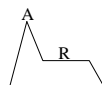

Wissenschaftstheoretische Beiträge zur Chemie

Der Begriff der Robustheit in der Chemie

Formale Betrachtungen und experimentelle Arbeiten



von dem Fachbereich Chemie
der Universität Hannover
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften

Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

von

Dipl. Chem.

ANDREAS WÖLKE

geboren am 17.09.1969, in Hannover

Erscheinungsjahr 1999

Referent: Prof. Dr. Gerold Wünsch

Korreferent: Dr. habil. Andreas Seubert

3. Gutachter: Prof. Dr. Gerhard Vollmer

4. Gutachter: Prof. Dr. Reinhard Nießner

Prüfungstermin: 21.01.2000

Ablauf

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit von Juni 1996 bis Oktober 1999 am Institut für Anorganische Chemie im Bereich des Lehrgebietes Analytische Chemie der Universität Hannover unter der Anleitung von Herrn Prof. Dr. G. Wünsch durchgeführt.

1 Kurzzusammenfassung und Suchbegriffe	Seite 7	...
2 Vorwort	Seite 8	...
3 Legende	Seite 9	...
4 Einführung	Seite 10	..
4.1 Informationen zum besseren Verständnis	Seite 11	..
4.2 Der Robustheitsbegriff	Seite 13	..
4.2.1 Robustheit und Systemverhalten	Seite 14	..
4.2.2 Robustheit und Selektivität	Seite 15	..
4.2.3 Anfälligkeit und Empfindlichkeit	Seite 16	..
4.2.4 Leistung, Anfälligkeit und Robustheit	Seite 17	..
4.3 Begriffsgegenüberstellung: Stabilität und Robustheit	Seite 19	..
4.3.1 Ergebnis der Recherche bezüglich der Stabilität	Seite 20	..
4.3.2 Ergebnis der Recherche bezüglich der Robustheit	Seite 23	..
4.3.3 Gegenüberstellung der Begriffe	Seite 24	..
5 Qualitätssicherung und Risikomanagement	Seite 27	..
5.1 Qualitätssicherung in der Chemie	Seite 27	..
5.2 Risikomanagement in der Chemie	Seite 29	..
5.3 Wirtschaftswissenschaftliches Risikomanagement	Seite 30	..
5.3.1 Risikoanalyse	Seite 32	..
5.3.2 Risikopolitische Strategien, Ziele und Grundsätze	Seite 33	..
5.3.3 Risikopolitische Massnahmen	Seite 35	..
5.4 Entscheidungstheorie	Seite 37	..
5.5 Risikomanagementmix in der Chemie	Seite 39	..
6 Arbeit am Begriff - Die Instrumente	Seite 42	..
6.1 Wozu Definitionen?	Seite 44	..
6.1.1 Definitionskultur	Seite 45	..
6.1.2 Definition, Begriff, Bedeutung	Seite 47	..
6.1.3 Notwendigkeit einer exakten Definition	Seite 49	..
6.2 Propädeutik als Weg	Seite 51	..
6.2.1 Verständnis durch vernünftiges Reden	Seite 52	..
6.3 Der metallische Charakter	Seite 54	..
6.4 Problemlöseverhalten als übergeordnetes Phänomen	Seite 59	..
6.4.1 Der Problemraum	Seite 60	..
6.4.2 Problemlösen durch Analogien	Seite 60	..
6.4.3 Begriffsbildung durch Analogien	Seite 61	..
6.4.4 Probleme bei Analogieschlüssen	Seite 62	..
6.4.5 Analoges Zuordnen	Seite 63	..

6.5 Formale Logik	Seite 65 ..
6.5.1 Formalisierung der chemischen Fachsprache	Seite 67 ..
6.5.2 Vereinfachte Formalisierung der Vorschrift	Seite 67 ..
6.5.3 Erweiterte Formalisierung der Vorschrift	Seite 74 ..
6.5.4 Erweiterung des Antecedens	Seite 76 ..
6.5.5 Verbesserung des Konsequens	Seite 78 ..
6.5.6 Angepasste Formale Logik	Seite 78 ..
6.5.7 Wahr oder falsch?	Seite 80 ..
6.5.8 Anwendungen der Formalen Logik	Seite 85 ..
7 Arbeit am Begriff - Mathematische Ansätze	Seite 87 ..
7.1 Robustheit im Gesamtsystem	Seite 87 ..
7.2 Robustheit als Elastizitäten	Seite 88 ..
8 Anwendung auf ein Syntheseverfahren: Nitrophenoldarstellung ..	Seite 95 ..
8.1 Mechanismus	Seite 95 ..
8.2 Versuchsdurchführung	Seite 97 ..
8.3 Versuchsbeobachtung	Seite 99 ..
8.4 Versuchsauswertung	Seite 99 ..
8.4.1 Versuchsergebnisse	Seite 100 ..
8.4.2 Erläuterung der Versuchsergebnisse	Seite 101 ..
8.5 Faktorenversuchspläne	Seite 103 ..
8.5.1 Kriterien für die Anwendung von Faktorenversuchsplänen	Seite 103 ..
8.6 Faktorenversuchspläne in der Anwendung	Seite 104 ..
8.6.1 Vollständige Faktorenversuchspläne	Seite 104 ..
8.7 Auswertung des Faktorenversuchsplanes	Seite 106 ..
9 Anwendung auf ein multimodales System: Die Polarographie ...	Seite 110 ..
9.1 Arbeitsmethodik	Seite 111 ..
9.1.1 Die unterschiedlichen Techniken	Seite 114 ..
9.2 Versuchsdurchführung	Seite 115 ..
9.3 Das Modellsystem	Seite 116 ..
9.3.1 Schwermetall-Bestimmung im Dünger	Seite 118 ..
10 Numerische Angaben zur Robustheit	Seite 122 ..
10.1 Weiterentwicklung der Faktorenversuchspläne für die Nitrophenolsynthese ..	Seite 122 ..
10.1.1 Entwicklung einer Modellvorstellung	Seite 123 ..
10.1.2 Darstellung des Polynoms	Seite 125 ..
10.1.3 Diskussion der Darstellung	Seite 125 ..
10.2 Vollständiger 3 ³ -Faktorenversuchsplan für die Nitrophenolsynthese	Seite 126 ..
10.2.1 Theoretische Beschreibung	Seite 126 ..

