

Automation in und mit der analytischen Chemie. III*

Zur Frage der Programmiersprachen und Symbolik

H. Malissa und G. Jellinek

Institut für Analytische Chemie und Mikrochemie der Techn. Hochschule, Wien, Österreich

Eingegangen am 19. März 1969

Automation in and with Analytical Chemistry. III. Problems of Programming Languages and Symbolism. After a short introduction to the problem, the theory of programming languages is discussed, the earlier suggestions [6] of a sign-symbolism are extended and concentrated in symbol-tables. An alphabetic symbolism as a base for a programming language for analytical chemistry is given.

Zusammenfassung. Nach einer Einführung in die Problemstellung wird die Theorie der Programmiersprachen kurz behandelt, die früheren Vorschläge [6] zu einer Zeichensymbolik erweitert und in Symboltabellen zusammengefaßt. Erörterungen zu einer Buchstabensymbolik als Grundlage einer Programmiersprache für die analytische Chemie schließen die Arbeit ab.

1. Einleitung

Eine, wenn auch nur überschlagsmäßige Schätzung der Zahl der bekannten chemischen Verbindungen liegt bei 4000000, wovon vielleicht 3000000 organische sind. Römpp [8] gibt für die Zahl der organischen Verbindungen folgende Ziffern an:

1865	3000
1880	15000
1910	150000
1935	350000
1968	3000000 (Schätzung)

Daraus ersieht man, wieviel Informationen auf dem Weg der verschiedensten Analysen erbracht werden müssen, um zu Identifikationen, Definitionen und echten Zuordnungen dieser Verbindungen zu kommen. Allein in den letzten 30 Jahren wurden im Durchschnitt täglich etwa 250 neue organische Verbindungen geschaffen, die mehr oder minder gut analysiert, definiert und in die Nachschlagewerke aufgenommen wurden. (Beilstein, Zentralblatt, Chemical Abstracts, usw.)

Neueste Schätzungen haben ergeben, daß bereits jetzt pro Minute eine chemisch-wissenschaftliche Arbeit produziert wird [10], und untersucht man die Zahl in Richtung analytischer Chemie weiter, so ist für 1967 festzustellen, daß allein die Zeitschriften: Zeitschrift für Analytische Chemie, Analytical Chemistry, Analytica Chimica Acta, Talanta, Analyst, Mikrochimica Acta und Microchemical Journal auf über 12000 Seiten analytisch-chemische Themen

abhandeln. (1967 ist mit über 2300 Seiten die Zeitschrift für Analytische Chemie daran zu 17,5% beteiligt.) Das heißt, es wurden allein in die genannten Zeitschriften 40 Seiten wissenschaftliche Texte pro Tag aufgenommen. Alle diese Arbeiten und viele mehr, die in weniger großen Zeitschriften „kursieren“, müssen, sollen sie nicht brachliegen, erfaßt und auffindbar gespeichert werden. Es ist einzusehen, daß es schon heute kaum mehr möglich ist, auch nur die Zusammenfassungen der Publikationen zu lesen, geschweige denn zu „verdauen“. Was liegt näher, als zu versuchen, dafür eine allgemeingültige, semantisch-pragmatisch einwandfreie „Zusammenfassungssprache“ zu schaffen? Ein derartiges Unternehmen kann aber nur auf breiter Basis in wissenschaftlichen Fachgremien durchgeführt werden.

2. Zur Theorie von Programmiersprachen

Um also die immer notwendiger werdende Verbindung zwischen analytischer Chemie und solchen Sprachen, die letzten Endes auf eine Programmiersprache hinauslaufen, zu schaffen, soll hier auf das zum Beispiel von Zemanek [11,12] untersuchte allgemeine Gebiet der Theorie der Programmiersprache hingewiesen und im Hinblick auf die analytische Chemie behandelt werden.

Danach sind jedem Entwurf solcher formeller Sprachen 3 Wurzeln zugrunde zu legen, nämlich die Theorie der Sprache, die der Algorithmen, also der Rechenvorschriften, und die der Verarbeitungssysteme, welche die mathematische Formulierung der Apparatur behandelt. Die Theorie der Sprache,

* II. Mitt.: diese Z. 238, 81 (1968).

