

Begriffe und Definitionen zur Automation in und mit der analytischen Chemie

Eingegangen am 16. Januar 1968

Während der Tagung der Fachgruppe „Analytische Chemie“ der Gesellschaft Deutscher Chemiker, der Österreichischen Gesellschaft für Mikrochemie und Analytische Chemie im Verein Österreichischer Chemiker und der Schweizerischen Gesellschaft für Analytische Chemie und Angewandte Chemie vom 13.—16. April 1966 in Lindau (Bodensee) hat sich die Notwendigkeit einer einheitlichen Definition der mit der Automation in und mit der analytischen Chemie zusammenhängenden Begriffe ergeben. Aus dieser Notwendigkeit heraus hat sich das unten angeführte Gremium konstituiert und in mehreren Sitzungen die nun vorliegenden Formulierungen, die als Grundlage zur einheitlichen Anwendung dienen sollen, erarbeitet.

Dieser Entwurf wurde auch der Internationalen Union für Reine und Angewandte Chemie, Division für Analytische Chemie, Kommission für Nomenklatur (Vorsitz: Prof. Dr. R. BELCHER) übermittelt.

1. Bearbeiter der Begriffsbestimmung

Dr. W. FRITSCHÉ, Gesellschaft Deutscher Chemiker, Frankfurt a. M.
 Prof. Dr. G. GOTTSCHALK, Technische Universität Berlin, Berlin
 Dipl.-Ing. G. JELLINEK, Technische Hochschule, Wien
 Dr. R. KAISER, Badische Anilin- und Soda-Fabrik, Ludwigshafen a. Rh.
 Dr. H. KIENITZ, Badische Anilin- und Soda-Fabrik, Ludwigshafen a. Rh.
 Prof. Dr. W. KOCH, August Thyssen-Hütte, Duisburg
 Prof. Dr. H. MALISSA, Technische Hochschule, Wien
 Prof. Dr. E. SCHWARZ-V. BERGKAMPF, Montanistische Hochschule,
 Leoben
 Prof. Dr. W. SIMON, Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich
 Dr. H. ZETTLER, Norddeutsche Affinerie, Hamburg.

2. Vorbemerkung

Sitzungsteilnehmer und Bearbeiter dieses Entwurfes waren sich darüber einig, daß die Definitionen

2. 1. *keine ethischen Werturteile* über Sinn und Zweck der Vorgänge und Geräte

2. 2. *keine Bezugnahmen auf menschliche Tätigkeiten und Fähigkeiten* enthalten sollten. Eine Einbeziehung derartiger Begriffselemente in die Definitionen stellt eine unzumutbare Einschränkung dar, da Maschinen, Instrumente und

Automaten heute bereits Tätigkeiten und Handlungen vollziehen können, deren ethischer Wert umstritten ist und die über menschliche Fähigkeiten weit hinausgehen.

Die vorgeschlagenen Definitionen sind zwar aus der Sicht des Naturwissenschaftlers, insbesondere des analytisch tätigen Chemikers, entwickelt worden, doch waren die Bearbeiter bemüht, auch Meinungen, Anregungen und Vorschläge anderer Gruppen zu berücksichtigen. Ob diese Definitionen in jedem Fall ein logisch und sachlich widerspruchsfreies System darstellen, bedarf sicher noch einer weiteren eingehenden Prüfung. Sie sind daher zunächst nur als Basis für fruchtbare Diskussionen in dem größeren Kreis der Fachkollegen aus Deutschland, Österreich und der Schweiz und anderen Interessenten gedacht. Zuschriften mit ausführlichen Beispielen aus dem jeweiligen Arbeitsgebiet, die eine Bestätigung oder auch eine Problematik der vorgeschlagenen Begriffsbildungen aufzeigen, wären daher sehr zu begrüßen. Es sollte dabei beachtet werden, daß eine *vollständige* Erfassung *aller* Gegenstände von vornherein unmöglich ist und auch nicht beabsichtigt wurde.

3. Begriff der Zusammenhänge

3.1. *Mechanismus*

3.1.3. mechanisch (Adjektiv)

3.2. *Maschine*

3.2.1. Mechanisation (Substantiv)

3.2.2. mechanisieren (Verb)

3.2.3. maschinell, mechanisiert (Adjektiv)

3.3. *Instrument*

3.3.1. Instrumentation (Substantiv)

3.3.2. instrumentieren (Verb)

3.3.3. instrumentell (Adjektiv)

3.4. *Automat*

3.4.1. Automation (Substantiv)

3.4.1.1. Automatisierung

3.4.2. automatisieren (Verb)

3.4.3. automatisch, automatisiert (Adjektiv)

Die Definitionen

3.1. *Mechanismus*

Anordnung beweglicher Objekte mit definierter Wirkung

Erläuterung:

Objekte steht als Sammelbegriff für materielle Teile. So sind Werkzeuge, Teile von Geräten oder Apparaten und sonstige Hilfsmittel wie Spatel, Pinzetten, Lupen, Filterpapiere, Lineale, Wägegäseschen, Pipetten oder Küvetten, für sich allein betrachtet, nur Objekte.