10.2.2 Auswertung des vollständigen 3^3 - Faktorenversuchsplanes	Seite 126
10.2.3 Diskussion des vollständigen 3^3 - Faktorenversuchsplanes	Seite 130
10.3 Nitrophenolsynthese und Robustheit	Seite 132
10.3.1 Nitrophenolsynthese unter klassischer Robustheitsbetrachtung	Seite 132
10.3.2 Nitrophenolsynthese unter Elastizitätsbetrachtung	Seite 134
10.4 Weiterentwicklung der Auflösung R für die Polarographie	Seite 138
10.5 Polarographie und Robustheit	Seite 140
10.5.1 Aufgelöstes Systemverhalten	Seite 141
10.5.2 Summenpeaks zur Schwermetall-Bestimmung	Seite 143
10.6 Szenario 1 zur Robustheit	Seite 145
10.7 Szenario 2 zur Robustheit	Seite 152
11 Bestimmung der Robustheit	Seite 154
11.1 Zwischenergebnis 1	Seite 154
11.2 Robust als Prädiktor	Seite 155
11.3 Bestimmung der Robustheit	Seite 157
11.4 Logik als Verhaltensregel	Seite 161
11.5 Psychologische Robustheit	Seite 163
11.6 Zwischenergebnis 2	Seite 165
11.7 Zusammenführung	Seite 166
12 Zusammenfassung	Seite 172
13 Ausblick und Entwicklung	Seite 174
14 Glossar	Seite 176
15 Anhang	Seite 183
15.1 Kalibration	Seite 183
15.2 Korrelationsrechnung	Seite 186
15.3 Spektrum der Nitrophenole	Seite 188
15.4 Literaturrecherche: Gegenüberstellung der Begriffe: Robustheit und Stabilität	Seite 189
15.4.1 Physikalische, Technische und Quanten-Chemie	Seite 191
15.4.2 Ingenieurs-Wissenschaften	Seite 206
15.4.3 Wirtschaftswissenschaften	Seite 210
15.4.4 Der Robustheitsbegriff	Seite 213
15.4.5 Sprachphilosophische Untersuchung der Begriffe	Seite 217
15.4.6 Der Begriff des Optimums	Seite 223
15.5 Begriffsuntersuchungen	Seite 227
15.5.1 Die Entwicklungsgeschichte des Wortes - Etymologie	Seite 229
15.5.2 Bedeutungsvariationen als Chance und Risiko	Seite 230
15.5.3 Begrifflicher Wandel	Seite 231

1 Kurzzusammenfassung und Suchbegriffe

Ausgangspunkt der Arbeit

Die Weiterentwicklung des Robustheits-Begriffes, sowohl experimentell als auch inhaltlich stand anfangs im Mittelpunkt. Dabei hat sich die Notwendigkeit ergeben, in zunächst unerwartet großem Umfang wissenschaftstheoretische und sprachphilosophische Untersuchungen durchzuführen und die betreffenden Werkzeuge für die Anwendung auf die Chemie zu erschliessen.

Inhalt der Arbeit

Der Robustheits-Begriff wurde um den Elastizitäts-Begriff und auch um Risiko-Aspekte erweitert. Ferner wurde er dem Stabilitäts-Begriff gegenübergestellt und seine Berechtigung neben diesem nachgewiesen. Der experimentelle Teil besteht aus der Verfeinerung der Anwendung des Robustheits-Begriffes auf ein Synthesebeispiel und der Erschliessung für ein Beispiel aus der Analytik. Besonders großen Wert wird auf die Erläuterung von Begriffs-Konzepten und auf die formalen Anforderungen an einzuführende Begriffe gelegt.

ROBUSTHEIT, FORMALE LOGIK, DEFINITIONSLEHRE

Starting Point of this thesis

The elucidation and elaboration of the idea of robustness, both experimentally and theoretically, have initially been in the focus of this thesis. It then became necessary to investigate, to an unexpectedly broad extend, questions concerning aspects of the theory of science and the philosophy of language and their application to chemistry.

Contents of this thesis

The principle of elasticity was added to the theory of robustness and extended with a few aspects of risk-analysis. Furthermore the concept of stability was matched up and compared to robustness to verify the necessity of the latter. The experimental part of this work consists of the application and fine tuning of this concept to an example from chemical synthesis and the transfer of these results to chemical analysis. Finally the definition and explanation of various terms and their formal scope and limitations have been thoroughly adressed.

ROBUSTNESS, FORMAL LOGICS, DEFINITION-THEORY

2 Vorwort

"Wenn es ein starkes Argument für die Einheit der Wissenschaft über alle `Kulturgrenzen´ (die der verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen, aber auch der verschiedenen Weltreligionen) hinweg gibt, dann liegt es in diesem Führungswechsel zwischen Phänomenerfahrungen, Konzeptarbeit und Phänomenbeschreibung. Man täuscht sich eben doch, wenn man glaubt, dass Logiker und Soziologen, Informationstheoretiker und Biologen, Kybernetiker und Neurophysiologen, Literaten und Theologen nichts miteinander zu tun hätten und wechselseitig ignorant ihr Spezialwissen pflegten. Individuell stimmt das zwar fast immer, aber auf der konzeptionellen Ebene einer `Vernunft der Verhältnisse´ gibt es vielfältige und häufig untergründige kommunizierende Röhren. **Allerdings tauscht man sich wesentlich weniger auf der Ebene des Wissens als auf der Ebene des Nichtwissens aus. Oder, genauer: Man tauscht sich dort aus, wo die eigenen Fragestellungen Probleme aufwerfen, die auch für die Fragestellungen anderer Disziplinen erhellend sein können.**"

Becker, D., DIE ZEIT Nr. 11, 1996

3 Legende

fett	=	Für Betonungen
" "	=	Für Zitate
<i>kursiv</i>	=	Für sonstige Hervorhebungen, besonders die Index-Einträge, Eigennamen und die Autoren im Literaturverzeichnis
(☞ Glossar)	=	Diese Begriffe werden im Glossar Tz 14 (S. 176) erläutert
(s. Tz x.y)	=	siehe Textzeichen x.y
Tz	=	Für die Numerik des Textes

Anm.: Häufige Verweise auf andere Tz (s. Tz x.y) sollen die Möglichkeit der Wiederholung oder Vertiefung des behandelten Themas bieten, sind teilweise aber auch für das Textverständnis notwendig.

4 Einführung

Im Rahmen dieser Dissertation sollte zunächst primär die Anwendung des Robustheits-Begriffes auf die Chemie diskutiert werden. Gestützt von ersten Erkenntnissen in der Diplomarbeit (D.A.) *T. Schulze*¹ über die Informationstheorie und ihre Deutung bezüglich der Robustheit, ist die D.A. *A. Wölke*² "Robustheit - Nicht nur Arbeit am Begriff" entstanden. Verschiedene Konzepte (Sprachphilosophie, Informationstheorie und das Selektivitätskonzept von *K. Doerffel*³) sollten auf ihre Gebrauchsfähigkeit im chemischen Alltag hin untersucht und gegebenenfalls weiterentwickelt werden. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen gaben Anlass zu weiteren Arbeiten in diesem Themenkomplex, denn praktikable Lösungen für ein funktionierendes Robustheits-Konzept benötigen noch wesentliche Entwicklungsarbeit.

Im Verlaufe der Arbeiten zu dieser Doktorarbeit über dieses eher praxisorientierte Thema entstanden immer mehr begriffliche Schwierigkeiten, offensichtliche wissenschaftstheoretische Defizite und schliesslich die Überzeugung, dass einige philosophische Vorarbeiten geleistet werden müssen, um in der Chemie effektiv neue Begriffe benutzen zu können.

Daher soll diese Dissertation im wesentlichen dazu beitragen, wissenschafts-theoretische Aussagen so umzusetzen, dass adäquate Begrifflichkeiten erstellt werden können, um so erkennbar zu machen, welche *Konzepte der Wissenschaftstheorie* für die Chemie von *Bedeutung* (☞ Glossar) sind und wie diese zu behandeln sind. Auf dieser Grundlage können dann die ebenfalls durchgeführten Experimente und ihre Daten anhand des Robustheits-Begriffes diskutiert werden.

Wie noch erläutert wird, hat die Chemie ein grosses Interesse daran, neue Begriffe angemessen zu beschreiben und nicht, ein neues Begriffskonzept zu erstellen.

