

CLB

Chemie in Labor und Biotechnik

Analytik

Biotechnik

Optimierte Prozesse

Komplexe Materialien

Maßgeschneiderte Moleküle

Menschen und Chemie

Aus- und Weiterbildung



- Zweidimensionale Kapillarelektrophorese
- Naturstoffe und Radikalfänger
- Kosmetikentwicklung

trat hier an ihre Stelle. Diese Entwicklung zeichnet sich auch in Mitteldeutschland ab. Zwar wird in den Buna-Werken in Schkopau die Calciumcarbid-Produktion weiter gesteigert. Auf längere Sicht wird aber auch hier Erdöl als Grundlage für die chemische Großindustrie angesehen, wie der beabsichtigte Bau einer Pipeline von Rußland nach Mitteldeutschland beweist.

Die Frage nach den Zukunftsaussichten der Petrochemie kann auch von der Seite der Lagerstättengeologie zuversichtlich beantwortet werden. Seit Jahren sind die Erdölreserven schneller als die Erdölförderung angewachsen; bei der heutigen Förderung reichen die bekannten Reserven noch mindestens 30 bis 40 Jahre. Man darf wohl sagen, daß wir erst am Anfang der Entwicklung der Petrochemie stehen.

Mineralwasser und Heilwasser

Von Dr. W. Fresenius, Chemisches Laboratorium Fresenius, Wiesbaden

In natürlichen Quellen oder niedergebrachten Bohrungen findet man gar nicht so selten Wasser, das sich durch einen erhöhten Gehalt an Mineralstoffen, durch erhöhte Temperatur oder durch einen häufig sehr erheblichen Gehalt an freiem gelöstem Kohlendioxyd deutlich von unserem gewöhnlichen Trinkwasser unterscheidet.

Mit der Frage, wie dieses „Mineralwasser“ entsteht, haben sich die Geologen seit langen Zeiten befaßt und dabei erkannt, daß verschiedene Möglichkeiten bestehen. Der einfachste Fall ist dadurch gegeben, daß Oberflächenwasser in die natürlichen Spalten der Gebirge eindringt, in der Tiefe aufgewärmt wird, und dieses erwärmte Wasser dann an anderer Stelle nach dem Prinzip der kommunizierenden Röhren wieder aufsteigt. Im allgemeinen rechnet man damit, daß eine Tiefe von jeweils 100 m zu einer Erhöhung der Temperatur um etwa 3°C führt. Das Wasser wird dabei je nach der Art der durchflossenen Erdschichten mehr oder weniger Mineralstoffe aufgenommen haben. Tritt nun zu einem derartigen in die Erdoberfläche eingedrungenen Wasser Kohlendioxyd, etwa aus ersterbenden Vulkanen hinzu, so ergibt sich ein wesentlich günstigeres Lösungsvermögen für die Mineralien der durchflossenen Erdschichten, und in einem solchen Fall bekommen wir eine Anreicherung mit Hydrogencarbonaten. Ein Teil des an die Oberfläche austretenden Wassers kann aber auch „jungfräuliches“, erstmals an die Erdoberfläche gelangtes Wasser sein. Bei anderen Vorkommen stammt der Gehalt an Mineralstoffen aus Salzlagerstätten. Diese Lagerstätten sind oft verhältnismäßig weit entfernt von den tatsächlichen Wasseraustritten; neuere Beobachtungen haben den unmittelbaren Zusammenhang zwischen den Lagerstätten und dem zutage tretenden Mineralwasser eindeutig erkennen lassen.

Die Abgrenzungen zwischen dem Trinkwasser im engeren Sinne und den Mineralquellen sind nicht immer ganz einfach zu ziehen. Auf Grund umfassender statistischer Unterlagen, die *L. Grünhut* zusammenstellte, wurde in den „Nauheimer Beschlüssen“ im Jahre 1911 eine klare Abgrenzung vereinbart. Als Grundlage dieser Abgrenzung diente der Mindestgehalt von 1 g gelöster fester Stoffe in 1 kg Wasser bzw. der Gehalt an gelöstem freiem Kohlendioxyd sowie der Gehalt an einer ganzen Reihe von Elementen, die üblicherweise nicht im Trinkwasser vorkommen. Dabei wurden neben Eisen- und Jod-Ionen sowie titrierbarem Schwefel z. B. auch Lithium-, Strontium-, Barium-Ionen mit aufgeführt. Diese Ergebnisse, die sich zunächst rein statistisch ergeben hatten, sind dann insbesondere für Heilquellen später kritisch überarbeitet und dabei Ionen gestrichen worden, die zwar gelegentlich vorkommen, die aber keinerlei pharmakologischen Effekt erwarten lassen.

Für Mineralwässer, die in erster Linie nicht als Heilwässer verwendet werden, sind in der Tafelwasserverordnung von 1934 bzw. 1938 klare Festlegungen getroffen. Hiernach wird von einem natürlichen Mineralwasser verlangt, daß es in einem Kilogramm mindestens 1 g gelöster fester Bestandteile oder 250 mg gelöstes freies Kohlendioxyd enthält. Überschreitet der Wert für das gelöste freie Kohlendioxyd den Wert von 1000 mg/kg Wasser, so wird von einem „Säuerling“ gesprochen. In der Tafelwasserverordnung sind dann aber auch noch mineralarme Wässer sowie künstliche Mineralwässer definiert. Letztere werden heute im allgemeinen nur durch Verdünnung von Solen hergestellt. Die Verwendung von Salzen zur Herstellung künstlicher Mineralwässer spielt in Deutschland praktisch keine Rolle. Die natürlichen Mineralwässer werden vor ihrer Verwendung als Tafelwasser häufig enteisen, da sich Eisenverbindungen bei der Lagerung in den Flaschen absetzen können und auch noch die Möglichkeit besteht, daß das Eisen-Ion, z. B. beim Vermischen des Mineralwassers mit Wein, zu Trübungen führt. Die Abscheidung der Eisen-Ionen geschieht heute nach der Oxydation in geschlossenen Systemen, und die Verfahren sind so entwickelt, daß dabei praktisch keine Veränderungen in der übrigen Zusammensetzung des Wassers auftreten. Bei der Kennzeichnung des natürlichen Mineralwassers muß auf die Enteisenung ausdrücklich hingewiesen werden. Umgekehrt muß aber auch ein Zusatz von Kohlensäure deklariert werden. Dabei kann es sich um quelleneigene Kohlensäure handeln oder aber auch um Kohlensäure anderer Herkunft. Neben der Enteisenung ist auch die Entfernung des Schwefelwasserstoffes bei Tafelwässern gestattet, doch werden schwefelwasserstoffhaltige natürliche Wässer kaum als Tafelwässer abgefüllt.

Heilwässer

Von einem Heilwasser wird verlangt, daß es ohne Zusatz oder Entzug irgendwelcher Bestandteile verwandt wird und daß es medizinisch nachgewiesene krankheitsheilende, lindernde oder verhütende (gesundungsfördernde) Eigen-

Prof. Dr. Wilhelm Fresenius war von Beginn an Herausgeber der CLB. Der nebenstehende (und auf Seite U3 fortgeführte) Aufsatz von 1960 entstand aus dem Umfeld seiner Arbeit im Institut Fresenius heraus, von dem er 1949 die Leitung übernahm. Es wurde 1848 als „Chemisches Laboratorium Fresenius Wiesbaden“ mit verbundener Unterrichtsabteilung durch Carl Remigius Fresenius gegründet, dem Urgroßvater von Wilhelm Fresenius. Aus der Unterrichtsabteilung entstand später die „Europa Fachhochschule Fresenius“, die Wilhelm Fresenius von 1971 bis 1998 leitete.

schaften hat. Diese Eigenschaften sollen durch klinische Gutachten erbracht werden. An diese Wässer werden auch bestimmte Forderungen bezüglich ihrer chemischen und physikalischen Beschaffenheit gestellt. Man unterscheidet zwischen Wässern, die mehr als 1 g/kg gelöste feste Mineralstoffe enthalten, und einer Gruppe von Wässern, die unabhängig vom Gesamtgehalt an gelösten festen Mineralstoffen besonders wirksame Bestandteile enthalten. Hierzu gehören

1. Eisen-haltige Wässer mit mindestens 10 mg Eisen-Ionen/kg.
2. Arsen-haltige Wässer mit mindestens 0,7 mg Arsen-Ionen/kg, entsprechend 1,3 mg Hydrogenarsenat-Ionen/kg.
3. Jod-haltige Wässer mit mindestens 1 mg Jodid-Ionen/kg.
4. Schwefel-haltige Wässer mit mindestens 1 mg titrierbarem Schwefel/kg.
5. Radon-haltige Wässer mit einer Aktivität von mindestens 18 Nanocurie/l = 50 ME.
6. Radium-haltige Wässer mit mindestens 10^{-7} mg Radium/kg.
7. Kohlensäurewässer oder Säuerlinge, die über 1000 mg freies Kohlendioxyd pro kg enthalten.

Als Thermen werden Wässer bezeichnet, deren Temperatur von Natur aus höher liegt als 20°C.

Seit altersher sind auch einzelne mineralarme kalte Quellen mit zur Heilung herangezogen worden, die den oben gegebenen chemischen Definitionen nicht entsprechen. Bei Nachweis ihrer Heilwirkung können sie auch heute noch als Heilwässer bezeichnet werden.

Es sei ausdrücklich darauf hingewiesen, daß die jetzt in den Begriffsbestimmungen aufgeführten besonderen Bestandteile durchaus keine endgültige Auswahl darstellen. So wird immer wieder diskutiert, auch einen Grenzwert für das Fluorid-Ion mit aufzunehmen. Das Fluorid-Ion ist in einer ganzen Reihe von Heilwässern enthalten; der Tagesbedarf liegt in der Größenordnung von 2 mg. Das Problem liegt darin, daß der optimale Wert nur einen sehr begrenzten Spielraum zeigt und bei Fluorgaben durchaus die Möglichkeit besteht, daß dem Organismus eine zu große Menge zugeführt wird.

Von den zur Zeit anerkannten charakteristischen Bestandteilen eines Heilwassers ist das Arsen durchaus umstritten. Auf der einen Seite werden ihm krebserzeugende Wirkungen zugeschrieben, auf der anderen Seite bestehen neben einer gewissen stimulierenden Einwirkung wenig eindeutige Hinweise auf einen tatsächlichen Heileffekt. Die weitere Entwicklung der medizinischen Beobachtungen und Erkenntnisse wird zeigen, ob das Arsen als ein charakteristischer Bestandteil für ein Heilwasser beibehalten wird. Bemerkenswert ist auch die Auseinandersetzung um den Gehalt des Radiums. Während man vor einigen Jahren darauf hinwies, daß die in natürlichen Heilquellen vorkommenden Radium-Mengen schädlich sein könnten, ist man inzwischen zu der Auffassung gekommen, daß bei einem Wasser, das den oben aufgeführten Grenzwert für Radium gerade überschreitet, etwa 100000 Liter vom Menschen aufgenommen

Liebe CLB-Leserin, lieber CLB-Leser,

fast bis an sein Lebensende nahm Prof. Dr. Wilhelm Fresenius aktiv Teil an wissenschaftlichem und gesellschaftlichem Leben. Kurz nach Eintritt in sein 92. Lebensjahr starb der „Vater der deutschen analytischen Chemie“. Herausgeber und Redaktion bedauern den Tod des Gründungsherausgebers der CLB. Als ein Beispiel seiner Arbeit für diese Zeitschrift finden Sie nebenstehend einen Artikel von Wilhelm Fresenius aus dem Jahre 1960 (im Zusammenhang mit dem Thema des Artikels: Millionen von Mineralwasser-Etiketten schmücken sich mit dem Namen Fresenius). Der Nachruf auf Seite 284 wirft Schlaglichter auf sein Leben.

Nur eine Seite nach dem Fresenius-Artikel aus dem Jahre 1960 findet man einen Aufsatz über Rechtschreibung in der Chemie. Aus dem aktuellen Anlass unserer heutigen Rechtschreib-Diskussion haben wir ihn mit der heutigen Schreibweise verglichen: Auch ohne Rechtschreibreform hat sich in der Schreibweise chemischer Ausdrücke einiges getan (siehe Seiten M57-M58).

Der Asfutaz zgiet: Rleegn für die Rschtcherbienug knöenn druhcuas Snin mehcan, aebr oft buget man scih der Srapchgeowhneiht.

In der Alltagssprache ist es überhaupt belanglos ob man beispielsweise „Schiffahrt“ oder „Schiffahrt“, „uass“ oder „uass“ schreibt – die Schweizer verzichten sowieso auf das „d“.

Vi wchtgr st, dss d Lsr dn nhlt ns rtkls vrsth.

Dafür muss bei Autor und Lesern eine geeignete Schnittmenge an Wissen vorhanden sein. Dies baut der Autor dann durch Zusatzinformationen aus. Übrigens: Konnten Sie die drei vorigen Absätze entziffern (vertauschte Zwischenbuchstaben, halb abgeschnittene Zeilen, ausgelassene Vokale)? Ich denke schon, und daran sehen Sie, wie

viel Redundanz in der Schrift, insbesondere aber auch im Sprachverständnis des Gehirns steckt. Ich trete also für das Schaffen von mehr Verständnis ein, und nicht für das Schaffen von mehr Formalismen. Übrigens sind die Rechtschreibregeln auch nur für den Schulbereich bindend. Sonst kann Sie niemand per Gesetz zwingen, nach bestimmten Regeln zu schreiben!

Über geringe Fehleranfälligkeit, über Robustheit freut man sich auch in der Technik. Auf den Seiten 288 bis 292 beschreiben Prof. Dirk Flottmann et al. eine Analysetechnik, die sich durch geringe Matrixempfindlichkeit auszeichnet – ein kleiner Schritt in diese Richtung, ebenso wie eine erhebliche Vereinfachung entsprechender Analysen.

Manchmal kann man Fehler aber nicht vermeiden, sondern nur überdecken. Sieht man die körperlichen Folgen des Alterns als Fehler an, kommt beispielsweise der Kosmetik diese Aufgabe zu. Welche vielfältigen Aspekte aus chemischer Sicht die Haar- und Hautkosmetik hat zeigt der Artikel von Hans-Dietrich Martin auf den Seiten 305 - 308.

Vielleicht kann man aber Zellschäden bald ursächlich reparieren. Ich bin immer wieder erstaunt, welche vielfältigen Ergebnisse heutige Biotechnik-Forschung liefert (siehe z.B. den Artikel „Neue Aus-Schalter für Proteine“ auf Seite 310 bzw. die Meldungen in den Spalten „Proteine, Gene und Hormone“).

Ihr



INHALT

Aufsätze

Zweidimensionale kapillarelektrophoretische Methoden Sehr geringe Matrixempfindlichkeit _____	288
Jugend forscht: Synthese von Naturstoffen Von Radikalen zu Radikalfängern (Teil 2) _____	293
Linux, Knoppix, Mac OS X, Open Source: Vorteile von Unix et al. in Chemie & Biologie Teil 10: Awk Grundlagen _____	302

Rubriken

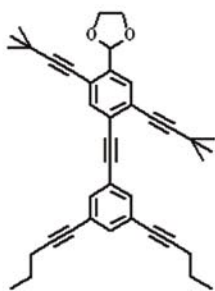
Editorial _____	281
Impressum _____	283
F & E im Bild _____	283
Nachruf _____	284
Unternehmen _____	285
Personalia _____	287
Umschau	
Labors für spezielle Aufgaben 24	
Kompetenzzentrum für Kosmetik _____	305
Forschung und Technik _____	309
Nanotechnik _____	311
Umfeld Wissenschaft _____	312
Literatur _____	314
Neue Produkte _____	316
Bezugsquellenverzeichnis _____	319



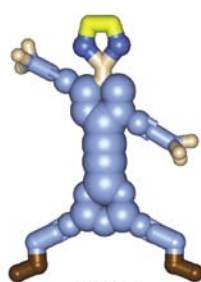
Zum Titelbild:
Ray Saupe vom Zentrum für Mikrotechnologien der TU Chemnitz zeigt einen Mikrospiegel für ein besonders kleines Infrarot-Spektrometer. Die aufgetragene Chrom-Gold-Beschichtung ermöglicht eine Reflektion von mehr als 98 Prozent (siehe Artikel Seite 309; Foto: TUC/Meinhold).

CLB-Memory

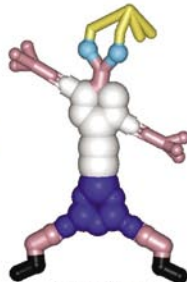
Die Rechtschreibung in der Chemie	
Muss man Octan schreiben? _____	M57
DFG legt MAK- und BAT-Werte-Liste 2004 vor	
Cadmium als krebserzeugend bewertet _____	M59
Fremde Federn finden	
Plagiate in der Schule _____	M60
Bildungsgerechtes Urheberrecht	
Neue Medien im Unterricht _____	M60
Risikobewertung von Lampenölen	
Gefährliche Haushaltsmittel _____	M61
Anregungen für den Chemieunterricht	
„Hilfe, die Riesen kommen“ _____	M62
Analytische Chemie	
Es kann mehr als eine Antwort richtig sein _____	M64



NanoKid



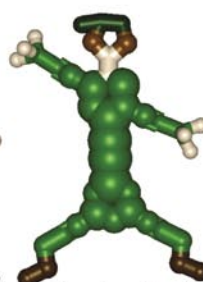
NanoKid



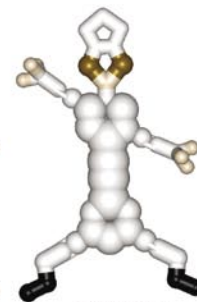
NanoAthlete



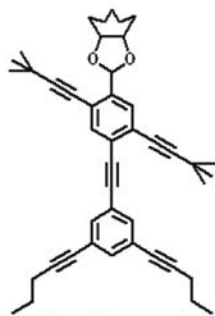
NanoPilgrim



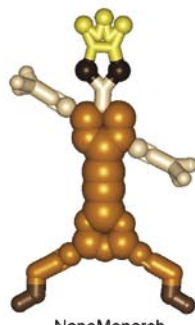
NanoGreenBeret



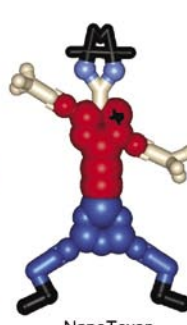
NanoJester



NanoMonarch



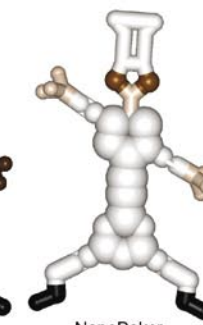
NanoMonarch



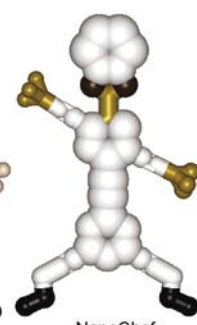
NanoTexan



NanoScholar



NanoBaker



NanoChef

Variationen von Nanobürgern

Im November vergangenen Jahres erhielt Stephanie H. Chanteau (kleines Bild) ihren Dokortitel von der Rice-Universität (Houston, Texas, USA; Doktorvater: Prof. James M. Tour). Unter anderem synthetisierte sie eine Reihe von zwei Nanometer großen anthropomorphen Molekülen. Ausgehend von einem „Nanokid“, für das man zunächst Ober-, dann Unterkörper synthetisierte und diese Teile dann Palladium-katalysiert zusammensetzte, schuf Chanteau eine ganze Reihe von „Nanoputians“. Zur Variation der Kopfformen setzte die gebürtige Tahitianerin, die zunächst in Frankreich studierte, verschiedene Mikrowellensynthesen ein. Später synthetisierte sie „Nanodancer“ und sogar eine ganze selbst organisierende Nanoputians-Armee auf einer Goldoberfläche. Die genauen Synthesewege beschreiben PDF-Dateien auf der Webseite von Stephanie Chanteau: <http://schanteau.com>. Dort beschrieben ist auch ein Chemie-Lehrprojekt, das aus den Nanokids heraus entwickelt wurde (Abb.: Rice University/Chanteau).



Impressum

CLB
Chemie in Labor und Biotechnik

Verlag:
Agentur & Verlag Rubikon
für technische und wissenschaftliche
Fachinformation – Rolf Kickuth
Anschrift:
CLB, Agentur & Verlag Rubikon
Bammentaler Straße 6–8
69251 Gaiberg bei Heidelberg
Deutschland
E-Mail: redaktion@clb.de

Gründungsherausgeber:
Dr. Dr. h.c. Wilhelm Foerst (†)
Prof. Dr. Wilhelm Fresenius (†)

Herausgeber:
Dr. Dr. U. Fitzner, Düsseldorf · Priv. Doz.
Dr. H.-M. Kuß, Duisburg · Prof. Dr. Georg
Schwedt, Clausthal-Zellerfeld · Prof. Dr.
G. Weichbrodt, Aalen · Prof. Dr. G. Wer-
ner, Leipzig.

Redaktion:
Rolf Kickuth (RK, verantwortlich;
E-Mail: kickuth@clb.de),
Dr. Maren Bulmahn (MB,

E-Mail: bulmahn@clb.de),
Dr. Christiane Soiné-Stark (CS,
E-Mail: stark@clb.de).

Ständige Mitarbeiter:
Prof. Dr. Wolfgang Hasenpusch, Hanau;
Dr. Mechthild Kässer, Diekholzen; Hans
Dietrich Martin, Köln; Dr. Uta Neubauer,
Bad Soden; Dr. Röbbie Wünschiers, Köln.

VBTA-Verbandsmitteilungen:
Thomas Wittling,
Raiffeisenstraße 41, 86420 Diedorf
Telefon (0821)327-2330
Fax (08 23 8) 96 48 50
E-Mail: info@vbta.de

Anzeigenservice:
Natalia Khilian
CLB, Agentur & Verlag Rubikon
Bammentaler Straße 6–8
69251 Gaiberg bei Heidelberg
Telefon (0 62 23) 97 07 43
Fax (0 62 23) 97 07 41
E-Mail: anzeigen@clb.de

Abonnementbetreuung:
Natalia Khilian
CLB, Agentur & Verlag Rubikon
Bammentaler Straße 6–8

69251 Gaiberg bei Heidelberg
Telefon (0 62 23) 97 07 43
Fax (0 62 23) 97 07 41
E-Mail: service@clb.de

Layout und Satz:
Agentur & Verlag Rubikon
Druck: Printec Offset, Ochshäuser Straße
45, 34123 Kassel

CLB erscheint monatlich.

Bezugspreise:
CLB Chemie in Labor und Biotechnik mit
der Beilage „CLB-MEMORY“. Einzelheft
– außerhalb des Abonnements – 8,60
Euro, im persönlichen Abonnement jäh-
rlich 87 Euro zuzüglich Versandkosten;
ermäßigter Preis für Schüler, Studen-
ten und Auszubildende (nur gegen Vor-
lage der Bescheinigung) jährlich 67,10
Euro zuzüglich Versandkosten, inkl. 7%
MWSt. Ausland sowie Firmenabonne-
ments (Staffelpreisliste nach Anzahl) auf
Anfrage. Bezug durch den Buchhandel
und den Verlag. Das Abonnement ver-
längert sich jeweils um ein weiteres Jahr,
falls nicht 8 Wochen vor Ende des Be-
zugsjahres Kündigung erfolgt.

Erfüllungsort ist Heidelberg. Mitglieder
des VDC sowie des VBTA erhalten die
CLB zu Sonderkonditionen.

Anzeigenpreisliste:
Nr. 43 vom 12.8.2004.

Bei Nichterscheinen durch Streiks oder
Störung durch höhere Gewalt besteht kein
Anspruch auf Lieferung.

Die Zeitschrift und alle in ihr enthalte-
nen einzelnen Beiträge und Abbildungen
sind urheberrechtlich geschützt. Jede
Verwertung außerhalb der engen Gren-
zen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne
Zustimmung des Verlags unzulässig
und strafbar. Das gilt insbesondere für
Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mi-
kroverfilmungen und die Einspeicherung
und Verarbeitung in elektronischen Sys-
temen.

Für die Rückgabe unverlangt eingesand-
ter Buchbesprechungs-exemplare kann
keinerlei Gewähr übernommen werden.

ISSN 0943-6677



Wilhelm Fresenius gestorben

Ein engagierter Vertreter für verständliche Chemie

Der Chemiker Professor Wilhelm Fresenius ist tot. Der „Vater der deutschen analytischen Chemie“ starb am 31. Juli im Alter von 91 Jahren in Wiesbaden.

Prof. Dr. Wilhelm Fresenius war von Beginn an Herausgeber der CLB. Er begleitete die Zeitschrift mit Rat und Tat (siehe z.B. seinen Artikel von 1960 auf den inneren Umschlagseiten). Noch in diesem Frühjahr erörterte er mit mir die Möglichkeit, einen Artikel über die Entwicklung der Analytik aus seinem Erleben heraus zu schreiben, den er dann leider nicht mehr verwirklichen konnte.

Die Hauptarbeit in seinem Leben galt aber dem Institut Fresenius, dessen Leitung er 1949 nach Chemiestudium, Promotion und Assistententätigkeit an der Universität Frankfurt übernahm. Es wurde 1848 als „Chemisches Laboratorium Fresenius Wiesbaden“ mit verbundener Unterrichtsabteilung durch Carl Remigius Fresenius gegründet, dem Urgroßvater von Wilhelm Fresenius. Aus der Unterrichtsabteilung entstand später die „Europa Fachhochschule Fresenius“, die Wilhelm Fresenius von 1971 bis 1998 leitete.

In seiner wissenschaftlichen Arbeit konzentrierte sich der gebürtige Berliner auf die Verbesserung der Qualität von Trink- und Mineralwasser, Lebensmitteln und Gebrauchsgegenständen. 1996 wurde Fresenius zum Ehrenmitglied der Wasserchemische Gesellschaft ernannt und seinen lebenslangen Beitrag zur Weiterentwicklung der analytischen Chemie würdigte man 1999 mit der Verleihung der Clemens-Winkler-Medaille der Fach-



Wilhelm Fresenius war seit 1950 Gründungsherausgeber der CLB. CLB-Begründer Wilhelm Foerst – von der Hauptaufgabe her Herausgeber der „Ullmann Enzyklopädie der Technischen Chemie“ – und der Umschau-Verlag gewannen Fresenius, weil ihm schon damals eine verständliche Vermittlung von Wissenschaft am Herzen lag. Die CLB hieß in ihren ersten beiden Ausgaben vollständig „Chemie – die verständliche Zeitschrift für Labor und Betrieb“. Dem Arbeitgeber von Foerst, der Verlag Chemie in Weinheim, erschien der Anspruch der Zeitschrift zu niedrig für das eigene Portfolio, nicht so jedoch Fresenius und dem Frankfurter Umschau-Verlag... (Foto: RK).

gruppe Analytische Chemie. Die höchste Auszeichnung der Gesellschaft Deutscher Chemiker, die Ehrenmitgliedschaft, wurde ihm 2001 zuteil.

Er machte sich auch als Autor von Standardwerken, Dozent und Vorsitzender vieler Fachgremien einen Namen. So war er von 1949 bis Ende Januar 2002 Herausgeber des „Fresenius Journal of Analytical Chemistry“ und seitdem Honorary Editor der Zeitschrift „Analytical and Bioanalytical Chemistry“. Das als „Fresenius‘ Zeitschrift für analytische Chemie“ gegründete Magazin wurde 140 Jahre lang kontinuierlich durch Mitglieder der Familie Fresenius herausgegeben.

Vor allem auch für sein überdurchschnittliches Engagement im öffentlichen Leben wurde ihm 1999 das Bundesverdienstkreuz überreicht. Die Evangelische Kirche von Hessen und Nassau (EKHN) würdigte Fresenius als einen ihrer Gründungsväter. Er war fast 40 Jahre lang Mitglied der Synode und viele Jahre Vorsitzender des Diakonischen Werkes. In Wiesbaden saß er 20 Jahre als Abgeordneter in der Stadtverordnetenversammlung und war CDU-Fraktionsvorsitzender. Der Vater dreier Kinder war bis zu seinem Tod im Unternehmen präsent und in der Öffentlichkeit aktiv.

Die CLB wird ihm stets ein ehrendes Andenken bewahren.

Rolf Kickuth

Viscum AG forscht für Krebstherapie

Erster rekombinanter Pflanzenwirkstoff wird erprobt

Der Wirkstoff der Mistel soll bald in grossem Maßstab gentechnisch hergestellt werden: Gemeinsam haben die Viscum AG in Bergisch Gladbach und die Gesellschaft für Biotechnologische Forschung in Braunschweig (GBF) ein industrietaugliches Verfahren für die Produktion des Pflanzenproteins Viscumin entwickelt.

Viscumin gehört zur Substanzklasse der Lektine und ist ein Eiweissmolekül mit krebsbekämpfender und das Immunsystem stimulierender Wirkung.

Das daraus gewonnene Präparat Aviscuminum wird bereits unter Verantwortung der Viscum AG in umfangreichen klinischen Prüfungen getestet, die Voraussetzung für eine mögliche spätere Zulassung

als Medikament. Wenn es zum Einsatz kommt, wird es das erste gentechnisch hergestellte Medikament aus einem Pflanzenwirkstoff sein.

Den beteiligten Forschern ist es gelungen, das Gen des Mistel-Wirkstoffs zu finden und in das Darmbakterium *Escherichia coli* einzuschleusen. „Die Bakterien können das Viscumin in wesentlich größeren Mengen herstellen als die Pflanze selbst“, erklärt Dr. Martin Langer, Business Development Manager der Viscum AG, „und sie produzieren es in gleichbleibender Qualität.“

Die GBF erarbeitete das „Scale-up“ vom Labormassstab zur Produktion im Bioreaktor und entwickelte so ein robustes Produktionsverfahren.

Kooperation PerkinElmer/Vivascience/Sartorius

Reagenzplattform für die Analyse von Biomarkern

PerkinElmer Inc., führender Anbieter im Bereich der Arzneimittelentwicklung und Lifescience-Forschung sowie analytischer Lösungen, und die Vivascience AG, führender Lieferant von Produkten und innovativer Techniken für die Proteinreinigung und -analyse, haben eine Kooperation im Bereich Biomarker-Screening und Biomarker-Identifizierung vereinbart.

Gemäß dieser Vereinbarung wird Vivascience dem Unternehmen PerkinElmer seine patentierte Technik der Membranadsorber-Chromatographie zur Isolierung von Biomarkern zur Verfügung

stellen. PerkinElmer wird diese Technik mit eigenen proprietären Methoden kombinieren, um anwenderfreundliche Produkte im Kitformat zu entwickeln, mit denen sich Proben von Biomarkern fraktionieren und präparieren lassen. Die Kits werden in PerkinElmers automatisierte Plattform für das Biomarker-Screening integriert, die die MultiProbe II zur automatischen Weiterbearbeitung der Kits und das proTOFTM 2000 MALDI O-TOF Massenspektrometer zur Detektion der Biomarker umfasst. Die Vivascience AG in Hannover ist ein 100-prozentiges Tochterunternehmen der Sartorius AG in Göttingen.

NACHRICHTEN & NOTIZEN

Die MWG Biotech AG, Biotechnologiespezialist aus Ebersberg, meldet den Abschluss eines weltweiten Liefervertrages für Oligonukleotide mit einem großen amerikanischen, international tätigen Pharmaunternehmen. Aus der Liefervereinbarung wird ein Jahresumsatz von rund einer Million Euro erwartet. Der Geschäftsbereich Genomic Synthesis (Herstellung synthetischer Nukleinsäuren) erwirtschaftete im Geschäftsjahr 2003 einen Umsatz von 19,7 Millionen Euro bei einem EBITDA von 3,4 Millionen Euro.

