur der Dioxine, nachweisen, die nach all dem, was man weiß, nicht mehr zu beobachtbaren, biologischen Veränderungen, die als Schadwirkungen einzustufen sind, führen.

Auf der anderen Seite wird die Rolle der Chemie als Teil der modernen Industriegesellschaft, von der Produktion bis hin zur Anwendung chemischer Stoffe, ohne die moderne analytische, die zerlegende Chemie, realisiert in Ausbildung und Forschung, nicht mehr auskommen. Wenn sich das chemische Vergrößerungsglas, das die Analytische Chemie häufig nur darstellte, zum Elektronenmikroskop gewandelt hat, heißt es, daß mehr Wissen ein mehr an Nachdenken erfordert. Die Gleichung "weniger Wissen und dafür weniger Nachdenken" hat für die Naturwissenschaft nie Grundlage ihres Selbstverständnisses sein können und wird es auch nicht werden. Nicht der Sehende schafft die Veränderungen, sondern er beschreibt sie nur, sie existieren auch ohne ihn.

Die Frage prägt die Antwort

Vor jeder analytisch-chemischen Untersuchung sollte man sich bewußt werden, was eine "Analyse" als wissenschaftlich-experimenteller Vorgang darstellt. Abstrakt formuliert bedeutet sie, daß ein realer Zustand mit vorgegebenen, in ihrer Aussagekraft abgesicherten Methoden in eine Information über diesen Zustand umgeformt wird. Die gewünschte Information ergibt sich dabei - dies mag auf den ersten Blick paradox erscheinen - mehr aus der vorgegebenen Fragestellung, weniger aus dem eingeschlagenen Analysenweg.

Viele Untersuchungen erledigten oder vereinfachten sich deutlich, wenn vor ihrem Beginn die Fragestellung eindeutig geklärt würde. Bei der Erfassung einer komplexen Umweltbelastung kann die Klärung der Fragestellung bereits aber eine eigene Komplexität enthalten und nur schwierig lösbar sein.

Wenn die Fragestellung definiert ist, muß man vor dem Beginn der eigentlichen chemisch-analytischen Untersuchungen häufig eine weitere Klippe umgehen. An welchem Objekt soll die Fragestellung Untersuchungsobjekte untersucht werden? Die Klärung liegt noch vor der auch in der Öffentlichkeit in den letzten Jahren in ihrer Bedeutung erkannten "Probenahme" (Objektnahme). Nach der Festlegung der relevanten Fragestellung prägt die Festlegung des relevanten Untersuchungsobjektes entscheidend die zu erhaltende Antwort, selbstverständlich vorausgesetzt, daß im nachfolgenden analytisch-chemischen Prozeß keine Kunstfehler unterlaufen.

Bei der Objektauswahl muß bereits der Analytiker prägend mitarbeiten. Aus seiner Kenntnis der nachfolgenden Prozeßschritte kann zu den Vorgaben der Fragestellung eine problemgerechte, problemrelevante Objektauswahl getroffen werden. Wissenschaftlich-technische Traditionen bis hin zu formalen Vorgaben einer "Zuständigkeit" greifen an dieser

Stelle oft sachfremd in den analytischen Prozeß ein.

An die Objektauswahl schließt sich dann die Probenahme an. Sie ist selbst heute noch nicht immer selbstverständlicher Teil des Analysenverfahrens. Dieses beginnt im populären Verständnis erst mit der Bereitstellung des Probenmaterials auf dem Labortisch. Für viele analytische Untersuchungen mag das noch immer mit Berechtigung zutreffen - für die Erfassung einer komplexen Umweltbelastung gilt es fast nie! In diesem Fall beginnt das Analysenverfahren bereits mit der Objektauswahl.

Als eine wissenschaftliche Disziplin fragt die Analytische Chemie vor und nach der Durchführung der Experimente stets nach der Relevanz des Vorgehens, sowohl im experimentell-methodischen Bereich als auch für den Zusammenhang von Fragestellung und Objektwahl. Grundlegend ist ferner die Frage, wie weit das gefundene Ergebnis und der reale Zustand sich decken. Damit ist die Frage nach der Richtigkeit des Ergebnisses gestellt. Gehen die Methodik oder der Experimentator als Variable in das Meßergebnis für einen Zustand ein, liegt ein Fehler vor; das Ergebnis ist in einem unbekanntem Ausmaß falsch.