¹ *Schulze, T.*: Robustheit und Anfälligkeit als Kenngrößen zur Beurteilung analytischer Systeme. Hannover: Universität, Diplomarbeit, 1994

² *Wölke, A.*: Robustheit - Nicht nur Arbeit am Begriff. Hannover: Universität, Diplomarbeit, 1996

³ *Doerffel, K.*: Multifaktorpläne - ein einfaches Hilfsmittel zur Prüfung auf Selektivität. Pharmazie 49 , 216, 1994

Der Ausgangspunkt dieser Arbeit ist jedoch auch deutlich davon bestimmt, in wie weit ein neuer Begriff verständlich gemacht werden kann und neben bereits existierenden bestehen kann. Dieses bezieht sich ganz besonders auf den auch in der Chemie weit verbreiteten *Stabilitäts*-Begriff. Aus einer Auseinandersetzung mit diesem Begriff muss daher der Nachweis folgen, dass die Chemie, speziell die Analytik oder Synthesechemie, einen weiteren Begriff benötigt.

Folgend soll zunächst einiges bezüglich der Verwendung des Robustheits-Begriffes erläutert, sowie verwandte Begriffe besprochen werden. Dann folgen die Ergebnisse einer ausführlichen Literaturrecherche (s. Anhang Tz 15.4, S. 189) bezüglich des *Stabilitäts*-Begriffes, wie er in den Natur-Wissenschaften gebraucht wird und dem Robustheits-Begriff gegenüberzustellen ist.

Am Ende von Tz 4 soll für den Leser deutlich geworden sein, aus welcher Situation heraus, mit welchen Mitteln und mit welchem Ziel diese in der Chemie ungewöhnliche Dissertation durchgeführt wurde.

4.1 Informationen zum besseren Verständnis

An dieser Stelle muss zu Beginn der Einführung auf die Struktur dieser Dissertation eingegangen werden. Dieses soll erreichen, dass die Intention des Autors besser verstanden wird, Missverständnisse möglichst schon zu Beginn ausgeräumt werden und letztlich die Geduld des Lesers nicht überstrapaziert wird.

Wie in der Einleitung zu Tz 4 und bereits in Tz 1 (S. 7) angesprochen wird, soll mit dieser Arbeit für einen nahezu neuen Begriff geworben werden. Das erfordert den Nachweis, dass ein solcher Begriff benötigt wird, was im ersten Hauptteil dieser Dissertation gezeigt wird. Darüber hinaus ist ein didaktischer Aspekt zu betonen, der den Chemiker einerseits ermutigen soll, über seine Sprache nachzudenken, ihm andererseits Werkzeuge zur Verfügung stellen soll, mit denen er seine Arbeit besser formulieren kann.

Nach dieser Einführung, in der zunächst die zu untersuchenden Begriffe betrachtet werden, folgen dann zwei Hauptteile:

Arbeit am Begriff, Tz 6 und 7, besteht aus den wissenschaftstheoretischen Werkzeugen und den mathematischen Beschreibungsansätzen für den Robustheitsbegriff.


Experimentelle Beiträge und Bestimmung, Tz 8 bis 11, beinhaltet die beiden Experimentalsysteme, die numerischen Angaben zur Robustheit und die Anwendung der Werkzeuge aus Tz 5 und 6.

Darüber hinaus geben ein Glossar (Tz 14) und ein Anhang (Tz 15) die Möglichkeit, sich noch weitere Informationen zu verschaffen.

So soll folgendes erreicht werden: Die Daten aus den Experimentalsystemen werden mit den mathematischen Konzepten verknüpft. Die Aussagen aus diesen Verknüpfungen werden dann mit Hilfe der wissenschaftstheoretischen und sprachphilosophischen Werkzeuge präzisiert, bewertet und vom benutzten chemischen Sachverhalt abstrahiert.


Entscheidend ist die Tatsache, dass sowohl die mathematischen, als auch die chemischen Voraussetzungen möglichst einfach gehalten werden, um den allgemeingültigen Charakter des Robustheits-Begriffes zu erhalten. Nur wenn die Bedingungen für die Nutzung eines Begriffes leicht verständlich sind, ist mit einer breiten Anwendung und Akzeptanz zu rechnen.

4.2 Der Robustheitsbegriff

In den Naturwissenschaften steht dieser *Begriff* ( Glossar) meist für die "Fähigkeit eines Systems, den Zustand der Gebrauchstauglichkeit beibehalten zu können."⁴ Es wird also die Antwort eines Systems auf eine Parameter-Veränderung beschrieben, z.B. die Veränderung eines Puffersystems auf die zugegebene Säuremenge. Ein gutes Puffersystem sollte die Veränderung verkraften können, es sollte eben puffern, also **robust** sein. Dazu weiter bezüglich der Pufferkapazität: Wird ein Puffersystem mit Säure oder Base belastet, so ändert sich sein pH-Wert nur wenig. Die Änderung hängt in erster Linie vom Konzentrationsverhältnis des Pufferpaares HA/A⁻ ab. Im Hinblick darauf, dass das Ausmass der Belastung, d.h. die Stoffmenge an zugesetzter starker Säure bzw. Base, verschieden sein kann, hängt die Systemantwort auch von der Gesamtkonzentration des Pufferpaares ab. Nach *Seel*⁵ heisst *Pufferkapazität* **b** in mol/L die "differentielle Änderung $\beta = dC^*/dpH$, wobei C* in Mol/L die zugesetzte Belastung bezeichnet". β ist um so grösser, je weniger sich der pH-Wert ändert und entspricht so begrifflich der Robustheit (R.) und nicht der *Anfälligkeit* (s. Tz 4.2.3, S. 16). β ist mit Hilfe des Massenwirkungsgesetzes berechenbar. Das Maximum der Pufferkapazität hat im realen System, d.h. bei endlichen Konzentrationen, einen endlichen Wert von β . Sofort entsteht der Wunsch, diese R. besser fassen zu können. Zum einen aus mathematischer Sicht, um eine Quantifizierung möglich zu machen, bzw. den Rs.-Begriff von bestimmten Systemen zu lösen, ihn also als allgemeine Kenngröße in der Chemie behandeln zu können. Zum anderen ist es unbefriedigend, mit Vokabular umzugehen, das sprachlich nicht scharf genug gefaßt ist. Regeln zum Gebrauch des Begriffes R. wären für den Benutzer daher sehr von Vorteil. Für diese Explikation finden sich in der Philosophie einige Ansätze, wobei wichtig ist, dass die Philosophie als Werkzeug genutzt werden soll. Es wird keine reine geisteswissenschaftliche Betrachtung des Rs.-Begriffes durchgeführt, sondern mit philosophischen Methoden oder Ratschlägen der bestehende Sachverhalt in der Chemie verschärft und verdeutlicht.

⁴ *Wünsch, G.:* J. Prakt. Chem. 336, 319, 1994

⁵ *Seel, F.:* Grundlagen der Analytischen Chemie. Weinheim: Verlag Chemie, 3. Aufl., 1963

Die "notwendige Normierung des Sprachgebrauchs"⁶ ist zu diskutieren und wird in Tz 6.1 (S. 44) zur Definitionskultur und in Tz 6.2 (S. 51) zur *Prädikation* (auch  Glossar) wieder aufgegriffen.