Der Düngemittelkonzern Norsk Hydro hat seinen Geschäftsbereich Hydro Agri ausgegliedert. Das selbständige Unternehmen wird als Yara GmbH & Co. KG in Oslo an die Börse gehen. Die Zweigniederlassung in Rostock heißt Yara Rostock. Damit soll das Kerngeschäft, die Produktion und der Vertrieb von Mineraldüngern konzentrierter und leistungsfähiger gemacht werden.

Clariant, Muttenz/Schweiz, verkauft seine Geschäftseinheit Elektronikmaterialien (Zulieferer Halbleiter und Flachbildschirme) für 518 Millionen CHF an die Carlyle Gruppe. Die Transaktion ist Teil eines Programms, das den Verkauf verschiedener Geschäfte, die Verbesserung der operativen Leistung und einen weltweiten Stellenabbau umfasst.

BASF, Bayer und Hoechst trennen sich von ihren DyStar-Beteiligungen. Die Übernahme des Frankfurter Textilfarbstoffherstellers DyStar durch den weltweit tätigen Finanzinvestor Platinum Equity, Los Angeles, Kalifornien, wurde am 5. August 2004 abgeschlossen. Die zuständigen Aufsichtsbehörden haben der Transaktion zugestimmt.

Die Axaron Bioscience AG, ein Biotech-Unternehmen in Heidelberg, startet die Phase II der klinischen Entwicklung für den Schlaganfall-Wirkstoff AX200. Die Axaron Bioscience AG entwickelt Therapien zur Behandlung neurodegenerativer Erkrankungen wie Schlaganfall und Parkinson.

Die Medigene AG, ein deutsch-amerikanisches Biotechnik-Unternehmen, hat die Krebs-Medikamentenkandidaten und die Technikplattform der Munich Biotech AG erworben. Das Umsatzpotenzial dieser Produkte, die auf dem therapeutischen Prinzip der Anti-Angiogenese basieren, wird nach erfolgreichem Abschluss der weiteren klinischen Entwicklung und Erhalt der Marktzulassung auf über 500 Millionen Euro pro Jahr geschätzt.

Icon Genetics AG und Berlex Inc., die US-Niederlassung von Schering AG Deutschland, haben einen Kooperationsvertrag zur Medikamentenherstellung in transgenen Pflanzen unterzeichnet. Ziel ist die Untersuchung von Menge und Qualität der unter ICONS geschützter biotechnologischer Produktionsplattform magnICON hergestellten pharmazeutischen Proteine, die sich bei Berlex in der vorklinischen Prüfung befinden. Finanzielle Einzelheiten der Vereinbarung wurden nicht bekanntgegeben.

Neue Citralanlage bei der BASF in Ludwigshafen Gewinnen durch Verbund und Verlass

„Wir haben Aufträge, die anderen nicht“, bemerkte BASF-Vorstandsmitglied Peter Oakley als Antwort auf die Frage, warum die BASF nicht in dem Klagechor vieler Feinchemie-Anbieter mitsinge.

Auf der Pressekonferenz zur Einweihung der neuen Citralanlage in Ludwigshafen begründete er den Erfolg des Unternehmens sowohl durch kostenoptimierte Produktionsmöglichkeiten dank der schon legendären Verbundstruktur in Europas größtem Chemieanlagenkomplex wie auch durch Ansprüche der Kunden auf Verlässlichkeit. „Die BASF gewinnt zunehmend Kunden, weil diese sich darauf verlassen können, dass wir auch in fünf Jahren noch da sind“, erläuterte er mit dem Hinweis auf Entwicklungs- und Liefersicherheit.

Das Engagement des Ludwigshafener Unternehmens in der Feinchemie verbindet Oakley mit dem prognostizierten Wachstum von

Wirtschaft trifft Politik bei der Einweihung zum symbolischen Einfügen des letzten Puzzle-Teilchens der Anlage, die in nur drei Monaten genehmigt wurde (v.l.): BASF-Vorstandsvorsitzender Dr. Jürgen Hambrecht, Werksleiter Dr. Albert Heuser, Ludwigshafens Oberbürgermeisterin Dr. Eva Lohse (CDU) und der Ministerpräsident von Rheinland-Pfalz, Kurt Beck (SPD).



Erläutern Technik und ökonomisches Umfeld der abgebildeten Anlage (v.l.), die zusammen mit Anlagen für Citral-Folgeprodukte 300 Millionen Euro kostete: Feinchemie-Spezialist Dr. Andreas Henne, Werksleiter Dr. Albert Heuser, Vorstand Peter Oakley, Leiter Feinchemie Martin Laudenschlager und Europa-Pressesprecherin Elisabeth Schick (Fotos: RK).

überdurchschnittlich sechs Prozent pro Jahr bis zum Jahre 2010 in diesem Bereich, verglichen mit dem Wachstum der Weltwirtschaft von nur 3,1 Prozent im selben Zeitraum. Gründe dafür lägen im gestiegenen Gesundheitsbewusstsein sowie in der höheren Lebenserwartung. „Der demographische Wandel, der uns nicht nur in Deutschland viel sozialpolitischen Diskussionsbedarf liefert, ist aus Sicht der Feinchemie eine Chance, die wir in Kosmetik, im Pharma Contract Manufacturing und in der Ernährung für Mensch und Tier nutzen“, so Oakley. Dazu wolle man in der Feinchemie organisch wachsen, aber auch Akquisitionen tätigen, vom Umsatz her im zweistelligen bis zum mittleren dreistelligen Millionenbereich.

Die neue Citralanlage ersetzt eine Bestehende, die von (1981) 2200 Jahrestonnen auf 10000 Jahrestonnen ausgebaut wurde. Die neue Anlage hat eine Kapazität von 40000 Jahrestonnen und liefert damit mehr als zehnmals soviel von der Substanz wie die Anlage des einzigen Mitbewerbers, Kuraray in Japan (zudem gibt es sehr kleine Anlagen, die Citral statt auf

chemischem Wege zu erzeugen aus Naturstoffen darstellen).

Die neue Anlage arbeitet mit 300 bar Druck in der ersten Stufe und über 300 Grad Celsius Reaktionstemperatur in der dritten Stufe. In zwei Reaktoren befinden sich BASF-eigene Katalysatoren. Sie wird gesteuert und geregelt durch ein Prozessleitsystem der US-Firma Emerson Process Management, die 2001 aus Fisher Rosemount entstanden. Die Anlage ist auch eine Konsequenz der Bemühungen des Unternehmens, Kosten zu sparen. Dafür durchleuchtete man Anlage für Anlage, optimiere Verfahrensschritte, so Werksleiter Dr. Albert Heuser. Schon seien 250 Millionen der angepeilten 450 Millionen Euro an jährlichen Einsparungen am Standort Ludwigshafen erzielt.

Citral soll der Schlüsselbaustein der BASF-Feinchemie werden. Basischemikalien für die Synthese sind Methanol und Isobuten. Endprodukte sind die synthetisch hergestellte Vitamine A und E (dessen Produktion sich nun auf 20000 Jahrestonnen verdoppelt), Carotinoide, aber auch Aromachemikalien etwa mit Rosen-, Zitronen- oder Lavendelduft. *Rolf Kickuth*

BASF **Michael Vassiliadis** wurde neues Mitglied des Aufsichtsrats der Aktiengesellschaft. Er tritt damit die Nachfolge von **Dr. Jürgen Walter** an, der weiterhin als stellvertretender Aufsichtsratsvorsitzender dem Aufsichtsrat der BASF Schwarzheide GmbH angehören wird.

BAXTER EUROPE Neuer Präsident der Firma ist **Jim Utts**. Der 51-Jährige verantwortete zuvor als General Manager weltweit die Fachgebiete Onkologie und Nutrition im Geschäftsbereich Medication Delivery.

DEUTSCHES MUSEUM **Wolfgang Heckl**, Professor für Oberflächentopographie an der Fakultät für Geowissenschaften der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) München, wird Generaldirektor des Deutschen Museums. Der 46-jährige Physiker setzte sich gegen 60 Bewerber durch und tritt die Nachfolge von Professor Wolf Peter Fehlhammer an.

DKG E.V. Neuer Vorstand der Deutschen Krebsgesellschaft (DKG) ist **Prof. Dr. M. Bamberg**. Der Tübinger Klinikdirektor tritt die Nachfolge von **Prof. Klaus Höffken** (Jena) an.

FILTRATION SOCIETY Zum Vorsitzenden des Verbands wurde der Geschäftsführer von Whitehouse Scientific **Dr. Graham Rideal** gewählt. Der gemeinnützige Verein will die Kenntnisse in Konstruktion und Anwendung von Filtrations- und Abscheidungsverfahren fördern.

HGV E.V. Neuer Leiter Kommunikation und Medien bei der Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGV) wird **Thomas Gazlig**. Bisher leitete er die Presse- und Öffentlichkeitsarbeit der Gesellschaft für Biotechnologische Forschung (GBF) in Braunschweig. Der bisherige Kommunikationschef, **Dr. med. Hinrich Thoelken**, kehrt

nach gut zwei Jahren in das auswärtige Amt zurück.

MEDIGENE AG **Dr. Ulrich Delvos** ist Vorstand für Forschung und Entwicklung bei der Aktiengesellschaft. Der Mediziner war bisher Vorstandsmitglied und Geschäftsführer der Aventis Behring GmbH und zugleich Senior Vice President und Chief Scientific Officer der Aventis Behring LLC.

PHENION GMBH Neue Geschäftsführerin der Forschungsgesellschaft ist **Dr. Andrea Sättler**. Ihr Vorgänger, **Dr. Thomas Gassemeyer** hat bei der Henkel KGaA in Düsseldorf die Leitung der Plattform Fibers in der Zentralen Henkel-Forschung übernommen.



Am Fachbereich Medizin der Universität Mainz wurde der **Wulf-Vater-Dihydropyridine-Forschungspreis** an Frau Privat-Dozentin **Dr. Andrea Welling** aus dem Institut für Pharmakologie und Toxikologie der TU München vergeben. In ihrer prämierten Habilitationsschrift zur Wirkung der Dihydropyridine auf Herzmuskel und Gefäßmuskulatur beeindruckte Frau Dr. Welling durch originelle und intelligente Experimente. Dihydropyridine haben vor knapp 30 Jahren ein neues Zeitalter der Behandlung von Herz-Kreislaufkrankungen eingeleitet.

Der mit 50 000 Euro dotierte **Erwin Schrödinger-Preis** für interdisziplinäre Forschung wird in diesem Jahr von der Helmholtz-Gemeinschaft deutscher Forschungszentren anlässlich der Jahrestagung im Dezember 2004 in Brüssel an ein Team aus Physikern und Chemikern vergeben. **Frank Henrich, Ralph Krupke, Marcel Mayor und Heiko Weber** aus dem Institut für Nanotechnologie des Forschungszentrums Karlsruhe entwickelten ein seit langer Zeit gesuchtes Verfahren zur Trennung von winzigen Kohlenstoffröhrchen und es gelang ihnen, den elektrischen Strom durch einzelne organische Moleküle zu vermessen.

Ein Internationales Gremium wählte **Professor Volker Schurig** vom Institut für Organische Chemie der Universität Tübingen anlässlich des 16. Symposiums über Chiralität in New York zum diesjährigen Preisträger. Er erhält die **Chiralitäts-Medaille** als erster Wissenschaftler aus Deutschland für seine „herausragenden Beiträge auf dem Gebiet der Trennung von Stereoisomeren mittels chromatographischer Techniken.“ Die Umwandlung der rechts- und linkshändigen Formen ist besonders bei chiralen Medikamenten wichtig. Meist entfaltet nur das Bild die gewünschte Wirkung, während das Spiegelbild des Medikaments sogar giftig oder fruchtschädigend sein kann.

EHRUNGEN

Der mit 10 000 Euro dotierte Firmenich Flavor and Fragrance Science Award 2004 ging an Dr. Andrea Büttner vom Institut für Lebensmittelchemie der Technischen Universität München. Damit wurden ihre Arbeiten zur Aromaforschung ausgezeichnet, insbesondere ihre Studien zum Einfluss der menschlichen Physiologie auf die Geruchswahrnehmung beim Verzehr von Lebensmitteln.



Sehr geringe Matrixempfindlichkeit

Dirk Flottmann, Jürgen Hins, Christian Rettenmaier, Norbert Schnell, Andreas Trinkle

Bisher wenig beachtete Methoden zur Ionenanalytik stellen die zweidimensionale Isotachophorese (ITP-ITP) [4-7] bzw. die Kopplung zwischen Isotachophorese und Kapillarzonenelektrophorese (ITP-CZE) [8,9] dar. Diese Verfahren zeichnen sich durch sehr geringe Matrixempfindlichkeit aus und sind prinzipiell auf alle ionischen bzw. ionisierbaren Analyten anwendbar.

Stark matrixbehaftete Proben stellen in der instrumentellen Ionenanalytik häufig ein Problem dar, da Überschusskomponenten die Analyse stören oder die zum Einsatz kommenden Analysengeräte beschädigen können [1-3]. Deshalb werden oft zeitaufwendige Probenvorbereitungsschritte benötigt, die häufig zu schlechter Reproduzierbarkeit neigen und die Analysenkosten erhöhen.

Die Autoren

Prof. Dr. Dirk Flottmann, Jahrgang 1965: Studium der Chemie an der Universität Bielefeld, 1995-2002 Wacker Chemie GmbH/Burghausen und Wacker Siltronic AG/Singapur. Seit April 2002 arbeitet er im Fachbereich Chemie der FH Aalen im Studienschwerpunkt Analytische Chemie. Sein Forschungsinteresse liegt auf dem Gebiet der Elementanalytik, der Spurenanalytik und neuartiger Trennverfahren.

Dip.-Ing. (FH) Jürgen Hins, Jahrgang 1969: Studium der Chemie an der FH Aalen, bis 2003 Mitarbeiter der Firma J&M Mess- und Regeltechnik GmbH, seit September 2003 Mitarbeiter im BMBF-Projekt von Prof. Flottmann und Prof. Schnell.

Dipl.-Ing. (FH) Christian Rettenmaier, Jahrgang 1978: Studium der Chemie an der FH Aalen, 2003-2004 Forschungsaufenthalt in Singapur, ab Oktober 2004 Beginn der Dissertation an der Universität Freiburg.

Andreas Trinkle, Jahrgang 1976: Studium der Chemie an der FH Aalen, ab September 2004 Beginn der Diplomarbeit bei der Landeswasserversorgung In Langenau auf dem Gebiet der organischen Spurenanalytik mittels LC-MS.

Prof. Dr. Norbert Schnell, Jahrgang 1960: Studium der Biochemie an der FU Berlin und der Eberhard-Karls-Universität Tübingen, 1991-93 Forschungsaufenthalt am MIT und Caltech, USA, 1994-2002 AstraZeneca plc in Manchester, UK und Boston, USA. Seit September 2002 arbeitet er im Fachbereich Chemie der FH Aalen im Studienschwerpunkt Molekulare Biotechnologie. Sein Forschungsinteresse liegt auf dem Gebiet der Vernetzung von Chemie und Biologie, beispielsweise der Aufklärung der Interaktionen von Molekülen mit lebenden Zellen.

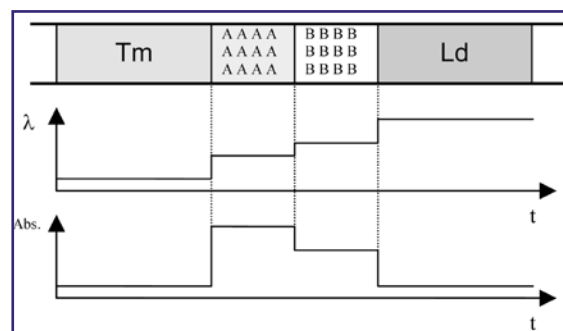


Abbildung 1: Darstellung des Verlaufs der Leitfähigkeit und der UV-Absorption eines isotachophoretischen Systems

Isotachophorese

Bei der Isotachophorese handelt es sich um eine elektrophoretische Trennmethode, bei der Ionen und ionisierbare Komponenten im elektrischen Feld gemäß ihrer elektrophoretischen Mobilitäten getrennt und detektiert werden.

Die ITP arbeitet mit einem diskontinuierlichen Elektrolytensystem, bestehend aus einem Leit- (Leading electrolyte, Ld) und einem Folgeelektrolyten (Terminating electrolyte, Tm). Der ansonsten übliche Medienfluss unterbleibt dank des hydrodynamisch geschlossenen Systems [10].

Die Analytionen ordnen sich ihrer Mobilität entsprechend zwischen dem Leitelektrolyt mit der höchsten Mobilität und dem Folgeelektrolyt mit der geringsten Mobilität unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes in homogenen, diskreten Zonen an und wandern im sich dann einstellenden stationären Zustand alle mit gleicher Geschwindigkeit (griech.: isos = gleich, tachos = Geschwindigkeit).

Am Ende der Trennsäule wird ein treppenartiges Leitfähigkeitssignal aufgezeichnet, wobei die zeitliche Länge einer Analytzone zur Quantifizierung, die relative Stufenhöhe ($L_d = 0$; $T_m = 1$) zur Identifikation dient.

Zusätzlich zur Leitfähigkeit kann die UV/Vis-Absorption gemessen werden, wobei ein rechteckiges Signal erhalten wird (Abbildung 1).

Methodenentwicklung

Die Selektivität einer isotachophoretischen Trennung kann durch eine Veränderung der effektiven Mobilitäten der Analyten beeinflusst werden. Den wichtigsten Parameter stellt dabei der pH-Wert dar, der die effektive Ladung beeinflusst [10].

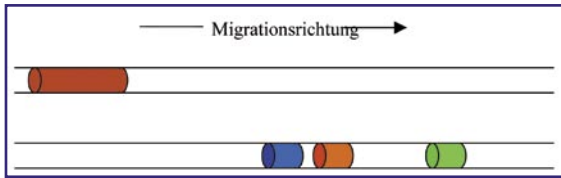


Abbildung 2: Schematische Darstellung einer CZE-Trennung.

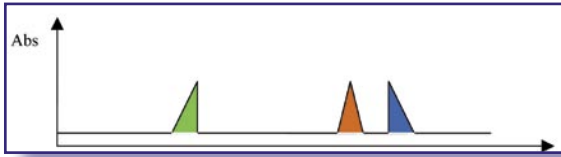


Abbildung 3: Schematisches UV/Vis-Signal. Die Abweichungen der Peakformen von der idealen Gauss-Kurve ergeben sich aus Elektrodispersionseffekten [1]

- grün: höhere Mobilität als Elektrolyt
- braun: gleiche Mobilität wie Elektrolyt
- blau: niedrigere Mobilität als Elektrolyt

Eine weitere Möglichkeit zur Mobilitätsbeeinflussung besteht in der Zugabe von Komplexbildnern zum Leitelektrolyten. Der Komplexbildner soll mit dem Analyten im dynamischen Gleichgewicht stehen und somit dessen effektive Ladung beeinflussen und/oder den effektiven Radius des Analytens vergrößern.

Kapillarzonenelektrophorese

Im Gegensatz zur ITP arbeitet die CZE mit einem kontinuierlichen Elektrolytssystem. Dadurch wandern die Analytionen mit individueller Geschwindigkeit, wodurch die aufgezeichneten Analytsignale Peakform aufweisen. Ein elektroosmotischer Fluss (EOF) kann durch das hydrodynamisch geschlossene System nicht auftreten [10].

Abbildung 2 zeigt schematisch die Trennung der Analyten im Hintergrundelektrolyt, Abbildung 3 die dazugehörigen Signale der UV-Absorption.

Gerätebeschreibung

Das ItaChrom II Kapillarisotachophoresegerät der Firma „J&M Analytische Mess- und Regeltechnik GmbH, Aalen“ wird mit zwei gekoppelten Kapillaren vertrieben [10]. Die Vortrennsäule ist mit einem Leitfähigkeitsdetektor, die Analytische Säule sowohl mit einem Leitfähigkeitsdetektor als auch mit einem UV-Detektor ausgestattet.

Durch die Kopplung zweier Kapillaren wird sowohl die zweidimensionale ITP, als auch die ITP-CZE-Kopplung ermöglicht. Überschussbestandteile lassen sich in der Oberen Säule quantifizieren und abtrennen, bevor die in geringerer Konzentration vorliegenden Komponenten in die dünnere Analytische Säule übergeben werden; dort werden sie getrennt und schliesslich detektiert. Das Injektionsventil fasst 30 µl; zusätzlich kann durch ein über dem Ventil angebrachtes Septum ein frei wählbares Volumen injiziert werden.

Die Vorratsgefäße CE1 und CE2 sind mit Leitelektrolyt bzw. Hintergrundelektrolyt gefüllt und dienen zur Bereitstellung einer ausreichenden Pufferkapazität. Sie sind durch semipermeable Membranen von den Kapillarsäulen getrennt, wodurch das Auslaufen der Elektrolytlösungen durch den hydrostatischen Druck in den Kapillaren verhindert wird. Im Vorratsgefäß TE befindet sich der Endelektrolyt, der die geringste elektrophoretische Mobilität im System besitzt. Abbildung 4 zeigt den schematischen Geräteaufbau.

Applikationsbeispiele

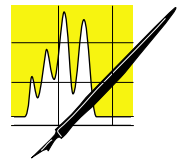
Wasseranalytik

Die Qualität von Fluss-, Regen-, Trink- und Abwasser hängt unter anderem vom Gehalt anorganischer Anionen ab. Mit der Isotachophorese können z.B. die Ionen Chlorid, Nitrat, Sulfat, Nitrit, Fluorid und Phosphat gleichzeitig bestimmt werden. Nachfolgend sind die verwendeten Kapillarsäulen und das Elektrolytssystem aufgeführt.

	Länge [mm]	Innendurchmesser [µm]	Stromstärke [µA]
Vortrennsäule:	160	800	200
Analytische Säule:	160	300	8

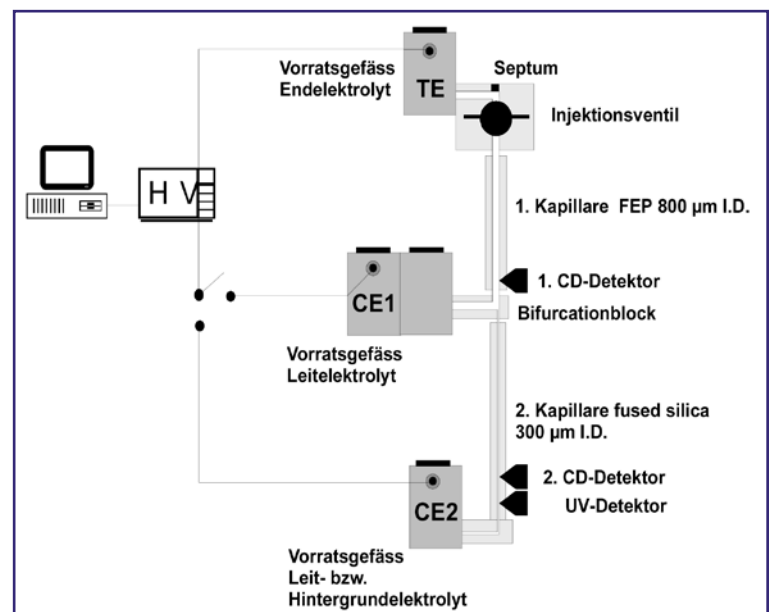
Leitelektrolyt 1:	5,0 mmol/L Dithionsäure 7,0 mmol/L β-Alanin 1,8 mmol/L Magnesiumacetat 0,1% Methylhydroxyethylcellulose pH = 3,5
Leitelektrolyt 2:	1,0 mmol/L Dithionsäure 1,4 mmol/L β-Alanin 0,4 mmol/L Magnesiumacetat 0,02% Methylhydroxyethylcellulose pH = 3,5
Endelektrolyt:	5 mmol/L Citronensäure

Die Analysenzeit pro Lauf beträgt etwa 20 Minuten.



AUFsätze

Abbildung 4: Schematische Darstellung des ItaChrom II (manuelle Version)



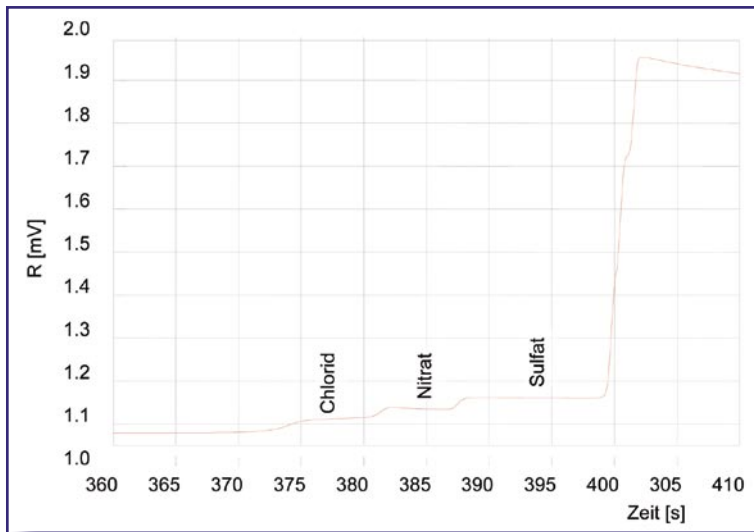


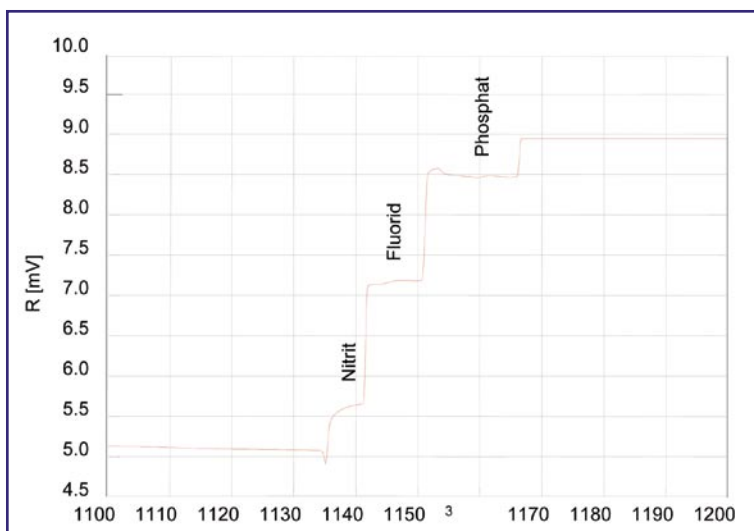
Abbildung 5: Leitfähigkeitssignal der Vortrennsäule c (Cl⁻, NO₃⁻, SO₄²⁻): je 300 µmol/L

Da o.g. Anionen in realen Proben in verschiedenen Konzentrationsbereichen vorkommen, müssen in den beiden Säulen unterschiedliche Konzentrationen des Leitions verwendet werden [10], um alle Analyten in einem Analysengang quantifizieren zu können.

Durch den Zusatz von Mg²⁺ wird die effektive Mobilität des Sulfats erniedrigt und dadurch die Trennung von Sulfat und Nitrat ermöglicht.

Die Anionen Chlorid, Nitrat und Sulfat können dank der vergleichsweise hohen Konzentrationen bereits in der Vortrennsäule quantifiziert werden. Nach Durchgang durch die Vortrennsäule werden sie ausge-

Abbildung 6: Leitfähigkeitssignal der Analytischen Säule c (NO₂⁻, F⁻, PO₄³⁻): je 30 µmol/L



schleusst. Die verbleibenden Analyten werden in die Analytische Säule überführt und dort quantifiziert.

Abbildungen 5 und 6 zeigen die Leitfähigkeitssignale der Vortrenn- bzw. Analytischen Säule eines Standards.

Für die in geringen Konzentrationen vorkommenden Anionen ergeben sich nach DIN 32 645 [11] die Nachweis- (LOD) und Bestimmungsgrenzen (LOQ) zu:

	Nitrit	Fluorid	Phosphat
LOD [µmol/L]	2,0	2,9	2,5
LOQ [µmol/L]	6,9	9,8	8,3

Bestimmung von Fluorid, Phosphat und Saccharinat in Zahnpasta

Die Bestimmung der Gehalte an Fluorid, Phosphat und Saccharin einer handelsüblichen Zahnpasta wurde mittels Standardaddition durchgeführt, um eventuelle Einflüsse der Matrix auf die Trennung auszuschliessen.

Nachfolgend sind die verwendeten Säulen und das Elektrolytssystem aufgeführt:

	Länge [mm]	Innendurchmesser [µm]	Stromstärke [µA]
Vortrennsäule:	160	800	250
Analytische Säule:	160	300	50

Leitelektrolyt:	8 mmol/L HCl 3,5 mmol/L β-Alanin 3 mmol/L Bis-(tris)-propan 0,1% Methylhydroxyethylcellulose pH = 3,60
Endelektrolyt:	10 mmol/L Essigsäure

0,30 g der Zahnpasta wurden in einen Messkolben eingewogen, in 50 mL Wasser gelöst und mit dieser Lösung eine Standardaddition durchgeführt.

Abbildung 7 zeigt die Überlagerung des Leitfähigkeits- und des UV-Absorptionssignals bei 254 nm der so erhaltenen Lösung.

In Abbildung 8 sind die Kalibriergeraden (Standardadditionsverfahren) für o.g. Analyten dargestellt. Alle drei Analyten sind zu über 99,9% linear korreliert.

Bestimmung von Thiamin in Cornflakes

Ein Beispiel für die Anwendung der Kopplung von ITP und CZE stellt die Bestimmung von Thiamin in einem handelsüblichen Cornflakes-Produkt dar. Thiamin, das zur Gruppe der B-Vitamine gehört, spielt in Form seines Phosphorsäureesters eine wichtige Rolle als Coenzym im Stoffwechsel [12].

Die instrumentellen Parameter sind in folgender Tabelle zusammengefasst:

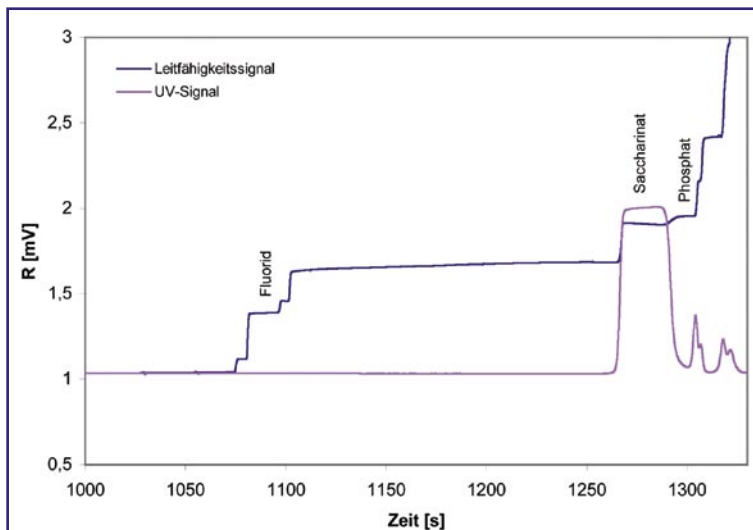


Abbildung 7: Isotachopherogramm einer 6 g/L Zahnpastalösung; Überlagerung des Leitfähigkeits- und des Absorptionssignals bei 254 nm. Bei den UV-Signalen hinter Saccharinat handelt es sich um Brechungssignale.