Semiotik genannt, gliedert sich in Syntax, Semantik und Pragmatik. Diese drei Begriffe haben speziell bei der Schaffung einer Zusammenfassungssprache Berücksichtigung zu finden.

Die Syntax behandelt die Beziehungen der Zeichen einer Sprache untereinander, ohne Rücksicht auf deren Bedeutung. Sie entscheidet die logische Richtigkeit von Beziehungen und Ausdrücken, und nur, was ihr entspricht, ist in der jeweils betrachteten Sprache ein korrekter Satz. Hier lassen sich grundsätzlich zwei Funktionen unterscheiden:

1. Die Erzeugung korrekter Sätze oder korrekter Programme für einen Rechenautomaten und/oder eine Apparatur.

2. das automatische Erkennen, ob vorgelegte Sätze bzw. Programme korrekt, also syntaktisch richtig sind.

Die Semantik behandelt die Beziehung der Zeichen und Wörter zu den Objekten, die sie bezeichnen, also ihre Bedeutung. Diese Bedeutung kann auf zweierlei Art festgelegt werden, entweder durch den menschlichen Begriff, wie ihn die Erfahrung lehrt, oder aber durch die Wirkung, die ein Satz in einem Automaten hervorruft. In der Mathematik und bei den Programmiersprachen überdecken sich diese beiden Arten der Bedeutung weitgehend.

Die Pragmatik umfaßt die subjektive Bedeutung der Zeichen und die subjektive Richtigkeit der Sätze. Sie schließt die Semantik genauso ein, wie die Semantik die Syntax einschließt, und behandelt die Beziehung der Zeichen zum Menschen.

Jede Programmiersprache geht von der gewöhnlichen und der logischen Algebra aus, es werden die Hintergedanken präzisiert und all das ergänzt, was in den bisher üblichen mathematischen Texten „zwischen den Zeilen steht“, als bekannt vorausgesetzt oder der Intuition des Lesers überlassen wird. Ein Automat kann einen Text in einer Programmiersprache nur dann verstehen, wenn er ihm lückenlos geboten wird, d.h., er muß ihn selbsttätig interpretieren können und aufgrund dieser Interpretation die gewünschten Funktionen abwickeln. Geht man vom numerischen Kern aus, wie er für wissenschaftliche (ALGOL, FORTRAN) und kommerzielle Sprachen (COBOL) typisch ist, so besitzen Programmiersprachen folgende Eigenheiten:

1. Die „Variablen“ sind als Namen von Speicherzellen definiert. In diesen Speicherzellen sind der Reihe nach die aktuellen Werte der Variablen untergebracht.

2. „Ausdrücke“ umfassen Zahlen, Namen und Operatoren, wie jene für die Grundrechnungsarten

(+, -), für die logische Verknüpfungen (und, oder) und für die Größenrelationen der Zahlen (>, <).

3. „Anweisungen“ bewirken die Auswertung von Ausdrücken unter Benutzung der aktuellen Werte. Eine Anweisung wird nicht mit dem Gleichheitszeichen (=) der Algebra angeschrieben, sondern mit dem Ergibtzeichen (:=) (ALGOL), das den Zeitablauf der Auswertung miteinbezieht. $\times := \times + 1$ bedeutet, daß der aktuelle Wert von \times durch die Anweisung um 1 erhöht wird. Es gibt bedingte Anweisungen, die ausgeführt werden, wenn ein logischer Ausdruck als „wahr“ erkannt wird und übersprungen, wenn der Ausdruck „falsch“ ergibt. Weitere Anweisungen ermöglichen Sprünge im Programm und Sprünge von und zu der Programmbibliothek des Automaten.

4. „Vereinbarungen“ definieren die Natur der auftretenden Variablen (z.B. ganze, reelle Zahlen, Vektoren). Die Vereinbarung sorgt für die Reservierung des erforderlichen Speicherraums im Rechner und für die Zuordnung von Namen und Speicherzellen.

