

$W^0(V^4G^0)$. a) Ionenfocussierung mit homogenem Feld und einem Gegenstrom, dessen Geschwindigkeit abnimmt.

b) Sedimentation mit abnehmendem Gegenstrom, eventuell noch erweitert durch eine zusätzliche Verschiebung V^2 zwecks besserem kontinuierlichem Betrieb.

W^0V^3 . Kontinuierliches Zonenschmelzen, wobei man sich auch V^3 in V^2 und V^4 zerlegt vorstellen kann. Allerdings wäre hier V^3 die Bewegungsrichtung eines metallenen Fließbandes, bedeckt mit einer dünnen Schicht erstarrter Schmelze.

Die genannten 10 Verfahren stellen jedoch nur einen Teil der zahlreichen Möglichkeiten dar. Ihre Probleme sind nicht prinzipieller, sondern apparativer, z.T. technologischer Natur. Mit Sicherheit kann man heute sagen, daß die kontinuierlichen, vor allem die Focussierungsverfahren ausgebaut und Eingang in technische Trenn- und Reinigungsprozesse finden werden.

Literatur

1. Baker, C. A., Williams, R. J. P.: J. Chem. Soc. 1956, 2352—2362.
2. Clayer, A., Agneray, L., Vandenbusche, G., Bruni, M.: diese Z. 236, 250—259 (1968).

3. Deutsches Patent Anm. P. 1673 020.4-52 (1967).
4. Italien. Patent Nr. 648 358 (1960).
5. Pauschmann, H.: diese Z. 236, 159—167 (1968).
6. — diese Z. 247, 176—179 (1969).
7. Pichler, H., Schulz, H.: Brennstoff-Chem. 39, 148—153 (1958).
8. Preetz, W., Pfeifer, H. L.: Anal. Chim. Acta 38, 255—260 (1967).
9. Schildknecht, H., Breiter, J.: Chemiker-Ztg. 94, 3—14 (1970).
10. Schuhmacher, E., Friedli, W.: Helv. Chim. Acta 43, 1706—1714 (1960).
11. Solms, J.: Helv. Chim. Acta 38, 1127—1133 (1955).
12. Stahl, E.: diese Z. 221, 3—17 (1966).
13. Sussman, M. V., Huang, C. C.: Science 152, 974—976 (1967).
14. Swensson, H., Agrell, C.-E., Dehlén, S.-O., Hagdahl, L.: Science Tools, 2, Nr. 2, 17—21 (1955).
15. Turina, S., Krajovan, V., Kostomaj, T.: diese Z. 189, 100—106 (1962).
16. — Marjanovic-Krajovan, V., Obradovic, M.: Anal. Chem. 36, 1905—1907 (1964); vgl. diese Z. 228, 55 (1967).
17. Visser, R.: Anal. Chim. Acta 38, 157—162 (1967).
18. Wagener, K.: Z. Elektrochem. 64, 922—928 (1960).
19. Williams, R. J. P.: Privat-Mitteilung.

Dr. H. Pauschmann
Lehrstuhl f. org. Chemie der Universität
D-7400 Tübingen, Nauklerstr. 37a
Deutschland

Kurze Mitteilungen

Automation in und mit der Analytischen Chemie

V. Computergerechte Einteilung der Arbeitsbereiche in der Analytischen Chemie*

Automation in and with Analytical Chemistry. V. Classification of Working Ranges in Analytical Chemistry with Regard to Computers

H. MALISSA und J. RENDL

Institut für Analytische Chemie und Mikrochemie der TH Wien

Eingegangen am 25. Oktober 1971

Die Einteilung der Methoden der Analytischen Chemie aufgrund der zur jeweiligen Untersuchung gelangenden Probenmengen und Konzentrationen ist zur Zeit nicht nur uneinheitlich, sondern auch verwirrend. Hinsichtlich der Probenmengen findet man

* Teil IV: diese Z. 256, 7 (1971)

von unklaren Begriffen wie Makro- bis Subultramikroprobe alle möglichen Bezeichnungen und hinsichtlich der Konzentration von Hauptbestandteil bis Ultramikrospurenbestandteil. Dies erscheint ein auf Dauer unmöglicher Zustand, besonders im Zeitalter der Automation.

Im Hinblick auf die, wegen der Flut der publizierten Arbeiten auf dem Gebiet der Analytischen Chemie dringend notwendig gewordenen Überlegungen zur Speicherung der Informationen bei Datenbanken wird zur Klassifizierung der Arbeitsbereiche in der Analytischen Chemie ein System, welches die Probenmengen und Gehalte (Konzentrationen) beinhaltet, vorgeschlagen.

Geht man von einem logarithmischen Koordinatensystem aus (Abb. 1) und trägt man auf die Ordinate die (zu bestimmenden) Gehalte (Konzentrationen) auf und auf der Abszisse die zur tatsächlichen Analyse gelangenden (oder notwendigen) Probenmengen (also die jeweiligen „Einwaagen“), so erhält man ein

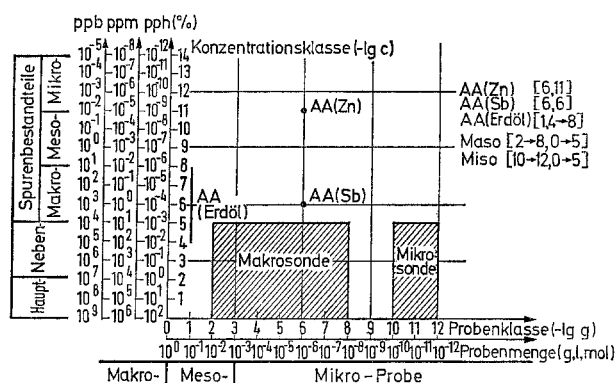


Abb. 1. Koordinatensystem zur Einteilung der Arbeitsbereiche

Schema, wie es z.B. bei Kolthoff u. Mitarb. [1] angeführt ist.