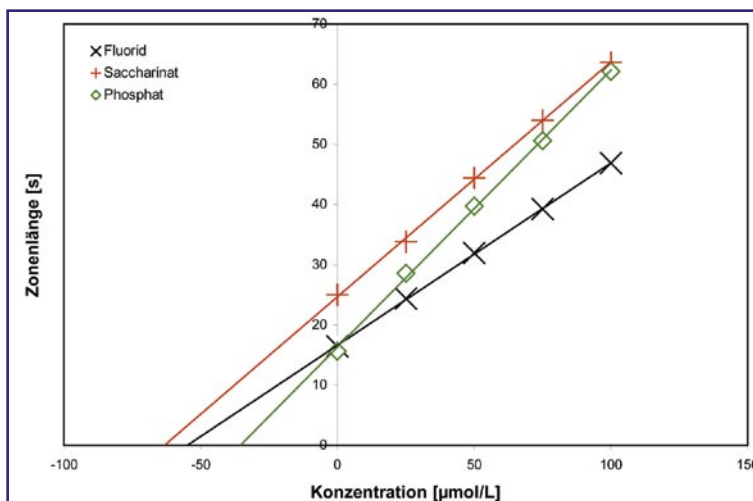


Abbildung 8: Standardaddition von Fluorid, Phosphat und Saccharinat

	Länge [mm]	Innendurchmesser [µm]	Stromstärke [µA]
Vortrennsäule:	90	800	250
Analytische Säule:	160	300	50

Leitelektrolyt:	10 mmol/L Ammoniumacetat 0,1% Methylhydroxyethylcellulose pH = 5,0
Hintergrundelektrolyt:	50 mmol/L Essigsäure 0,1% Methylhydroxyethylcellulose pH = 3,1
Endelektrolyt:	10 mmol/L Essigsäure

1,0 g handelsübliche Cornflakes wurden zerkleinert, in 10 mL Wasser aufgeschlämmt und anschliessend über ein 0,45 µm-Filter filtriert. Die erhaltene Lösung wurde in 5 Aliquote aufgeteilt. Zu diesen Aliquoten wurden 1, 2, 3 und 10 µmol/L Thiamin zuaddiert und anschliessend vermessen.

Das Thiamin zeigt eine gute UV-Absorption bei 254 nm, weswegen diese Wellenlänge zur Auswertung der Experimente herangezogen wurde.

Abbildung 9 zeigt die Signale des Oberen- und Unteren Leitfähigkeitsdetektors sowie des UV-Detektors.

In Abbildung 10 ist das Ergebnis der Standardadditionskalibrierung (Auswertung des UV-Detektors bei 254 nm) graphisch dargestellt.

Der Thiamingehalt in den Cornflakes wurde zu 62,4 mg/kg bestimmt. Der Tagesbedarf eines Erwachsenen beträgt ca. 1 – 2 mg [13].

Zusammenfassung

Die entwickelten zweidimensionalen ITP-ITP bzw. ITP-CZE-Methoden liefern eine hohe Auflösung der interessierenden Substanzen. Voraussetzung hierfür ist, dass die effektiven Mobilitäten der Analyten innerhalb des durch die Wahl des Leit- bzw. Endelektrolyten aufgespannten „Mobilitätsfensters“ liegen.

Im Gegensatz zu klassischen Bestimmungen, wie z.B. Redox-titrationen liefert die zweidimensionale ITP die Möglichkeit einer hochselektiven, simultanen Bestimmung mit kürzeren Analysenzeiten.

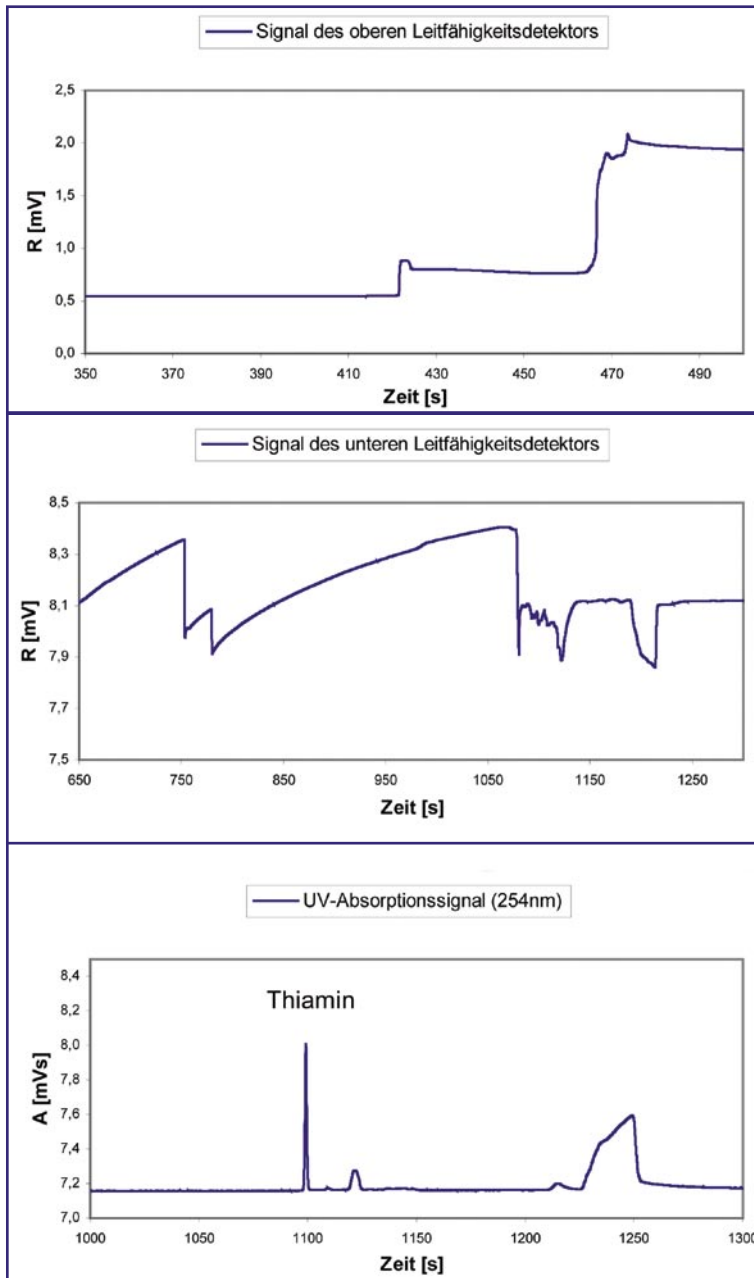
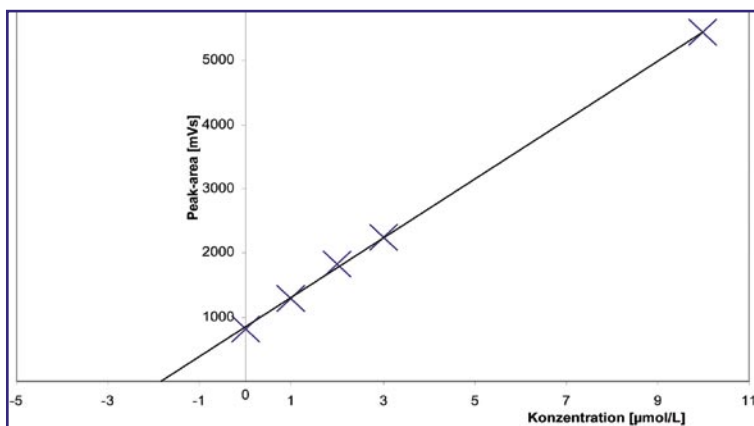


Abbildung 9: Signale der drei Detektoren für einen Analysengang mit oben beschriebener Cornflakeslösung.

Abbildung 10: Standardadditionsgerade für Thiamin (Korrelationskoeffizient: 0,99)



Die on-line Kombination der Kapillarisotachophorese (C-ITP) mit der Kapillarzonenelektrophorese (CZE) in der gekoppelten Säulenordnung zeigt die inhärente Bedeutung der ITP als Aufkonzentrationsschritt für die nachfolgende Trennung nach dem Prinzip der CZE. Die Entfernung von Matrixbestandteilen in der Vortrennsäule verhindert das Überladen der Analytischen Säule, so dass niedrige Nachweisgrenzen erreicht werden können. Die Matrixentfernung im 1. ITP-Schritt kann auch einen grossen Vorteil gegenüber der Ionenchromatographie darstellen.

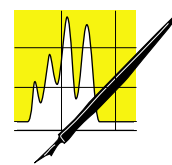
Die vorgestellten Analysenverfahren können erfolgreich für die Untersuchung verschiedenster Lebensmittel angewendet werden. Die zahlreichen Möglichkeiten zur Optimierung der elektrophoretischen Bedingungen erlauben die gezielte Anpassung des Systems an das jeweilige Trennproblem bzw. die Probenmatrix. Darüber hinaus wird nur eine wenig aufwändige Probenvorbereitung benötigt.

Die in diesem Beitrag beschriebenen Beispiele sind nur zur Inspiration gedacht und zeigen nur einen kleinen Teil der vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten.

Literatur

- [1] R. Saari-Nordhaus, L.M. Nair, J.M. Anderson, J. Chromatogr. 671, (1994) 159-163
- [2] F.A. Bytenhuys, J. Chromatogr. 218, (1981) 57-64
- [3] P.R. Haddad, J. Chromatogr. 546, (1991) 411-421
- [4] F.M. Everaerts, J.I. Becker, T.P.E.M. Verheggen, Isotachophoresis: Theory, Instrumentation and Applications, Elsevier, Amsterdam, 1976
- [5] P. Gebauer, W. Thormann, P. Bocek, J. Chromatogr. 608, (1992) 47-57
- [6] J. Boden, K. Bächmann, J. Chrom. 734, (1996) 319-330
- [7] B. Szczygiel, A. Waligora, Galvanotechnik 92 (2001), Nr. 11
- [8] D. Kaniansky, J. Marak, J. Chrom. 498, (1990) 191-204
- [9] D. Kaniansky, I. Zelensky, A. Hybenova, F.I. Onuska, (1994) Anal Chem 66: 4258-4264
- [10] T. Meissner, ITP-Kompodium, J&M Analytische Mess- und Regeltechnik, Aalen, 1998
- [11] Deutsches Institut für Normung, DIN 32645: Nachweis-, Erfassungs- und Bestimmungsgrenze, Beuth-Verlag, Berlin, 1994
- [12] P. Karlsson, D. Doenecke, J. Koolman, Kurzes Lehrbuch der Biochemie, 14. Aufl., G. Thieme Verlag, Stuttgart, 1994
- [13] E. Buddecke, Grundriss der Biochemie, 8. Aufl., W. de Gruyter Verlag, Berlin, 1989

Von Radikalen zu Radikalfängern (Teil 2)



AUFSÄTZE

Stephen Schulz

Mit der „Jugend forscht-Arbeit 2003“ wurde ein Weg aufgezeigt, Anthocyane zu isolieren und ihre Struktur aufzuklären. Anthocyane zeigen neben der faszinierenden Vielfalt an natürlichen Farben auch eine bedeutende biochemische Wirkung. Dieser Teil 2 des Artikels (Teil 1 in Ausgabe 07-2004) zeigt eine alternative Synthese-Methode und stellt einen Methodenvergleich an.

2.3 Synthese Cyclus B

2.3.1 Test einer alternativen Synthese-Methode

Gesucht und getestet wurde ein zur *Reformatsky*-Synthese alternativer Weg, das Chalkon [M2] mit Hydroxylgruppe in Position 3 zu synthetisieren.

Der erste Schritt vom Benzaldehyd zur Dihydroxypropionsäure verläuft über die *Perkin*-Synthese zur α,β -ungesättigten Propionsäure. Dazu wird das Vanillin mit Essigsäureanhydrid und Kaliumacetat als Hilfsbase erhitzt. Da Essigsäureanhydrid aus sicherheitstechnischen, gesetzlichen Gründen für mich schwer erhältlich ist, wird es in der Apparatur aus 9 mL Acetylchlorid und 9 g Natriumacetat selbst hergestellt und in einem Kolben, in dem 0,1 mol (15,214 g) Vanillin vorgelegt sind, überdestilliert. Nun wird bei weiter geschlossener Apparatur auf 140°C (2 h) erhitzt. Nach dem Abkühlen wird schnell mit Kaliumhydroxid neutralisiert mit 10 mL Wasser verdünnt. Die Hydroxylierung ohne Aufreinigung wird gleich angeschlossen, weil bei der nachfolgenden Reaktion mit Kaliumpermanganat sowieso noch zusätzlich Nebenprodukte entstehen. Man gibt also 0,1 mol (15 g) Kaliumpermanganat hinzu und rührt bei 0°C für 1 h und arbeitet dann bei Raumtemperatur das Ganze auf. Dazu wird das Roh-Produkt in 200 mL Ethanol gelöst, Mangan(II)-oxid abfiltriert und am Rotationsverdampfer stark eingeeengt.

Über Nacht lässt man die viskose Restflüssigkeit im Gefrierfach stehen, wobei ein brauner Niederschlag erhalten wird. Dieser Niederschlag besitzt ein sehr ähnliches Spektrum wie Phenylglycolsäure [K] (Abbildung 1), wodurch von der Identität der Verbindung ausgegangen werden kann, was sich nach einer HPLC-Trennung auf einer selbstgebauten Anlage bestätigen ließ. Die Gesamtausbeute beträgt bis zum Produkt [O] (Abbildung 1) 58 %, welche danach mit der Ausbeute der folgenden elektrochemischen verglichen werden soll.

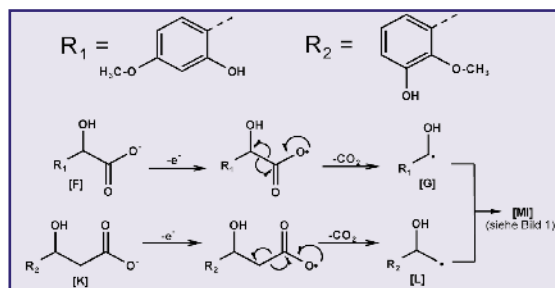


Abbildung 9: Kolbe-Schritt

2.3.2 Ergänzungen durch die elektrochemisch optimierte *Reformatsky*-Synthese

Neben der klassischen organisch-chemischen Methode besteht auch hier die Möglichkeit, durch eine entsprechende Variante mit einer zinkorganischen Methode zu arbeiten. Das angestrebte Produkt, die Phenyl-dihydroxypropionsäure [P] unterscheidet sich nur in einem Kohlenstoffatom von der in Weg 2 erzeugten Phenylglycolsäure [K]. Das heißt, mit Ethylchloroformiat und dem Benzaldehyd [AII] kommt man zu der Phenylhydroxypropionsäure, aus der aber wegen einer fehlenden OH-Gruppe nur Anthocyane entstehen können, ohne die Hydroxylgruppe in Position 3.

Die Umsetzung dieser Reaktion in der Praxis geschieht unter den günstigen Bedingungen, die in Kapitel 2.2.3 vorgestellt werden. Dabei wird statt des Methylchloroformiats 5 g (51 mmol) Methylchloroacetat [C] eingesetzt, welches durch Veresterung von Chloressigsäure mit Methanol erhalten wird. Die Umsetzung wird nach dem Durchfluss der gleichen

Der Autor

Wie schon 2003 belegte Stephen Schulz aus Gelsenkirchen beim Wettbewerb „Jugend forscht“ 2004 im Bereich Chemie bundesweit den zweiten Platz. Er ist Schüler der Oberstufe der Gesamtschule Buer-Mitte und wird anschließend Chemie in Münster studieren.



Ladungsmenge wie in Kapitel 2.2.3 abgebrochen. Danach wird exakt wie bei der Präparation nach Weg 2 verfahren.

Ein Vergleich der Gesamtausbeute zeigt, dass man im Gegensatz zur klassisch-chemischen Variante hier zu Ausbeuten von 76 % gelangt.

Das Beispiel zeigt einen weiteren Vorteil der elektrozinkorganischen Variante, weil nebenproduktanfällige Schritte vermieden werden.

2.4 Synthese der Zielstrukturen mit Hilfe der Kolbe-Elektrolyse

Im letzten Schritt erfolgt nun die entscheidende C-C-Bindungsknüpfung, wodurch die C15-Grundstruktur gebildet wird. Der Grund für die Entscheidung zur Kolbe-Elektrolyse ist zum einen die einfache praktische Umsetzbarkeit und zum anderen die sehr gute Kontrollierbarkeit der Reaktion durch die elektrotechnische Steuerung. Der Nachteil der Bildung möglicher Nebenprodukte ist angesichts der Steuerbarkeit durch die elektrotechnischen Parameter gut ausgleichbar.

Bei der Kolbe-Synthese erfolgt die anodische Bildung von Radikalen aus Carbonsäuren unter Decarboxylierung. Der Mechanismus der Reaktion ist in Abbildung 9 aufgezeigt am Beispiel der gekreuzten Kolbe-Elektrolyse der Natriumsalze 2-Hydroxy-4-methoxyphenylglycolsäure [K] und 3-Hydroxy-2-methoxyphenyl(3-hydroxypropionsäure) [F]:

Bei der gekreuzten Kolbe-Synthese reagieren am Ende die beiden Radikale zum Produkt M1, welches zur Stoffgruppe der Chalkone zählt. Durch Erhitzen im sauren Medium ist aus dem Chalkon das Anthocyan zugänglich.

Bei der Kolbe-Elektrolyse spielen besonders die Kettenabbruchreaktionen durch Bildungen von Dimeren, die Disproportionierung, sowie die Bildung von Carbenium-Ionen eine Rolle. Doch durch entsprechende Bedingungen kann die Reaktion zum Vorteil des Produktes M1 gesteuert werden. An der Optimierung der Kolbe-Elektrolyse arbeite ich im Moment.

Arbeitsvorschrift:

Die Synthese wird wieder in der vorgestellten Apparatur durchgeführt. Bei der Synthese werden diesmal Platin-Elektroden verwendet, weil bei diesem Elektrodenmaterial noch katalytische Effekte hinzukommen, die die Produktbildung beschleunigen.

Die Elektrolytlösung besteht aus je 20 mmol der Edukte [K] und [F] in 35 mL eines Ethanol-Wasser-Gemisches (1: 1), wobei die Lösung mit halbkonzentrierter Natronlauge auf den pH-Wert 9 eingestellt wird.

Die Elektrolyse wird wieder bei 25°C unter Stickstoffsättigung durchgeführt. Es wird in diesem Falle nicht wie bei den anderen Fällen potentiostatisch (mit konstanter Spannung), sondern galvanostatisch bei einer konstanten Stromdichte von 500 mA/cm² bis zum 95%igem Umsatz (1 Stunde) gearbeitet. Zur technischen Umsetzung wird das Netzgerät strombegrenzt, sodass die Spannung so nachgeregelt wird, damit die Stromstärke konstant bleibt.

Diese Konzentrationen und die hohe Stromdichte führen dazu, dass der Nebenproduktanteil, besonders an Dimeren, vermindert werden kann. Eine Reaktion durch die Radikale [G] und [L] mit dem schon entstandenen Produkt M1 wird durch die hohe Spannung von teilweise bis zu 40 V erreicht, weil es dann zur Elektromigration von nicht umgesetztem Natriumsalzen der Edukte zur Elektrodenoberfläche kommt.

Leider kommt man nach dieser Reaktion nicht um eine flashchromatographische Reinigung (Apparaturentwicklung Jufo 2003) herum. Die Reinigung erfolgt über eine 200*8 mm-Säule mit einer Kieselgel 60 (Merck)-Füllung sowie Essigsäure (25 %), was gleich zur Bildung des Anthocyan aus dem Chalkon M1 führt.

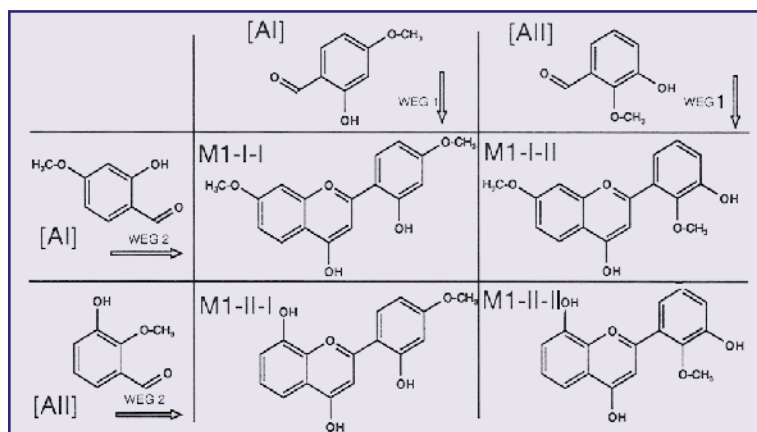
Nach dem Einengen der Produktfraktion wird das Anthocyan mit einer Ausbeute von 58 % für den Kolbe-Schritt und damit der Gesamtausbeute für dieses synthetisierte Anthocyan erhalten. Der Nachweis des Anthocyan erfolgt über die Infrarotspektroskopie und wird durch die Elementanalyse nach Liebig bestätigt.

2.5 Produktpalette der Synthese

Diese letzte Betrachtung der Produkte der Synthese soll nun dazu dienen, die kombinatorischen Möglichkeiten, die mit zwei verschiedenen Benzaldehyd-Abkömmlinge möglich sind, darzustellen. Bis zum jetzigen Zeitpunkt konnte bereits ein Anthocyan (eingerahmte Bezeichnung) nach der Methode aus Kapitel 2.4 auf diese Weise dargestellt werden. Die weiteren allein damit schon möglichen Anthocyane werden in der folgenden Tabelle 1 aufgezeigt.

In der ersten Spalte der Tabelle sind jeweils die Edukte der Synthese, die beiden Benzaldehyd-Derivate AI und AII, dargestellt, welche nach Weg 2 (Bezeichnung der Wege: Abbildung 1) umgesetzt werden. In der ersten Zeile sind gleiche Derivate nach Weg 1 umgesetzt worden, um den Cydus A zu stellen. Darunter bzw. daneben stehen die jeweiligen bei der Kolbe-Elektrolyse

Tabelle 1: Erzeugbare Produkte



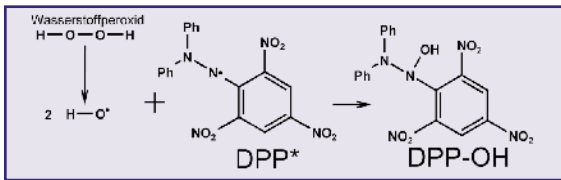


Abbildung 10: Reaktion des DPP*

erzeugten Radikale. Die Produkte aus den jeweiligen Radikalen sind im Weiteren schon als Anthocyane nach Behandlung der entstandenen Chalkone mit Säure dargestellt.

Damit sind nun schon bei 2 verschiedenen Edukten ([AI] und [AII]) und zwei Synthesewegen 4 Anthocyane darstellbar. Die allgemeine Formel für die Anzahl A der möglichen Strukturen der Anthocyane lautet $A = n^2$, wobei n für die Anzahl der unterschiedlichen Benzaldehyde steht.

Mit diesem Konzept ist eine wesentliche Vereinfachung der systematischen Untersuchung an Anthocyanen möglich, weil aus wenigen verschiedenen Benzaldehyden eine hohe Anzahl an verschiedenen substituierten Anthocyanenent steht. Damit können im weiteren Verlauf der Arbeit noch wesentlich mehr Anthocyane hergestellt werden und mit diesen die Methoden aus Kapitel 3 zur Struktur-Wirkungsbeziehung erfolgen.

2.6 Methodenvergleich „substrat-chemische“ / elektrochemische zinkorganischen Direktsynthese

Auf Grund der umfangreichen Vorteile der elektrochemischen Erzeugung von Zinkorganen macht es Sinn, die „chemische“ Methode der Direktsynthese mit aktiviertem Zink durch diese elektrochemische Methode zu ersetzen. (Tabelle 2)

3. Methoden zur Bestimmung der antioxidativen Kapazität

3.1 DPPH-Methoden

3.1.1 DPPH-Wasserstoffperoxid-Methode

Zur Messung der Eigenschaften der Anthocyane, als Radikalfänger zu fungieren, habe ich eine indirekte photometrische Messmethode entwickelt.

Dazu vergleicht man die Abnahme der DPP*-Konzentration bei der Reaktion mit Hydroxid-Radikalen mit und ohne Zugabe von Anthocyanen. Wegen der sterischen Hinderung tritt die direkte Abfangreaktion des DPP* mit dem Anthocyan nicht ein. Man beobachtet das Verschwinden der langweiligen Absorption im VIS-Spektrum bei $\lambda_{max} = 609$ nm. Das gebildete Verbindung DPP-OH absorbiert bei $\lambda_{max} = 390$ nm und stört somit nicht.

Die erste Methode mit freien DPPH-Radikalen ist aus der Idee entstanden, dass man Radikalfänger

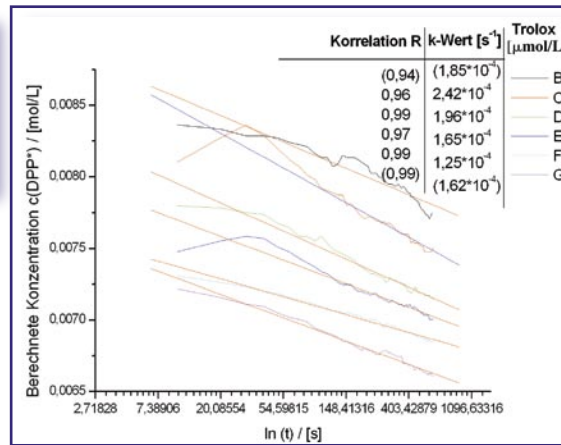


Abbildung 11: Kurvenschar mit DPP* mit H₂O₂

einfach mit dem DPPH-Radikal (im Weiteren als DPP* bezeichnet) reagieren lässt, und dann das Verschwinden der langweiligen Absorption im VIS-Spektrum bei $\lambda_{max} = 609$ nm verfolgt. Doch können dadurch nur indirekte Reaktionen des DPP*s beobachtet werden, weil eine direkte Reaktion zwischen DPP* und dem Radikalfänger wegen der sterischen Hinderung nicht möglich ist. Lediglich die sich bei Radikalkettenreaktionen bildenden kleineren Radikale wie z.B Hydroxid-Radikale sind dadurch beobachtbar. Deshalb entstand die Idee, ein durch Zerfall des Wasserstoffperoxids entstandenes Radikal durch DPP* abfangen zu lassen und dann die Hemmung dieser Abfangreaktion (Abbildung 10) spektrometrisch zu beobachten. Denn das dabei entstehende DPPH zeigt bei der Messwellenlänge keine Absorption, sondern nur bei $\lambda_{max} = 390$ nm. Eine optimale Zusammensetzung einer Probelösung sieht nun wie folgt aus:

200 μL DPP*-Lösung (10 mg DPP* (25 μmol) auf 10 mL mit Ethanol),
 300 μL dest. Wasser,
 500 μL Wasserstoffperoxid (w = 7,5 %),
 750 μL Probe.

Als Probe wird eine Trolox-Lösung des Konzentrationsbereichs 0-5 mmol/L in 0,5 mmol/L-Schritten gewählt. Dabei ergibt sich die in Abbildung 11 gezeigte Kurvenschar bei der Messwellenlänge von $\lambda_{max} = 609$ nm. Aus diesen Daten wird dann der k -Wert bestimmt (Steigung der Geraden nach Logarithmieren einer Achse [ln]).

Tabelle 2: Vergleich der Varianten der Reformatsky-Reaktion

„chemische“ Erzeugung	elektrochemische Erzeugung
Sicherheit: - geschlossene Apparatur nicht anwendbar (Heftige Reaktion, wäre nur mit großem Puffervolumen beherrschbar) - Umgang mit aktivem Zink, zinkorganischen Verbindung, mehrstufige Apparatur	Sicherheit: + geschlossenes System (Kombination mit Halbmikrotechnik möglich) + Zinkorganyl kann in Apparatur weiter umgesetzt werden
Praktische Umsetzung: - Reaktion schwer zu starten - Titration des Zinkorganyls notwendig + geringerparativer Aufwand	Praktische Umsetzung: + Umsetzung elektrotechnisch kontrollierbar + Berechnung der Ausbeute über Stromintegration - technisch aufwendiger
Nebenreaktionen: - Bildung von Dialkylzinkverbindungen	Nebenreaktionen: + durch entsprechende Bedingungen auszuschließen



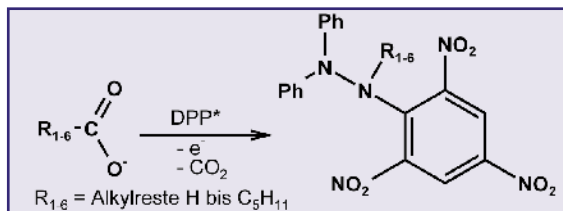


Abbildung 12: DPP*-Kolbe-Variante

Für eine Reaktion erster Ordnung kann ein linearer Zusammenhang zwischen k und der antioxidativen Kapazität (AK) gefunden werden:

$$AK = -1,30890 \cdot 10^4 \cdot k + 3,63$$

[Korrelation $R=0,997$]

Durch Bestimmung der Geschwindigkeitskonstante k ist die antioxidative Wirkung in Bezug auf Trolox möglich. Dieser Wert der Methode lässt eine Betrachtung der Radikalfängerwirkung auf Peroxid- und Hydroxid-Radikale, sowie bei dem Kettenmechanismus gebildeter sterisch günstiger Radikale zu.

3.1.2 Kombinationsmethode DPPH und Kolbe-Elektrolyse

Die Idee hinter dieser Methode ist die Beobachtung, dass die durch die Kolbe-Elektrolyse erzeugten Radikale mit dem DPP* reagieren und Produkte bilden, die nicht bei der Messwellenlänge (609 nm) absorbieren. Nun eröffnen sich ganz neue Möglichkeiten an einsetzbaren Radikalen, weil nun alle homologen Alkylradikale, die sich bei der Kolbe-Elektrolyse erzeugen lassen, Einsatz finden können. In kleinen Vorversuchen zeigte sich bei Benutzung von Natriumacetat mit DPP* an Platinelektroden ein gelbliches Produkt, dessen UVNIS-Spektrum dem vom DPPH sehr ähnlich ist. Bei dieser Reaktion läuft wahrscheinlich Folgendes ab (Abbildung 12): Die bei der Kolbe-Elektrolyse gebildeten Carboxylradikale, die Falle der Essigsäure Methylradikale bilden, rekombinieren mit dem DPP* Radikal zu DPP-R ($R_1 = CH_3$).

Besonders interessant ist aber der Fall mit Natriumformiat. Dabei sollen sich, gemäß dem Kolbe-Schema,

nach der Decarboxylierung Wasserstoffradikale bilden, die bei diesen Bedingungen eigentlich extrem kurzlebig sind und daher nicht mit dem DPP* rekombinierbar sein sollten. Es zeigt sich jedoch ein gelbes Produkt, dessen UV-Spektrum genau dem von DPPH entspricht. Eine andere Vermutung wäre, dass die Carboxylradikale mit dem DPP* reagieren. Diese Vermutung ist aber nicht haltbar, weil an der Anode auch stöchiometrisch Kohlenstoffdioxid gefunden wird. Nun wird wieder in gleicher Weise wie bei der Methode zuvor vorgegangen und auf Trolox kalibriert.

Im Gegensatz zur vorigen Untersuchung ist jetzt die Nutzung nur einer Küvette unzureichend. Deshalb wird folgendes System aufgebaut, welches aus einer Durchflussküvette, einer Schlauchpumpe und einer Elektrolysezelle mit Platinelektroden und Galvanostaten besteht.

Die in die Elektrolyse-Zelle eingefüllte Lösung hat folgende Zusammensetzung:

- 2 mL DPP* (25 μmol),
- 7,5 mL Natriumacetat-Lösung (3 mol/L),
- 7,5 mL Ethanol,
- 2 mL Trolox-Standard.

Es werden zwei Kurvenscharen bei der Messwellenlänge 609 nm registriert: In einem Zeitraum von 20 min wird die homologe Reihe von Natriumformiat bis -propionat und mit Natriumacetat die Trolox-Konzentrationen im Bereich von 0-5 $\mu\text{mol/L}$ und ohne Trolox untersucht.