Sehen wir zuviel?

Wo und wie werden analytisch-methodisches Potential falsch genutzt oder stehen ungenutzt bereit? Die vielfältigen Möglichkeiten und um zahlreiche stoffoptimierte Varianten erweiterten Verfahren der Chromatographie in der flüssigen Phase und in der Gasphase erlauben heute in Kombination die Auflösung komplexer Gemische in einem Maße, wie es noch vor 20 Jahren nicht vorstellbar war. Stoffgruppenoptimierte Trenn- und damit Anreicherungsverfahren ermöglichen im Verbund mit element- oder molekulspezifischen Nachweisverfahren die Bestimmung geringster Konzentrationen und Auflösung selbst sehr komplexer Belastungen. Bei Belastungen durch toxische Elemente ist die Komplexität allerdings deutlich geringer.

Die Feststellung, daß Gold im Meerwasser bei einem Gehalt von $0,001 - 0,01 \text{ mg/m}^3$ und einem Wasserinhalt der Ozeane von $11,4 \times 10^{18} \text{ m}^3$ zu einer Menge von 1,4 - 14 Millionen Tonnen vorliegt, hat die Goldindustrie nicht erschüttert. Weiterhin werden jährlich etwa 900 - 950 Tonnen aus Erz gewonnen wie vor 5 000 Jahren.

Die Problematik des Nachweises von Nanogramm pro Kilogramm ($10^{-9}/10^3 = \text{ppt}$) in einer Umweltprobe wird durch Anreicherungsschritte in eine Bestimmung im Bereich von Nanogramm pro Milligramm ($10^{-9}/10^{-3} = \text{ppm}$) in der Meßlösung transformiert. Diese Anreicherung um den Faktor eine Million ohne wesentliche Verluste und bei optimaler Abtrennung störender Komponenten durchzuführen, ist der Lösungsweg für jede organische Spurenanalyse. Im Bereich von 10 - 30 Nanogramm pro Liter liegt die mittlere Konzentration des Humankanzerogens Benzo(a)pyren im Regenwasser in Europa.

Völlig unabhängig von den nachweisbaren Konzentrationen ist die Frage nach der Richtigkeit eines Analysenergebnisses, d.h. der Größe des Unterschiedes zwischen einem objektiv existierenden Gehalt und dem

gemessenen, d.h. angegebenen Wert für diesen Gehalt. Als Fehler (Richtigkeit) eines Analysenergebnisses ist der Unterschied zwischen wahren Wert, dem real existierenden Zustand und dem Analysenresultat definiert. Als logische Konsequenz aus dieser Definition kann der Fehler einer Bestimmung nur bei Kenntnis oder wenigstens guter Näherung des wahren Wertes angegeben werden. Dieser ist mit vertretbarer Sicherheit nur durch mindestens zwei in allen Teilen unabhängigen Analysenverfahren anzugeben. Methodische Breite ist somit eine Grundvoraussetzung moderner analytischer Chemie.

Ist Gift immer noch Gift?

Was bedeuten die Ergebnisse der modernen analytischen Chemie? Zu der Umsetzung ihrer Ergebnisse gehört das Wissen, daß die Analytische Chemie in ihren Möglichkeiten anderen, bewertenden wissenschaftlichen Disziplinen in der Charakterisierung, d.h. Beschreibung des Zustandes der Umwelt, oft weit voraus geeilt ist. Auf jeden Fall kann man die fließenden Grenzen der analytischen Methodik für z.B. "Dioxine" und "Furane" nicht mehr als Richtzahl für "Grenzwerte" einer Unbedenklichkeit des Auftretens dieser Verbindungen setzen. Diese schwierige Aufgabe muß aufgrund anderer bewertender Kriterien gelöst werden. Für die praktische Umweltpolitik ist ferner die Erkenntnis umzusetzen, daß nachgewiesene Mengen so klein sein können, daß sie möglicherweise toxikologisch unbedenklich und auch juristisch nicht mehr relevant sind.