Darüber hinaus muss diskutiert werden, ob ein System, z.B. eine Reaktion robust sein kann oder nur die betrachtete Zielgrösse, beispielsweise die Ausbeute. Es kann für die Begriffs-Verwendung sinnvoll sein, weniger streng vorzugehen. In jedem Fall muss dies dann ausgeführt werden: Ist beispielsweise die Ausbeute am Zielpunkt robust (60% Hauptprodukt \pm 2%), dann kann trotzdem das Reaktionssystem selbst unrobust bezüglich der restlichen Produkte sein, da sich die restlichen 40% je nach Reaktionsbedingungen auf verschiedene Stoffe verteilen. Schwanken z.B. die Anteile eines qualitätsmindernden Nebenproduktes, dann ist zwar dessen Ausbeute robust, nicht jedoch die Qualität des Prozesses und damit des Hauptproduktes.

Es sei nochmals darauf hingewiesen:

R. ist ein Begriff der System-Beschreibung und es muss sehr sorgfältig formuliert werden, worauf sich die jeweilige Aussage bezieht!

4.2.1 Robustheit und Systemverhalten

Die Beurteilung eines Gesamtsystems bezüglich seiner Reaktion auf veränderte System-Parameter (Temperatur, Druck, Zusatzstoffe) ist bei jedem chemischen Prozess von grosser Bedeutung. Nur so kann vorausgesagt werden, ob und welcher Einfluss durch das Personal oder durch eingebaute Regler erfolgen muss.

Diese Beurteilung findet am besten anhand von sog. *Kenngrossen* statt, für die sich gerade die Begriffe Robustheit und ihr Kehrwert, die *Anfälligkeit* eignen. In den folgenden Tz werden ihre Definitionen mehrfach genutzt, um verschiedene Sachverhalte deutlich zu machen.

⁶ Hoyningen-Huene, P.: Persönliche Mitteilung. Hannover: Zentrum für Wissenschaftstheorie und Wissenschaftsethik, 1998

4.2.2 Robustheit und Selektivität

Werden die chemischen Störungen eines Nachweis- oder Analyse-Verfahrens verringert, so spricht man davon, es *selektiver* (☞ Glossar) zu machen.

Wird es damit bezüglich der Störeinflüsse auch robuster?

Zunächst ist für diese Fragestellung ausführlich zu klären, was *Selektivität* bedeutet. Aus der Sichtweise der Analytik ist ein Verfahren selektiv, wenn es durch eine Reaktion ermöglicht, einen Analyten (eine Analytgruppe) von mindestens einer anderen Gruppe zu unterscheiden. Nach *Kaiser*⁷ "[...] bezeichnen wir ein Analysenverfahren dann als (vollkommen) selektiv, wenn man mit ihm nebeneinander mehrere Komponenten in der Analysenprobe unabhängig voneinander bestimmen kann." Durch veränderte (schlechte, wenig beherrschte) Reaktions-Bedingungen kann die Selektivität verringert (gestört, aufgehoben) werden. Andererseits kann durch Wissen über das System die Selektivität gesteigert werden, d.h. auch bei Anwesenheit grösserer Matrixmengen ist das Unterscheiden möglich, auch bei schlecht eingehaltenen Reaktionsparametern ist das Abtrennen erfolgreich.

Betrachtet man das Verfahren unter dem Aspekt der Robustheit (R.), so lässt sich die Zunahme an Selektivität, damit der Erfolg/die Wirksamkeit der Abtrennung der Analyten auch als Zunahme an R. formulieren. Gerade die klassische Interpretation als "Beibehaltung der Gebrauchstauglichkeit"⁸ macht die Verwandtschaft der Begriffe Selektivität und R. deutlich.

Ist dieser Zusammenhang nun uneingeschränkt gültig?

Interpretiert man R. im mathematischen Sinne als Kehrwert der Anfälligkeit (s. folgendes Tz 4.2.3, S. 16), die ihrerseits als Veränderung der Systemeigenschaft ΔS bei Veränderung der Reaktionsvariablen ΔV , also als Quotient zu sehen ist, so ist für die Selektivität Entsprechendes anzusetzen (s. Gleichung 1).

$$\text{Selektivität} = \frac{\Delta \text{Matrix}}{\Delta \text{Analysesystemantwort}} \quad \text{Gleichung 1}$$

⁷ *Kaiser, H.:* Zur Definition von Selektivität, Spezifität und Empfindlichkeit von Analyseverfahren. *Fresenius Z. Anal. Chem.* 260, 252, 1972

⁸ *Wünsch, G.:* *J. Prakt. Chem.* 336, 319, 1994

Als Matrix ist die Zahl der sonstigen Bestandteile der Probe zu sehen. Somit bezeichnet *D Matrix* allgemein die Änderungen der chemischen Eigenschaften der Probe, ggf. inklusive der physikalischen Daten wie Temperatur und Aggregatzustand. *D Analysesystem-Antwort* beschreibt dann alle Veränderungen der qualitativen und quantitativen Richtigkeit des Ergebnisses, z.B. als Empfindlichkeit, spektrale Überlagerungen, Rauschen oder Aufschliessbarkeit. Mit diesen Formulierungen der beiden Δ -Werte wird in dieser Arbeit eine Erweiterung der von *Feigl* und *Kaiser*⁹ gegebenen Betrachtungen vorgeschlagen. Eine Darstellung der Analysesystem-Antwort ist beispielsweise die Frage, wie vollständig eine Oxalatfällung ist. Dies kann durchaus in Prozentwerten ausgedrückt werden. Eine große Änderung der zugegebenen, potentiell störenden Stoffe bei geringer Veränderung der System-Antwort bedeutet hohe Selektivität des betrachteten Verfahrens.

Es erscheint also möglich, den Selektivitäts-Begriff durch den Rs.-Begriff zu ersetzen.

Umgekehrt ist dies nicht allgemein möglich, denn eine bezgl. der Reaktionstemperatur robuste Ausbeute eines Verfahrens wird mit dem Selektivitäts-Begriff nur unvollständig beschrieben.

Selektivität ist daher ein Spezialfall der Robustheit¹⁰ und Robustheit ist der übergeordnete Begriff.

4.2.3 Anfälligkeit und Empfindlichkeit

Unter dem gleichen Vorzeichen wie im vorhergehenden Tz kann eine weitere Begriffspaarung diskutiert werden:

Ist die *Empfindlichkeit* ein Spezialfall der *Anfälligkeit*?

In jedem Fall ist die Robustheits-Diskussion eine vielschichtige Angelegenheit: Nicht immer ist Robustheit gewünscht, denn z.B. Indikatoren sollen *anfällig* sein

⁹ *Kaiser, H.*: Zur Definition von Selektivität, Spezifität und Empfindlichkeit von Analyseverfahren. *Fresenius Z. Anal. Chem.* 260, 252, 1972

¹⁰ *Wünsch, G.*: *J. Prakt. Chem.* 336, 319, 1994

und nicht erst bei grossen Änderungen der Systemvariablen (pH-Wert, Redox-Potential) reagieren.