Dabei werden zum einen auch Extinktionsmessungen gegen die Zeit aufgenommen und zum anderen noch Spektren der Lösungen. Zusätzlich werden noch bei einer Acetat-Blindprobe sog. stopped-flow-Spektren aufgenommen, wobei der Stromfluss unterbrochen und ein Spektrum alle 2 min aufgenommen wird.

Die Elektrolysen im Allgemeinen werden galvanostatisch bis 200 mA/cm² durchgeführt. Das 3D-Diagramm 1 zeigt die Zeitkurven für verschiedene Alkylreste. Dabei sind die zunächst abfallenden Werte und die dann steigenden Werte für die Extinktion besonders interessant. Da der Abfall der Werte mit der

Diagramm 1: Reaktion von DPP* und R*: Wellenlänge vs. C-Anzahl vs. Extinktion

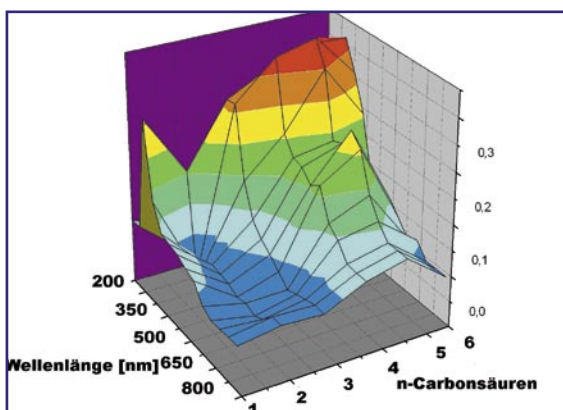
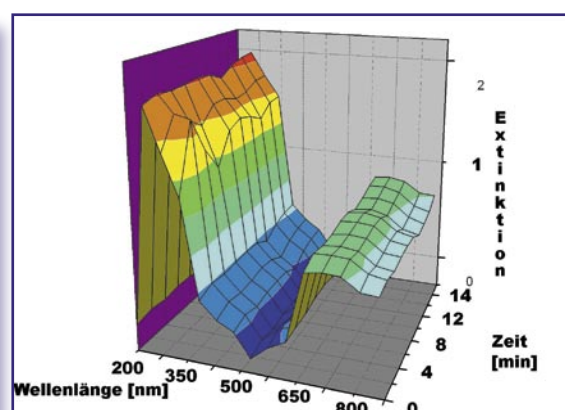


Diagramm 2: Reaktion DPP* mit CH₃*: Zeit vs. Extinktion vs. Wellenlänge



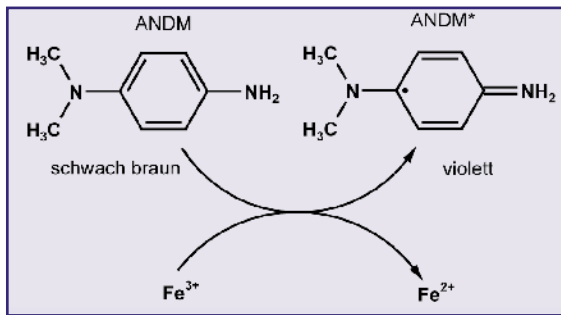


Abbildung 13: ANDM*-Erzeugung mit Fe³⁺

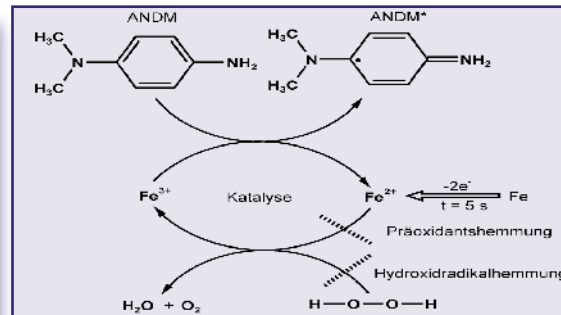


Abbildung 14: Katalytische ANDM*-Methode

zunehmenden Kettenlänge zunimmt, ist dies auf die geringere Reaktivität der Radikale durch Stabilisierung durch die Alkylkette und die zunehmende sterische Hinderung zurückzuführen.

Der Effekt des mit der zunehmenden Kettenlänge schwächer werdenden Wiederanstiegs, der Extinktion ist bei Betrachtung des 3D-Plots 1 als Beispiel (Stopped-Flow-Spektren von Acetat) verständlich. Denn die Reaktionsprodukte mit den kurzkettingen Alkanen haben ein in der Nähe der DPP*- Absorption liegendes Maximum, welches mit der Zeit zunimmt und so bei den Messungen mit konstanter Wellenlänge zum Wiederanstieg der Extinktion führt.

Im Diagramm 2, wo die zeitliche Lage des Extinktionsminimums (vergl. C1) zur Trolox-Konzentration aufgetragen ist, kann man erkennen, dass sich die Zeitdauer bis zum Extinktionsminimum proportional zur Trolox-Konzentration verhält. Der Wiederanstieg der Extinktion lässt sich durch den 3D-Plot der stopped-flow-Spektren eindeutig als zunehmende Bildung eines Produktes mit dem Absorptionsmaximum in diesem Bereich deuten. Der Zusammenhang zwischen dem Zeitpunkt des Extinktionsminimums und der Trolox-Konzentration lässt sich durch folgende Gleichung beschreiben:

$$AK = t \cdot 1,4673 \cdot 10^2 - 4,5869$$

(AK: Antioxidative Kapazität in mmo/g Trolox;

t: Zeit in min)

[R = 0,998].

Durch diese Methode sind nun völlig neue Bewertungsfaktoren für Antioxidationen möglich; man kann nun die antioxidative Kapazität mit verschiedenen stabilen homologen Radikalen und sogar Wasserstoffradikalen untersuchen. In meinen zukünftigen Untersuchungen zu diesen Methoden versuche ich eine solche Betrachtung beispielhaft durchzuführen.

3.2 ANDM-Methoden

3.2.1 Fe³⁺-Methode

Die hier entwickelte Methode arbeitet mit dem ANDM*, welches leicht durch Oxidation von ANDM mit Eisen(III)-Ionen zugänglich ist (ANDM wird auch als Indikator für diese Ionen eingesetzt). Das Eisen(III)-Ion wird dabei zum Eisen(II)-Ion reduziert. Die Metho-

de basiert auf der Reaktion (Abbildung 13) zwischen Hydroxid-Radikalen aus Wasserstoff-Peroxid und dem ANDM*. Das ANDM an sich ist wieder nur schwach gefärbt, während das ANDM* und auch das DPP* stark gefärbt sind mit einer starken Absorption bei $\lambda_{\max} = 570\text{nm}$.

Diese Methode findet ihren Sinn darin, dass man zum einen die Radikalfängerwirkung gegenüber Hydroxid-Radikalen und gleichzeitig gegenüber N-zentrierten Radikalen betrachten kann, weil das ANDM* im Gegensatz zum DPP* nicht periresistent, sondern resonanzstabilisiert ist.

Die Testlösung besteht aus:

0,5 mL ANDM (63 mg in 10 mL Ethanol/Wasser 1:1),
2,0 mL dest. Wasser bzw. Trolox- oder Probenlösung,
0,1 mL Eisen(III)-chlorid-Lösung (halbgesättigt in Wasser).

Diese Methode wird wie alle anderen auch mit Trolox-Konzentrationen im Bereich von 0-5 $\mu\text{mol/L}$ Trolox kalibriert. Bei den Zeit-Extinktionsmessungen wird eine Kurvenschar für eine Reaktion zweiter Ordnung gefunden. Die Kurve wird über die Integration ausgewertet und der Zeitpunkt bestimmt wo 98 % des Produktes umgesetzt sind. Es ergibt sich wieder ein linearer Zusammenhang zwischen dem Zeit-Wert und der AK: (Korrelation R = 0,99). Dadurch wird ein weiterer Faktor der antioxidativen Bewertung geschaffen, die auf der N- und Hydroxid-Radikalfängerwirkung beruht:

$$AK = E(98\%) \cdot -5,204 \cdot 10^3 + 2,5606.$$

3.2.2 Katalytische Methode

Die katalytische Methode ist eine Ergänzung zu der Methode im vorigen Kapitel. Man kann statt Eisen(III)- auch Eisen(II)-Ionen einsetzen, welche man dann mit Wasserstoffperoxid zu Eisen(III)-Ionen oxidiert. Dieser Vorgang (Abbildung 18) muss aber keineswegs mit stöchiometrischen Mengen stattfinden, weil die Eisen(III)-Ionen wieder zu Eisen(II)-Ionen reduziert werden können. Dadurch entsteht ein katalytischer Kreisprozess, so dass nur Spuren von Eisen(II)-Ionen notwendig sind.

Dieses Verfahren beruht also auf einer Vielfalt bzw. Kombination verschiedener Anwendungen der ANDM*-Methode, denn es gibt mehrere Möglichkeiten, bei denen unterschiedliche Radikalfängereigenschaften (siehe gestrichelte Linien in Abbildung 14) erfasst werden. Dazu zählen das Abfangen von Peroxid-, Hydroxid-,

ANDM* und sonstigen Stufen des Kettenmechanismus und noch eine besondere Wirkung, nämlich die Fangwirkung auf Fe(II)-Ionen, welche als Präoxidans im Organismus Vorstufen zu Radikalen bilden kann und so eine durch andere Methoden nicht überprüfbar Größe darstellt.

Die Testlösung besteht aus:

0,2 mL ANDM-Lösung (62 mg in 10 mL Wasser),

1,5 mL dest. Wasser,

0,1 mL Probe,

Katalyse 0,1 mL Eisen(II)-chlorid (gesättigt)

und 0,6 mL Wasserstoffperoxid (3/1000 %).

Neben der Variante des Starts mit Hilfe von Wasserstoffperoxid lässt sich noch eine weitere Startmethode einsetzen. Bei dieser Methode wird der Start elektrochemisch herbeigeführt. Die Elektrolyse übernimmt aber lediglich die Erzeugung einer Spur an Eisen(II)-Ionen, die dann mit dem Wasserstoffperoxid wieder in den katalytischen Zyklus (Abbildung 14) eintreten. Zusätzlich kommt es auch noch zu Bildung von ANDM* an der Anode und zur Reduktion des ANDM* zu ANDM. Da aber nur ein sehr kurzer Stromstoß verwendet wird, ist diese Reaktion sehr unwahrscheinlich. Es würde aber im Optimalfall keine Konzentrationsbeeinflussung an ANDM* geben, weil genauso viel erzeugt wie verbraucht wird, es sei denn, es treten Nebenreaktionen zwischendurch auf.

In der Praxis wird der gleiche Ansatz wie oben beschrieben verwendet, diesmal aber ohne Zusatz von Eisen(II)-chlorid. Zum elektrolytischen Start wird in der Küvette ein Platindraht als Kathode und ein Eisendraht als Anode eingesetzt. Wenn man nun für 5 Sekunden mit 100 mA/cm² elektrolysiert, werden genug Eisen(II)-Ionen in Lösung gebracht und die Reaktion startet sofort. Da der Strompuls so kurz ist, ist kaum ein Einfluss wie in Kapitel 3.2.3 bewusst verwendet wird zu befürchten (gestrichelte Linien in Abbildung 14)

Da die Reaktion sehr schnell abläuft, können keine Extinktionsmessungen/Zeit mit stationären Methoden aufgenommen werden. Der hohe *k*-Wert bringt aber die Möglichkeit mit sich, nach 1 Minute bei 570 nm zu messen und die Werte dann linear mit *AK* in Beziehung zu setzen: [Korrelation *R* = 0,987]
 $AK = E(60s) \cdot 34,247 - 10,041$.

3.2.3 Kombination mit elektrochemisch erzeugten Radikalen

Diese Methode ist eine Anlehnung an die Methode aus Kapitel 3.1.2, wobei nun mit dem ANDM* und den durch die *Kolbe*-Elektrolyse erzeugten Radikalen gearbeitet wird. Bei dieser Reaktion kann man dann die Wirkung von Radikalfängern in Bezug auf N-zentrierte Radikale und gleichzeitig wieder in Verbindung mit homologen Alkylradikalen messen. Als weiterer Aspekt kommt noch hinzu, dass das ANDM* nicht schon vorher „chemisch“ erzeugt werden muss, sondern ANDM eingesetzt werden kann, welches an der Anode zu ANDM* umgesetzt wird (Abbildung 15).

Eigentlich würde auch die Rückreaktion von ANDM* zu ANDM an der Kathode eine Rolle spielen, da aber an der Anode auch die Alkylradikale der *Kolbe*-Elektrolyse entstehen, werden die ANDM* gleich von Alkylradikalen abgefangen. Diese Methode erlaubt das Arbeiten bei einer stationären ANDM*-Konzentration in Lösung. Die vielfältigen Möglichkeiten für den Eingriff der Radikalfänger sind wieder durch Abbruchlinien in Abbildung 15 dargestellt.

Da während der *Kolbe*-Elektrolyse der pH-Wert nicht konstant bleibt, muss die Lösung gepuffert werden, denn ANDM weist als salzbildendes Amin eine ausgeprägte Halochromie auf. Um den optimalen pH-Wert für die quantitative Bestimmung zu finden, werden 0,2 mL ANDM (52 mg in 10 mL Ethanol/Wasser 1:1) mit 2 mL TRIS-Puffer versetzt und mit Natronlauge oder Salzsäure die pH-Werte 1 bis 14 eingestellt. Die UV/VIS-Spektren zeigen ganz klar, dass das Amin ANDM ab dem pH-Wert von 9, am stärksten bei der Messwellenlänge absorbiert. Der isosbestische Punkt lässt auf die Bildung von mindestens einesdeprotonierten Produktes schließen. Da bei diesen pH-Werten die Reaktion am besten funktioniert, wird die Testlösung nun immer mit Natronlauge auf den pH-Wert 13 eingestellt.

Ein typischer Ansatz für die Aufnahme von Extinktions-/Zeitmessungen sieht nun wie folgt aus:

2 mL dest.-Wasser/Probe,

0,2 mL ANDM-Lösung (62 mg ANDM in 10 mL Ethanol/Wasser),

2 mL Acetat-Lösung (3 mol/L auf pH-Wert 13 eingestellt).

Die bei den Aufnahmen von Extinktions-/Zeitmessungen mit Trolox-Standards in der dafür entwickel-

Abbildung 15:
Kolbe-Variante der ANDM*-Methode

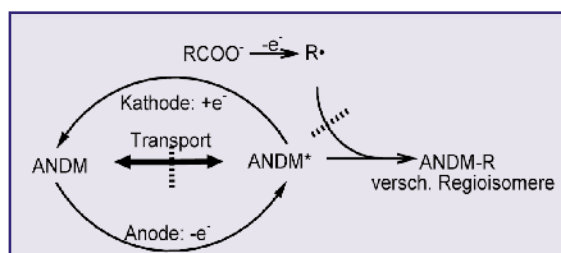
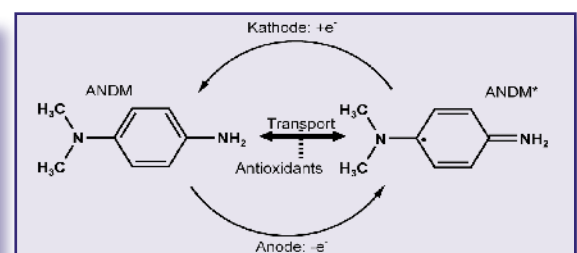


Abbildung 16:
Reaktionen bei der elektrochemischen Variante



ten Apparatur erhaltenen Ergebnisse findet man auf der Webseite www.chemicalshobby.de; dort gibt es auch eine ausführliche Literaturliste. Interessant sind der Verläufe der Kurvenschar, welche einer Kinetik höherer Ordnung entsprechen (trotz stationärer Konzentration an ANDM, konst. Stromfluß). Wegen der sehr komplizierten Kinetik auf Grund der Vielfalt der Reaktionen ist es am sinnvollsten, einfach nach einer Zeit von 1200 s die Extinktion abzulesen. Es lässt sich folgender linearen Zusammenhang mit der Antioxidativen Kapazität vorfinden: (Korrelation $R = 0,99$)

$$AK = E(1200s) \cdot 9,1743 + 1,2202$$

Diese Methode ermöglicht es nun die Radikalfängerwirkung für N-zentrierte Radikale und Alkylradikale gleichzeitig zu beschreiben.

3.2.4 Elektrochemische Methode

Diese letzte entwickelte Methode greift das im letzten Kapitel beschriebene Reaktionskonzept von ANDM zu ANDM* an den Elektroden und die Rückreaktion auf. Die Reaktion (Abbildung 16) läuft nun nur noch mit der ANDM-Lösung (2 mL ANDM-Lösung (62 mg/10 mL)) und der Probe (2 mL) in einer auf 20 mL verdünnte Lösung für die Elektrolysezelle ab. Doch weil die Leitfähigkeit der Lösung so gering ist, muss

als Leitsalz das Tetrabutylammoniumtetrafluorborat (50 mg) zugesetzt werden.

Bei der Elektrolyse kommt es nun an der Anode zur Bildung des ANDM*, welches an der Kathode wieder reduziert werden kann (Abbildung 16). Auf dem Weg von der Anode zur Kathode kann es zu möglichen Abfangreaktionen kommen. Trotz der galvanostatischen Arbeitsweise dauert es erst eine Weile bis zur Einstellung des Gleichgewichts. Doch wegen der ständigen Bildung und auch der Reduktion an der Kathode ist die Radikalkonzentration weitgehend stabil, sodass man nun in den Extinktions/Zeitmessungen nur die Radikalabfangreaktionen beobachten kann. Auch in dieser Methode mit Hilfe von Trolox-Standards kalibriert, wobei sich wieder eine Kurvenschar zeigt, die einer Kinetik nullter Ordnung folgt. Es kann wieder ein linearer Zusammenhang zwischen der antioxidativen Kapazität und der Extinktion nach 870 s Elektrolyse ermittelt werden:

$$AK = 0,424 - 0,114 \cdot E(870s)$$

(Korrelation $R=0,99$)

Diese rein elektrochemische Variante ermöglicht im Vergleich zu den anderen Methoden eine direktere Beobachtung der Radikalfängerprozesse.

3.3 Miniaturisierung durch Elektroanalytik

In Analogie zu den ANDM*-Methoden mit elektrochemischer Unterstützung (Kapitel 3.1.2., 3.2.3. und 3.2.4.) wurde die praktische Umsetzung durch die Anwendung der cyclischen Voltammetrie ergänzt. Dadurch wurde die spektroskopische Analytik ersetzt und so eine weitere Miniaturisierung möglich.

Bei der Methode wird an der inerten Arbeitselektrode erst das Oxidationspotential des ANDM zeitlich konstant für 25 s angelegt (Abbildung 17a) und dabei ANDM* gebildet. Im Anschluß wird das Potential auf das Oxidationspotential des Acetat-Ions erhöht (25 s) und so die Bildung von Alkylradikalen „hinzugeschaltet“. Im Anschluss erfolgt dann ein analytischer Durchlauf der cyclischen Voltammetrie (Abbildung 17b),

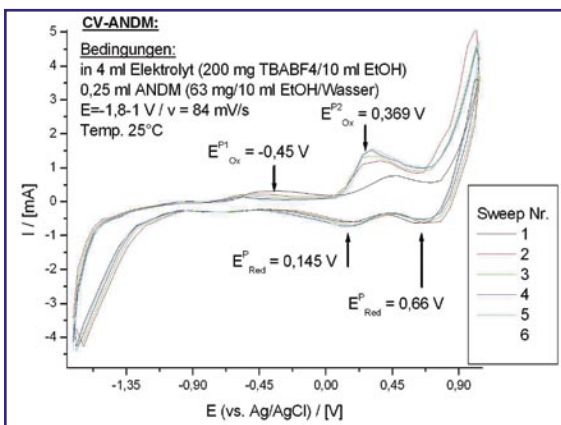


Abbildung 17b: CV-ANDM

Abbildung 17c: Peakstromverlauf bei der ANDM-Kolbelektromethode

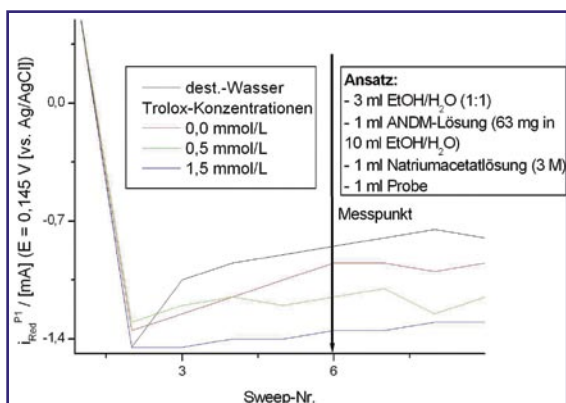


Abbildung 17d: Integration der ANDM*- bzw. CH₃*-Bildung

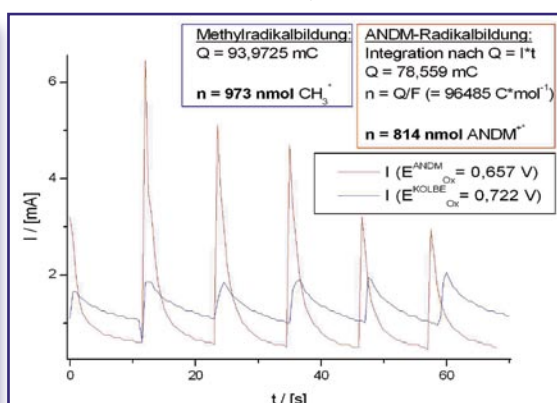


Abbildung 17a: Oszillogramm

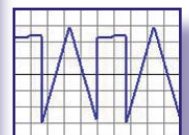


Abbildung 18:
Flavonderivate

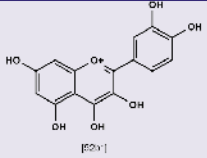
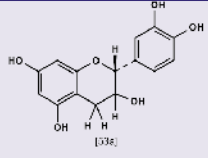
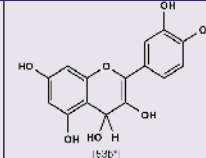
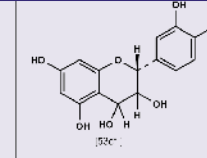
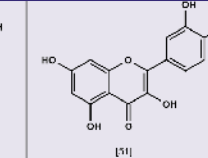
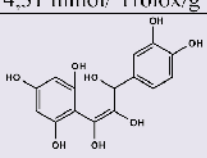
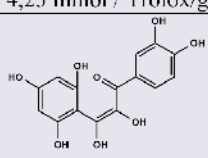
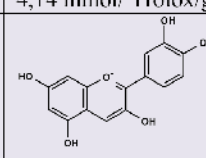
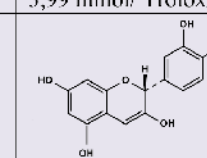
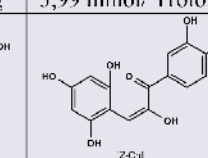
				
4,31 mmol/ Trolox/g	4,23 mmol/ Trolox/g	4,14 mmol/ Trolox/g	3,99 mmol/ Trolox/g	3,99 mmol/ Trolox/g
				
3,93 mmol/ Trolox/g	3,65 mmol/ Trolox/g	3,5 mmol/ Trolox/g	3,29 mmol/ Trolox/g	3,24 mmol/ Trolox/g

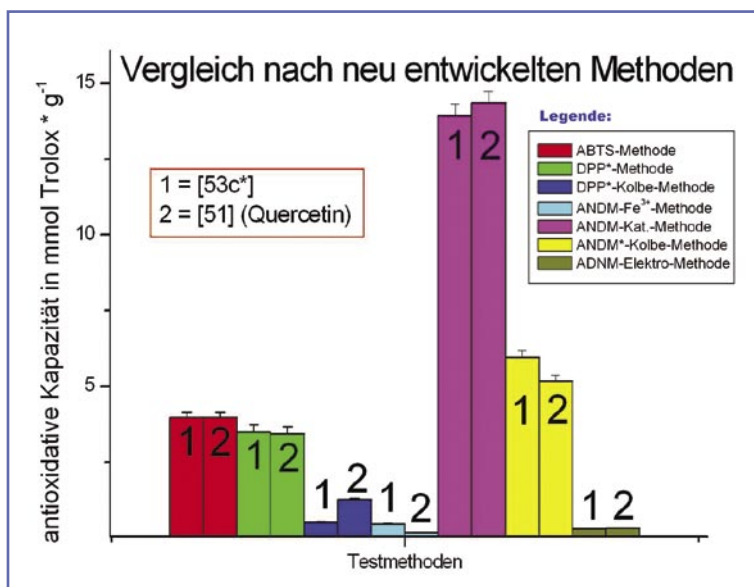
Tabelle 3

Trolox-Methode-Struktur/Wirkungsthesen	„Methoden-Kit“-Struktur/Wirkungsthesen
<ul style="list-style-type: none"> • Je „anthocyanähnlicher“ der Heterocyclus ist, desto stärker wird die antiox. Wirkung mit einer OH-Gruppe in Position 5. [52b*]/[53b*]/[53c*] • Je reduzierter das Flavon ist, desto geringer die Wirkung der OH-Gruppe in Pos. 5 [53a] • Eine Carbonylgruppe in Position 5 ist nicht so wirksam, wie eine OH-Gruppe [51]/[52b*] • Je mehr OH-Gruppen am geöffneten Ring, desto besser die H-Brücken-Bindung, desto höhere antiox.-Kap [53e*]/[53d*] <p>(In eckigen Klammern stehen je die Verbindungen durch dessen Vergleich die Thesen hergeleitet wurden)</p> <p>-----</p> <p>Beim Methoden-Kit sind bis zum jetzigen Zeitpunkt nur das halbsynthetische Catechin [53c*] und das natürlich vorkommende Quercetin verglichen worden</p>	<ul style="list-style-type: none"> • ANDM-Kat.-Methode: OH-Gruppen wirken schwächer als C=O-Gruppen (Komplexbildung; Präoxidans) • ANDM-Methode: Je mehr OH-Gruppen, desto stärker die Wirkung (H-Abstraktion durch ANDM) • ANDM-Kolbe-Methode: Aussage wie ANDM-Methode; C=O-Gruppe spielt bei Alkylradikalen nur eine geringe Rolle • ANDM-Elektro: Bestätigt H-Abstraktion durch ANDM • DPP*-H₂O₂: Anzahl der OH-Gruppen wichtig, hinsichtlich H-Abstraktion durch Hydroxid-Radikale • DPP*-Kolbe: Im Einklang mit ANDM-Kolbe hat die C=O-Gruppe nur geringe, aber vorhandene Wirkung (direkte H-Abstraktion von DPP* sterisch nicht zu erwarten)

wodurch über die Randles-Sevcik-Beziehung eine Konzentrationsbestimmung an ANDM* möglich ist.

Die Auswertung erfolgt über den Peakstrom zur Sweep-Anzahl (Abbildung 17c), wobei sich nach dem 6. Sweep eine lineare Beziehung zwischen der Stromstärke zur Antioxidativen Wirkung finden lässt.

Diagramm 3 (zu
Tabelle 3)



$$AK = 4,7161 + 3,5714 \cdot I(6. \text{ Sweep})$$

Nach Integration der Stromkurven (Abbildung 17d), während der potentialkonstanten Zeit, kann man feststellen, dass nur 814 nmol ANDM*-Radikale gebildet wurden. Der Ablauf der Radikalfängerprozesse ist analog zu den erwähnten Methoden, lediglich die Konzentrationsbestimmung wird elektrochemisch umgesetzt. Dadurch ist nun die weitere Miniaturisierung der Methode möglich, wodurch es nun sogar möglich ist diese Methode in Form des „lab on the chip“ umzusetzen. Diese Methode ist auch anwendbar auf die DPPH-Kolbe, die ANDM-Elektromethode sowie die ANDM-Fe(II)-Methode.

3.4 ABTS-Methode

An dieser Stelle soll nun lediglich die praktische Umsetzung und Verfahrensverbesserung der ABTS-Trolox-Methode behandelt werden. Es soll dabei jeweils nur der Schritt zur aufwändigen Herstellung von Metmyoglobin beschrieben werden.

Standard-Variante: Hierbei wird Myoglobin in PBS-Puffer gelöst und dann mit Kaliumhexacyanoferrat(III)-Lösung zu Metmyoglobin oxidiert. Die nun vorhandenen Salze werden mit Hilfe der Gelchromato-

CLB – Memory

Die CLB-Beilage für Ausbildung in Chemie, Labortechnik,

Chemietechnik, Biologie und Biotechnik

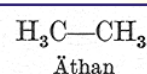
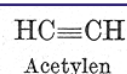
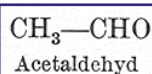
August 2004

Die Rechtschreibung in der Chemie

Muss man *Octan* schreiben?

Heißt es *Acetylen* oder *Azetylen*, oder sollte man besser nur noch *Ethin* schreiben? Muss man *Oktan* oder *Octan* schreiben? Kann hier überhaupt von „muss“ die Rede sein?

Viele werden sagen, darauf käme es doch wirklich nicht an, und werden mit oder ohne Argument die eine oder andere Form bevorzugen. Hier handelt es sich aber nicht um eine Frage des persönlichen Geschmacks. Jedes Wort, das eine chemische Verbindung bezeichnet, soll beim Leser sofort eine Vorstellung von der Struktur dieser Verbindung hervorrufen, so dass chemische Texte auch dann verständlich sind, wenn sie keine Formeln enthalten. Daher ist es das Bestreben aller Nomenklaturkommissionen, bestimmte Grundworte, End- und Vorsilben neben anderen Symbolen so festzulegen, dass sie in einer eindeutigen Beziehung zu immer wiederkehrenden Strukturelementen stehen. So wird eine OH-Gruppe durch die Endung *-ol*, eine Doppelbindung durch die Silbe *-en* bezeichnet, und jeder weiß beim Lesen des Wortes *Enol* sofort, dass er sich darunter die Struktur >C=C(OH)- vorzustellen hat. Voraussetzung dafür ist natürlich, dass jeder, der chemische Fachausdrücke benutzt, sich an diese Nomenklaturregeln hält und nicht etwa mit der Silbe *-en* eine Dreifachbindung bezeichnet. Ein Nomenklatorsystem kann sei-



nen Zweck also nur dann erfüllen, wenn es eindeutig ist und nicht zu Missverständnissen führt.

Auch unsere Frage „*Acetylen* oder *Azetylen*?“ ist ein Nomenklaturproblem. Es muß *Acetylen* und *Octan* heißen, die beiden anderen Formen mit *z* beziehungsweise *k* sind falsch. Wir wollen dies an Hand von Beispielen zeigen, die deutlich machen, welche Verwirrungen entstehen können, wenn man *Azetylen* oder *Oktan* schreibt.

Die Silbe *Acet-* bedeutet (neben der Silbe *Eth-*) ein Molekül oder einen Rest, der aus zwei Atomen Kohlenstoff besteht (Abbildung 1). Schreibt man also *Azetylen*, so müsste es konsequenterweise auch *Azetat* und *Azetaldehyd* heißen. Ein Gerät zur Bestimmung von Essigsäure würde dann *Azetometer* (statt richtig *Acetometer*) genannt. Nun gibt es aber auch einen Apparat zur Stickstoff-Bestimmung: das

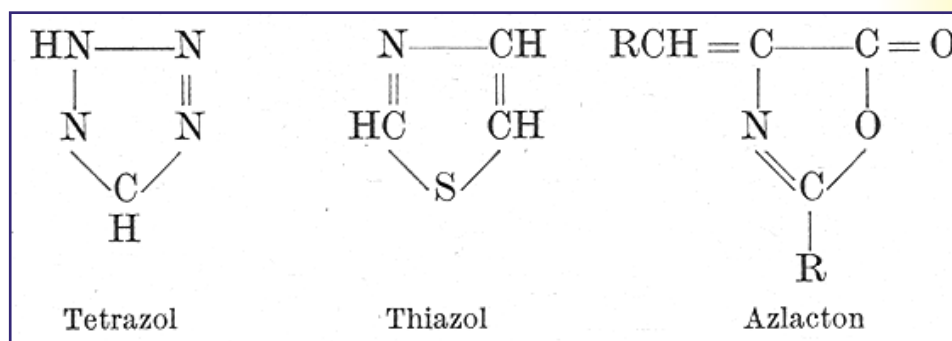
Azotometer. Welchem Leser fiel sofort der Unterschied zwischen den Worten *Azetometer* und *Azotometer* in die Augen?