Für jedes Gift gilt die Vorgabe, daß eine Wirkung an eine bestimmte vorliegende Menge gebunden ist, um eine wirksame Konzentration aufzubauen. Die moderne analytische Chemie hat Methoden entwickelt, die das Vorliegen einer giftigen Verbindung auch weit unterhalb einer wirksamen Menge nachzuweisen erlauben.

Der lange Zeit als gültig angesehene Schluß, daß eine giftige Verbindung, wenn sie nachgewiesen wird, auch als eine wirksame Menge vorliegt, war in der Vergangenheit nur in der Unzulänglichkeit der Analytik begründet und ist durch die modernen Nachweisverfahren aufgehoben worden. Diese Vorgaben muß man berücksichtigen, wenn man durch Funde oder Nachweise Belastungen durch Schadstoffe zu beurteilen hat.

Beachten muß man aber auch, daß als das Risiko einer Gefährdung ganz allgemein das Produkt aus Eintrittswahrscheinlichkeit und Schadensausmaß anzusehen ist. Komplexe Belastungen entziehen sich unserer Beurteilung, globale Effekte entziehen sich der menschlichen Kontrolle - damit ist ein nicht kontrollierbares Schadensausmaß im Ergebnis einer nicht kontrollierbaren Eintrittswahrscheinlichkeit gleichzusetzen. Das Vermeiden des Eintritts durch Vorsorge oder Vorbeugen ist somit die alleinige Möglichkeit, ein Schadensausmaß zu kontrollieren. Unser an der singulären Kausalität geschultes Denken muß neue Wege finden, komplexe Zustände zu erfassen und zu bewerten.

Die moderne Analytische Chemie vor einer Belastungsprobe?

In der Spurenanalyse haben Anreicherungsverfahren, verbunden mit chromatographischen Trennmethode und mit nachweisstarken element- oder molekulspezifischen Detektionsmethoden, neue Dimensionen eröffnet. Die Analyse komplexer Gemische aus Hunderten von organischen Verbindungen ist heute möglich. Die intellektuelle Aufbereitung der Möglichkeiten und Grenzen moderner Analytik hat aber selbst in der Wissenschaft erst teilweise und nur bedingt in der Industrie und Politik begonnen. Ausmaß und Komplexität der Belastungen der Umwelt schreiten schneller voran als die - außer bei dem fachlich un spezifizierten sogenannten öffentlichen Bewußtsein - intellektuelle und damit dann auch wirtschaftlich-politische Umsetzung dieser Veränderungen. Lokale wie auch regionale Gegenbeispiele verdeutlichen nur als Kontrast die generelle Unbefangenheit oder, positiver formuliert, generelle Unsicherheit in dieser Hinsicht.

Die Notwendigkeit von Analysenmethoden, die richtige Ergebnisse auch auf komplexe Fragestellungen liefern können, ist unübersehbar. Die letzten drei Jahrzehnte haben eine Vielfalt von faszinierenden analytischen Entwicklungen gebracht, deren apparativer und finanzieller Aufwand andererseits geradezu ein Eigenleben erfordert.

Die Analytische Chemie wird sich in den 90er Jahren und danach in Lehre wie in Forschung in steigendem Maße an den allgemeinen Grundlagen des analytischen Prozesses orientieren müssen. Methodische Breite und Problem-orientierte Abstraktion müssen in einem Gleichgewicht bleiben. Die Auflösung komplexer Zusammenhänge in überschaubare und damit nachprüfbar Kriterien ist nicht nur für die Analytische Chemie ein Muß im Denken und Handeln. Der analytisch-chemisch arbeitende Chemiker wird darüber hinaus verstärkt bereits bei der Fragestellung und der abschließenden Einordnung und Bewertung der Ergebnisse seiner Arbeit teilnehmen müssen. Diese Aufgaben sind für manchen vielleicht eine ungewohnte Herausforderung, in ihnen liegt aber ein Teil der Zukunft des Faches Analytische Chemie, und damit ihr Beitrag als Teilbereich zum Gesamtfeld der Chemie.