Meist wird über Empfindlichkeiten im Rahmen von Kalibriergeraden diskutiert: So stellt die Steigung der Funktion direkt die Empfindlichkeit dar.¹¹

Wird jetzt wiederum ein Quotient aus ΔS und ΔV angesetzt, so ist hier für die Empfindlichkeit Gleichung 2 anzusetzen.

$$\text{Empfindlichkeit} = \frac{\Delta \text{Messsignal}}{\Delta \text{Analytgehalt}} \quad \text{Gleichung 2}$$

Eine hohe Empfindlichkeit bedeutet daher eine grosse Veränderung des Signales schon bei kleiner Variation des Analyt-Gehaltes. Auch hier kann wiederum Anfälligkeit analog verwendet werden, denn sie entspricht gerade einer deutlichen Systemantwort, wie sie z.B. bei den o.g. Indikatoren erwünscht ist: ein schneller Farbumschlag bei geringer pH-Wert-Änderung (zumindest in der Nähe des Umschlagbereiches).

Vergleichbar der Argumentation im vorherigen Tz würde also der Begriff der Anfälligkeit ebenfalls unnötig eingeschränkt werden, träte an seine Stelle allein der Empfindlichkeits-Begriff. Genauso ermöglicht auch der Robustheits-Begriff umfangreichere Anwendungen als der Selektivitäts-Begriff. Auch hier kann also die Empfindlichkeit als Spezialfall der Anfälligkeit formuliert werden und damit ist Anfälligkeit der übergeordnete Begriff.

4.2.4 Leistung, Anfälligkeit und Robustheit

Die Begriffe Robustheit (R.) und Anfälligkeit, aber auch Empfindlichkeit wurden in den vorstehenden Tz erläutert. Nicht betrachtet wurde eine aber fast automatisch vorhandene *Wertbesetzung* der Begriffe. Schnell könnte selbst ein Kind benennen, ob es lieber robust oder empfindlich sein möchte. Bei *Wölke*¹² wird einiges

¹¹ Schwedt, S.: Analytische Chemie. Stuttgart: Georg Thieme Verlag, 1995

¹² Wölke, A.: Robustheit - Nicht nur Arbeit am Begriff. Hannover: Universität, Diplomarbeit, 1996

bezüglich der umgangssprachlichen Verwendung des Begriffes R. gesagt und es sind alles *positive* Begriffe. Positiv, da sie wünschenswertes Verhalten oder günstige Umstände versprechen. Lediglich die "robuste Figur" deutet eventuell auf etwas unschöne Ausmasse hin.

Ganz anders der Begriff der Anfälligkeit: Obwohl zumindest das Beispiel des notwendig anfälligen Indikators zeigt, dass Anfälligkeit gebraucht wird (s.o.), ist es ein deutlich *negativ* besetzter Begriff. Empfindlichkeit steht in der natürlichen Sprache in seiner semantischen Aussage zwischen den beiden anderen Begriffen: Heutzutage erwünschte emotionale Sensibilität im Umgang mit Menschen wird häufig als Empfindlichkeit, besser Empfindsamkeit bezeichnet.

Da die festgelegte Bedeutung der *Empfindlichkeit* in der Analytischen Chemie die Steigung der Kalibrations-Gerade ist, ist ein hoher Wert hier von Vorteil, denn so kann mit wenig Analytmenge ein deutliches Signal erzeugt werden.

In der Chemie ist also gleichzeitig eine hohe R., z.B. bei Stoffausbeuten, eine hohe Anfälligkeit bei Indikator-Verwendungen und eine hohe Empfindlichkeit bei der Kalibration erwünscht. Dieses ist kontextabhängig, denn verändert man die Situationen, hohe Anfälligkeit für die Ausbeute oder hohe R. für den Farbumschlag, so ergeben sich ungewollte Systemeigenschaften.

Was kann man wissenschaftlich mit solchen wertenden Begriffen anfangen? Sollten neue für *unerwünscht hohe R.* und *erwünscht hohe Anfälligkeit* eingeführt werden? Wie schon angeführt könnte man im Falle der erstrebenswerten hohen Anfälligkeit oder Empfindlichkeit von *Sensibilität* sprechen. Ein sensibler Regler reagiert schnell, ein sensibles Ventil öffnet ohne Verzug. Wenn dieser Begriff wertend sein sollte, dann jedoch positiv.

Die nicht gewollte hohe R. hingegen könnte durch *Unsensibilität* ersetzt werden und erhält durch die Silbe Un- eine negative Bewertung (vgl. Tz 15.5.2, S. 230). Diese Vorstellung wird in Tz 11.3 (S. 157) ausführlich diskutiert.

Somit spräche man von einem **robusten Syntheseverfahren** (bzw. einer robusten, weil hohen Ausbeute trotz schlecht kontrollierbarer Parameter), aber einer **unsensiblen Katalysator-Wirkung** (erst äquivalente Kat-Mengen beschleunigen eine Reaktion).

Eine (temperatur-) **anfällige Membran** stünde im Gegensatz zum **sensiblen Indikator**, der schnell reagiert.

Die beschriebenen Situationen und Mechanismen beziehen sich auf den seinerseits bewerteten Begriff der *Leistung*.

Leistung ist in der Physik Arbeit pro Zeit, Leistung ist aber auch das erfolgreiche Lösen von Problemen, das Verändern von unbefriedigenden Zuständen, wobei die Variable Zeit zwar auch eine Rolle spielt, aber keineswegs begriffsnotwendig ist. Durch Leistung werden Anforderungen erfüllt und Aufgaben erledigt.

Immer dann, wenn einer der o.g. Begriffe positiv besetzt ist, ist er für die gestellte Aufgabe, für das betrachtete System geeignet. *Er leistet etwas*.

Ist der Begriff negativ wertend, hat das System, auf das er Bezug nimmt, versagt.

4.3 Begriffsgegenüberstellung: Stabilität und Robustheit

Dieses Tz gibt das Ergebnis der Literatur-Recherche wieder, die bezüglich einer Gegenüberstellung des Robustheits- (Rs.-) Begriffes mit dem *Stabilitäts*-Begriff durchgeführt wurde. Das Ziel dieser Recherche war, wie noch mehrfach angesprochen wird, zu belegen, dass es durchaus sinnvoll ist, einen neuen Begriff in diesem Bereich zu prägen, da die vorhandenen die Anforderungen speziell der Analytischen Chemie nicht erfüllen.

Der *Stabilitäts*-Begriff in der Chemie soll also erarbeitet und sodann dem Rs.-Begriff gegenübergestellt werden. Darauf erfolgt eine Stellungnahme, die deutlich macht, was der Rs.-Begriff über den *Stabilitäts*-Begriff hinaus zu leisten vermag oder eben zu dem Schluss kommt, dass es wohl zwei vergleichbare Konzepte nebeneinander gibt.

4.3.1 Ergebnis der Recherche bezüglich der Stabilität

Die hier genannten Arbeiten können im Anhang (s. Tz 15.4, S. 189) nachgelesen werden.

Da sich diese Dissertation mit Wissenschaftstheorie und Sprachphilosophie in bezug auf die Chemie auseinandersetzt, wurde bereits in der Literaturrecherche darauf geachtet, ob die jeweiligen Arbeiten den sprachtheoretischen Ansprüchen an einen *Begriff* (☞ Glossar) genügen. Ausführliches zum *Begriff des Begriffs* und zum *Begriffs-Konzept* findet sich in Tz 6 (S. 42) und im Anhang Tz 15.4 (S. 189). Darüber hinaus ist eine derart durchgeführte Literaturrecherche aber typisch als Einstieg in eine neue naturwissenschaftliche Arbeit, denn anhand der vorhandenen Literatur kann gezeigt werden, dass die vorliegende Arbeit einen wissenschaftlichen Fortschritt für die Chemie darstellt.