Ausdrücke, Anweisungen und Vereinbarung werden nach strengen Regeln gebildet, die ihrerseits wieder genau beschrieben werden müssen. Das besorgt eine die Programmiersprache beschreibende Metasprache.

Am weitesten entwickelt sind Programmiersprachen für Rechenprozesse. Dazu gehören die eben erwähnten FORTRAN, ALGOL, COBOL. Für die industrielle Automation wurde die industrielle Automationsprache APT entwickelt. Diese dient der Steuerung von Werkzeugmaschinen und bringt die Vorteile der Programmiersprachen in den technisch-industriellen Sektor. Diese Sprache APT (automatically programmed tools) ist in ihrer Entwicklung praktisch soweit wie ALGOL oder FORTRAN. Um sie kurz zu charakterisieren, sei angeführt, daß sie die gleichen Ausdrücke, Anweisungen und Vereinbarungen besitzt wie ALGOL oder FORTRAN. Zu diesen numerischen bzw. arithmetischen Zügen kommen aber noch die besonderen für die numerische Werkzeugsteuerung. So enthält sie z. B. Ausdrücke für die Geometrie des Werkstückes und die der Bearbeitung, weiterhin enthält sie Anweisungen für die Positionierung und Bewegung von Werkzeugen sowie Vereinbarungen betreffend Toleranzfestlegung usw. [9]. So ist das Bild einer Anweisung zum Bohren eines kreisrunden Loches von 7 mm Durchmesser bei den Koordinaten 3, 7, 9 das folgende

CIRCLE/CENTER, (POINT/3, 7, 9), RADIUS, 7.

Bei normalen Rechenanlagen ist die Realisierung eines solchen großen Sprachsystems schwierig und es werden Teilsysteme für spezielle Aufgaben definiert.

3. Eine Sprache für die analytische Chemie

In Anlehnung an die Sprache APT können sich allgemeine Erörterungen über eine im Bereich der Chemie und speziell der analytischen Chemie zu schaffende Programmiersprache anschließen. Die Befehle einer solchen Sprache werden im arithmetischen Teil in einer der heute üblichen Programmiersprachen gegeben. Spezielle Befehle müssen wohl aus dem Bereich der Chemie, also z. B. aus der „analytischen Technologie“ entlehnt werden. Dazu seien z. B. Befehle zum Erhitzen, zur Zugabe von Reagentien, Abfrage von Temperatur und Zeiten erwähnt. Allerdings müssen gewisse Eigenheiten des Computers bezüglich der Eingabe eingehalten werden, wie beispielsweise der Grundsatz, daß alle Anweisungen nur sequentiell, in einer Zeile eingegeben werden können.

Eine Beschäftigung mit den Programmiersprachen für die analytische Chemie darf die Möglichkeit, den Rechenautomaten auch zur Literaturübersetzung heranzuziehen, nicht aus dem Auge verlieren.

Perschke [7] zeigt dazu den (mühsamen) Weg über die automatische Sprachenübersetzung nach dem Verfahren der „rohen Gewalt“ = „brute force“, wobei Wort für Wort über photoskopische Platten und einen relativ schnellen Zugriff von Wörterbuchinformationen übersetzt wird. Dieses System, von der IBM als „bi-directional single-pass translator“ = Einzelschrittübersetzer in beiden Richtungen bezeichnet, erlaubt also die Übersetzung von einer Sprache in die andere, fordert aber neben versierten Analytikern noch Mathematiker und Linguisten.

Ein denkbarer Weg, das Problem praktisch zu lösen, wobei natürlich auch ein Einblick in eine „Sprache“ für die analytische Chemie gewonnen werden kann, geht über die Erarbeitung einer Zeichensymbolik für die analytische Chemie. Unser bereits skizzierter Vorschlag [6] besitzt den Vorteil, daß zumindest für das Lesen von Zusammenfassungen keine Fremdsprachenkenntnisse erforderlich sind, um den wesentlichen Inhalt einer beschriebenen Methode zu erkennen.