Sehr beliebt ist auch die Verwechslung zwischen *acid* und *azid*. Wir haben soeben am Beispiel des Azotometers gesehen, dass die Silbe *az-* Stickstoff bedeutet. Weitere Beispiele sieht man in Abbildung 2. Wie will man also bei der Vertauschung von *c* und *z* ein *Azid* (Salz der Stickstoffwasserstoffsäure HN_3) von einer *aziden* (richtig: *aciden* = sauren) Lösung unterscheiden?

Aus dem Wort *Acidose* erkennt man sofort, auch ohne genau zu wissen, um was es sich handelt, dass eine Säure im Spiel sein muss (Acidose = Übersäuerung des Blutes). Die Schreibweise *Azidose* wäre gänzlich irreführend, denn mit Stickstoff hat die zugrunde liegende Erscheinung überhaupt nichts zu tun.

Abbildung 1:
Ein Molekül oder ein Rest, der aus zwei C-Atomen besteht, enthält die Silbe *Acet-*.

Abbildung 2:
Moleküle die Stickstoff enthalten, haben im Schriftbild die Silbe *-az-*.



Was würde ein Chemiker sagen, der den schriftlichen Auftrag bekommt, *Krypton* zu synthetisieren? Jedermann weiß, dass Edelgase höchstens zu gewinnen, nicht aber zu synthetisieren sind. Hat der Auftraggeber sich also geirrt? – Ja er hat, denn er vertauschte *c* mit *k*. In Wirklichkeit wollte er *Crypton*, ein kompliziertes organisches Keton, synthetisiert haben.

Nicht ist so beständig wie der Wandel, und so haben sich in der chemischen Nomenklatur in der jüngeren Zeit Schreibweisen durchgesetzt, die noch bei Chemikern unserer Elterngeneration zu Grimm geführt hätten. Ein Beispiel dafür ist *Octan* – ein Kohlenwasserstoff mit acht C-Atomen – und *Octalin* mit der Summenformel $C_{10}H_{16}$. Früher schrieb man letztgenannte Verbindung **Oktalin**; sie hatte also schon von der Schreibweise her nichts mit Oct = acht C-Atome zu tun. *Octalin* – und zu dieser Schreibweise ist man mittlerweile übergegangen – ist ein achtfach hydriertes Naphthalin (Octahydronaphthalin) (Abbildung 3). Man hat die Schreibweise geändert, um so auch international verständlich zu bleiben; der Dominanz des Englischen in der Wissenschaft ist eben Tribut zu zollen. Genau

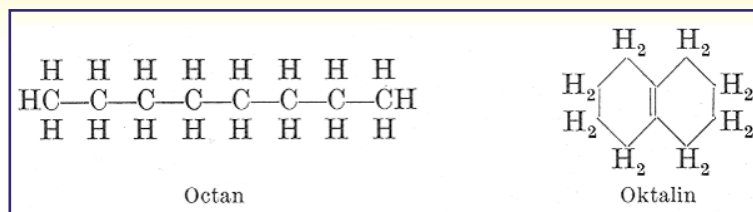


Abbildung 3: Octalin besteht im Gegensatz zu Octan nicht aus acht C-Atomen, sondern ist ein achtfach hydriertes Naphthalin.

das gleiche gilt beispielsweise auch für *Decan* (= Kohlenwasserstoff) mit zehn C-Atomen) und *Decalin* (= zehnfach hydriertes Naphthalin, Decahydronaphthalin).

Es gibt etliche Unterschiede im internationalen Sprachgebrauch: Italiener und Spanier schreiben *f* statt *ph*, Engländer und Amerikaner übersetzen *Natrium* mit *sodium*. Aber das Bestreben sollte sein, solche Differenzen im Interesse der leichten Verständigung auszugleichen, statt sie durch ein nationales Durcheinander der Schreibweisen zu vermehren.

Wir brauchen aber gar nicht ins Ausland zu gehen, um auf Schwierigkeiten zu stoßen. Angenommen, jemand möchte sich in einem deutschen Buch über die Eigenschaften des Elementes *Caesium* unterrichten. Entsprechend dem Elementsymbol *Cs* wird er im Register unter *C* nachschauen, aber

weder unter *Cae...* noch unter *Cä...* ist das Element zu finden. Wer käme auf die Idee, dass er es – falsch geschrieben – als *Zäsium* am Schluß des Alphabetes unter *Z* finden kann?

Auch der Duden verzeichnet alle chemischen Elemente und Verbindungen, für die sich im Laufe der Zeit aus nationalem Eigensinn zwei Schreibweisen entwickelt haben, ohne Erläuterung nur die Form, die vom Standpunkt einer einheitlichen und widerspruchsfreien Nomenklatur aus falsch ist. Also findet man beispielsweise Silikon und Zäsium – allerdings ist jeweils die chemisch richtige Schreibweise mit dem Vermerk „fachsprachlich“ ebenfalls aufgenommen: Silicon und Caesium. Und diese Schreibweisen finden sich auch im „Wörterbuch chemischer Fachausdrücke“, das ebenfalls im Dudenverlag erschienen ist. *RK*

Vereinfachte Regeln zur Nomenklatur nach IUPAC

Formal gesehen sind die von der IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) für die organische Chemie und die Biochemie vorgegebenen ausführlichen Namengebungsregeln verbindlich, doch in der Praxis reichen einige Grundsätze aus, um viele organische Verbindungen zu benennen und vorgegebene Namen zu verstehen.

Ein Name hat die Form: Substituenten - Stamm - Endung. Als Stamm wählt man die längste Kette von C-Atomen beziehungsweise die mit den hochrangigsten (massereichsten) Substituenten und prüft, ob das Molekül nur Einfach- oder auch Doppel- oder Dreifach-Bindungen enthält. Ist eine Dreifachbindung vorhanden, erhält der Stamm ein „in“, bei einer Doppelbindung ein „en“ und sonst ein „an“ (zum Beispiel Ethin, Propen oder Butan). Die hochrangigste funktionelle Gruppe gibt die Namensendung an. Beinhaltet beispielsweise das Molekül -OH hängt man ein „-ol“ an, bei -SH wird dem Namen ein „-thiol“ angehängt. Ist die Kohlenstoffkette ringförmig zusammengesetzt, benutzt man die Vorsilbe „cyclo“.

Nun überprüft man, welche Substituenten außerdem noch im Molekül enthalten sind. Danach werden die Kohlenstoffatome der

Grundkette so durchnummeriert, dass der erste Substituent eine möglichst kleine Nummer erhält. Sollten beide Enden der Hauptkette die gleiche Entfernung vom ersten Substituenten haben, wird die Variante benutzt, bei der die Summe aller in der Formel verwendeter Zahlen die kleinere ist. Substituenten können andere funktionelle Gruppen sein. Sie werden durch Vorsilben bezeichnet, jeweils versehen mit der Nummer des Kohlenstoffatoms, an dem sie hängen. Substituenten können aber auch Seitenketten sein. Sie werden nach den gleichen Regeln wie Grundkette benannt, aber erhalten als Endung „-yl“.

So erhält zum Beispiel die Substanz $NH_2CH_2CH_2OH$ den Namen 2-Aminoethanol: Da die Kohlenstoffatome nur Einfachbindungen aufweisen, erhält die Wurzel als erste Endung „an“. Die Grundkette enthält zwei Kohlenstoffatome; damit ergibt sich als Stamm „eth“. Als funktionelle Gruppen sind enthalten eine Alkohol-(OH) und eine Aminogruppe (NH_2). Die Alkoholgruppe hat die größere Masse. Damit wird die Endung zu „anol“. Die Aminogruppe befindet sich nicht am selben Kohlenstoffatom wie die Alkoholgruppe (Atom Nr. 1), sondern an dem daneben (Nr. 2). Deshalb geben wir den Ort an durch „2-Amino“.

DFG legt MAK- und BAT-Werte-Liste 2004 vor

Cadmium als krebserzeugend bewertet

Die Senatskommission zur Prüfung gesundheitsschädlicher Arbeitsstoffe der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) hat die MAK- und BAT-Werte-Liste 2004 vorgelegt. Sie enthält Vorschläge für die höchstzulässige Konzentration eines Arbeitsstoffes am Arbeitsplatz, die nach gegenwärtigem Kenntnisstand auch bei täglich achtstündiger Exposition die Gesundheit der Beschäftigten nicht beeinträchtigt. Insgesamt ergaben sich 91 Änderungen und Neuaufnahmen.

Cadmium und seine anorganischen Verbindungen wie auch Wolframcarbid- und Cobalt-haltige Hartmetalle sind als krebserzeugend für den Menschen bewertet und damit in die Kanzerogenitäts-Kategorie 1 eingruppiert. Indiumphosphid, sowie 1,5-Diaminonaphthalin haben sich als krebserzeugend im Tierversuch erwiesen und sind der Kanzerogenitäts-Kategorie 2 zugeordnet. Talk (asbestfaserfrei) wurde als krebverdächtiger Arbeitsstoff der Kanzerogenitäts-Kategorie 3B zugeordnet. Auch Benzoylchlorid, Chlorameisensäureethylester, 2,5-Dimethoxy-4-chloranilin, Glyoxal und 1,5-Naphthylendiisocyanat wurden dieser Verdachtskategorie zugeordnet. Der Lebensmittelzusatzstoff 3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxytoluol (BHT) wurde in die Kategorie 4 umgestuft. Die Trimethylpentan-Isomeren mussten in die Kanzerogenitäts-Kategorie 3A eingruppiert werden, da entscheidende Daten für die Ableitung eines MAK-Wertes fehlen.

Der MAK-Wert für Chlorwasserstoff wurde gesenkt. Für sechs weitere Stoffe (BHT, Essigsäureisopropenylester, Isophorondiisocyanat, Kupfer und seine anorganischen Verbindungen, 2-Phenylpropen und Trimethylamin) ändern sich die MAK-Werte.

13 Arbeitsstoffe wurden auf besondere Gefährdung in der

Schwangerschaft hin überprüft. BHT sowie Chlor und Chlorwasserstoff kommen in die Gruppe C, in der diejenigen Stoffe zusammengefasst sind, bei denen bei Einhaltung des MAK-Wertes kein Risiko der Fruchtschädigung zu befürchten ist. Kupfer, Pentan, Phenylpropen und Trimethylamin dagegen werden der Schwangerschaftsgruppe D zugeordnet: Ein Risiko der Fruchtschädigung ist bei Einhaltung des MAK-Wertes derzeit eher unwahrscheinlich, kann aber nicht ausreichend sicher ausgeschlossen werden. Auch Xylol verbleibt trotz einer neuen Studie in dieser Gruppe. Für Propan, Octan, Essigsäureisopropenylester, Bromwasserstoff und Isophorondiisocyanat konnte mangels Daten keine Zuordnung zu einer der Gruppen vorgenommen werden und die Stoffe müssen in der Liste im Abschnitt IIc geführt werden.

Auf ihre atemwegs- und hautsensibilisierenden Eigenschaften wurden in diesem Jahr 22 Arbeitsstoffe überprüft. Neue Markierungen erhielten 16 Chemikalien, darunter

die als Duftstoffe verwendeten Verbindungen Eichenmoos, Geraniol und Lyral, das Enzym Papain sowie die als Konservierungsmittel beziehungsweise Biozid verwendeten Stoffe Bronopol und 5-Ethyl-3,7-dioxa-1-azabicyclo[3.3.0]octan (EDA0) außerdem auch Wolframcarbid- und Cobalt-haltiger Hartmetallstaub.

21 Stoffe erhielten neu den Warnhinweis „H“, was bedeutet, dass die Resorption durch die Haut neben der Inhalation wesentlich zur Toxizität am Arbeitsplatz beitragen kann. Für zwei weitere Arbeitsstoffe, Bronopol und p-Toluidin, wurde dieser Warnhinweis überprüft und bestätigt.

Im Teil „BAT-Werte, BLW und EKA“ gibt es eine Neuaufnahme, und zwar Expositionsäquivalente für leicht lösliche Nickelverbindungen (EKA).

Eine Liste mit allen Neuaufnahmen und Änderungen kann abgerufen werden unter www.dfg.de/aktuelles_presse/reden_stellungnahmen/download/mak2004.pdf.

Verbraucherinformation über neues Chemikalienrecht

Das Bundesumweltministerium informiert über die bevorstehende Reform des europäischen Chemikalienrechts. Einer systematischen Prüfung auf beispielsweise hautreizende, allergieauslösende oder krebserregende Eigenschaften unterliegen bislang nur die „Neustoffe“. Das sind rund 4000 Stoffe, die seit 1981 in Europa erstmals auf den Markt gekommen sind. Für die mehr als 100 000 „Altstoffe“ gibt es derartige systematische Prüfungen bislang nicht. Das neue europäische Chemikalienrecht soll dafür sorgen, dass innerhalb von elf Jahren die wichtigsten Altstoffe durchleuchtet werden. Die Verwendung besonders gefährlicher Chemikalien kann von einem Zulassungsverfahren abhängig gemacht werden. Die „REACH-Verordnung“ (Registration, Evaluation and Authorisation of Chemicals – Anmeldung, Bewertung und Zulassung von Chemikalien) wird das europäische System der Chemikaliensicherheit auf ein neues Fundament stellen. Die BMU-Broschüre „Reach – Magazin für eine moderne Chemie“ kann unter www.bmu.de heruntergeladen werden.



Fremde Federn finden

Plagiate in der Schule

Fremde Federn Finden – so heisst die von Prof. Dr. Debora Weber-Wulff, Medieninformatikerin an der Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin (FHTW), entwickelte Lerneinheit, die Lehrerinnen und Lehrer an Schulen fit macht für das Aufspüren von Hausarbeiten, die ihre Schülerinnen und Schüler nicht selbst verfasst, sondern einfach aus dem Internet heruntergeladen haben.

Dass Seminar- und Hausarbeiten von ihren Verfassern nicht redlich erarbeitet, sondern einfach aus dem Internet heruntergeladen, sprich: geklaut werden, bereitet nicht nur Professorinnen und Professoren an Universitäten Sorge, sondern immer häufiger auch Lehrerinnen und Lehrern an Schulen. Wie spürt man „Plagiate“ auf, wurde Prof. Dr. Debora Weber-Wulff oft gefragt. Als Antwort darauf hat die Spezialistin für eLearning und Autorin zahlreicher Beiträge zum Thema „Plagiat in der Wissenschaft“ die Lerneinheit „Fremde Federn finden“ entwickelt.

Auf über 40 Seiten stellt Weber-Wulff die Geschichte des Plagiats dar und erörtert die Bedeutung im Schulunterricht. Vor allem aber gibt sie Tipps, wie man Plagiaten auf die Spur kommt, wahlweise mit oder ohne Softwareunterstützung, und führt die Ergebnisse eines Tests von zehn Softwaresystemen zur Erkennung von Plagiaten auf.

Ein wichtiges Element der Lerneinheit ist der Selbsttest. Anhand von zehn Beispiel-Aufsätzen können die Nutzerinnen und Nutzer überprüfen, in wie weit sie selbst

herausfinden, ob es sich bei einem Text um ein Plagiat handelt oder nicht. Zu jedem Aufsatz gibt es die Lösung samt einschlägiger Hinweise. Wie sind die Plagiate entstanden, wie hatte man Verdacht schöpfen können und wie hätte man diesen Aufsatz mithilfe einer Suchmaschine finden können?

Die Lerneinheit steht kostenlos im Internet zur Verfügung. Ein einfacher Web-Browser genügt, um den Kurs zu lesen. Veranschlagt werden zwei bis drei Stunden für die Lektüre sowie ca. 20 Minuten pro Aufgabe. Weitere Informationen finden Sie unter <http://plagiat.fhtw-berlin.de/ff/>.

Bildungsgerechtes Urheberrecht

Neue Medien im Unterricht

Ein privilegierter Zugang zu Informationen ist unerlässlich, wenn eine zukunftsfähige Wissensgesellschaft aufgebaut werden soll, in der die neuen Medien effektiv genutzt werden können. Prof. Dr. Ulrich Sieber, Direktor des Freiburger Max-Planck-Instituts für ausländisches und internationales Strafrecht, hat im Auftrag von Schulen ans Netz e. V. ein „Memorandum zur Berücksichtigung der Interessen des Bildungsbereichs bei der Reform des Urheberrechts“ veröffentlicht, in dem konkrete Handlungsfelder benannt werden.

In der Praxis zeigt sich jedoch, dass viele Lehrkräfte den Einsatz neuer Medien im Unterricht wegen rechtlicher Unsicherheiten scheuen. Das Memorandum belegt, dass diese Ängste der Lehrkräfte durchaus ihre Berechtigung haben.

Im Einzelnen zeigt es vor allem die folgenden Schwachstellen auf: Die für das vernetzte Arbeiten an der Schule konzipierte Vorschrift des § 52a UrhG ist in ihrer aktuellen Fassung mit einer Reihe von rechtlichen Unklarheiten belastet, die sie als praxisuntauglich erscheinen lässt. So scheint ein Online-Zugriff auf Inhalte innerhalb eines schulischen Intranets oder passwortgeschützten Bereichs ei-

ner Homepage nur erlaubt zu sein, wenn dies unmittelbar im Unterricht geschieht. Schon für einen Zugriff im Rahmen der Erledigung der Hausaufgaben bietet die Vorschrift keine verlässliche Grundlage. Weiterhin hat der Gesetzgeber bisher nicht von der Möglichkeit Gebrauch gemacht, Computersysteme an Schulen zu gestatten, über die den Schülern an der Schule vorhandene elektronische Inhalte zugänglich gemacht werden können. Und dies, obwohl der Europäische Gesetzgeber die Einrichtung solcher Computersysteme ausdrücklich gestattet und nach wie vor viele Kinder und Jugendliche im häuslichen Umfeld keinen Zugriff auf elektronische Abspielgeräte, wie DVD-Player oder PC, haben.

Erhebliche rechtliche Unsicherheiten bestehen ausserdem dahingehend, ob privat erworbene oder in einer gewöhnlichen Videothek ausgeliehene Videokassetten oder DVDs im Unterricht vorgeführt werden können. Sieber fordert daher eine Klarstellung im Gesetz, die dies ausdrücklich ermöglicht und damit Lehrerinnen und Lehrer nicht länger zwingt, in einer rechtlichen Grauzone zu agieren.

Das Memorandum ist zu finden unter www.lehrer-online.de/url/memorandum.

Lösungen zu Seite M64:

1 E; 2 C, E; 3 C, D; 4 B; 5 C; 6 E; 7 D; 8 C; 9 A, B, C; 10 D; 11 E; 12 E; 13 E; 14 A; 15 B, C, D.

Risikobewertung von Lampenölen

Gefährliche Haushaltsmittel

Trotz wiederholter Warnungen und einer Reihe risikominimierender Maßnahmen sind erneut zwei kleine Kinder durch Lampenöl ums Leben gekommen.

Beide hatten geringe Mengen paraffinhaltigen ungefärbten und unparfümierten Lampenöls aufgenommen. Ein Kind hatte aus dem Behälter einer Gartenfackel getrunken, das andere vermutlich am Docht einer Öllampe gesaugt. Beide Kinder starben trotz intensiver ärztlicher Bemühungen. Wegen ihres besonderen Gefahrenpotenzials hat das damalige Bundesinstitut für gesundheitlichen Verbraucherschutz und Veterinärmedizin, BgVV, in Deutschland bereits 1999 ein Verkaufsverbot für gefärbte und parfümierte, paraffin- und petroleumhaltige Lampenöle initiiert. Seit dem Jahr 2000 gilt das Verbot europaweit. „Diese Maßnahme“, so der Präsident des BfR, Professor Andreas Hensel, „reicht nicht aus, um kleine Kinder ausreichend zu schützen. Es sollte dringend geprüft werden, inwieweit das Verkaufsverbot auch auf die ungefärbten und unparfümierten Produkte ausgedehnt werden sollte“. Eltern kleiner Kinder rät das Institut davon ab, derartige Lampenöle im Haushalt zu verwenden.

Seit 1990 wurden dem Institut insgesamt fünf Todesfälle bei Kindern durch paraffin- und petroleumhaltige Lampenöle gemeldet. Andere Kinder trugen schwere gesundheitliche Schäden davon. Diese Produkte zählen damit zu den gefährlichsten Haushaltschemikalien für Kinder zwischen einem und drei Jahren. Das Gefahrenpotenzial resultiert aus den besonderen physikalisch-chemischen Eigenschaften dieser Lampenöle. Schon beim Verschlucken kleinster Mengen von unter einem Gramm können die Öle in die Lunge „kriechen“ und dort schwere Entzündungen, „chemische Lungenentzündungen“

auslösen. Ärztliche Hilfe kommt in diesen Fällen häufig zu spät.

Seit 1970 war die Zahl der Anfragen zu Lampenölvergiftungen in den deutschen Giftinformationszentren stetig angestiegen. 1994 kamen auf ca. 1000 solcher Anfragen 250-300 „chemische Lungenentzündungen“ bei Kleinkindern. Erst eine Reihe präventiver Maßnahmen, die auf Initiativen des Vorgängerinstituts des BfR zurückgehen (kindergesicherte Verschlüsse, Warnhinweise, Kennzeichnung mit „R 65“ als „gesundheitsschädlich“, Verkaufsverbot für parfümierte und gefärbte, paraffin- und petroleumhaltige Lampenöle an Endverbraucher,) führte zu einer Abnahme der Zahl gemeldeter Fälle mit schweren gesundheitlichen Schäden. Das belegt eine Studie zu Vergiftungen mit Lampenölen, die das BgVV im Jahr 2000 begonnen hatte und die vom BfR weitergeführt wurde.

In seiner Auswertung kommt das Bundesinstitut zu dem Schluss, dass sich die Zahl gemeldeter, schwerer gesundheitlicher Schäden, und insbesondere chemischer Lungenentzündungen, seit dem Verbot der gefärbten und parfümierten Lampenöle auf Paraffin- und Petroleumbasis zwar reduziert hat. Weitere Fälle werden aber immer noch gemeldet. Davon lassen sich einige durch die Verwendung von Altbeständen an gefärbten und parfümierten Lampenölen erklären. Andere konnte das BfR jedoch ursächlich zweifelsfrei auf die, vom geltenden Verbot nicht erfassten, ungefärbten und unparfümierten, paraffin- oder petroleumhaltigen Lampenöle zurückführen.

In seiner aktuellen Risikobewertung kommt das BfR deshalb zu dem Schluss, dass auch diese Produkte ein erhebliches Gefährdungspotenzial bergen. Das Institut empfiehlt eine Ausweitung des Verkaufsverbotes auf ungefärbte und unparfümierte Lampenöle auf

Paraffin- oder Petroleumbasis, um die Gesundheit und das Leben von Kleinkindern ausreichend zu schützen.

Auch andere, vergleichbare Zubereitungen, wie etwa flüssige Grillanzünder, Petroleum oder Feuerspuckflüssigkeiten stellen eine Gesundheitsgefahr für den Verbraucher dar. Das BfR mahnt deshalb zur Vorsicht: Diese Produkte gehören nicht in Kinderhand und müssen für Kinder unzugänglich aufbewahrt werden. Die von der Industrie auf den Markt gebrachten Lampenöl-Ersatzstoffe (meist auf der Basis von „Biodiesel“ hergestellt) scheinen dagegen keine vergleichbaren gesundheitlichen Risiken zu bergen.

Weitere Informationen zu diesem Thema finden Sie auf der Homepage (www.bfr.bund.de) unter dem Menüpunkt Chemikalien/ Chemikalienbewertung/ „Risikobewertung von Lampenölen auf Kohlenwasserstoffbasis“.

Wichtige Hinweise für Verbraucher:

Sollte ein Kind trotz aller Vorsichtsmaßnahmen an paraffin- oder petroleumhaltige Lampenöle oder andere flüssige Brennstoffe gelangen und davon trinken, gilt:

- Kein Erbrechen auslösen! Erbrochenes, und damit das Öl, kann so in die Lungen eindringen.
- Sofort mit einem Giftinformationszentrum in Verbindung setzen!
- Selbst bei geringsten Symptomen, wie unmittelbarem, anhaltendem Husten muss das Kind bei einem Arzt oder in einer Klinik vorgestellt und überwacht werden.



Anregungen für den Chemieunterricht „Hilfe, die Riesen kommen“

Dr. Renate Hoer, GDCh

Im September findet in Bremen die Fortbildungs- und Vortragstagung der Fachgruppe Chemieunterricht der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) unter dem Motto „Chemie und Technik“ statt. Die Tagung gibt Lehrern Gelegenheit, neue Ideen für einen interessanten und spannenden Chemieunterricht aufzunehmen.

In Diskussions- und Experimentalvorträgen, in Workshops und anhand von Postern stellen Lehrer neue Unterrichtsprojekte vor, geben Hochschul- und Industriechemiker Anregungen für die Gestaltung des Unterrichts: „Hilfe, die Riesen kommen! – neue, einfache Schülerexperimente zu Makromolekülen“ lautet beispielsweise ein Thema. Oder auch: „Verpackungsmaterialien für Lebensmittel – ausgewählte Experimente zur Gewinnung von Erkenntnissen über Aufbau und Funktion“, „Von der Elektrolysezelle zur Leuchtdiode“, „Elektrisch leitfähige Polymere führen zu Verbesserungen in der Technik“ und „Integration von Heimexperimenten in den Chemi-

eunterricht – ungewöhnliche Hausaufgaben im Fach Chemie“.

Grundlage für das Verständnis von Alltags-Phänomenen (beispielsweise Lösen von Zucker in Tee, Gewinnung von Salz aus Meerwasser) ist das Teilchenkonzept, doch die Schüler haben oft Schwierigkeiten mit der Teilchenvorstellung, weil sie den diskontinuierlichen Aufbau der Materie mit keinem ihrer Sinne erfassen können. In Bremen wird eine Unterrichtseinheit „Molekulares Sieben“ vorgestellt. Hierbei werden verschiedene Farbstofflösungen mit einer selektiv-permeablen Membran, einer gewöhnlichen Einmachfolie, durchsiebt. Je nach Größe der Farbstoffmoleküle können diese die Einmachfolie durchdringen oder werden zurückgehalten. Ein Stoff zerfällt während des Lösens eben nicht zufällig in beliebig große Stücke, sondern besteht aus einheitlichen, vorgebildeten Teilchen.

Ein grundsätzliches Anliegen ist die Verbesserung der Akzeptanz und damit des Erfolgs des Chemieunterrichts. Ohne die notwendigen fachlichen Grundlagen zu vernachlässigen, gilt es, den Alltag verstärkt einzubeziehen und mög-

lichst viele Schülerexperimente durchzuführen. Statt Laborchemikalien solle man Stoffe aus dem Alltag verwenden, beispielsweise Oxi-Reiniger, universell einsetzbare Reinigungs- und Bleichmittel auf Sauerstoffbasis. Sie setzen in nennenswerten Mengen Sauerstoff frei und können, statt zum Beispiel Kaliumpermanganat, für die Durchführung und Erläuterungen von Oxidations- und Redoxreaktionen herangezogen werden.

Lehrer sollten stets mit Begeisterung und Motivation in den Unterricht gehen, um auch die Schüler begeistern und motivieren zu können. In der Chemie kann es leicht zu Demotivationen bei Lehrern kommen, weil der Arbeitseinsatz wegen der Versuchsvor- und -nachbereitungen oftmals ungleich höher ist als in anderen Fächern. Chemielehrer suchen daher nach Rezepten für zeitsparende Experimente. In einem Experimentalvortrag wird in Bremen die Idee der „Instant Chemistry“ vorgestellt, mit der in sehr kurzer Zeit interessante Schulversuche sicher und mit geringem Aufwand durchführbar sind.

Eine Lehrerin, die sich durch besondere Leistungen im Chemieunterricht hervorgetan hat, ist Studiendirektorin Sabine Venke, Berlin. Sie erhält den Friedrich-Stromeyer-Preis der GDCh-Fachgruppe Chemieunterricht für ihre Verdienste um die Entwicklung und Gestaltung eines modernen Chemieunterrichts und ihr großes Engagement in Gremien, die eine Optimierung des Chemieunterrichts in Deutschland zum Ziel haben.

Prof. Dr. Volkmar Dietrich, Potsdam erhält für seine langjährigen Verdienste um die Förderung und Weiterentwicklung eines modernen Chemieunterrichts durch überdurchschnittliches Engagement in der Lehrerfort- und Weiterbildung den Heinrich-Rössler-Preis.

Der „Phytolator“ im Dschungel der Erkenntnis

Wissenschaftler des Leibniz-Institutes für Pflanzenbiochemie (IPB) haben ein informatives und amüsanteres Bonuspiel entwickelt, das interessierten Schülern und Studenten die Arbeit des Naturstoffchemikers näher bringen soll.

Der Spieler darf als „Phytolator“ im Urwald nach interessanten Pflanzen fahnden. Anschließend isoliert und analysiert er deren Inhaltsstoffe. Am Ende seiner Arbeit weiß er Bescheid über Struktur- und Summenformel des gesuchten Stoffes und ist im Besitz eines virtuellen Doktorhutes.

Das Spiel und ein virtueller Rundgang können von den Instituts-Webseiten kostenlos heruntergeladen werden (384 MB): <http://www.ipb-halle.de/deutsch/presse/phytolator.htm>.



Deutsche erfolgreich bei Chemieolympiade Fünfte von 61 Nationen

Am 26. Juli 2004 wurden im Hamburger Congress Center die Medaillen der 36. Internationalen Chemie-Olympiade vergeben. Im diesem größten weltweiten Chemiewettbewerb für Schüler holten die vier deutschen Vertreter zwei Gold- und zwei Silbermedaillen.

Den Gewinner stellte das russische Team mit Alexey Zelfman (88,7 Punkte). Als beste deutsche Schüler errangen Michael Hell, Leibniz Gymnasium Altdorf, (77,6 Punkte) und Martin Brehm, Goetheschule Ilmenau, (72,3 Punkte) zwei Goldmedaillen für die deutsche Mannschaft. Lukas Reck, Karls-Gymnasium Stuttgart,

und Frank Biedermann, Georg-Cantor-Gymnasium Halle, holten Silber.

In der inoffiziellen Mannschaftswertung liegt Deutschland auf dem 5. Platz. China stellte mit vier Goldmedaillen das beste Team, gefolgt von Korea mit drei Gold- und einer Silbermedaille.

An der 36. Chemie-Olympiade, die in Kiel ausgetragen wurde, nahmen 61 Nationen mit je vier Schülern zwischen 17 und 19 Jahren teil. Weitere sieben Länder schickten Beobachter.

Die nächste Chemie-Olympiade findet im kommenden Jahr in Taiwan statt.

Frauen in Wissenschaft und Forschung CEWS Kompetenzzentrum

Das Kompetenzzentrum Frauen in Wissenschaft und Forschung CEWS ist mit seiner neuen Website <http://www.cews.org> online. Mit einem Angebot an zusätzlichen zielgruppenspezifisch aufbereiteten Informationen präsentiert sich der Web-Auftritt technisch auf dem neuesten Stand und in zeitgemäßem Design.

Besonders wichtig war es, allen Interessierten einen möglichst barrierefreien Zugang zu ermöglichen. Deshalb orientierte man sich bei der Programmierung eng an der Barrierefreien Informationstechnik-Verordnung (BITV).