Anordnung ist als Struktur, Aufbau oder Zusammensetzung zu verstehen. Sie kann natürlich, aber auch künstlich bzw. konstruiert sein, und ist stets konkret oder zumindest abstrakt abgrenzbar.

Beweglichkeit der Objekte ist für die *Wirkung* ein notwendiges Merkmal. Ein Mechanismus liegt aber erst dann vor, wenn die Wirkung *definiert* werden kann, das heißt,

ein eindeutig beschreibbares Resultat erzielt wird. Für die Zuordnung des Begriffes ist es sehr wesentlich, daß die Anordnung alle Objekte enthält, die zu einer definierten Wirkung erforderlich sind.

3.1.3. mechanisch: bezieht sich auf Mechanismen

Erläuterung:

Im allgemeinen Sprachgebrauch wird „mechanisch“ auch für „selbständig ablaufende Vorgänge“ verwendet, ohne daß dabei ein Mechanismus im Sinne der obigen Definition vorliegt oder an einen solchen gedacht wird.

„mechanisch“ wird auch z.B. für „künstlich“ im Gegensatz zu „lebendig“ gesetzt. Derartige Zuordnungen sollten in der Zukunft vermieden werden.

Ein Verbum zu Mechanismus existiert nicht; wohl aber wird in Variation zur hier gegebenen Mechanismus-Definition auch „ein definierter Vorgang mit beweglichen Objekten“, d.h. die ablaufende Handlung selbst als ein Mechanismus bezeichnet.

3.2. Maschine. Konstruktion mit Mechanismen zur wiederholten Ausübung einer vorbestimmten Funktion

Erläuterung:

Konstruktion engt den Oberbegriff Anordnung ein und bezieht sich nur auf solche Anordnungen, die erstellt bzw. konstruiert wurden, sowie konkret abgrenzbar sind. Eine „natürliche“ oder eine nur „abstrakt abgrenzbare“ Anordnung ist keine Maschine. Materielle Verbindungen mit der Umwelt in Form von Zuführungen und Abführungen (Energie, Material, Bedienung) widersprechen nicht der Forderung nach Abgrenzung, da jeder materielle Gegenstand zwangsläufig mit der Umwelt in Verbindung stehen muß.

Die Formulierung *mit Mechanismen* soll ausdrücken, daß Mechanismen zwar unbedingt in einer Maschine enthalten sein müssen, jedoch auch noch weitere Objekte als Bauteile in der Konstruktion verwendet werden können, die nicht Teile eines Mechanismus sind.

Wiederholte Ausübung einer Funktion ist ein notwendiges aber noch nicht ausreichendes Kriterium für eine Maschine. Sie schließt zunächst solche Konstruktionen aus, die für einen einmaligen Handlungsablauf bestimmt sind.

Funktion ist im Sinne von Arbeit, Leistung oder Tätigkeit zu verstehen. *Vorbestimmt* enthält die Einschränkung, daß die Funktion einer Maschine oder das Resultat der Maschinen-Handlung eindeutig vorhersagbar sein muß. Eine Konstruktion mit bewußt eingebauten Zufalls-Mechanismen ist keine Maschine. Zwangsläufig sind Zufallselemente oder sogar Zufalls-Mechanismen bei Betrieb einer Maschine nicht auszuschließen. Man spricht in solchen Fällen von „Störungen der Funktions-Ausübung“ und trifft Maßnahmen, das „nicht mehr einwandfreie Funktionieren“ zu beheben.

3.2.1. Mechanisation: Einsatz von Maschinen

3.2.2. mechanisieren: einsetzen von Maschinen

3.2.3. maschinell (mechanisiert): bezieht sich auf Maschinen

3.3. Instrument. Konstruktion, die Eigenschaften und Zustände in phänomenologisch verwertbare Information überführt

Erläuterung:

Konstruktion wurde bereits im Rahmen der Begriffsgruppe „Maschine“ ausführlicher erläutert. Diese Erläuterungen gelten auch für die Begriffsgruppe „Instrument“,

wobei lediglich für das Wort „Maschine“ jeweils das Wort „Instrument“ zu setzen ist. Ein Instrument kann als Bauteil auch Teil-Konstruktionen beinhalten, die für sich allein eine Maschine darstellen.

Eigenschaften und Zustände stehen als Begriffe für definierte Variable oder Konstante, physikalische Merkmalsgrößen.

Überführen steht als Sammelbegriff für die Handlungsfolge Aufnehmen von Eigenschaften/Wandeln in Informationen/abgeben bzw. Anzeigen der Informationen. Fehlt in einer Konstruktion auch nur ein Teil dieser Handlungskette, so liegt von vornherein kein Instrument vor.

Der vollständige Überführungsprozeß ist ein notwendiges aber noch nicht ausreichendes Kriterium für ein Instrument.

Phänomenologisch verwertbare Informationen bedeuten eine weitere Einengung des Begriffes „Instrument“ auf solche Konstruktionen, die Informationen in einer Erscheinungsform liefern, die direkt weiterverarbeitet werden kann. Ähnlich wie die Maschine muß ein Instrument ein eindeutiges und vorhersagbares Merkmal liefern. Eventuell einwirkende Zufallselemente oder Zufalls-Mechanismen sind, wie bei einer Maschine „Störungen des Überführungsprozesses“.