4. Erweiterung der Zeichensymbolik, Symboltabellen

In Erweiterung der erwähnten Vorschläge bringen die im Anhang (S. 5) gegebenen Symboltabellen weitere Einzelheiten. Diese Tabellen können noch keinen Anspruch auf Vollständigkeit nach den Grundsätzen für künstliche Sprachen erheben und beinhalten eine gewisse Problematik, die nur in einem größeren Gremium gelöst werden kann. Das Hauptziel dieser und aller anderen Symboltabellen liegt in der

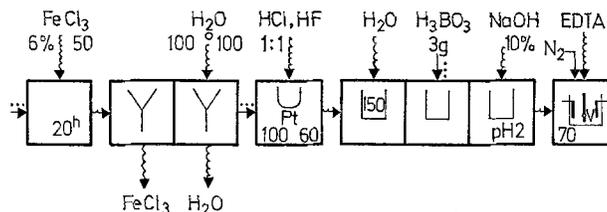


Abb. 1. Symbolschema eines komplexometrischen Analyseverfahrens (vgl. die entsprechende Zusammenfassung)

Schaffung einer Diskussionsgrundlage. Eine ähnliche Vorgangsweise wurde auch bei der Erarbeitung einer einheitlichen Nomenklatur für die Automation in und mit der analytischen Chemie gewählt [3].

Die folgende Zusammenfassung in englischer Sprache hat unter Verwendung der Symboltabellen und der Symbolik von DIN-Blatt Nr. 7091 [1] für die Materialströme etwa das in Abb. 1 gezeigte Aussehen:

6488. Complexometric determination of ferric iron in Rennslag, with potentiometric indication. J. Vorlíček and F. Vydřa (Res. Inst. ŽDH, Mnřek Pod Brdy, Czechoslovakia). *Sb. Praci VÚŽDHE*, 1964, 5 147–154.—*Procedure*—Remove metallic iron by treating the powdered sample (1 g) for 20 hr. with FeCl_3 soln. (6%) (50 ml). Filter the mixture, wash the residue with hot H_2O (100 ml), and heat it in a platinum crucible with HCl/HF (1:1) for 1 to 2 hr. on a sand bath; repeat the procedure, if necessary. Dilute the resulting soln. with twice-distilled water (oxygen-free) to 150 ml, add H_3BO_3 (2 to 3 g), and adjust the pH to 1.5 to 2 by adding NaOH soln. (10%). Heat the soln. at 60° to 70°C, and titrate with 0.05 M EDTA in an atmosphere of N_2 , potentiometrically or by the dead-stop method.

5. Analytische Berechnungen und Computer

Die Möglichkeiten, die der Einsatz des Computers heute auch für den analytischen Chemiker bietet, wirken sich auch auf die Form aus, in der z. B. analytische Berechnungen durchzuführen, welche Zeichen zu verwenden und wie chemische Formeln anzuschreiben sind. Dabei muß vor allem auf die Eigenart der Ein- und Ausgabeeinheiten heute zur Verfügung stehender Rechner Rücksicht genommen werden. Diese Einheiten sind nur imstande, einzeilige Sequenzen von Buchstaben, Ziffern und Zeichen zu lesen und zu schreiben. Es fallen also die Möglichkeiten des Anschreibens von Hochzahlen, von tiefgestellten Indices und meist auch alphabetfremder Buchstaben weg. Daraus ergibt sich, daß die Schreibung von a^n z. B. lautet $A^{**}N$ (FORTRAN). Für die Anschreibung von Verbindungen mußte eine neue Form gefunden werden, bei der die Indices mit den Elementsymbolen in einer Zeile stehen. Dabei wird zur Vermeidung von Verwechslungen dafür gesorgt, daß zwischen zwei Elementzeichen einer Verbindung ein Zwischenraum