Mit dem [cews.informationpool](http://www.cews.org/informationpool) (<http://www.cews.org/informationpool>) bietet das CEWS ein neuartiges, zusätzliches Onli-

ne-Angebot. Dieses beinhaltet eine umfassende Sammlung an Ressourcen zum Thema Gleichstellung in der Wissenschaft und ermöglicht eine bequeme Recherche. NutzerInnen können sich ab sofort über aktuelle Meldungen, Veranstaltungshinweise und Stellenangebote informieren. Darüber hinaus stehen Datenbanken und Portale zur Verfügung.

Bis Herbst 2004 wird das Angebot weiter ausgebaut: mit wichtigen Dokumenten als Downloads und einem umfangreichen Linkverzeichnis.

Relevante und aktuelle Informationen in elektronischen und Printmedien zur Verfügung zu stellen, ist eine zentrale Aufgabe im Rahmen des Leistungsbereiches „Wissenstransfer“.

Aus der Bildungslandschaft

- Ab sofort informiert www.studienwahl.de, die Online-Schwester der Broschüre „Studien- und Berufswahl“, über das Studienangebot aller Hochschulen in Deutschland. Das gemeinsame online-Angebot der Bund-Länder-Kommission für Bildungsplanung und Forschungsförderung und der Bundesagentur für Arbeit stellt auch Alternativen zum Hochschulstudium vor, wie zum Beispiel die Ausbildung in Berufsakademien. Mehr als 1300 Links führen zu weiteren Informationsquellen wie den Internetseiten der über 60 Studentenwerke mit ihren Wohnraumabteilungen, zum DAAD, zur Bundesagentur für Arbeit, zu den einschlägigen Bundes- und Landesministerien sowie zu den Online-Infos wichtiger Verbände.

- Für das kommende Wintersemester können sich Interessierte beim Fernstudienzentrum der Universität in Koblenz wieder bewerben. Der Fernstudien-Kurs zur **Europäischen Wasserrahmenrichtlinie** steht ebenso wie der Diplom-Fernstudiengang **„Angewandte Umweltwissenschaften“** im Angebot. Daneben bietet die Universität anerkannte Lehrgänge für Abfall- und für Gewässerschutzbeauftragte per Fernstudium.

- Erstmals zum kommenden Wintersemester kann man an der Universität Jena den Bachelor-Studiengang (B.Sc.) **„Angewandte Umweltwissenschaften“** studieren. Weitere Informationen unter: www.uni-jena.de/Bewerbungsunterlagen.html.

- Zum Wintersemester startet am Ökologie-Zentrum der Universität Kiel der neu eingerichtete Studiengang **„Environmental Management – Management natürlicher Ressourcen“**. Der englischsprachige, zweijährige Masterstudiengang soll Absolventen befähigen, komplexe Managementkonzepte zur Lösung von Umweltproblemen zu entwickeln. Informationen und Unterlagen stehen im Internet unter: www.ecology.uni-kiel.de/masters.

- Die Europa Fachhochschule Fresenius (EFF) führt im kommenden Wintersemester einen neuen Schwerpunkt im Studium der Betriebswirtschaftslehre ein. Neben Medienwirtschaft, Gesundheitsökonomie und Umweltökonomie können die Studenten im Hauptstudium künftig den Schwerpunkt **Interkulturelles Management** wählen.

- Zum Wintersemester geht mit dem Masterprogramm **Industrial Engineering** an der oncampus GmbH ein neuer Fernstudiengang online. In nur 18 Monaten können Studierende den international anerkannten Master of Science erwerben.

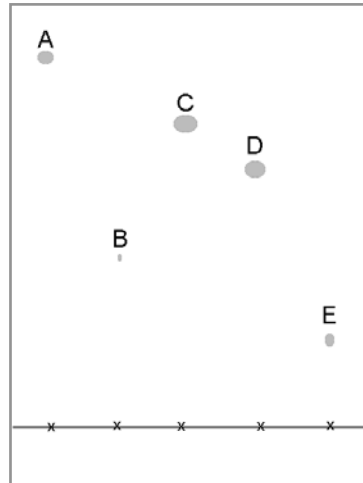
- Der Studiengang **Medizinische Biologie** an der Universität Duisburg-Essen verbindet moderne Biologie mit experimentell ausgerichteter Medizin. Er endet mit dem „Bachelor of Science (B.Sc.)“, der durch den konsekutiven Master of Science (M.Sc.) ergänzt wird. Abschliessend kann in eine Promotion folgen.

Analytische Chemie

Mehrere richtige Antworten sind möglich.

- 1 Wozu verwendet man ein Eintauchrefraktometer? Zur Messung
A des Schmelzpunktes
B des Siedepunktes
C der Dichte
D des Flammpunktes
E der Brechzahl
- 2 Welche Methode könnte man als klassische analytische Methode bezeichnen?
A HPLC
B AAS
C Titrimetrie
D Photometrie
E Gravimetrie
- 3 In welcher Aussage ist ein Fehler enthalten?
A Die Potentiometrie ist eine Methode ohne Stromfluss.
B Die Konduktometrie ist eine Methode mit Stromfluss aber vernachlässigbarem Stoffumsatz.
C Bei der Photometrie befindet sich die mobile Phase in gasförmigem Zustand.
D In der Flüssigkeitschromatographie ist die Elutionskraft die Kraft, mit der das Adsorptionsmittel einen adsorbierten Stoff festhält.
E Der Wärmeleitfähigkeitsdetektor in der Gaschromatographie ist auf Trägergase angewiesen, die sich in ihrer Wärmeleitung möglichst stark von den Proben-substanzen unterscheiden.
- 4 Bei welcher Methode befindet sich die mobile Phase in gasförmigem Zustand?
A LC
B GC
C TLC
D HPLC
- 5 Welche analytische Methode ist historisch gesehen die jüngste?
A Gravimetrie
B Elektrogravimetrie
C Chromatographie
D Kolorimetrie
E Spektrometrie

- 6 Welche Substanz besitzt in dem folgenden Chromatogramm den kleinsten R_f -Wert?

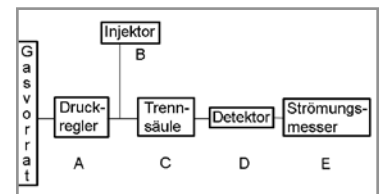


- 7 Welches Bauteil ist in UV/VIS-Absorptionsspektrometern nicht enthalten?
A Glühlampe
B Gasentladungslampe
C Küvettenhalter
D Prisma aus Natriumchlorid
E Photozelle
- 8 Üblicherweise bezeichnet man in der Photometrie die Intensität des eingestrahlichten Lichts mit I_0 und die Intensität des Lichts nach dem Durchgang durch eine Lösung mit I . Wie ist dann die Absorption A (Extinktion = Auslöschung) definiert?
A $A = I_0/I$
B $A = I/I_0$
C $A = \lg(I_0/I)$
D $A = \lg((I_0 - I) / I_0)$
E $A = \lg((I - I_0) / I_0)$
- 9 Manche Maßlösungen müssen nach dem Ansetzen noch „eingestellt“ werden, andere können direkt verwendet werden, weil die betreffende Substanz die Eigenschaften einer Urtitersubstanz hat. Welche Maßlösungen können (korrektes Arbeiten vorausgesetzt) direkt verwendet werden?
A Natriumchlorid-Lösung
B Kaliumdichromat-Lösung

- C** Kaliumiodat-Lösung
D Kaliumbromat-Lösung
E Natriumthiosulfat-Lösung

- 10 Welche Zahl entspricht der Wellenlänge $5 \mu\text{m}$?
A 400 cm^{-1}
B 500 cm^{-1}
C 1000 cm^{-1}
D 2000 cm^{-1}
E 5000 cm^{-1}

- 11 Die Skizze zeigt schematisch die Anordnung der Bauteile eines Gaschromatographen. Welches Teil ist falsch eingezeichnet?



- 12 Was ist in der Regel kein Bauteil eines Flammenphotometers?
A Monochromator
B Spalt
C Photozelle
D Brenner
E Küvette
- 13 Bei welcher Analysenmethode wird polarisiertes Licht verwendet?
A Polarographie
B Kolorimetrie
C Photometrie
D Refraktometrie
E Polarimetrie
- 14 Welcher Begriff stammt aus der IR-Spektrometrie?
A Normalschwingung
B Trennstufenzahl
C Elektroosmotischer Fluss
D Retentionszeit
E Elektroneneinfangdetektor
- 15 Was enthält eine Kalomelektrode?
A pH-Puffer
B Quecksilber
C Kaliumchlorid-Lösung
D Quecksilber(I)-chlorid

graphie abgetrennt. Das dabei auftretende Problem ist die starke Bandenverbreiterung durch geringe Korngrößen, die dazu führen kann, dass die Myoglobinlösung zu verdünnt ist und ein Einengen nicht möglich ist (thermische Instabilität).

3.4.1. Alternative Methode:

Um nun die problematische Gelchromatographie zu ersetzen wird mit einem entwickelten Mischbettionenaustauscher-System gearbeitet aus 2 Teile Lewatit M500 (basisch) und 1 Teil Lewatit S100 (stark sauer). Unter Kontrolle des pH-Wertes ist so die Entsalzung der Lösung möglich ohne die Probleme der Gelchromatographie.

3.5 Struktur/Wirkungsbeziehung (Radikalfängerwirkung) mit Flavonen

Diese erste Auswertung von Ergebnissen mit Flavon-Derivaten, welche ich nach den Wettbewerben im letzten Jahr synthetisiert habe, soll zeigen, wie ich bei den weiteren Untersuchungen vorgehen werde, um seine Struktur/Wirkungsbeziehung aufstellen zu können.

Die Flavonderivate, die mit der ABTS-Trolox-Methode getestet worden sind, und die ermittelten Ergebnisse folgen zusammengestellt in der Tabelle 3: Struktur/Wirkungsbeziehung der Flavonderivate. Das Diagramm 3 zeigt beispielhaft die Ergebnisse der eigenen Methoden.

Durch die Ordnung der Stoffe nach der antioxidativen Wirkung kann man nun Schlüsse zum strukturellen Zusammenhang ziehen. In diesem Beispiel wird der Oxidationszustand der Flavon-Derivate geändert und im Falle des neuen Synthesekonzepts kann der Substituenten-Effekt auf die antioxidative Wirkung untersucht werden. Die höchste Wirkung besitzt das Leukocyanidin, danach folgen drei Catechin-Derivate, das Quercetin [51], die Chalkone [53e*/53d*], das Cyanidin [52a], Flavonol [53aa*] und das Chalkon.

Wie in der zweiten Tabelle aufgezeigt, lassen sich erste Schlüsse in Richtung einer Struktur/Wirkungsbeziehung durchführen.

Bis zum Wettbewerb werden auch noch die restlichen Flavon-Derivate nach den neuen Methoden untersucht um erste sichere Aussagen zur Relation Oxidationszustand/Wirkung durchzuführen. Bei der Anwendung der neu entwickelten Methode sollten noch differenziertere Angaben über Struktur und Wirkung möglich sein, besonders unter Einbeziehung der Substituenteneffekte, wobei diese teilweise nicht im Einklang mit der Trolox-Methode stehen (nur ein Radikal wird betrachtet), was die Relevanz der neuen Methoden zeigt. Hier werden später Molecular-Modeling-Rechnungen über Raumstruktur und Ladungsverteilung zur Korrelation mit der antioxidativen Wirkung herangezogen, um die aufwendigen chemischen Untersuchungen auf die in der Modellrechnung favorisierten Moleküle beschränken zu können.

Fazit

Ziel dieser Stufe der Beschäftigung mit Anthocyanen ist die Entwicklung

- von Substanzen mit biochemischer Wirkung und
- Methoden die Wirkungsweise von Radikalen zu prüfen, um die Wirkung in Zellen verfolgen und möglicherweise regulierend eingreifen zu können.

In dieser Arbeit werden zunächst

- a) Methoden zur Synthese von zinkorganischen Verbindungen entwickelt. Diese sind notwendig, um
- b) ein neues Synthesekonzept für Anthocyane zu verwirklichen, womit eine größere Zahl von Anthocyanen synthetisiert werden kann.
- c) Weiterhin werden Methoden zur Bestimmung der antioxidativen Wirkung entwickelt, die Rückschlüsse auf verschiedene Moleküleigenschaften erlauben.

Zu a) Bei der Methode zur elektrochemischen Synthese von zinkorganischen Verbindungen kommen Vorteile wie einfache Anwendbarkeit, Arbeit im geschlossenen System, bessere Steuerbarkeit und die direkte Weiterreaktion in der Apparatur zum Tragen.

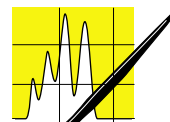
Zu b) Diese Methode ersetzt die herkömmliche Variante der Direktsynthese und erlaubt durch elektrochemisch gesteuerte Kombination die Darstellung einer Vielzahl von Anthocyanen. Die Synthesemethode von zinkorganischen Verbindungen könnte neben der Anwendung in der organischen Synthese im Labor auch industriell Anwendung finden, weil der Vorteil der guten Steuerbarkeit im Gegensatz zur rein chemischen Variante den Anforderungen nach Sicherheit im Umgang mit gefährlichen Stoffen und Reaktionsbedingungen gerecht werden kann.

Zu c) Die weiterentwickelten Methoden zur Bestimmung der antioxidativen Wirkungen von Substanzen könnten zum einen die bestehende Methoden ersetzen, denn sie besitzen Vorteile, wie einfache Ausgangsstoffe, enorme Vielfalt der Varianten und einfache Verfahrensweisen. Außerdem erlauben sie die Zusammenstellung eines Methoden-Kits zur routinemäßigen Bestimmung und differenzierten Betrachtung unterschiedlicher Moleküleinflüsse.

Durch die Verbindung des neuen Synthesekonzepts für Flavon-Derivate mit den neuen antioxidativen Testmethoden wird die Möglichkeit eröffnet, die Wirkung von gesundheitsrelevanten und auch in der Nahrung vorkommenden Radikalfängern, wie den Flavon-Derivaten, auf ihre Struktur zurückzuführen.

Danksagung

Als erstes möchte ich meinen Eltern und Großeltern für ihre Unterstützung danken, wobei ich meinen Großeltern besonders danken möchte für die Hilfe im Labor bei der Aufnahme der unzähligen Spektren. Besonderer Dank gilt auch Herrn Dr. Häusler für seine besondere Unterstützung, Förderung und Korrektur. Meiner Chemielehrerin Frau Rosch gilt ebenso Dank für die Korrektur und Unterstützung.



AUFsätze



Linux, Knoppix, Mac OS X, Open Source: Vorteile von Unix et al. in Chemie & Biologie

Teil 10: Awk Grundlagen

Röbbe Wünschiers

Ein anwenderfreundliches aber vielseitiges Werkzeug für die Datenprozessierung ist die Skriptsprache Awk – benannt nach den Familiennamen ihrer Autoren Aho, Weinberger und Kernighan. Obwohl bereits in den 70iger Jahren entwickelt, ist Awk nach wie vor sehr beliebt und weit verbreitet. Viele der alltäglich anfallenden Datenformatierungen und -analysen lassen sich leicht und effektiv umsetzen. Wie bei den meisten Aufgaben aus der Datenprozessierung ist es die elegante Anwendung von regulären Ausdrücken (CLB 04/04), die, verpackt in ein kleines Skript, zum Ziel führt. In der letzten Ausgabe habe ich Sie mit dem Awk-Skript *pdb2xyz.awk* zur Umwandlung eines Molekülstrukturdatei Formats ins kalte Wasser geworfen. Heute möchte ich die grundlegende Arbeitsweise von Awk vorstellen.

Der Aufruf eines Awk-Skripts besteht aus mehreren Bestandteilen (Abbildung 1). Unablässig ist natürlich der Awk-Interpreter selbst, der mit dem Befehl **awk** oder **gawk** (GNU Awk) aufgerufen wird. Um festzustellen ob Awk auf Ihrem System installiert ist, geben Sie in der Kommandozeile (Terminal, Konsole, Shell) einfach den Befehl **awk --version** oder **gawk --version** ein. Ist Awk installiert, dann erhalten Sie auf diese Weise Informationen über die installierte Version. Auf den Aufruf des Awk-Interpreters folgt das Awk-Skript selbst, gefolgt von der zu bearbeitenden Datei. Dieser Aufruf kann auf dreierlei Weise erfolgen. Handelt es sich um ein sehr kurzes Skript, einen so genannten Einzeiler, dann wird das Skript meist direkt, eingeschlossen in einfachen Anführungszeichen, zusammen mit der zu bearbeitenden Datei (*datei.txt*) eingegeben: **awk 'skript' datei.txt**. Liegt ein längeres Skript vor, oder ein Einzeiler den man sehr häufig anwendet, dann wird das Skript in einer Datei abgelegt und nur der Dateiname des Skripts

Abbildung 1: Aufruf eines Awk-Skripts. Ein Einzeiler wird, eingeschlossen von einfachen Anführungszeichen, direkt eingegeben (oben). Eine Skriptdatei wird mit der Option **-f (file)** aufgerufen (unten). Wesentlich ist der Aufruf des Awk-Interpreters (1), des Skripts (2) und meistens einer zu bearbeitenden Eingabedatei.

```
awk 'Muster {Aktionen}' Datei
1      2      3
awk -f skript.awk Datei
```

```
$0 Die CLB ist super.
$1 $2 $3 $4
```

Abbildung 2: Zeilen & Wörter. Awk zerlegt jede Zeile (*record*) in Wörter (*fields*). Die aktuelle Zeile ist in der Variablen **\$0**, die Wörter der aktuellen Zeile in den Variablen **\$1, \$2, ...** gespeichert.

(*skript.awk*) zusammen mit der zu bearbeitenden Datei (*datei.txt*) angegeben: **awk -f skript.awk datei.txt**. Schließlich kann das Skript so gestaltet werden, dass es wie ein normales Linux-Kommando ausgeführt wird: **skript.awk datei.txt**. Alle drei Möglichkeiten werden wir uns im Folgenden näher ansehen. Die Ausgabe erfolgt immer auf den Bildschirm, d.h. die original Datei wird nicht verändert. Zur Speicherung des Ergebnisses wird die Umleitung (*redirection*) verwendet (siehe CLB 01/04).

Zeilen und Wörter

Awk behandelt die zu bearbeitende Datei zeilenweise (Abbildung 2). Zeilen sind standardmäßig dadurch charakterisiert, dass sie mit einem Zeilenumbruch enden. Der Zeilenumbruch wird in Linux durch die beiden Zeichen **\n** erzeugt. Die aktuelle Zeile ist in der Variablen **\$0** gespeichert. Jede Zeile wird von Awk wiederum in Wörter zerlegt. Das erste Wort der aktuellen Zeile ist in der Variablen **\$1**, das zweite Wort in der Variablen **\$2** usw. abgelegt. Wörter sind für Awk standardmäßig zusammenhängende Zeichenfolgen die durch Leerzeichen oder Tabulatoren voneinander getrennt sind. Ich schreibe *standardmäßig*, da Awk dazu angewiesen werden kann andere Trennzeichen für Zeilen und Wörter zu verwenden – doch davon mehr in einer späteren Ausgabe. In der Awk-Sprache ist eine Zeile ein *record* und ein Wort ein *field*.

Skript Syntax

Ein Awk-Skript besteht grundsätzlich aus zwei Elementen, einem Muster (*pattern*) und den Befehlen (*actions*). Das Muster beschreibt die Zeilen der Eingabedatei die bearbeitet werden sollen. Wird das Muster weggelassen, dann werden alle Zeilen bearbeitet. Die Befehle geben an, wie die Zeilen oder Wörter bearbeitet werden sollen. Befehle können in einem **BEGIN**-Block, einem Hauptteil und einem **END**-Block stehen

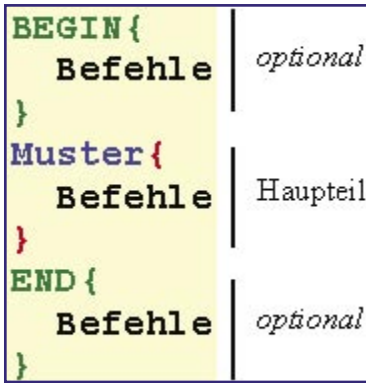


Abbildung 3: **Skript Aufbau.** Den Kern eines Awk-Skripts bilden die Befehle des Hauptteils. Sie werden auf jede Zeile der Eingabedatei angewandt. Optional kann ein Muster (*pattern*) angegeben werden, das die zu bearbeitenden Zeilen der Eingabedatei einschränkt. Die optionalen BEGIN- und END-Blöcke werden ausschließlich vor und nach der Bearbeitung des Hauptteils abgearbeitet. Alle Befehle des Hauptteils sowie der BEGIN- und END-Block werden jeweils von geschwungenen Klammern eingeschlossen. Es ist wichtig, dass das Muster in einer Zeile mit der öffnenden Klammer des Hauptteils liegt.

(Abbildung 3). Die Befehle der optionalen BEGIN- bzw. END-Blöcke werden einmalig vor bzw. nach der Bearbeitung der Eingabedatei ausgeführt. Die Kommandos des Hauptteils dagegen werden für jede Zeile auf die das Muster zutrifft ausgeführt.

Betrachten wir nun ein einfaches Beispiel. Zunächst erzeugen wir eine Beispieldatei namens *enzyme.txt* mit den Michaelis-Menten Konstanten einiger Enzyme.

Terminal 1

```
01 $ cat > enzyme.txt
02 Enzym Km
03 Protease 2.5
04 Hydrolase 0.4
05 ATPase 1.2
06 $
```

In Zeile 1 lenken wir mit dem Befehl `cat > enzyme.txt` die Eingabe der Tastatur auf den Bildschirm und in die Datei *enzyme.txt*. Mit der Tastenkombination `CTRL + D` beenden wir die Eingabe nach Zeile 5 und gelangen zurück in die Eingabezeile. Trennen Sie die Enzymnamen von den zugehörigen Km-Werten durch eine oder mehrere Leerzeichen oder Tabulatoren. Natürlich können Sie die Datei *enzyme.txt* auch mit dem Texteditor Vim erstellen (siehe CLB 02/04).

Jetzt wenden wir Awk's einfachsten Befehl an; die Ausgabe aller Zeilen durch den `print` Befehl. Mit dem Muster `/2/` beschränken wir den `print` Befehl auf alle Zeilen, welche die Zahl 2 enthalten.

Terminal 2

```
01 $ awk '/2/{print $0}' enzyme.txt
02 Protease 2.5
03 ATPase 1.2
04 $
```

Terminal 2 zeigt alle wichtigen Eigenschaften eines Awk-Skripts. Das Skript ist in einfachen Anführungszeichen eingeschlossen. In diesem Beispiel gibt es keinen BEGIN- oder END-Block, sondern nur einen Hauptteil der von geschwungenen Klammer umgeben ist. Er besteht nur aus dem Befehl `print $0`. Wie weiter oben angesprochen entspricht der Wert der Variable `$0` der gesamten aktuell bearbeiteten Zeile. Vor dem Hauptteil steht das Muster (*pattern*), der reguläre Ausdruck `/2/` (reguläre Ausdrücke werden bei Awk immer von Schrägstrichen (*slashes*) umgeben). Daher werden nur Zeilen ausgedruckt, welche die Zahl 2 enthalten. Würden wir das Muster weglassen, dann würden alle Zeilen ausgegeben. Dies ist im folgenden Beispiel gezeigt.

Terminal 3

```
01 $ awk '{print $1}' enzyme.txt
02 Enzym
03 Protease
04 Hydrolase
05 ATPase
06 $
```

Allerdings geben wir in Terminal 3 nicht die gesamte Zeile aus, sondern nur das erste Wort einer jeden Zeile. Das erste Wort ist in der Variablen `$1` gespeichert (Abbildung 2).

Lassen Sie uns nun ein Awk-Skript in eine Textdatei schreiben. Am besten verwenden Sie hierzu den Texteditor Vim (siehe CLB 02/04). Speichern Sie das nachfolgend wiedergegebene Skript in einer Datei namens *zwei.awk* ab.

Skript *zwei.awk*

```
01 #!/usr/bin/awk -f
02 BEGIN{print "Zeilen mit
03 2..."}
04 /2/{print $0}
05 END{print "Fertig"}
```

Das Skript besteht aus vier Zeilen. Würden wir nur die Zeile 3 verwenden, dann hätten wir ein Skript mit der in Terminal 2 dargestellten Funktion. Die Zeilen 2 und 4 erweitern das Skript um einen BEGIN- und einen END-Block. D.h. vor und nach der Bearbeitung der Eingabedatei wird in diesem Fall ein Text ausgegeben. Die erste Zeile sieht etwas sonderbar aus. Sie ist ausschließlich dann notwendig, wenn das Skript wie ein normaler Linux-Befehl, also ohne Aufruf des Kommandointerpreters `awk`, ausgeführt werden soll. Mehr dazu in Terminal 5. Werfen wir zunächst einen Blick auf Terminal 4.

Terminal 4

```
01 $ awk -f zwei.awk enzyme.txt
02 Zeilen mit 2...
03 Protease 2.5
04 ATPase 1.2
05 Fertig
06 $
```

Zeile 1 von Terminal 4 zeigt den Aufruf eines Awk-Skripts aus einer Datei. Im Vergleich zu Zeile 1 in den Terminals 3 und 4 entfallen die einfachen Anführungszeichen. Dafür benötigen wir die Option `-f (file)` gefolgt von dem Namen der Skriptdatei. Alles andere bleibt gleich. Die wahrscheinlich komfortabelste Art und Weise ein Awk-Skript aufzurufen ist die, bei der das Skript wie ein Linux-Kommando aufgerufen werden kann. Dazu muss das Skript, wie oben dargestellt, mit der Zeile `#!/usr/bin/awk -f` beginnen. Die Kombination „#!“ wird auch als *shebang* bezeichnet. Sie bewirkt den direkten Aufruf des nachfolgenden Kommandos unter Umgehung der Shell. Es wird also, wie in Terminal 4, `awk` mit der Option `-f` aufgerufen. Allerdings muss der Pfad zu der Programmdatei `awk` angegeben werden; hier `/usr/bin/` (CLB 12/03). Auf Ihrem System kann Awk sich woanders befinden. Sie können den tatsächlichen Pfad mit dem Kommando `whereis awk` bestimmen. Weiterhin muss das Awk-Skript ausführbar sein. Dazu ist es notwendig die Zugriffsrechte der Datei zu ändern. Wie in Teil 2 (CLB 12/03) bereits besprochen, können die aktuellen Zugriffsrechte mit dem Befehl `ls -l` angezeigt werden. Mit dem Befehl `chmod u+x zwei.awk` (`chmod = change file modes`) werden dem Besitzer (`u = user`) die Rechte zum Ausführen (`+x = plus execute`) der Datei `zwei.awk` zugewiesen.

Terminal 5

```
01 $ ls -l zwei.awk
02 -rw-r--r-- 1 rw staff 83 Jul
   26 14:27 zwei.awk
03 $ chmod u+x zwei.awk
04 $ ls -l zwei.awk
05 -rwxr--r-- 1 rw staff 83 Jul
   26 14:27 zwei.awk
06 $ ./zwei.awk enzyme.txt
07 Zeilen mit 2...
08 Protease      2.5
09 ATPase 1.2
10 Fertig
11 $
```

Die Umstellung der Zugriffsrechte erfolgt in Zeile 3 von Terminal 5. In Zeile 6 rufen wir das Skript wie einen Linux-Befehl auf. Die Zeichen `./` müssen vorangestellt werden, da sich das Benutzerverzeichnis normalerweise nicht in dem Systempfad befindet, in welchem Linux nach Befehlen sucht. Sie können sich aber z.B., wie in CLB 03/04 beschrieben, ein Alias erzeugen. Eine andere Möglichkeit ist die Erstellung eines Verzeichnisses in welches Sie alle selbst geschriebenen Skripte kopieren. Dieses Verzeichnis können Sie dann wie in Zeile 3 von Terminal 6 gezeigt zum Systempfad hinzufügen.

Terminal 6

```
01 $ mkdir ~/Skripte
02 $ cp zwei.awk ~/Skripte
03 $ PATH=$PATH:~/Skripte
04 $
```

Ab sofort können Sie von jedem Verzeichnis aus das Skript `zwei.awk` und alle anderen Skripte die Sie in das Verzeichnis `~/Skripte` kopieren, direkt und ohne die Verwendung von `./` ausführen. Zur Erinnerung: `~` bezeichnet den Pfad zu Ihrem Home-Verzeichnis (siehe CLB 12/03). Um die Veränderungen permanent zu speichern fügen Sie die Zeile 3 in die Datei `.bashrc` ein (siehe auch CLB 03/04).

In der kommenden Ausgabe werden Sie u.a. mehrere Möglichkeiten kennen lernen das Muster (*pattern*) zu definieren.

Neue Befehle in dieser Ausgabe

<code>awk</code>	Aufruf des Kommandointerpreters von Awk
<code>chmod</code>	Änderung der Zugriffsrechte einer Datei
<code>whereis</code>	Bestimmung des Pfades eines Kommandos

Vormerken!!!

29. bis 31. März 2005,
Heinrich-Heine-
Universität
Düsseldorf:



Labors für spezielle Aufgaben 24

Kompetenzzentrum für Kosmetik

Die tägliche Dosis Schönheit“ oder „der kleinste Kosmetikkoffer der Welt“, solche Titel von Broschüren der Wacker-Chemie GmbH machen neugierig auf das Kompetenzzentrum für Kosmetik, das sich das Unternehmen in seinem Werk Burghausen eingerichtet hat, um Produkte für die Kosmetikindustrie zu entwickeln und seine Kunden zu beraten. Wacker hat hier zwei Produktgruppen, einmal Silicon-Öle, Harze, Wachse und Gele mit dem Handelsnamen Belsil, zum anderen eine Reihe von Cyclodextrinen mit den Handelsnamen „Cavamax“ beziehungsweise „Cavasol“, die zur Einkapselung von kosmetischen Wirkstoffen verwendet werden. Für CLB sprach Hans-Dietrich Martin mit Petra Scheppler und Dr. Claudius Schwarzwälder, beide zuständig für die Silicone, sowie mit Marlies Regiert und Dr. Jens Moldenhauer, die Cyclodextrine bearbeiten.

Aufgrund ihrer einzigartigen Eigenschaftspalette haben sich Silicone in vielen Bereichen der Kosmetikindustrie als unverzichtbare Rohstoffe etablieren können. Silicone gehen hauptsächlich in Hautcremes, Lotions, Gesichtscrème, Sonnenschutzprodukte sowie in Lippenstifte und Makeup-Formulierungen. Eine wichtige Rolle spielen sie auch als so genannte Conditioning Agents in Shampoos und in Conditioners. Sie verleihen den kosmetischen Präparaten ein konkurrenzlos angenehmes Hautgefühl, und durch Modifikation des Basismoleküls, beispielsweise mit Phenylgruppen, lässt sich ein höherer Brechungsindex erzielen, der sich optisch durch vermehrten Glanz bemerkbar macht.