Wenn also die Grenzen der beiden Variablen, also Probe und relativer Gehalt, gegeben sind, so läßt sich daraus auch der absolute Gehalt ersehen, bzw. umgekehrt, wenn wir den absoluten Gehalt erfassen wollen, so können für bestimmte Bereiche (Verfahren) auch die dazu notwendigen Probenmengen im voraus festgelegt werden. Gehen wir weiter und nehmen sowohl für Probenmengen als auch Konzentrationen den jeweiligen negativen Logarithmus, so lassen sich diese Größen in (meist) positiven Zahlen ausdrücken, wie dies Tab. 1 zeigt. Negative Zahlen treten nur dann auf, wenn z.B. Probenmengen über 1 g zum Einsatz gelangen. Dies sind aber bereits Fälle, die zur Minderheit gehören.

Bei dem vorgeschlagenen System gibt die 1. Zahl (oder Zahlen) immer die Probenmenge bzw. Probenmengenbereich an, d.h. die Probenmengenklasse und die 2. Zahl die Konzentrationsklasse.

Zum Beispiel: Bestimmung von x in y ; 3,3 heißt: Die Methode erfordert Probenmengen im Milligrammbereich und erlaubt die Bestimmung in Zehntelprozenten. Nach bisheriger Bezeichnung handelt es sich um eine Mikro- bzw. nach IUPAC-Nomenklatur um eine Milligrammprobe und erlaubt die Bestimmung von Nebenbestandteilen.

Oder 0→2; 6 heißt: Die Methode erlaubt bei Einwaagen von 1–0,01 g die Bestimmung von $10^{-4}\%$ bzw. 1 ppm bzw. 10^3 ppb und wäre nach der bisherigen Bezeichnung eine Makro- bis Halbmikromethode zur Spurenbestimmung.

Das auf die Kolthoffschen Überlegungen zurückgehende Klassensystem hat 3 wesentliche Vorteile:

1. Es enthebt uns der oft unmöglichen, wenig objektiven und sehr verwirrenden Benennung von Arbeitsbereichen wie z.B. „Bestimmung von Mesospuren in Semimikroproben“ usw.

Tabelle 1

Probenmengen		
Klasse (-lg g)	Methodenbezeichnungen	
	IUPAC	Kolthoff, etc.
0	Gramm-	Makro
1	Deci-	Semi-, Meso-, Halbmikro- Mikro
2	Centi-	
3	Milli-	
4	Decimilli-	
5	Centimilli-	
6	Mikro-	Ultramikro, Mikro
7	Decimikro-	
8	Centimikro-	
9	Nano-	Submikro, Ultramikro
10	Decinano-	Subultramikro
11	Centinano-	
12	Pico-	

Probenbestandteile

Klasse (-lg %)	Benennung -bestandt.	pph (%)	ppm	ppb
0→2	Haupt-	100–1	$10^6 - 10^4$	$10^9 - 10^7$
3→5	Neben-	$10^{-1} - 10^{-3}$	$10^3 - 10^1$	$10^6 - 10^4$
6→14	Spuren-	$10^{-4} - 10^{-12}$	$10^0 - 10^{-8}$	$10^3 - 10^{-5}$
6→8	Makrospuren-	$10^{-4} - 10^{-6}$	$10^0 - 10^{-2}$	$10^3 - 10^1$
9→11	Mesospuren-	$10^{-7} - 10^{-9}$	$10^{-3} - 10^{-5}$	$10^0 - 10^{-2}$
12→14	Mikrospuren-	$10^{-10} - 10^{-12}$	$10^{-6} - 10^{-8}$	$10^{-3} - 10^{-5}$

Beispiel: 3.3

Probenmenge = Milligrammeinwaage

Bestandteil = Nebenbestandteil

2. Es ist durchaus computergerecht, denn es lassen sich durch wenige Zahlen, meist 2, in seltenen Fällen maximal 4, sowohl Probenmengen, als auch Gehalte, also auch der Arbeitsbereich vollkommen *beschreiben und speichern* und

3. es ist leicht zu merken und bringt keine Übersetzungsschwierigkeiten.

Damit ergeben sich sowohl für die Automation als auch speziell für Literaturdienste (Abstracts) wesentliche Vorteile.

Literatur

- Kolthoff, M., Sandell, E. B., Meehan, E. J., Bruckenstein, S.: Quantitative chemical analysis, 4. Aufl., S. 8. London: The MacMillan Comp.-Collier. MacMillan Ltd. 1969.

Prof. Dr. H. Malissa

Inst. f. Analyt. Chemie u. Mikrochemie der Techn. Hochschule A-1060 Wien

Getreidemarkt 9, Österreich