freigelassen wird, sofern nicht durch eine Zahl oder eine Klammer Eindeutigkeit vorliegt. Es würde also z.B. Ammoniumsulfat die Formel haben: $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$. Keine besonderen Schwierigkeiten ergeben sich für die Anschreibung alphabetfremder Buchstabensymbole, die durch Anschreibung ihres Namens z.B. für β — Beta gekennzeichnet werden. Die angeführten Maßnahmen sind deshalb notwendig, weil bei der Konstruktion der Ausgabedruck- und -schreibmaschinen keine Rücksicht darauf genommen wurde, daß die Lesbarkeit von ausgegebenen Daten durch eine rein lineare Anschreibungsweise schwer beeinträchtigt wird. Es sollte daher gerade auch im Hinblick auf Anwendung einer Programmiersprache für die Chemie mit Nachdruck auf eine Änderung dieses Zustandes hingewirkt werden. Denn, wie es scheint, wird durch die unübersichtliche Anschreibungsweise der durch Automation gewonnene Vorteil der erhöhten Zahl der Informationen wieder durch schlechte Lesbarkeit teilweise verloren.

Für die analytisch-chemischen Berechnungen ist der Einsatz der Programmiersprachen FORTRAN und ALGOL ausreichend [5].

Es dürften allerdings die geringeren Ausgabemöglichkeiten des ALGOL dem FORTRAN gewisse Vorzüge zugestehen, das sich durchaus eignen wird, bis die neue Programmiersprache PL/1 das jetzige System ablöst.

Es wird für den praktischen Gebrauch nützlich sein, häufig wiederkehrende analytische Berechnungen in Form einer Programmbibliothek einsatzbereit zu halten. Dazu zählen etwa folgende Rechnungen:

Prozentberechnungen, Umrechnungen von Mol-, Gewichts- und Volumsprozenten,

Ausgleichsrechnung,

Lösung von Gleichungen mehrerer Unbekannter, statistische Berechnungen,

Kurvenintegration und -differentiation,

Korrekturberechnungen aller Art,

Auswerteverfahren für Spektren aller Art [2].

Für den Einsatz einer solchen Sprache wäre allerdings die Forderung nach Verwendung einheitlicher Buchstabensymbole für Variable und Konstanten nicht zu hoch, wohl eine Aufgabe, der nur im großen Rahmen Erfolg beschieden sein kann. Bis dahin muß bei der Angabe von Programmen für analytische Berechnungen eine Liste mit den verwendeten Variablen und Konstanten und ihrer Bedeutung vorgelegt werden.

6. Von der Zeichensymbolik zur Programmiersprache

Um von der von einem Computer schwierig zu verarbeitenden Zeichensymbolik zu einer Buchstabensymbolik und zu einer Programmiersprache zu kommen, gibt es die Möglichkeit, ein zu beschreibendes Verfahren in codierter Form auf Lochkarten anzugeben. Dazu sei als Beispiel das in Abb.2 dargestellte Teilschema erörtert.

Zur Kennzeichnung organischer Verbindungen für die Bearbeitung auf dem Computer kann die nach der Genfer Nomenklatur vorzunehmende Beschreibung einer organischen Verbindung durch Kombination aus den sie aufbauenden Gruppen dienen. Eine organische Verbindung wird durch eine Lochkombination in den Spalten und Zeilen der Lochkarten angegeben, wobei nach dem Schema (Abb.2) vorgegangen wird und jeder Gruppe, die zum Aufbau einer Verbindung beiträgt, entsprechend der Lage auf dem Schema ein Platz auf der Lochkarte zukommt. Derartige Schemata werden heute in der Industrie häufig angewandt. Es ist damit die Möglichkeit gegeben, mit Hilfe dieses Codes praktisch jede organische Verbindung durch eine Lochkombination zu beschreiben und daher bei der Suche nach einer bestimmten Verbindung nur mehr die Arbeit des Tabellierens zu verrichten. Der einzige Nachteil dieses Verfahrens besteht in der Codierung, die nur von einem voll ausgebildeten Chemiker durchgeführt werden kann.