Bis auf wenige Ausnahmen (*Balzer*¹³, *Müller*¹⁴) ist in den untersuchten Bereichen der Chemie kein Begriffskonzept zu erkennen. Damit ist gemeint, dass keine Sicht von aussen, d.h. die Einordnung in den Kontext, die Untersuchung der Prägung des Begriffes, eine Aussage über die begriffliche Umgebung und Ähnliches.(s.a. Anhang Tz 15.4, S. 189) vorliegt. Eine Einordnung oder Gegenüberstellung mit verwandten Begriffen findet nur in diesen beiden Fällen statt. Darüber hinaus ist eine umfangreiche Diskussion und Anwendung der *Stabilitätsanalyse* zu verzeichnen und dort kann auch in einem Fall implizit eine Beschäftigung mit dem *Stabilitäts-Begriff* nachgewiesen werden (*Schneider*¹⁵). Wie durch die dennoch weite Verbreitung des **Wortes Stabilität** erkennbar ist, muss eine indirekte und nicht ausgeführte Begriffsbildung stattgefunden haben. Genau eine solche natürlich-sprachliche Begriffsbildung wird in der Diplomarbeit *Wölke*¹⁶ anhand des Rs.-Begriffes vorgestellt. Diese ist in vielfältiger Weise zu erkennen, so als Vorliegen eines Energie-Minimums (*Zülicke*¹⁷), als spontaner Reaktionsverlauf (*Rau*¹⁸) oder als Nucleonenzahl (*Barrow*¹⁹).

¹³ *Balzer, D., Hartmann, K., Kirbach, V., Schäfer, W., Weis, W.*: Stabilität verfahrenstechnischer Prozesse und Systeme. Berlin: Akademie-Verlag, 1991

¹⁴ *Müller, G., Friedrich, L.*: Stabilität und Zuverlässigkeit von Fertigungsprozessen. Berlin: VEB Verlag Technik, 1977

¹⁵ *Schneider, F.W., Münster, A.F.*: Dynamik in der Chemie. Heidelberg: Spektrum, 1996

¹⁶ *Wölke, A.*: Robustheit - Nicht nur Arbeit am Begriff. Hannover: Universität, Diplomarbeit, 1996

¹⁷ *Zülicke, L.*: Quantenchemie. Heidelberg: Hüthig Verlag, 1985

¹⁸ *Rau, H., Rau, J.*: Chemische Gleichgewichts-Thermodynamik. Braunschweig: Vieweg, 1995

Die drei o.g. Ausnahmen (*Balzer, Müller und Schneider*) sollen hier noch einmal besprochen werden:

Bei *Balzer* finden sich einige Hinweise auf eine begriffliche Einordnung, die sich mit dem Rs.-Konzept vergleichen lassen: So kommt gerade die Aussage, dass eine nicht zu überschreitende Grenze vom Betrachter festgelegt werden muss, der besonders in der vorliegenden Dissertation betonten Eigenverantwortlichkeit im Rs.-Konzept nahe. Darüber hinaus sind sich die Autoren bewusst, dass "dem Begriff der Stabilität, je nachdem mit welchem konkreten Gegenstand und mit welcher Fragestellung er verbunden wird, ein recht unterschiedlicher Inhalt gegeben werden kann." Sie raten aber dann dazu, den Begriff nach *Ljapunow* zu benutzen (s.u. und Anhang Tz 15.4, S. 189), denn "für eine exakte wissenschaftliche Arbeit ist aber eine eindeutige Definition notwendig." So wird deutlich, dass die Dynamik auch hier Grundlage der gesamten Diskussion ist und auch die Ausführungen zur Stabilitätsanalyse lassen erkennen, dass der *Stabilitäts*-Begriff in der Chemie auf bekannten mathematischen Gleichungssystemen basieren muss. Ohne diese Gleichungen ist keine Diskussion oder Analyse der *S.* möglich. Dieses wird besonders bei *Jakubith*²⁰ deutlich und *Hesse*²¹ sagt dazu: "Was nutzt ein *Stabilitäts*-Begriff an einem mathematischen Konzept, wenn ich dieses gar nicht habe?" Um deutlich zu machen, welcher Aufwand an Mathematik dahintersteht, sei hier kurz das Beispiel der Anwendung der *Ljapunow*-Kriterien auf den *nicht-isothermen Rührkesselreaktor* vorgestellt, es stammt aus *Jakubith*. Es wird nicht auf die einzelnen Terme und Indices eingegangen, diese sind aber vom geneigten Leser in den Standardwerken der Technischen Chemie leicht nachzulesen:

"Die Stoff- und Wärmebilanz des nicht-isothermen Rührkessels ergibt sich für eine stoffmengenkonstante Reaktion nach früheren Darlegungen zu:

$$f(c, T) = V \frac{dc_i}{dt} = \dot{V}_0(c_{i,0} - c_i) + \nu_i V r_v$$

$$g(c, T) = V \tilde{c}_p \rho \frac{dT}{dt} = \dot{V}_0 \tilde{c}_p \rho (T_0 - T) + (-\Delta_R H) V r_v + (T' - T) \frac{\dot{m}' \tilde{c}'_p \alpha A}{\alpha A + \dot{m}' \tilde{c}'_p}$$

¹⁹ *Barrow, G. M.*: Physikalische Chemie. Braunschweig: Vieweg, 1984

²⁰ *Jakubith, M.*: Chemische Verfahrenstechnik. Weinheim: VCH, 1991

²¹ *Hesse, D.*: Persönliche Mitteilung. Hannover: Universität, Institut für Technische Chemie, 1999

Im stationären Fall werden die zeitlichen Ableitungen zu Null gesetzt, gleichzeitig soll die abkürzende Schreibweise eingeführt werden:

$$(T' - T) \frac{\dot{m}' \bar{c}'_p \alpha A}{\alpha A + \dot{m}' \bar{c}'_p} = (T' - T) \kappa$$

Dann folgt für die stationären Lösungen (Index: st):

$$\left. \begin{aligned} c_{i,st} &= \frac{\dot{V}_0 c_{i,0} + \nu_i V r_{v,st}}{\dot{V}_0} \\ (-\Delta_R H) V r_{v,st} &= (T_{st} - T') \kappa + \dot{V} \bar{c}_{p0} (T_{st} - T_0) \\ \dot{Q}_{chem} &= \dot{Q}_{transp} \end{aligned} \right|$$

Auf der linken Seite der stationären Wärmebilanz steht die chemisch erzeugte Wärmemenge \dot{Q}_{chem} , auf der rechten Seite die durch Kühlung abgeführte Wärmemenge \dot{Q}_{transp} . Die chemisch erzeugte Wärmemenge stellt wegen der Exponentialfunktion des Arrheniustermes

$$k = k_0 \exp \left[-\frac{E_A}{RT} \right] \quad \text{bzw.} \quad r_v = r_{v0} \exp \left[-\frac{E_A}{RT} \right]$$

eine stark nichtlineare, S-förmige Funktion dar, in den Gliedern der transportierten Wärmemenge steht die Temperatur nur linear: sie stellt in erster Näherung eine Gerade dar." Wie bei *Jakubith*²² ausgeführt, können die Funktionen nun aufgetragen und diskutiert werden. Ohne die dynamischen Kenntnisse, ohne die Differentialgleichungen und ihre Lösungen wäre dieses nicht möglich gewesen.