3.3.1. Instrumentation: Einsatz von Instrumenten

3.3.2. instrumentieren: einsetzen von Instrumenten

3.3.3. instrumentell: bezieht sich auf Instrumente

3.4. *Automat. Konstruktion mit Mechanismen und Instrumenten, die ein in sich informativ geschlossenes System bildet*

Erläuterung:

Konstruktion wurde bereits bei den Begriffsgruppen „Maschine“ und „Instrument“ als ein konkret abgrenzbares Gebilde erläutert. Neben den unbedingt erforderlichen Mechanismen kann ein Automat auch Bauteile enthalten, die einer Maschine oder einem *Instrument* entsprechen.

In sich informativ geschlossen ist eine sehr wesentliche Einengung für den in einem tatsächlichen Automaten ablaufenden Prozeß. Man kann auch sagen, daß ein Automat diesen Prozeß nach dem Input/Output-Prinzip vollziehen muß. Dieses Prinzip besagt, daß materielle und/oder „informativ Eingangsgrößen“ intern ohne jegliche weitere äußere Bedienungseingriffe verarbeitet werden und die Resultate erst wieder als definierte materielle und/oder informative Ausgangsgrößen in Erscheinung treten. Der Prozeß wird häufig durch Zusatzworte wie z. B. „Rechenautomat“ oder „Titrierautomat“ ausdrücklich gekennzeichnet. Im Gegensatz zu einer Maschine oder einem Instrument brauchen die einzelnen Handlungsschritte in einem Automaten keinesfalls nach Art und Dauer vorhersagbar zu sein. Der Ablauf wird vielmehr durch interne Regel- und Steuervorgänge in vorgegebenen Grenzen variabel gestaltet. Hierzu findet innerhalb des Automaten eine Vor- und/oder Rückkopplung von Informationen statt, der die Mechanismen in ihrer Wirkungsgröße verändert und aufeinander abstimmt. Es ist dabei für die Abläufe entscheidend, daß auch die jeweiligen Eigenschaften des zu verarbeitenden Objektes direkt ermittelt und in den Informationskreislauf einbezogen werden.

Bei festgelegten Eingangsgrößen spricht man auch von der Gruppe der Programm-Automaten. Automaten-Konstruktionen zur Eliminierung variabler Eingangsgrößen in Form von Zufalls-, Abweichungs- oder Störgrößen werden auch als Regel- bzw. Steuer-Automaten bezeichnet. Bei vielen Automaten-Konstruktionen kommen jedoch beide Konzeptionen zum Tragen.

3.4.1. Automation: Einsatz von Automaten

3.4.1.1. Automatisierung: Einsatz von Automaten unter *Hinzuziehung der Kybernetik*

3.4.2. automatisieren: einsetzen von Automaten

3.4.3. automatisch (automatisiert): bezieht sich auf Automaten

Dr. W. FRITSCHÉ
GDCh-Geschäftsstelle
6000 Frankfurt, Postfach 9075

Photometrische Titrationsen unter Verwendung von Chrom(II) in alkalischer Lösung

E. R. GROENEVELD und G. DEN BOEF

Laboratorium für analytische Chemie der Universität von Amsterdam

Eingegangen am 27. Dezember 1967

Summary. A report is given on the application of photometric end-point indication for reductometric determinations with Cr(II).

Performance in weakly alkaline solution in the presence of EDTA makes use of the strong reduction properties of the Cr(II)-EDTA complex. Examples are given for the determination of mg-quantities of inorganic anions and organic compounds with reducible groups. An error calculation is also presented.

Einleitung

Chrom(II) findet als reductometrisches Reagens in der analytischen Praxis noch regelmäßig Verwendung. Neben der Bestimmung von Kationen in Stählen, Legierungen und Erzen, wobei die entsprechenden Metalle zu einer niedrigeren Wertigkeitsstufe reduziert werden, findet man in der Literatur auch eine Vielfalt maßanalytischer Verfahren zur Bestimmung von Anionen und Stoffen wie O_2 , H_2O_2 usw. Ferner wird Cr(II) neben Ti(III) in der organischen Analyse angewandt u. a. bei der Bestimmung von Diazoniumsalzen, Azo-, Nitro- und Nitrosoverbindungen [2, 12]. Ein allgemeiner Überblick über Titrationsen mit zweiwertigem Chrom wird von BERKA u. Mitarb. [1] gegeben.

Die Bestimmungen mit Cr(II)-Maßlösungen werden fast nur in saurem Medium unter Ausschließung von Luftsauerstoff ausgeführt. Die Endpunktsanzeige erfolgt gewöhnlich potentiometrisch, in einigen Fällen auch visuell [10]. Zur Erzielung quantitativer Resultate ist es meistens notwendig, bei erhöhter Temperatur zu arbeiten oder ein indirektes Verfahren mit überschüssigem Cr(II) anzuwenden.