Nach Art des aufgezeigten Schemas könnte auch in der Verfahrensbeschreibung vorgegangen werden, zu der die vorgeschlagene Zeichensymbolik eine Vorstufe bildet. Jedem Einzelschritt der Analyse wird ein Platz in der Zeilen-Spaltenmatrix der Lochkarte zugeordnet. Dabei muß, um die Abfolge des Verfahrens zu gewährleisten, eine Unterteilung in Bereiche (z.B. Probenahme-Probevorbereitung usw.) vorgenommen werden.

Damit ist die Möglichkeit gegeben, jeder Probe einen Kartenblock bestehend aus Probenummern-, Substanz-, Verfahrens- und Auswertekarte beizustellen und den von der Probeeingabe bis zur Ausgabe der Analysenresultate codierten Vorgang zu kontrollieren.

Beim Schritt zu einer Programmiersprache für die analytische Chemie ist nach dem Prinzip einer Blockprogrammierung vorzugehen, wo jeder Verfahrensschritt durch eine Buchstabenkombination, die intern ein gewünschtes Programm ablaufen läßt, aufgerufen und durchgeführt wird. Das würde bedeuten, daß jedem Symbol in den Tabellen eine Buchstabenkombination entspricht, die den Automaten zur Durchführung aller den aufgerufenen Verfahrens-

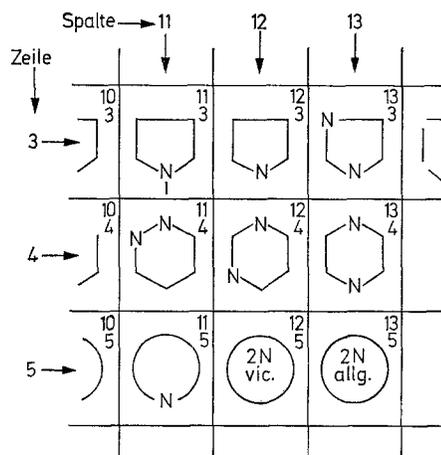


Abb. 2. Schema zur Codierung organischer Verbindungen auf Lochkarten

schritt aufbauenden Teilprozesse veranlaßt. Dabei müssen neben dieser Buchstabenkombination in Klammern die variablen Parameter der Teilprozesse in einer genormten Reihenfolge aufscheinen, wie z. B.: Zeitdauer in Sekunden, Temperaturen, Drücke. In weiteren Klammern ist dann der zu diesem angegebenen Schritt führende Verfahrensschritt und der nachfolgende zu nennen, wodurch auch Verzweigungen in einem vermaschten Netz beschrieben werden können.

Als Blockprogramme, also ohne die dazugehörigen Unterprogramme (wie z. B. Gaseinleitung bei der Titration), würde das in Abb. 1 beschriebene Analyseverfahren etwa folgendes Aussehen haben.

Die zugegebenen Substanzen und ihre Mengenverhältnisse werden durch folgende Kurzbezeichnungen vereinbart:

L 1	FeCl ₃ -Lösung (6% ig); 50 ml
L 2	Wasser; 100°C 100 ml
L 3	HCl/HF-Lösung (1:1)
L 4	Wasser; zweifach destilliert
L 5	NaOH (10% ig)
L 6	ÄDTA (0,05 M)
S 1	Probe; 1 g
S 2	H ₃ BO ₃ ; 3 g.

Weitere Abkürzungen geben die Anweisungen für die einzelnen Analysenschritte:

SAMP	Probeneinwaage
ADD	Zugabe
SOLV	Lösen
DILUT	Verdünnen
FILT	Filtrieren
WASH	Waschen
HEAT	Erhitzen
IF	lenkt die pH-Kontrolle.