In der Arbeit von Müller²³ wird die Ausrichtung des *Stabilitäts*-Begriffes auf die Fertigung und ihre Optimierung betont. Eine Überschneidung mit dem Rs.-Konzept findet durch die Diskussion der Begriffe *Zuverlässigkeit* und *Kontinuität* statt, auch wenn sich der Rs.-Begriff gerade nicht das (Produktions-) Optimum zum Ziel setzt. Die genannten Wahrscheinlichkeiten, ob geplante Produktionsmengen erreicht werden, können den Rs.-Begriff erweitern, aber nicht ersetzen.

Bei Schneider²⁴ schliesslich ist die Ausrichtung der Stabilitätsanalyse selbst auf die bekannte Dynamik und zugrundeliegende Mathematik erkennbar. Für spezielle chemische Fragestellungen ist die Stabilitätsanalyse und der damit verbundene *Stabilitäts*-Begriff sehr nützlich. Auf die Analytik, Synthese-Reaktionen und deren Situation ist sie nicht anwendbar, da keine Aussagen über die Dynamik eines Analysesystems gemacht werden können, bzw. dieses nicht praktikabel wäre. Hesse²⁵ dazu: "Die Dynamik muss ich hinschreiben können, dann erst kann ich entscheiden, ob das System stabil oder instabil ist. Ohne Dynamik-Kenntnisse keine Stabilitätsanalyse."

4.3.2 Ergebnis der Recherche bezüglich der Robustheit

Die hier genannten Arbeiten können im Anhang (s. Tz 15.4, S. 189) nachgelesen werden.

Erkennbar ist die Ausrichtung des Rs.-Begriffes auf die praktische Anwendung, für die wenig mathematische Vorbedingungen nötig sind. Es liegen auch nahezu gar keine Kenntnisse über das jeweils betrachtete System vor, anhand derer man mit mathematischen Instrumenten wie der Stabilitätsanalyse Vorhersagen treffen könnte. Die vorliegende Literatur gibt ein recht einheitliches Bild des Rs.-Begriffes wieder, wobei deutlich wird, dass die eher klassischen Arbeiten von Wünsch²⁶ und Caporal-Gautier *et al.*²⁷ inzwischen Erweiterungen und Nachbesserungen erfahren

²³ Müller, G., Friedrich, L.: *Stabilität und Zuverlässigkeit von Fertigungsprozessen*. Berlin: VEB Verlag Technik, 1977

²⁴ Schneider, F.W., Münster, A.F.: *Dynamik in der Chemie*. Heidelberg: Spektrum, 1996

²⁵ Hesse, D.: Persönliche Mitteilung. Hannover: Universität, Institut für Technische Chemie, 1999

²⁶ Wünsch, G.: *J. Prakt. Chem.* 336, 319, 1994

²⁷ Caporal-Gautier, J. *et al.*: *Guide de validation analytique*. S.T.P. *Pharma Pratiques* 2 (4) 205-226 1992

haben. In der vorliegenden Dissertation wird gezeigt, wie die verschiedenen Ansätze mit Hilfe der wissenschaftstheoretischen Bewertung, Präzisierung und Einordnung genutzt werden können.

4.3.3 Gegenüberstellung der Begriffe

Zusammenführend ergibt sich, dass genau dort in der Literatur, wo nicht mit *Ljapunow*, Dynamik oder Stabilitätsanalyse argumentiert wird, die grösste Verwandtschaft zum Rs.-Begriff vorliegt. Dort wird der *Stabilitäts*-Begriff aber leider zu unpräzise und teilweise gar nicht näher fassbar gehandhabt, geschweige denn definiert, sodass mit Folgendem geschlossen werden kann:

Das *Stabilitäts*-Konzept der Dynamik deckt sich mit dem Rs.-Konzept nahezu gar nicht, während die Ideen und Ansätze der anderen *Stabilitäts*-Bezüge sehr wohl den Rs.-Begriff erweitern können.

So zeigt sich also, dass der *Stabilitäts*-Begriff der Physikalischen und Technischen Chemie aus praktischen und technischen Erwägungen für die Analytik, Synthetik und Qualitätssicherung (s. Tz 5, S. 27) nicht geeignet ist.

Die beiden Konzepte haben ihre Vor- und Nachteile, ihre Einschränkungen und Möglichkeiten. Für unsere Belange, für die praxis-orientierte, pragmatische und ergebnis-bezogene Arbeit in der Chemie ist nur der Rs.-Begriff von Bedeutung und wird in der vorliegenden Dissertation ausführlich bestimmt.

Zur besseren Übersicht wird abschliessend noch einmal tabellarisch gezeigt, welche *Attribute* (☞ Glossar) dem hier vorherrschenden *Stabilitäts*-Begriff und dem Rs.-Begriff zukommen (s. Tabelle 1).

Tabelle 1: Attribute der Begriffe

Begriff	Attribute	Erläuterungen
Robustheit	gebrauchstauglich, handhabbar;	der Einfluss der individuellen Anforderungen des Benutzers wird deutlich;
	systembezogen, dennoch übertragbar, daher mög- lichst allgemein;	langfristig soll Vergleichbarkeit ganz unter- schiedlicher Systeme erzeugt werden;
<i>Stabilität</i>	mathematisch bestimmt;	starker Bezug zu komplexen Grössen;
	dynamische und nicht- lineare Ausgangssituation;	für klassisch schwer beschreibbare Systeme gut geeignet;
	beruht auf gelösten Differentialgleichungen;	die mathematischen Grundgleichungen müssen bekannt und lösbar sein;

Die genannten Attribute sollen nicht nur der Unterscheidung und Gegenüberstellung der beiden ausgeführten Begriffe dienen, sondern auch dazu beitragen, eine weiterführende Idee anzusprechen: Kann der Rs.-Begriff in weiterer Anwendung dazu dienen, nicht nur Systeme auf ihre Reaktion bezüglich verschiedener Parameter-Änderungen zu überprüfen, sondern auch Einrichtungen planbar zu machen? Ist es vorstellbar, mit dieser neuen Kenngrösse Arbeitsplätze und Analysengeräte vor der Herstellung zu bewerten und so Anforderungsprofile für die industrielle Fertigung und Verwendung zu erstellen? Dafür sind sicherlich noch weitere Arbeiten und die deutlichere Einbeziehung der praxisrelevanten Fakten nötig. Im Rahmen der Qualitätssicherung werden jedoch vergleichbare Projekte realisiert (s. Tz 5, S. 27).

Beide Begriffe beziehen sich auf System-Veränderungen und -Reaktionen, die beobachtet und bewertet werden. Daraus werden jeweils mit vom Betrachter

festgelegten Vorbedingungen, Normen und Anforderungen Schlüsse gezogen und Ableitungen für die Beurteilung des Systems gemacht.