Für schöneres Haar

Doch nicht nur schöner Glanz für das Haar ist gefragt, sondern auch, dass sich das Haar gut käm-

men lässt. Schwarzwälder erläutert: „Für Haarpflegeprodukte haben wir spezielle Testmethoden aufgebaut, zum Beispiel Kämmkraft-Studien. Dazu nimmt man Haartressen, das sind Bündel von menschlichem Haar, die mit dem Präparat definiert behandelt werden. Dann wird mit einem Kamm und einer entsprechend umgebauten Zugdehnungs-Prüfmaschine (Abbildung 1) gemessen, welche Kräfte man beim Kämmen des Haars aufwendet und wie man diese durch Einsatz von Siliconen reduzieren kann. Das Ziel dabei ist, das Haar leicht kämmbar zu machen. Gerade nasses Haar ist durch das Kämmen mechanisch leicht zu schädigen. Man muss sich das Haar in der äußeren Schicht vorstellen wie einen Tannenzapfen: Die Oberfläche des Haars besteht aus lauter kleinen Schuppen, die je nach Zustand des Haars mehr oder weniger aufgestellt oder beschädigt sein können. Dadurch können sich die Haare leichter ineinander verhängen. Die Folge ist: der Kamm bleibt hängen, das Haar wird mechanisch geschädigt.“

Silicon-Additive verhindern das Übereinandergreifen der Schuppen und außerdem auch eine unerwünschte elektrostatische Aufladung. Schwarzwälder berichtet von weiteren Prüfverfahren: „Man kann auch die Schädigung beim Kämmen untersuchen. Da gibt es Kämmroboter, die tausende Male durch eine Haartresse durchfahren, und wo man zeigen kann, dass eine lange mechanische Belastung durch den Kamm zu Haarbruch oder anderen mechanischen Schäden führt, beispielsweise Spliss. Man muss wissen, wenn eine Dame schulterlanges oder noch längeres Haar trägt, dass das Haarende schon mehrere Jahre alt ist und die Schädigungen dort sehr hoch sein können. Deshalb bieten wir unsere Produkte für Conditioner Shampoos an, die auf dem Haar nach dem Waschen einen dünnen Film hinterlassen, so dass



Abbildung 1: Zur Kämmkraftprüfung wird eine umgebaute Zugfestigkeitsprüfmaschine verwendet; unten: Dr. Claudius Schwarzwälder (alle Abbildungen: Wacker-Chemie GmbH, München).

man es leichter kämmen kann. Speziell bei Spliss werden Hair Tip Fluids empfohlen, die die gespaltenen Haarfasern wieder vereinen und mit einem Schutzfilm umgeben. Hier werden sehr häufig hochmolekulare Siliconöle eingesetzt.

Alle neuen Siliconprodukte müssen ein Screening durchlaufen, in dem wir uns neben den Produktwerten die Eigenschaften in den Anwendungen anschauen wie zum Beispiel die Kämmkraft. Außerdem beurteilen wir mit einem Testkollektiv den Glanzeindruck oder prüfen, wie man ein größeres Haarvolumen erzeugen kann. Letzteres ist vor allem interessant für Leute, die feines Haar haben und deren Frisur nicht so voluminös ist. Wichtig ist auch der Griff, der schön weich sein sollte. Das ist eine der Hauptaufgaben, die ein Silicon in solch ein Produkt einbringen kann. Das wären die mehr physikalischen Tests.

Dann machen wir immer auch Paneltests mit einem Kollektiv von Testpersonen, die ein Produkt subjektiv beurteilen. Das kann in einem Fall eine Haartresse sein oder als letzte Stufe der Halbseitentest, da wird die eine Hälfte des Kopfes entweder mit gar nichts oder einem Standard behandelt und die andere Hälfte mit dem neuen Produkt, und dann muss der Proband mit Hilfe eines Fragebogens das Präparat beurteilen. Das ist letztlich das Ausschlaggebende, denn was nützen die schönsten physikalischen Parameter, wenn der Kunde, der das Produkt kaufen soll, die Verbesserung über-





Abbildung 2: In der Shinebox wird der Glanz einer Haarsträhne visuell beurteilt; unten: Petra Scheppler.



haupt nicht bemerkt. Schließlich und endlich geht es immer über den Menschen, der das Produkt noch einmal anfühlt, beriecht, auf die Haut aufträgt, und dies dann aus seiner Sicht beschreibt, und da entscheidet sich das Schicksal des Präparats.“

Ist Haar und Haar eigentlich das gleiche? Schwarzwälder schüttelt den Kopf: „Da gibt es große Unterschiede bei den verschiedenen menschlichen Rassen. Wir haben das europäische oder kaukasische Haar, dann gibt es das asiatische Haar und schließlich noch das afrikanisch-amerikanische Haar, das sind die drei Hauptgruppen. Sie unterscheiden sich durch unterschiedliche Querschnitte des Haars, entweder kreisrund oder elliptisch, und das hat wieder Konsequenzen für die Haareigenschaften. Es gibt entweder ganz glattes, gestrecktes Haar wie bei den Asiaten, Europäer haben immer eine leichte Wellung drin, und die negroide Bevölkerung hat krauses Haar. Und deshalb gibt es dann auch größere Unterschiede in den Anwendungstests. Es ist immer wichtig, dass man angibt, an welchem Haar man getestet hat.“

Samtige Haut und sinnliche Lippen

Dass sich Silicone als regelrechte Trendsetter erweisen können, verdeutlicht das Beispiel des Wet Look bei Lippenstiften. Bei diesen beliebten Produkten sorgen phenylmodifizierte Siliconöle mit ihrem höheren Brechungsindex dafür, dass Lippen

beispielsweise nicht nur rot gefärbt werden, sondern auf Grund des höheren Glanzes zugleich auch feucht und sinnlich wirken. Auch die zarte Haut von Säuglingen, die wesentlich dünner ist als bei erwachsenen Menschen, profitiert von der Silicon-Chemie. Hier helfen alkyl- oder alkoxy-modifizierte Silicone, eine Schutzschicht aufzubauen, welche die Babyhaut weich und geschmeidig erhält.

Für diesen Bereich ist Petra Scheppler zuständig. Sie schildert die Tests, die in ihrem Labor gemacht werden: „Es ist einfach, menschliche Haare zu kaufen, aber bei der menschlichen Haut ist man auf den Paneltest beschränkt, deswegen machen wir hier vergleichende Tests mit verschiedenen Formulierungen, die unsere Silicone enthalten. Wir machen das auf dem Unterarm, man kann da maximal acht Proben wie Cremes oder Lotions auftragen, und die Teilnehmer werden dann zur Textur und den sensorischen Eigenschaften befragt: Ist es besser oder schlechter verteilbar, ist es geschmeidiger, weniger fettend, weniger klebrig? Oder die Probanden beurteilen solche und andere Kriterien in einem in-use-test nach mehreren Anwendungen zu Hause und bewerten es in einem Fragebogen“

Was bewirken Silicone in Hautpflegemitteln? Scheppler zählt auf: „Zum einen verbessern sie die Verteilbarkeit, zum anderen bewirken sie, dass ein kosmetisches Produkt besser und länger auf der Haut bleibt. Siliconharze bewirken, dass Lippenstifte, Make up oder Wimperntusche-Formulierungen möglichst lange halten. Andere Produkte wie die Silicon-Polyglycoside sind sehr milde Emulgatoren und haben ein hervorragendes Dispergiervermögen für anorganische Mikropigmente wie Zinkoxid oder Titandioxid, das als physikalischer Lichtschutzfilter in vielen Sonnenschutzmitteln enthalten ist. Sie müssen, um eine optimale Wirkung zu erreichen, möglichst gleichmäßig auf der Haut verteilt werden. Die Silicone haben hier noch einen Nebeneffekt, sie machen den Schutz-

film hydrophob, damit er dann beim Baden nicht abwaschbar ist.

Streitfrage Tierversuche

Oft wird die Meinung vertreten, Chemie in Kosmetika, das sei Teufelswerk. Und oft sieht man in Drogerien „Unsere Produkte sind nicht durch Tierversuche getestet.“ Andererseits werden solche Prüfungen vom Gesetzgeber zwingend vorgeschrieben, beispielsweise auf Hautverträglichkeit. Schwarzwälder relativiert das: „Als Rohstoffhersteller führen wir keine Tierversuche durch, und die Kosmetikindustrie versucht seit langem, von den Tierversuchen wegzukommen und entwickelt Alternativmethoden, zum Beispiel testet man die Rohmaterialien an bebrüteten Eiern. Letztendlich trifft der Kosmetikhersteller durch solche Tests eine Vorauswahl unter den Rohstoffen und muss dann seine fertige Gesamt Rezeptur noch einmal abschließend testen, letzten Endes auch am Menschen. Da gibt es verschiedene Tests. Dabei wird das Produkt aufgetragen, mit einem Pflaster abgedeckt und man schaut dann, ob es Rötungen gibt. Ganz vereinfacht könnte man sagen, wie bei einem Allergietest beim Hausarzt.“

Anwendungstechnik

Die Tätigkeit hier ist also durchaus mit der klassischen Anwendungstechnik wie bei der Kunststoff-Industrie vergleichbar? Schwarzwälder nickt bestätigend: „Das ist Anwendungstechnik, ganz klar fällt das in diesen Bereich. Dafür müssen wir auch die Testmethoden der Kunden ausführen. Da gibt es unterschiedliche Ansätze, zum einen, dass wir von unseren Forschungskollegen ein neues Produkt bekommen oder dass wir eine Idee haben und daraus ein neues Molekül entwickeln, das dann in eine Rezeptur eingearbeitet und durchgeprüft wird. Der andere Weg ist, dass ein Kunde mit einem speziellen Wunsch zu uns kommt, dann überlegen wir, wie man den gewünschten Effekt erreicht. Wir haben etwa 60 verschiedene Belsil-Produkte, Tendenz steigend.“

Welche Spezialausrüstung wird verwendet? Schwarzwälder zählt auf: „Über die Kämmkraftmaschine haben wir schon gesprochen. Man kann sie auch einsetzen, um das Volumen zu testen. Dazu zieht man die Haartresse durch immer enger werdende Ringe und kann so den Aufbau von Volumen aufzeigen. Wichtig ist daneben eine Shinebox (Abbildung 2), ein Kasten mit einer definierten Lichtquelle, in dem der Glanz beurteilt wird. Dann haben wir die Curl Retention. Man erzeugt eine definierte Locke und schaut sich an, wie schnell sie sich bei hoher Luftfeuchtigkeit wieder streckt.“

Petra Scheppeler ergänzt: „Neben den Paneltests zur Beurteilung der sensorischen Eigenschaften haben wir die Möglichkeit, die Feuchtigkeit der oberen Hautschicht mit dem Corneometer beziehungsweise den Sebum-Gehalt der Haut mit einem Sebumeter zu messen. Sebum ist der natürliche Oberflächenfilm, den man auf der Haut hat, ein Gemisch von Wasser, Salzen und Fetten. Für größere Laboransätze haben wir eine Rühr- und Emulgierausstattung für Mengen bis zu drei Kilogramm. Lippenstifte werden in speziellen Formen gegossen. Dazu werden die Rohstoffe wie Öle, Wachse und Farbstoffe geschmolzen, homogen verrührt und dann heiß in die Mehrfachform (Abbildung 3) gegossen. Nach dem Erkalten nehmen wir den Übertrag ab. Anschließend kann man den oberen Teil der Form abnehmen. Dann kann man die Lippenstifte einen nach dem anderen herausziehen und in die Hülsen stecken.“ Bei Emulsionen oder Makeups wird in zeitlichen Abständen der pH-Wert und die Viskosität gemessen und natürlich auch die Stabilität bei unterschiedlichen Temperaturen beurteilt. Das geht von Kühlschranktemperaturen bis zu höheren Temperaturen von 40, 45 oder 50 Grad Celsius.

Nanobecher aus Cyclodextrin schützt Wirkstoffe

In vielen kosmetischen Präparaten werden hochwirksame Substanzen wie Vitamine, Antioxidantien oder

Parfumes verwendet, die aber den Nachteil haben, dass sie unter Licht- und Feuchtigkeitseinwirkung oder durch Oxidation abgebaut werden. Wacker hat nun eine Methode entwickelt, diese empfindlichen Stoffe zu schützen: Jedes Wirkstoffmolekül wird einzeln in ein nur wenige Millionstel Millimeter kleines Nanokörnchen „verpackt“ und erst auf der Haut, gesteuert durch Feuchtigkeit, gezielt freigesetzt. Verpackungsmaterial sind Cyclodextrine, natürliche Abbauprodukte von Stärke. Sie bilden ringförmige Moleküle, in deren Hohlraum jeweils ein Molekül des Wirkstoffs Platz findet. Marlies Regiert, zuständig für die Entwicklung von Cyclodextrin-Produkten für die Kosmetik- und Personal-Care-Branche, nennt diese Einschlussmethode den „kleinsten Kosmetikkoffer der Welt“.

Sie schildert die Aufgaben ihrer Abteilung: „Wir bearbeiten eine Entwicklung von der Idee bis zum Einsatz unseres Produktes bei einem Kosmetikhersteller. Dabei suchen wir problematische Wirkstoffe aus, deren Moleküle instabil oder leicht flüchtig sind, um dann diesen Nachteil durch eine Einschlussverbindung mit Cyclodextrinen zu beheben. Dann schützt die Wandung des Cyclodextrinmoleküls den Wirkstoff vor Oxidation, Abbau und Zersetzung. Viele leicht flüchtige Substanzen werden von den Cyclodextrinen festgehalten, damit zum Beispiel Duftstoffe auch vollständig beim Verbraucher ankommen. Oder man kann bei schwer- und nichtlöslichen Substanzen die Was-

Marlies Regiert (rechts)



Abbildung 3: Mehrfachform für Lippenstifte

serlöslichkeit erhöhen und dadurch die Verfügbarkeit auf der Haut zu steigern.“

Gehen Cyclodextrine eine chemische Bindung mit dem Wirkstoff ein? Regiert: „Das ist im klassischen Sinn eine Einschlussverbindung, hier wirken van-der-Waals'sche Kräfte, die dieses lipophile System festhalten. Durch die „Verpackung“ mit Cyclodextrin entsteht ein molekularer Komplex, ein Wirkstoffmolekül wird von einem Cyclodextrinmolekül eingeschlossen. (Abbildung 4) So schaffen wir eine große Oberfläche und damit eine hohe Verfügbarkeit unendlich vieler Wirkstoffteilchen, und das ist ein zusätzlicher Vorteil dieser „Nano-Verkapselungen“, weil mit der klassischen Mikroverkapselung im Vergleich dazu immer noch relativ große Stoffmengen eingeschlossen werden. Wir haben drei verschiedene Cyclodextrine, das α -, β - und γ -Cyclodextrin mit jeweils sechs, sieben oder acht Glukose-Einheiten. Der Durchmesser des Innenraums variiert zwischen 0,47 und 0,83 Nanometer, und die Tiefe des Nanoröhrchens liegt bei etwa 0,8 Nanometer. Zum Vergleich: Das entspricht etwa dem 100 000stel des Durchmessers eines menschlichen Haares.“

Wie geschieht das ganz praktisch? Wie wird eingekapselt? Regiert demonstriert das in einem Becherglas: „Hier haben wir eine Lösung von Retinol (Vitamin A). Es wird nicht pur geliefert, weil es sehr instabil ist. Der optimale Schutz ist bei einem äquimolaren Verhältnis erreicht, also von zwei Mol γ -Cyclodextrin und einem Mol der Wirksubstanz

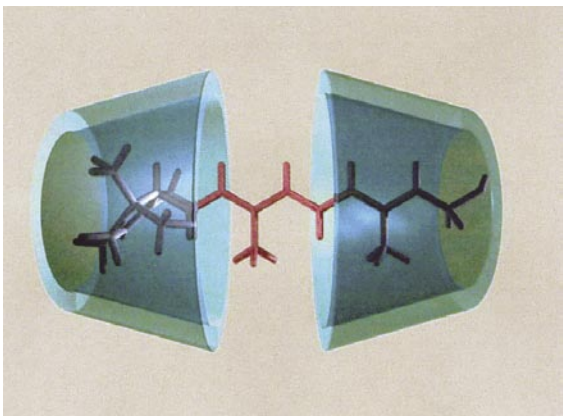


Dr. Jens Moldenhauer

Retinol. Beim γ -Cyclodextrin mit einem Molekulargewicht von 1297 Gramm pro Mol analog zu 286,46 Gramm pro Mol Retinol ergibt sich ein Wirkstoffgehalt zwischen sieben und neun Prozent im Komplex. Bei der Komplexherstellung muss man die Parameter für jedes Produkt einzeln optimieren. Man dreht also an der Schraube der Cyclodextrin-Charakteristik, der Temperatur, der Konzentration des Cyclodextrins im Wasser, Verhältnis Gast zu Cyclodextrin usw.

Um zu beweisen, was der Komplex kann, testen wir die Stabilität. Dazu ist die Entwicklung der optimalen analytischen Methode erforderlich. Analytische Methoden der Wahl sind die Kernresonanzspektroskopie (Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, kurz NMR, die High Pressure Liquid Chromatography (HPLC), die Gaschromatographie (GC) sowie die Solid Phase Matrix Extraction (Festphasenmikroextraktion, SPME). Die Entwicklung der Analytik ist oft sehr zeitraubend, weil die Analysevorschriften für jeden Komplex neu erarbeitet werden müssen, und es kann manchmal ein Jahr dauern, bis man dem Kunden eine wirklich reproduzierbare Methode präsentieren kann.

Abbildung 4: Schematische Zeichnung des Einschusses eines Wirkstoffmoleküls in ein Cyclodextrinmolekül.



Wichtig sind auch Stabilitätstests bei 40 Grad Celsius, denn dem Konsumenten wird eine Lagerstabilität von etwa zwei Jahren garantiert. Dann testen wir die Stabilität bei Sonneneinstrahlung. und sehen dann, wie weit die im Komplex eingeschlossene Substanz UV-A und UV-B stabil ist. Da haben wir gute Daten bezüglich Tocopherol (Vitamin E), das als Antioxidans beziehungsweise als Radikalfänger in vielen Sonnenschutzmitteln verwendet wird, aber es hält unter der Sonneneinstrahlung nicht sehr lange durch. Die Cyclodextrinkomplexe von $d\text{-}\alpha$ -Tocopherol können als Heerschar von winzigen Sonnenschirmen gesehen werden, die die menschliche Haut beschützen. Zudem vermessen wir die Freisetzungsdaten von flüchtigen Duftstoffen sowie schwerflüchtigen Substanzen bei Temperaturen bis zu 220 Grad sowie unter Einfluss von Feuchte. Das ist eine Auswahl von analytischen Methoden, mit denen wir arbeiten.“

Feuchtigkeit setzt den Wirkstoff frei.

Wie wird die Wirksubstanz später wieder freigesetzt? Regiert: „Das geschieht auf der Haut. In der Kosmetik soll der Wirkstoff nur ganz geringfügig unter die Haut gehen. Wir prüfen das, indem wir dem trockenen Komplex eine definierte Menge Feuchte zuführen. Dann misst man im Gasraum die freigesetzten Substanzen, beispielsweise von ätherischen Ölen oder von Menthol, und kann so beweisen, dass unter anderem über die Feuchte der Wirkstoff freigesetzt wurde. Auf einem biologischen Material, wie es die Haut darstellt, ist das leider nicht so einfach. Aber ich kann das über das beschriebene Modell mit Feuchte, Temperatur bei 37 Grad gut verfolgen. Zur Feuchtigkeit kommt außerdem noch die Freisetzung des Wirkstoffs durch den bakteriellen Abbau der Cyclodextrine auf der Haut.

Was sind das für Leute, die bei Ihnen arbeiten? Regiert lacht: „Sehr motivierte, vor allem. Es ist eine Laborantin und ein Laborant. Sie decken den ganzen Laborbereich

ab und haben auch Kundenkontakt. Wir haben also ein relativ breites Aktionsspektrum, nicht nur die klassischen Laborarbeiten, wie es in der Chemie sonst üblich ist. Das ist gerade bei einer so kleinen Mannschaft wichtig, dass die Mitarbeiter engagiert sind und auch Spaß dran haben.“

Textilien ohne Schweißgeruch

Hauptsächlich für den Einsatz in Textilien beschäftigt sich Dr. Jens Moldenhauer mit den Cyclodextrinen. Er berichtet: „Unter dem neudeutschen Begriff „Odor Control“, also Geruchskontrolle, entwickeln wir Anwendungen zur Vermeidung schlechter Gerüche. Zum Teil ist das kombiniert mit der kontrollierten Abgabe angenehmer Gerüche. Das ist dann ein Feld, das sich mit dem Gebiet der Kosmetik überschneidet. Wir können es nicht ganz verhindern, dass ein Kleidungsstück irgendwann zu riechen anfängt, aber wir können das hinauszögern. Mit Cyclodextrinen ausgerüstete Kleidungsstücke bleiben länger frisch und neutral riechend.“

Dann schnappt sich also das Cyclodextrin die Körpergerüche, kapselt sie ein und weg sind sie? Moldenhauer schwächt das etwas ab: „Kapselt sie ein, und dann sind sie nicht mehr so stark wahrnehmbar. Sie sind im Cyclodextrinmolekül eine Zeitlang geruchbindend verschlossen. Bei der nächsten Wäsche werden die Geruchstoffe ausgewaschen. Das Cyclodextrin ist durch die Textilausrüstung permanent auf dem Stoff fixiert, wird also nicht herausgewaschen und steht deshalb nach der Wäsche wieder reaktiviert zur Verfügung. Das ist das Wirkprinzip.

Wir beschäftigen uns auch mit pflegenden Textilien. Es gibt eine Reihe pflegender Komponenten, Vitamine zum Beispiel wie das Retinol oder das Tocopherol. Das ist ein hochwirksames Antioxidans, und man hat hauptsächlich daran gedacht, diese pflegende Eigenschaft auf der Haut über längere Zeit zur Verfügung zu stellen. Es soll dann auf die Haut übertragen werden und dort positiv wirken.“

Hans-Dietrich Martin

Mini-Analysesystem mit Mikrospiegeln Einsatz außerhalb des Labors

In etwa drei Jahren soll ein Infrarot-Spektrometer zur Verfügung stehen, das typischerweise außerhalb des Labors eingesetzt wird. Es soll einen großen Spektralbereich abdecken.

Zu den wichtigsten Methoden instrumenteller Analytik gehört die Infrarotspektroskopie, die derzeit jedoch nur im Labor verfügbar ist. Dies soll sich nun ändern: Ein besonders kompaktes, preiswertes und schnell arbeitendes Messgerät wird derzeit mit dem Know-how Chemnitzer Wissenschaftler entwickelt. Im Rahmen des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) mit 2,5 Millionen Euro geförderten Projektes MOPAL soll in den nächsten drei Jahren ein optisches Miniatur-Analysesystem entwickelt werden, das bei der Umweltüberwachung und in der Prozesskontrolle ebenso zum Einsatz kommen kann wie in der Medizintechnik. Zu den Projektpartnern gehört das Zentrum für Mikrotechnologien (ZfM) der TU Chemnitz und die Abteilung Micro Devices and Equipment Chemnitz des Fraunhofer Instituts für Zuverlässigkeit und Mikrointegration (IZM).

MOPAL steht für ein modulares optisches Analysesystem, das Gase, Flüssigkeiten und Feststoffe sowohl qualitativ als auch quantitativ zu bestimmen. Eine wesentliche Besonderheit dieses zu entwickelnden Systems ist der



Mikrospiegel für IR-Spektrometer (siehe Titelbild).

weit ausgedehnte Spektralbereich von 0,3 bis 10 Mikrometer, der durch die Kombination von verschiedenen Modulen abgedeckt werden soll. „Damit ist das Messgerät vielfältig einsetzbar“, betont Prof. Dr. Thomas Geßner, der als Professor für Mikrotechnologie am ZfM der Chemnitzer Universität und die Abteilung Micro Devices and Equipment des Fraunhofer IZM leitet.

Zu den MOPAL-Partnern gehören auch die Endress+Hauser Conducta GmbH & Co. KG aus Gerlingen und die Sentech Instruments GmbH aus Berlin. Und mit der Colour Control Farbmesstechnik GmbH kommt ein weiterer Partner aus Chemnitz. Darüber hinaus arbeitet das Konsortium eng mit Wissenschaftlern des Micro System Research Center der Chongqing University aus China zusammen.

Das MOPAL-Projekt kann bereits auf Vorarbeiten zurückgreifen. So wurde in Deutschland ein Mikrospiegel-Monochromator für den infraroten Bereich entwickelt, während auf chinesischer Seite am Micro System Research Center der Chongqing University ein Mikrospektrometer für den sichtbaren Bereich konstruiert wurde.



Prof. Dr. Thomas Geßner und Prof. Wen Zhiyu, Direktor des Micro System Research Center der Chongqing University unterzeichnen in China am 09. Juli 2004 einen Kooperationsvertrag (Fotos: TUC).

Proteine, Gene und Hormone

Durch Apoptose wird die Anzahl der Zellen im Körper und damit auch die Größe von Organen und Geweben kontrolliert und die für den Körper schädlichen Zellen beseitigt. Wissenschaftler am MPI für Biochemie in Martinsried haben die Funktion eines für die Zelltod-Signalkette wichtigen Proteins, des BIR-Repeat containing Ubiquitin-Conjugating Enzyme (BRUCE) aufgeklärt. Damit konnten sie eine Brücke schlagen zwischen dem programmierten Zelltod und dem Proteinabbau, für den das Ubiquitin-Proteasom-System verantwortlich ist.

Die Bildung von Proteinen am Ribosom als Ergebnis der exakten Übersetzung genetischer Information in eine definierte Kette von Aminosäuren ist nur durch das strikte Einhalten des Lese-/Übersetzungsrasters von jeweils drei Basen in eine dadurch definierte Aminosäure möglich. Wissenschaftler am MPI für molekulare Genetik in Berlin konnten zeigen, dass die dritte tRNA-Bindungsstelle am Ribosom die Einhaltung des Leserasters der mRNA kontrolliert, um so eine fehlerfreie Proteinsynthese zu gewährleisten.

Das Signalprotein Phosphoinositide 3-Kinase gamma (PI3Kgamma) hat zwei Funktionen. Im Immunsystem aktiviert es über eine katalytische Reaktion Fresszellen und hilft so, bakterielle Infektionen zu bekämpfen. Im Herzen, so fanden kürzlich Forscher der Universität Jena heraus, steuert es die Herzmuskelkontraktion, Hypertrophie- und Fibrosevorgänge. Nun werden PI3gamma-Hemmstoffe gesucht, um damit neue Herzmedikamente zu entwickeln.

Der Resistenzmechanismus einiger Gerstensornten gegen Pilzinfektionen ist von Kölner Max-Planck-Forschern entschlüsselt worden. Der Mehltaupilz benutzt das Mlo-Protein der Gerste, um deren Immunantwort zu manipulieren. Gerste mit einem Defekt im Mlo-Gen ist daher resistent und verlangt keinen Fungizid-Einsatz. Der Defekt entsteht durch etwa zehn dem Mlo-Gen direkt benachbarte Bruchstücke des Gens, was zu einer Störung des Leserasters führt.

Interleukin-22, ein Botenstoff aus Immunzellen, fördert die unspezifische Abwehr der Gewebe. Forscher der Charité in Berlin und der Schering AG fanden zahlreiche Rezeptoren für IL-22 an Haut- und Schleimhautzellen. IL-22 regt die Zellen dazu an, Defensine zu bilden, kleine Peptide, die wie natürliche Antibiotika wirken, besonders ausgeprägt bei chronischen Hauterkrankungen wie zum Beispiel Psoriasis.

HTH-Proteine (für „helix-turn-helix“), eine weitverbreitete Klasse von Genregulationsproteinen, benutzen ein bestimmtes Strukturelement der DNA, um ihre Zielgene zuverlässig zu erkennen. Wissenschaftler vom Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin (MDC) in Berlin entdeckten beim HTH-Protein KorB einen neuen Mechanismus der Generkennung und Aktivierung, bei dem das HTH-Element der DNA nur eine unbedeutende Nebenrolle spielt.

Charakterisierung von Proteinen

Neue Aus-Schalter für Proteine

Rund 30 000 Gene umfasst das Erbgut des Menschen; jedes von ihnen enthält die Bauanleitung für mindestens ein Protein. Erst von einem Bruchteil dieser Eiweissmoleküle weiss man bisher, welche Funktion sie im Körper erfüllen. Eine elegante und schnelle Methode könnte nun Licht ins Dunkel bringen: Wissenschaftler der Universität Bonn beobachteten, dass sich mit Hilfe von Aptameren sogar sehr ähnliche Proteine spezifisch „ausschalten“ lassen.

Um herauszufinden, wozu ein Eiweissstoff gut ist, schaut man am besten, was der Körper ohne ihn anfängt. Weltweit suchen die Forscher daher nach möglichst simplen Methoden, um einzelne Proteine auszuschalten.

Der Bonner Biochemiker Professor Dr. Michael Famulok erklärt: „Wir suchen nach Molekülen, den

Aptameren, die sich ganz spezifisch an die gewünschten Proteine heften und dadurch verhindern, dass sie funktionieren.“ Aptamere sind Ketten aus Ribonukleinsäure (RNA), die sich je nach Basenfolge auf eine ganz charakteristische Weise verdrillen und so eine bestimmte dreidimensionale Struktur annehmen. RNA-Aptamere sind spezifisch geformt, sodass sie an bestimmte Proteine binden können und dann ihre Funktion beeinflussen.

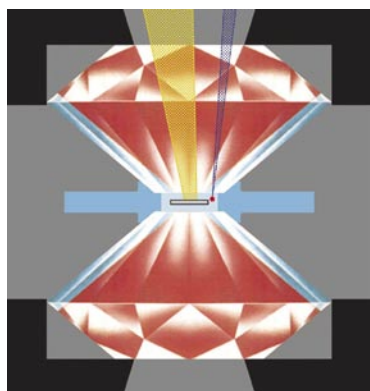
Aus einem großen Pool von RNA-Ketten suchten die Forscher nach einem Aptamer, das das Zellprotein Cytohesin-2 hemmt, ohne an das extrem ähnliche Cytohesin-1 zu binden. Cytohesine sind wichtige Proteine in den weissen Blutkörperchen. Bei einer bakteriellen Infektion sorgen die Cytohesine dafür, dass bestimmte Proteine in der Hülle der weissen Blutkörperchen plötzlich „klebrig“ werden. Damit

heften sich die Killerzellen an die Blutgefäß-Wand und wandern in das betroffene Gewebe.

„Wir konnten durch spezifische Hemmung von Cytohesin-2 zeigen, dass dieses Protein noch eine ganz andere Funktion wahrnimmt“, erklärt Famuloks Kollege Professor Dr. Waldemar Kolanus. Der Bonner Biochemiker hat die Gruppe der Cytohesine vor einigen Jahren während seiner Zeit am Gen-Zentrum München entdeckt. „Cytohesin-2 scheint auch eine Reihe von Genen im Zellkern anzuschalten, während Cytohesin-1 diese Funktion nicht hat. Das ist insofern bemerkenswert, als die beiden Proteine zu 90 Prozent identisch sind.“

Mit einem eleganten Selektionsverfahren und mehreren spezifischen Aufreinigungsschritten fanden die Forscher ein Aptamer, das zwischen den beiden Proteinvarianten eindeutig unterscheiden kann. Die Ergebnisse zeigen, dass Aptamere auch zwischen extrem ähnlichen Eiweissmolekülen unterscheiden und sie spezifisch hemmen können.

Schematischer Querschnitt einer Diamantstempel-Apparatur. Der Strahl eines Infrarotlasers beheizt die Probe, während ein Argonionenlaser zur Anregung eines Rubinsplitters für spektroskopische Druckmessungen dient (Abb.: MPI für Chemie).



Synthese von polymerem Stickstoff

Stärkster Sprengstoff

Jetzt haben Forscher am Max-Planck-Institut für Chemie erstmals eine polymere kubische Form synthetisiert, in der alle Stickstoffatome mittels kovalenter Einfachbindungen aneinander gebunden sind, ähnlich wie Kohlenstoff im Diamanten.

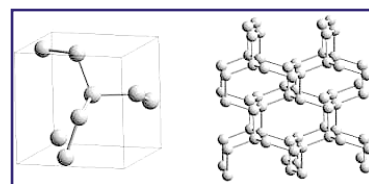
Stickstoff besteht gewöhnlich aus reaktionsträgen Molekülen, in denen zwei Atome dreifach aneinander gebunden sind.