Das Programm lautet dann etwa:

Schritt	Befehl	Erklärung
0	START	
1	SAMP S 1	
2	ADD L 1	
3	SOLV (1200)	1200 = 20 h
4	FILT	
5	WASH L 2	
6	ADD L 3	
7	HEAT (100; 60)	auf 100°C, 1 h
8	DILUT L 4 (150)	Verdünnung auf 150 ml
9	ADD S 2	
10	ADD L 5	
11	IF (PH.LT.2.0)	Wiederholung wenn pH 2
	GO TO 10	
12	TITR L 6 (70)	Titration bei 70°C
13	END	

Symboltabellen

1. Probenahme

Die Gegebenheiten der Probenahme weisen eine große Vielfalt auf. Es werden daher nur zwei für die nachfolgende Analyse entscheidende Möglichkeiten definiert.

kontinuierlich	
diskontinuierlich	
Probenteilung, kontinuierlich	
<i>Beispiel:</i> Entnahme im by pass, kontinuierlich	

2. Analytische Operationen

Diese Symbole kennzeichnen innerhalb von Analyseverfahren immer wiederkehrende Operationen, die vor der eigentlichen „Analyse“ notwendig sind. Weitgehend sind diese Symbole durch das DIN-Blatt Nr. 7091 [10] definiert. Zur Unterstützung ihrer Anschaulichkeit werden ihnen Symbole eingeschrieben. Eingeschriebene Zahlen deuten die Arbeitsbedingungen an (z. B. Zeit, Temperatur usw.).

Erhitzen, Trocknen (links: Temperatur, °C; rechts: Zeit, min)	
Verbrennung	
Schmelzaufschluß	
Lösen	

Lösen, elektrolytisch	
Fällen	
Abscheiden, elektrolytisch	
Filtrieren	
Zentrifugieren	
Waschen	
Extrahieren, Verteilen	
Destillieren	

3. Sensoren und Detektoren

Zum Aufbau der Symbole hierfür ist vorher die Definition von Grundsymbolen notwendig, wie z. B. bei den Strahlungsmaterie-Sensoren die Strahlungsarten, Anregungsarten usw. Die Detektoren sind in Temperatur-, elektrische, Photo- u. a. Detektoren unterteilt und ihre Symbole entstammen teilweise der Elektrotechnik [4].

Aggregatzustände

fest	s
flüssig	l
gasförmig	g

Strahlungsart

infrarot	IR
sichtbar	VI
ultraviolett	UV
Röntgen-	X
Gamma-	γ
Elektronen	e^-
Positronen	e^+
Neutronen	n
Protonen	p
α -Teilchen	α
Ionen	\oplus, \ominus

Strahlung

emittiert	
absorbiert	
polarisiert	
Beispiel: polarisierte UV-Strahlung	

Anregungsart

Flamme	
Bogen	
Funke	

Optische Trennmedien

optisches Filter	
optisches Prisma	
optisches Gitter	

„Küvetten“

Küvette, Probe	
Flamme	

Beispiele

Reflexion	
Absorption	
Diffraktion	
Streuung	

Detektoren

Waage	
Thermometer	
Thermoelement	
Elektrode	
polarisierte Elektrode	
ionenspezifische Elektrode (H ⁺)	
Tropfelektrode	
Halbelement	
Zählrohr	

Zählkristall	
photoelektrisches Bauelement	
Flammenionisationsdetektor	
Wärmeleitfähigkeitszelle	
elektrische Leitfähigkeitszelle	

4. Anzeige, Speicherung, Auswertung

Die Symbole sind teilweise den DIN-Normen [4] entnommen.

Anzeigegerät, analog	
Anzeigegerät, digital	
Fernsehschirm, Oscilloskop	
Photoplatte	
Schreiber (Recorder)	
Zifferndrucker	
Lochkartenstanzer	
Magnetbandgerät	
Speicher	
Rechner, allgemein	
Rechner, mit Auswerteformel	

5. Analysenverfahren

Die Symbole, die ein gesamtes Analysenverfahren bzw. eine Endpunktsbestimmung kennzeichnen, sind durch Kombination von Sensor- bzw. Detektorsymbolen mit für das Verfahren charakteristischen Symbolen gewonnen. Dabei wird auch ein neues Einteilungsprinzip für analytische Verfahren ersichtlich. Wird ein analytisches Verfahren in Blockform beschrieben und die eigentliche Analyse ist ein Schritt innerhalb des Ablaufschemas, so werden die folgenden Symbole in quadratische Kästchen eingeschrieben. Bei der Beschreibung von „Analysenfühlern“ innerhalb technischer Prozeßdiagramme wird die Art des Analysenverfahrens in das Symbol für einen „Analysenfühler“ eingetragen [6].