In dieser Ausarbeitung wird deutlich, dass der dynamische *Stabilitäts*-Begriff durch die mit ihm verbundene Stabilitätsanalyse ein wichtiges Werkzeug in der Physikalischen und Technischen Chemie ist. In der Analytischen und Synthese-Chemie kann er in dieser Form nicht genutzt werden. Gerade aber die Beschäftigung mit derart verschiedenen Begriffen und Formen der Bestimmung und die damit verbundene Hinterfragung des eigenen Begriffskonzeptes hat zu einer Bestätigung der vorliegenden Arbeit geführt. In dieser Dissertation werden bestehende Rs.-Begriffe analysiert, bewertet und weiter ausgeführt. Dieses wird bewusst mit einfachen mathematischen Mitteln durchgeführt, da so der Systemzustand auch ohne grossen Aufwand erfasst werden kann. Mit einer ähnlichen Begründung wird in dieser Dissertation keine neue Chemie angewendet, denn es handelt sich hier um ein didaktisches Konzept: Eine Art *Rezeptbuch für vernünftiges wissenschaftliches Arbeiten* (in Anlehnung an den Untertitel: "Vorschule des vernünftigen Redens"²⁸) soll entstehen und in diesem wäre es nur hinderlich, wenn bspw. ein organisch-synthetisch arbeitender Chemiker die vorliegende Analyseverfahren erst erschliessen müsste.

12 Zusammenfassung

Am Anfang dieser Arbeit standen der praxisorientierte Robustheits-Begriff und seine Anwendung auf die Chemie allein im Mittelpunkt. Auch wenn sich bereits in der Diplomarbeit *Wölke* zeigte, dass "Arbeiten am Begriff" notwendig sind, ist erst im Verlauf dieser Abhandlung der Umfang einer solchen sprachlich-wissenschaftstheoretisch ausgerichteten Arbeit deutlich geworden.

Neben der Erarbeitung der philosophischen Instrumente sollten mehrere mathematische Beschreibungen der Robustheit (R.) verglichen werden: die klassisch-differentielle, die integrale oder Gesamt- und eine in dieser Arbeit neu-entwickelte elastische R.

Diese Rs.-Begriffe sollten anhand des Datenmaterials, das aus den experimentellen Kapiteln über Nitrophenol-Synthese und polarographische Schwermetall-Bestimmung stammt, angewendet werden.

Die ausgeführten Werkzeuge, im wesentlichen die Logische Propädeutik, die Definitionslehre, die Formale Logik und die Analoge Begriffsbildung, mussten für die anwendungs-orientierte Chemie angepasst werden. Dabei durften jedoch die ihnen innewohnenden Prinzipien nicht verletzt werden.

In der Zusammenführung wurden dann die mathematischen Modelle, das chemische Datenmaterial und die philosophischen Instrumente kombiniert, um Naturwissenschaftlern Anleitung und Hilfe zu geben, ihre Ideen sprachlich möglichst präzise und wirkungsvoll zu formulieren.

Dabei ergaben sich neue Ansätze und Vorstellungen:

So kann es z.B. sinnvoll sein, bei der Vergabe eines Prädikators mehrere Entscheidungs-Kriterien heranzuziehen.

Der Rs.-Begriff kann, um einige Adjektive erweitert, als bspw. absolut inferior robust, genauere Aussagen über das vorliegende System machen.

Bei der Festsetzung eines Begriffes ist die evtl. bereits vorhandene Wertung der natürlichen Sprache zu berücksichtigen und bei der Veröffentlichung einer Idee muss auf die Ausrichtung der Adressaten durch Teilziel- und Operator-Bildung eingegangen werden.

Häufig können chemische Aussagen formalisiert und so verkürzt dargestellt werden, um dadurch einerseits Missverständnissen über den Inhalt vorzubeugen und andererseits eine zeilenweise Abarbeitung im Rahmen von Experten-Systemen zu gestatten.

Durch alle vorgestellten Methoden kann bereits ein deutlicher Fortschritt für die Begriffsbildung in der Chemie erzielt werden. Viele Schwierigkeiten, wie Fehl-Interpretationen, unzulässige Verallgemeinerungen oder kontext-bezogene Bewertungen werden durch konsequente, aber kritische Anwendung der Instrumente eliminiert. Darüber hinaus können verschiedene Kombinationen der mathematischen und philosophischen Modelle neue Ansätze für die Begriffsbildung liefern, wie am Bsp. der Verbindung Formale Logik, Definitionslehre und Elastische Robustheit gezeigt.

13 Ausblick und Entwicklung

Diese Dissertation leistet eine umfangreiche Erarbeitung wissenschaftstheoretischer und psychologischer Konzepte für die Chemie. Darüber hinaus ist deutlich geworden, dass ein Begriffskonzept, wie es zu Beginn gefordert wird, ein umfangreiches wissenschaftliches Projekt darstellt. Durch diese Arbeit kann in weiteren Projekten jedoch effektive Verbesserung für die Fachsprache der Chemie erreicht werden.

Erwartungsgemäss war der Aufwand für das Verstehen von fachfremden Texten sehr hoch. Unterschätzt wurde die notwendige Leistung für die Aufarbeitung und Umsetzung der bestehenden Konzepte aus den Geistes-Wissenschaften für die empirisch orientierten Natur-Wissenschaften. Daraus resultierte der sinnvoll notwendige Kompromiss, nicht alle Konzepte detailliert umzusetzen, was genau der geforderten pragmatischen Vorgehensweise der Arbeit entspricht.

Für weitere, darauf aufbauende Ausarbeitungen auf diesem Gebiet ist es sinnvoll zu empfehlen, nicht wiederum mehrere neue Instrumente anwendbar zu machen, sondern die jetzt bestehenden zu vertiefen. Dies wird in der kritischen Auseinandersetzung mit der praktikablen Seite der vorgestellten Modelle dazu führen, dass konkrete Aussagen über die Sprache der Chemiker gemacht werden können, die in dieser Form zum aktuellen Kenntnis-Stand nicht geleistet werden können.

Will man Chemiker dazu bringen, die eigenen Ideen zu durchdenken, muss wiederum starkes Gewicht auf die psychologischen Komponenten gelegt werden, wie es in dieser Arbeit gezeigt wird.

Effektiver wäre die hier vorgestellte Projektarbeit durch ein qualifiziertes Team zu verwirklichen:

Arbeiten je ein Natur-, Sprachwissenschaftler, Wissenschaftstheoretiker und Psychologe zusammen, kann genau die am Anfang geforderte interdisziplinäre Diskussion zustandekommen. So können Irrwege bemerkt und Umwege verringert werden. Die auch in einer solchen Gruppenarbeit auftretenden Verständigungs-Schwierigkeiten werden vielleicht auch dazu führen, dass ebenfalls

über die sprachliche Auseinandersetzung von Fachleuten und Laien nachgedacht wird.

Da diese Arbeit einer Menge Eigen-Motivation bedurfte, etwas mit dem eigenen Verstand ohne grosse Vorbilder zu bewirken, sei mit *Kant*¹⁰³ geschlossen:

"Aufklärung ist der Ausgang des Menschen aus seiner selbst verschuldeten Unmündigkeit. Unmündigkeit ist das Unvermögen, sich seines Verstandes ohne Leistung eines anderen zu bedienen, Selbstverschuldet ist diese Unmündigkeit, wenn die Ursache derselben nicht am Mangel des Verstandes, sondern der Entschliessung und des Mutes liegt, sich seiner ohne Leitung eines anderen zu bedienen. Sapere aude! Habe Mut, dich deines eigenen Verstandes zu bedienen! ist also der Wahlspruch der Aufklärung."

¹⁰³ Weischedel, W.: Immanuel Kant, Werke in sechs Bänden. Frankfurt/ Main: Inselverlag