<i>Gravimetrische Verfahren</i>	
Gravimetrie	
Thermogravimetrie	
Differentialthermogravimetrie	

Titrimationsverfahren

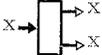
manuell	
mechanisch	
coulometrisch	
<i>Beispiel für stufenweise Zugabe</i>	

Endpunktsbestimmungsarten

optisch	
konduktometrisch	
potentiometrisch	
amperometrisch	
Hochfrequenz-	
thermometrisch	

„Strahlung-Materie“-Verfahren

Photometrie, Colorimetrie	
Polarimetrie	
Absorptionsspektralanalyse mit Bogenanregung	
Emissionsspektroskopie	
Flammenphotometrie	
Atomabsorptometrie	
Ramanspektroskopie	

Debyetechnik	
Radiometrie (Beispiel)	
Röntgenfluoreszenzanalyse	
Elektronenstrahlmikroanalyse	
Massenspektrometrie	MS
Kernresonanzspektroskopie	NMR
Elektronenmikroskopie	Elmi
<i>Elektrometrische Verfahren</i>	
Konduktometrie	
Potentiometrie	
Amperometrie	
Hochfrequenzmessung	
Polarographie	
Wechselstrompolarographie	

Verteilungsverfahren

Fest-Flüssig-Chromatographie	SLC
Fest-Gas-Chromatographie	SGC
Flüssig-Flüssig-Chromatographie	LLC
Flüssig-Gas-Chromatographie	LGC
Dünnschicht-Chromatographie	TLC
Papier-Chromatographie	PC
Elektrophorese	EP

Literatur

1. DIN-Normblatt 7091. Schematisches Fließbild der chem. Technik (Dezember 1945).
2. Franke, H., u. K. Post: diese Z. **222**, 144 (1966).
3. Fritsche, W., u. a.: diese Z. **237**, 81 (1968).
4. Gnädig, H.: Arch. Tech. Messen Lf. **387**, 65–68 (1968).
5. Gottschalk, G.: Talanta **14**, 361, 1315 (1967); **15**, 15 (1968).
6. Malissa, H., u. G. Jellinek: diese Z. **238**, 81 (1968).
7. Perschke, S.: Endeavour **27**, 97 (1968).
8. Römpf, H.: Chemielexikon. Stuttgart: Franckh 1968.
9. Semrad, H.: Numerisch gesteuerte Maschinen. Berlin: VEB Technik 1967.
10. Vester, F.: Bausteine der Zukunft. Berlin: Fischer 1968.
11. Zemanek, H.: Elektrotechn. Maschinenbau **84**, 413 (1967).
12. — Vortrag, Tagung Anal. Chem. u. Automation, Wien 1968.

Prof. Dr. H. Malissa
 Institut für Analyt. Chemie und Mikrochemie
 der Technischen Hochschule
 A-1060 Wien, Getreidemarkt 9, Österreich

Z. Anal. Chem. 247, 8–12 (1969)

Optimale Bedingungen der Atomabsorption, erläutert am periodischen System der Elemente

H. A. v. DERSCHAU und H. PRUGGER

Carl Zeiss, Oberkochen

Eingegangen am 23. April 1969

Optimum Conditions of Atomic Absorption, Illustrated by Means of the Periodic System. The 42 most important elements which can be determined by atomic absorption were examined according to a common method in order to establish the most favourable working conditions. The elements of groups IB and IIA and IIB were determined with the highest sensitivity at the lowest possible current of the hollow cathode lamp. All other elements yielded optimum results at maximum lamp current. In the individual groups the flame temperature required for sample evaporation decreased as the period increased. With the elements of group IVA (Ti, Zr, Hf) the evaporation blocking by formation of oxides could be reduced by hydrofluoric acid and, to a lesser extent, hydrochloric acid.