Diese neue Form hat man bisher bei keinem anderen Element gefunden. Sie hat einzigartige Eigenschaften wie zum Beispiel einen Energieinhalt, der fünfmal

größer ist als der der stärksten nicht-nuklearen Sprengstoffe.

Bereits seit zwei Jahrzehnten haben Wissenschaftler vorausgesagt, es gebe auch einfach gebundenen Stickstoff. Danach würde der molekulare Stickstoff bei hohem Druck einen atomaren Festkörper bilden mit der Struktur eines kubischen Gitters (cg-N). Seither hat man intensiv nach diesem polymeren Stickstoff gesucht, bei hohem Druck und in verschiedenen Temperaturbereichen.

Wissenschaftler der Hochdruckgruppe am Max-Planck-Institut für Chemie synthetisierten nun polymeren Stickstoff direkt aus zweiatomigem Stickstoff bei Temperaturen oberhalb von 2000 Grad Kelvin und Drücken von über 110 Gigapascal (1,1x10⁶ atm). Dazu nutzten die Forscher eine neue Anordnung einer laserbeheizten Diamanthochdruckzelle. Rönt-



Polymere kubische Gitterstruktur: Alle Stickstoffatome sind mittels kovalenter Einfachbindungen aneinander gebunden.

genbeugungsuntersuchungen und Ramanspektren des transparenten Kristalls belegen, dass sich tatsächlich polymerer Stickstoff mit der theoretisch vorhergesagten kubischen Gitterstruktur gebildet hatte. Diese Phase mit dem Kompressionsmodul von 300 Gigapascal ist charakteristisch für stark kovalent gebundene Festkörper. Stickstoffatome, die mit Einfachbindungen in ein polymeres Netz gebunden sind, bilden ein Material mit hoher Energiedichte: Bei Stickstoff besteht eine einzigartig große Energiedifferenz zwischen einer Einfachbindung und dem Drittel einer Dreifachbindung.

Nanotechnik für die Medizin

Partikel zum Pharmatransport und für NMR-Kontrast

Zwei Beispiele von Nanotechnik aus dem Labor für die medizinische Anwendung sollen kurz vorgestellt werden. Ein Therapieverfahren speziell für Lebertumore entwickelte ein Forscherteam der RWTH Aachen. Sie konstruierten nanogroße Trägermedien für Pharmaka, die ihre Ladung gezielt abgeben können. Ein neues Kontrastmittel auf der Basis von Eisenoxid-Nanopartikeln für die Kernspintomographie wurde am Institut für Radiologie der Charite in Berlin getestet. Voraussichtlich lassen sich damit viele Herzkatheteruntersuchungen vermeiden.

Bei vielen Pharmaka wäre eine gezieltere als die orale Anwendung wünschenswert, um die Dosis zu reduzieren und die Wirksamkeit

zu erhöhen. Das Team der RWTH Aachen entwickelte daher thermosensitive Nano- und Mikropartikel als steuerbare Pharmakaträger. Pharmaka werden zusammen mit magnetischen Nanopartikeln (Magnetkolloide mit Teilchengrößen von 10-100 Nanometern) in Polymerträger, kleinste Kunststoffgebilde, die auf Wärme reagieren, eingekapselt. Oberhalb einer bestimmten Temperatur geben diese in einem Entquellungsprozess bis zu 70 Prozent ihres gebundenen Wassers ab, auch den eingekapselten Wirkstoff. Eine kontaktfreie Erwärmung des thermosensitiven Polymerträgers erreicht man über die mit eingelagerten Magnetkolloide, die mittels einer äusseren Magnetspule (Induktionsspule) erwärmt werden. Dabei werden die Magnetpartikel zu einem Hei-

zelement, die die Wärme auf das Polymer übertragen.

Das Problem der Kernspintomographie in der Angiographie liegt in der kurzen Verweildauer gängiger Kontrastmittel im Blut. Eine längere Verweildauer könnte zu einer schärferen Darstellung auch kleiner Gefäße führen und insbesondere auch die Abbildung der Herzkranzarterien ermöglichen. Daher haben Forscher der Charite ein Kontrastmittel aus Eisenoxid-Nanopartikeln entwickelt, welches durch die Ummantelung mit Zitrone eine Partikelgröße von 7 Nanometern erreicht und etwa 45 Minuten im Blut verbleibt. Es wurde erstmalig am gesunden Menschen getestet. Das neue Kontrastmittel erwies sich als gut verträglich und erfüllte bei der Bildgebung von Herzkranzgefäßen alle Erwartungen.

Atomare Struktur von Nanoteilchen entschlüsselt

Charakterisierung von Metall-Nanoteilchen

Kleine Metallpartikel gewinnen rasant an Bedeutung in der Nanotechnik und Katalyse. Diese Nanoteilchen haben eine Größe von einigen wenigen bis einigen Hundert Atomen. Ihre Geometrie und Elektronenstruktur ist anders als die des Gesamtmaterials und sie können überraschende Eigenschaften aufweisen. Ziel der Forschung ist es, solche Teilchen in der Materialwissenschaft, der Nanoelektronik oder der Katalyse gezielt einzusetzen.

Eine neue Methode zur Bestimmung der atomaren Struktur einzelner Metall-Nanoteilchen haben Wissenschaftler des Berliner Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, des FOM-Instituts für Plasmaphysik in Nieuwegein/Niederlande, der Universität von Kalifornien in Los Angeles/USA sowie der Universität Nijmegen/Niederlande entwickelt.

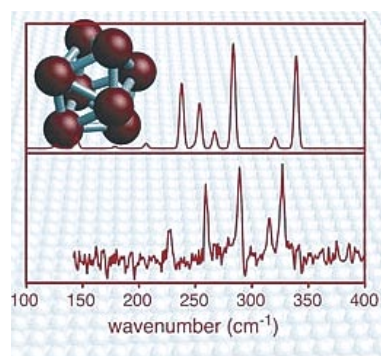
Die Eigenschaften von Nanoteilchen des gleichen Materials hängen extrem von der Größe ab und ändern sich drastisch, wenn man einem solchen Cluster nur ein einziges Atom hinzufügt.

Die Wissenschaftler haben die Schwingungseigenschaften der Teilchen aus nur 6 bis 23 Vanadium-Atomen mit Hilfe der Infrarot-Mehr-Photonen-Dissoziation (IR-MPD) gemessen und damit jene Kräfte bestimmt, die Atome im Nanoteilchen zusammenhalten. Die Experimente wurden am „Free Electron Laser for Infrared eXperiments (FELIX)“ des FOM-Instituts durchgeführt.

Je nach ihrer Größe entstanden unterschiedliche Spektren, die „Fingerabdrücke“ ihrer atomaren Struktur. Die Spektren sind charakteristisch für die geometrische Anordnung der Atome.

Ein Vergleich mit quantenmechanischen Modellen, basierend

auf der Dichte-Funktional-Theorie, gestattet es dann, die Strukturen der Nanoteilchen aufzuklären.



Die Infrarotspektren von größenselektierten Nanoteilchen (Clustern) wurden im Experiment gemessen. Die untere Kurve zeigt ein experimentelles Spektrum für einen Cluster aus acht Vanadium-Atomen. Mit Hilfe theoretischer Berechnungen können dann die Strukturen dieser Cluster und ihre Infrarotspektren bestimmt werden. In der oberen Kurve ist ein gerechnetes Spektrum zusammen mit der entsprechenden Struktur zu sehen. Zieht man die Unwägbarkeiten von Theorie und Experiment in Betracht, so ist die Übereinstimmung sehr hoch. Im Hintergrund sieht man die Oberfläche eines Vanadium-Festkörpers.

Senatspräsident Flachowsky zur Situation der Bundesforschungsanstalten Mehr Motivation durch interne Anreizsysteme

Forschung mit hohem Anspruch und unter massiven Einsparzwängen: In diesem Spannungsfeld bewegen sich derzeit die wissenschaftlichen Einrichtungen des Bundesverbraucherschutzministeriums (BMVEL). Jetzt nahm Professor Dr. Gerhard Flachowsky, Präsident des Senats der Bundesforschungsanstalten, Stellung zum Leistungsspektrum der Einrichtungen, ihrer Einbindung in die wissenschaftliche Gemeinschaft und zur Evaluierung der Ressortforschung durch den Wissenschaftsrat.

Trotz der Umbruchsituation, in der sich mehrere Bundesforschungsanstalten des BMVEL derzeit befinden, sind die Institute gesuchte Partner für Fachkollegen im In- und Ausland. Mehr als 900 Gastwissenschaftler waren in den letzten vier Jahren in den Einrichtungen tätig, zahlreiche Gemeinschaftsprojekte in nationalen und EU-weiten Forschungskoooperationen zeugen von der Kompetenz der im Bundessold stehenden Forscher. Doch Präsident Flachowsky hat auch Anlass zur Sorge. Zum Beispiel entwickelt sich die Altersstruktur in den Anstalten zunehmend ungünstig: „Bei den festangestellten wissenschaftlichen Mitarbeitern haben wir mehr Über-55-Jährige als Unter-35-Jährige“, erklärt er. Diese Überalterung sei eine direkte Folge der Stellenkürzungen. Die Bundesforschungsanstalten hätten die Auflage, ein Drittel ihres Personalbestandes von 1995 abzubauen. „Die massiven Stellenprobleme führen dazu, dass in vielen Einrichtungen ganze Forschungszweige wegbrechen“, so Flachowsky.

Doch wenn die Stellen auch weniger werden, die Aufgaben werden es nicht. Daher bemühen sich die Anstalten verstärkt Drittmittel einzuwerben. Auch der Nachwuchsförderung schenken

sie große Aufmerksamkeit. Jeder vierte Wissenschaftler aus den Bundesforschungsanstalten hat eine außerplanmäßige Professur oder nimmt einen Lehrauftrag an einer Universität oder Fachhochschule wahr. Im Zeitraum von 1999-2002 konnten mehr als 300 junge Nachwuchskräfte ihre Doktorarbeit an einer der derzeit sieben Bundesforschungsanstalten des Verbraucherschutzministeriums anfertigen.

Flachowsky ist der Auffassung, dass weitere interne Anreizsysteme für mehr Motivation und Wettbewerb in den Forschungsanstalten sorgen könnten. Einen Motivationsschub würden auch klare Entscheidungen über die künftige Struktur bewirken. Eine jahrelange Ungewissheit – etwa über Standorte – wirke sich lähmend auf die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aus, da sie auch die persönliche Zukunftsplanung erschwere. Der Senat der Bundesforschungsanstalten hat sich wiederholt dafür ausgesprochen, notwendige Entscheidungen über Aufgabenverteilungen und Standorte zu treffen und dann auch zügig umzusetzen.

Zentrum für Fluorchemie in Bremen

Professor Gerd-Volker Röschenthaler, Universität Bremen, und andere Fluorchemiker haben ein Kompetenz-Zentrum „Organische Fluorchemie“ an der Bremer Universität gegründet.

Der Bedarf an neuen fluorhaltigen Produkten für die Gebiete Agrochemie, Pharmazie, Medizin und Technik ist beträchtlich und nimmt stetig zu. Dem steht entgegen, dass die Zahl der forschenden Arbeitsgruppen in der „Organischen Fluorchemie“ an deutschen Universitäten schon im nächsten Jahr drastisch auf zwei gesunken sein wird. Das Zentrum wird folgende Ziele verfolgen: Sicherung, Zusammenführung und Ausbau des vor-

Einer externen Evaluierung, also der Begutachtung des Forschungsbetriebs von außen, steht Flachowsky positiv gegenüber. Der Anfang des Jahres vorgelegte Bericht des Wissenschaftsrates über die Rahmenbedingungen der Forschung in Ressortforschungseinrichtungen habe Empfehlungen enthalten, die jetzt genauer analysiert und auf ihre Umsetzbarkeit überprüft würden. Eine Evaluierung der einzelnen Bundesforschungsanstalten sei dies nicht gewesen. Gleichwohl haben sich in den vergangenen Jahren bereits mehrere Ressortforschungseinrichtungen evaluieren lassen, so die Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft (FAL), aber auch die Physikalisch-Technische Bundesanstalt, das Robert-Koch-Institut und weitere Einrichtungen in den Geschäftsbereichen anderer Bundesministerien. Neben dem Wissenschaftsrat seien dafür auch andere unabhängige Expertengremien denkbar. „Von außen werden mögliche Defizite oft besser erkannt, und effizientere Strukturen führen zu einem sinnvolleren Einsatz der Mittel“, so der Senatspräsident.

handenen Erfahrungspotentials in Deutschland; nachhaltige Förderung junger Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen; Koordinierung und Unterstützung gemeinsamer Forschungsaktivitäten, auch bei der Einwerbung von Drittmitteln bei der DFG, der VW-Stiftung, dem BMBF sowie der Chemischen Industrie; Stärkung der Profilbildung des Studiengangs Chemie der Universität Bremen durch die Entwicklung von Lehrkonzepten in der Forschungsrichtung „Organische Fluorchemie“ für ein interdisziplinäres Promotionsstudium, Durchführung von Sommerkursen für Studierende und von Weiterbildungskursen für Universitäts- und Industriechemiker.

Vormerken!

CLB-Herausgeber Prof. Dr. Georg Schwedt hat Überraschendes aus dem dunklen Mittelalter ausgegraben. Seinen typisch lebendigen Vortrag können Sie im November anhören (s.u.). In der CLB berichtet er darüber bereits in der kommenden Ausgabe.

Glauber

- sein Wundersalz und der Wein -
vom Weinstein zur modernen Weinforschung

Glauber-Kolloquium zum 400. Geburtstag
17. November 2004, 14:00 Uhr
im DECHEMA-Haus
Theodor-Heuss-Allee 25
D-60486 Frankfurt am Main

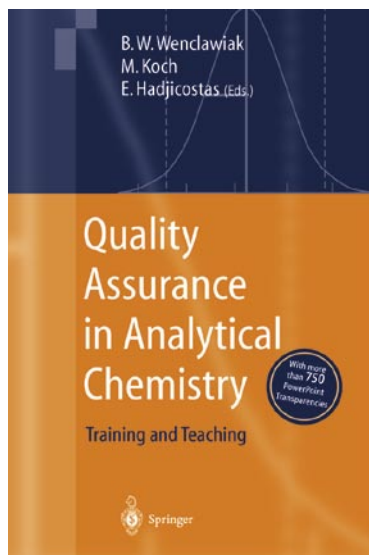


Trendbarometer Förderungen

- Die Schweiz erhält 10 Millionen Franken von der ETH Zürich und den Universitäten Basel und Zürich für die Startfinanzierung eines **Netzwerks im Zukunftsbereich Systembiologie**. Unter dem Arbeitstitel SystemsX werden bis zum Herbst dieses Jahres Konzept und Arbeitsprogramm erstellt.
- Das **Zentrum für Biomolekulare Magnetische Resonanz (BMRZ)** hat Bewilligungen in Höhe von rund zehn Millionen Euro für fünf Jahre erhalten. Im sechsten Rahmenprogramm fördert die Europäische Union damit drei neue Projekte in den Themenbereichen NMR-Wirkstoffforschung und Proteinfaltung sowie Technologieentwicklung.
- Ein neues Forschungsprojekt der Universität Bayreuth untersucht, insbesondere mithilfe der magnetischen Kernresonanzspektroskopie, biophysikalische und chemische Grundlagen der Wirkungsweise von Substanzen, die gegen **Prionenerkrankungen** wie die Creutzfeldt-Jakob Krankheit (CJK) oder BSE eingesetzt werden können. Das Verbundprojekt mit Kooperationspartnern an den Universitäten Düsseldorf und Erlangen-Nürnberg wird von der VolkswagenStiftung mit insgesamt 430 000 Euro gefördert und hat eine Laufzeit von drei Jahren.
- Die Fachhochschule Giessen-Friedberg hat ein **Institut für Biopharmazeutische Technologie** gegründet. Die neue Einrichtung gehört zum Fachbereich Krankenhaus- und Medizintechnik, Umwelt- und Biotechnologie (KMUB). Zur Startfinanzierung hat die FH Bundesmittel aus dem Hochschul- und Wissenschaftsprogramm (HWP) in Höhe von rund 100 000 Euro erhalten. Zusätzliche 60 000 Euro Fördermittel stehen einer Nachwuchswissenschaftlerin zur Weiterqualifizierung zur Verfügung.
- Das Göttinger Netzwerk GenoMik wird in einer zweiten Förderperiode durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung mit sechs Millionen Euro gefördert. Das BMBF stellt diese Mittel bis Mai 2006 im Rahmen seiner Fördermassnahme „**Genomforschung an Mikroorganismen**“ zur Verfügung. Aufgabe dieses Forschungsverbundes ist die Entschlüsselung der Genomsequenz verschiedener biotechnologisch relevanter Mikroorganismen.
- Wissenschaftler des Forschungszentrums Rossendorf in Dresden entwickelten in Kooperation mit der ausgegründeten nanoparc GmbH die erste **in Siliziumtechnik hergestellte Lichtquelle für ultraviolettes Licht**. Die ultraviolette Lichtquelle soll in „Lab-on-a-Chip“-Systemen für Vor-Ort-Schnelltests in der Lebensmittel- oder Wasserüberwachung eingesetzt werden.
- Individuelle Arzneimittelreaktionen werden von **Genvariationen** verursacht, die mit DNA-Chips analysiert werden können. Forscher der Universitäten Bochum und München haben eine hochsensitive elektrochemische Methode entwickelt, um solche Chip-Tests rasch und unkompliziert auszuwerten.
- Zur Erforschung nanokristalliner Materialien hat die EU das Exzellenznetz Nanoquanta (**Nanoscale Quantum Simulations for Nanostructures and Advanced Materials**) gegründet. Es wird von 2004 bis 2007 mit mehr als fünf Millionen Euro gefördert. Zum Netzwerk gehören zehn Wissenschaftlergruppen mit über 100 Forschern. Zu den drei deutschen Partnern gehört das Institut für Festkörpertheorie und -optik der Friedrich-Schiller-Universität Jena.
- Ein neues, mit insgesamt 7,4 Millionen Euro über fünf Jahre gefördertes „Integriertes Projekt“ im 6. Rahmenprogramm der EU beschäftigt sich mit den **Mechanismen biologischen Alterns**. Ziel ist es, die Ursachen altersassoziierter Erkrankungen besser zu verstehen. Wissenschaftler der Universität Frankfurt und Darmstadt sowie ein mittelständiges Unternehmen sind beteiligt.

Sehr gut für Schulungszwecke

Wenclawiak, Bernd W.; Koch, Michael; Hadjicostas, Evsevios: **Quality Assurance in Analytical Chemistry – Training and Teaching**; 280 Seiten; Hardcover; Springer Verlag Berlin Heidelberg New York, 2004; ISBN 3-540-40578-X; 49,95 Euro.



Dem Titel gemäß erwartet man von diesem Buch weniger seitenlange Auszüge aus Normen, Richtlinien und Guides, sondern eine knappe Zusammenfassung der Qualitätssicherungsanforderungen an ein Labor, als Schulungs-

unterlage für Laboranten/Labortechniker sowie Schüler und Studenten an Technischen Lehranstalten und Fachhochschulen. Der Rezensent kann bestätigen, dass diese Erwartung an das Buch zum größten Teil erfüllt werden kann. Vom Umfang her werden alle für ein akkreditiertes Labor wesentlichen Tätigkeiten und Rahmenbedingungen ausführlich beschrieben.

Dass das Buch generell nur in Englisch herausgegeben wird, schadet nicht, da sich alle im technisch-naturwissenschaftlichen Bereich Tätigen und Auszubildenden ohnehin viel mit englischsprachiger Literatur befassen müssen. Man vermisst einzig einen Index mit einer Gegenüberstellung englisch – deutscher Fachbegriffe, da die genaue Übersetzung von „kritischen“ Ausdrücken wie Genauigkeit, Präzision, Nachweisgrenze, Bestimmungsgrenze doch nicht immer eindeutig bekannt ist.

Die Vielfalt der Autoren spiegelt sich in Aufbau und Stil der einzelnen Kapitel. Während einige davon recht sachlich und (für eine Schulung fast zu) trocken gehalten sind und nur wenige Grafiken/Bilder und Anwendungsbeispiele enthalten (Glossary, Fit for Purpose, Q-Manual, Interlaboratory Tests), findet man in anderen Kapiteln recht anschauliche und aufgelockerte Erklärungen (TQM and Costs, Metrology & Traceability). Letztere Beispiele könnten als Vorbild für eine mögliche spätere Überarbeitung der anderen Kapitel dienen.

Inhaltlich sind zu folgenden Kapiteln Anmerkungen zu machen:

- In „Basic Statistics“ fehlen Hinweise auf die Auswahl von (anderen möglichen) statistischen Verteilungen; der Gesamtaufbau erscheint etwas ungewöhnlich und die Notwendigkeit der einzelnen statistischen Tests sollte an Praxisbeispielen besser heraus gearbeitet werden
- Im Kapitel „Calibration and Detection Limits“ wird ein guter Überblick gegeben; verwirrend müssen für den Neuling die verschiedenen Definitionen für die Messungen an der Nachweisgrenze am Ende des Kapitels erscheinen, so dass er eigentlich nach der Lektüre nicht weiß, was denn nun wirklich Stand der Technik ist. Weiters wären gerade hier gute grafische Darstellungen zu den Begriffen Nachweis-/Erfassungs-/Bestimmungsgrenze zum besseren Verständnis erwünscht.
- Der Abschnitt „Measurement Uncertainty“ erscheint dem Rezensenten zu knapp und etwas unvollständig, da auf andere als statistische Verteilungen zur Abschätzung von Unsicherheitskomponenten (Dreiecksverteilung, Rechtecksverteilung) nicht eingegangen wird, obwohl viele Unsicherheitsgrößen auf diese Art abgeschätzt werden müssen.

Ein besonderes Plus dieses Buches ist die beigelegte CD-ROM, auf der alle Kapitel als PowerPoint-Dateien enthalten sind und so hervorragend für Schulungszwecke eingesetzt werden können. Vor allem aber die beiden Excel-Anwendungen „Calibration“ und „Control Charts“ sind sehr wertvoll, da damit auch eigene Daten (z.B aus einem Laborpraktikum) bearbeitet werden können und so Anschaulichkeit und Verständnis für die statistischen Prozesse vermittelt werden können. Auf diese beiden Anwendungen sollte nicht nur im Buchtext, sondern auch im Index der CD-ROM (mittels Link) deutlicher verwiesen werden.

Alles in allem erscheint das Buch gut geeignet für die QS-Schulung; und es ist vor allem wegen der mit gelieferten, ausgezeichneten Daten-CD recht preiswert. Dieses Werk sollte in keiner Bibliothek von technischen Ausbildungsstätten fehlen!

Dr. Michael Grünwald, Lehrer für Chemie-Grundausbildungsfächer, Textilchemie, Analytisches Labor an der Höheren Technischen Bundes-Lehr- und Versuchsanstalt für Textil-Chemie-Informatik-Management Dornbirn (Österreich); Leiter der angegliederten akkreditierten Prüfstelle „Versuchsanstalt für Textil und Chemie“; Technischer Sachverständiger (Textilwesen) für die Akkreditierungsstelle des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit, Wien.

Sorgfältige Sprache

Flottmann Dirk, Forst Detlev, Rosswag Helmut: **Chemie für Ingenieure**; 2. völlig überarbeitete Auflage, 434 Seiten, 174 Abbildungen und 8 Tabellen; gebunden; Springer Verlag Berlin Heidelberg New York, 2004; ISBN 3-540-06513-X; 49,95 Euro.

Die drei Autoren stellen die chemischen Grundlagen und Zusammenhänge ohne allzu starken wissenschaftlichen Tiefgang dar. Sehr zu schätzen ist die sorgfältige, einfache Sprache mit Erklärung der lateinischen und griechischen Fachwörter.

Überzeugend ist der logische Aufbau von Elementarteilchen über Atome, Elemente, Periodensystem bis zu Bindungen. Das durchwegs verwendete technische Grau für die Abbildungen ist für ein Chemiebuch eigentlich schade, denn eine farbige Gestaltung von Skizzen und Bildern hat einen positiven Einfluss auf den Lerneffekt. Zudem ist die Farbenchemie ein wesentliches Kapitel der Erfolgsgeschichte der Chemie, das leider in diesem Buch nicht bearbeitet wird.

Die Autoren zeigen den Zusammenhang der Chemie zu aktuellen Themen aus verschiedenen Gebieten wie z.B. Brennstoffzellen, Korrosionsschutz, Halbleiter, Rohstoffherstellung und Verarbeitung, Polymerchemie, Bio- und Gentechnologie. Hier wird auch immer wieder verwiesen auf die aktuellsten technischen Verfahren in der Grossindustrie. Erfreulicherweise wird auch „Chemie und Umwelt“ mit den wichtigen Themen Ozon und Treibhauseffekt behandelt. Die beiden Themen zeigen, dass für das Lösen von Umweltproblemen für alle Fachleute ein gewisses Mass an chemischen Grundkenntnissen von großer Bedeutung ist. Speziell wertvoll ist die Auflistung der Literaturhinweise für die an weiteren Informationen Interessierten. Verbesserungspotential besteht bei den Internetadressen, denn die gesamte chemische Industrie und die Hochschulen liefern im Internet wichtige Informationen für alle chemischen Anwendungsgebiete wie Tenside, Farbstoffe, Polymerchemie, Katalysatoren usw.

Um die trotz allen Bemühungen oft komplexen Themen ohne begleitende Vorlesungen zu verstehen, werden auf dem Buchumschlag „Übungen mit Lösungen“ versprochen. Leider fehlen diese in dieser zweiten überarbeiteten Auflage.

Adolf Schmid, Dipl. Chemiker HTL, Fachlehrer an der Schweizerischen Textilfachschule in Wattwil.



Proteine, Gene und Hormone

Allergisches Asthma bei Kindern und Erwachsenen wird bisher überwiegend symptomatisch behandelt. Einen neuen Therapieansatz entwickelten Forscher vom Berliner Universitätsklinikum Charite. Sie produzierten monoklonale Antikörper gegen ICOS, einem Molekül auf T-Zellen, das den Entzündungsprozess in den Lungen einleitet und aufrechterhält.

Das Archäobakterium *Picrophilus torridus* aus der Bodenprobe einer ausgetrockneten heißen Schwefelquelle in Japan, könnte nicht nur für die Grundlagenforschung, sondern auch für biotechnologische Anwendungen von großem Interesse sein. Wissenschaftler der Universitäten Göttingen und Hamburg entschlüsselten die Genomsequenz des Bakteriums, das eine extreme Anpassung an saure Lebensbedingungen mit einem pH-Wert um 0 und gleichzeitig an hohe Temperaturen von um die 60 Grad Celsius aufweist und damit in „heißer Säure“ überleben kann.

„**Multiple kartilaginäre Exostosen**“ heißt eine seltene, erbliche Störung des Knochenwachstums. Wissenschaftlern des Max-Planck-Instituts für molekulare Genetik in Berlin gelang der Nachweis, dass das Molekül „Indian Hedgehog“ (Ihh), welches die Differenzierung der Knorpelzellen des wachsenden Skeletts und ihre Umbildung zu Knochenzellen reguliert, durch einen Mangel des Polysaccharids Heparansulfat aktiviert wird. Heparansulfat ist ein wesentlicher Bestandteil des wachsenden Knorpelgewebes.

Die molekulare Hand eines Forscherteams der Münchner Universität kann, von aussen gesteuert, ein Molekül des menschlichen Blutgerinnungsfaktors a-Thrombin wiederholt greifen und auch wieder loslassen. Das Aptamer aus 15 Basen kann die Thrombin-Konzentration in einer Lösung zwischen einem niedrigen und einem höheren Niveau präzise steuern.

Die Funktionen des Gens RAD51, dass eine Schlüsselrolle bei der Vererbung von Tieren, Pflanzen und Pilzen spielt, haben Wissenschaftler des MPI für Züchtungsforschung in Köln und der Penn State University, USA, in der Modellpflanze *Arabidopsis thaliana* aufgeklärt. Das Gen ist wichtig für die Rekombination und Reparatur des genetischen Materials.

Desulfotalea psychrophila („kälte-liebendes Sulfat-reduzierendes Stäbchen“) wurde 1999 am Meeresgrund vor Spitzbergen entdeckt. Die Entschlüsselung des 3 523 383 Basenpaare großen Genoms gelang einem Forscherteam aus den Biotechnik-Unternehmen e.gene GmbH (Feldafing), Epidauros AG (Bernied), der Technischen Universität München, sowie den MPIs für marine Mikrobiologie (Bremen) und Entwicklungsbiologie (Tübingen). Die bei vielen anderen Sulfat-reduzierenden Bakterien wichtigen c-Typ Cytochrome für den Elektronentransport fehlen in *Desulfotalea psychrophila*. Die nun vorliegende Genomsequenz erlaubt das Studium der genetischen Grundlagen für Leben unter extrem niedrigen Temperaturen, sowie den Zugang zu kälteaktiven Enzymen.

Neue Reagenzien zur Anfärbung intrazellulärer Strukturen

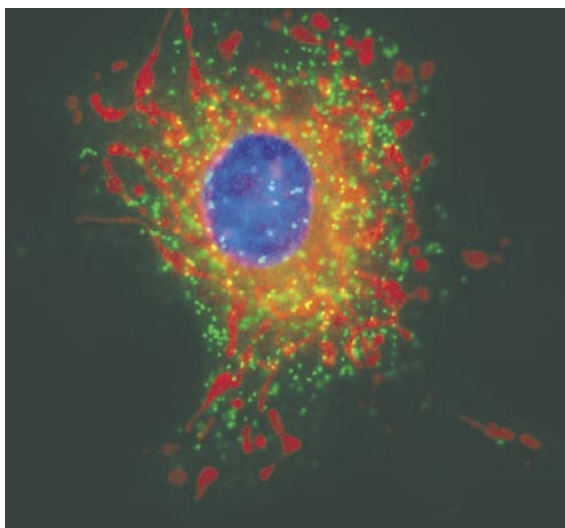


Abbildung: Peroxisomen-Markierung in fixierten und permeabilisierten Endothelzellen der Pulmonalarterie eines Rindes. Peroxisomen wurden mit einem Antikörper gegen das Peroxisomenmembranprotein 70 (PMP-70) markiert und mit Alexa-Fluor-488-markiertem Ziege-anti-Maus-IgG nachgewiesen. Mitochondrien wurden vor der Fixierung mit MitoTracker Red CMXRos eingefärbt; Zellkerne wurden mit blau fluoreszierendem DAPI eingefärbt.

Die neuen SelectFX Alexa Fluor 488 Labelling Kits von Molecular Probes enthalten alle Reagenzien, die zum selektiven Nachweis einer Reihe intrazellulärer Komponenten in fixierten Zellen erforderlich sind. Zu den ersten Produkten der SelectFX-Reihe gehören Kits zur Markierung des endoplasmatischen Retikulums, von Peroxisomen und zur Detektion von Zytocrom c in fixierten Zellen.

Jedes Kit enthält einen primären Antikörper gegen das jeweilige Target, einen sekundären Antikörper, der mit dem photostabilen Leuchtfarbstoff Alexa Fluor 488 von Molecular Probes markiert ist, Reagenzien zur Zellfixierung und Permeabilisierung, ferner Protokolle zur Präparation und zum Einfärben von Säugetierzellen. Die Fluoreszenz wird mit Hilfe von Standard-Fluoreszenzfiltern beobachtet. Peroxisomen sind einzelne,

membrangebundene Vesikel, die in den meisten eukaryotischen Zellen vorkommen. Ihre Hauptfunktion ist die enzymatische Oxidation von Fettsäuren und die Katalysierung des Nebenprodukts von H_2O_2 . Für den Nachweis verwendet das Kit einen Antikörper gegen Peroxisomenmembranprotein 70 (PMP70), wobei es sich um eine häufig vorkommende Komponente der Integralmembran von Peroxisomen handelt. Zum Nachweis von ER wird ein primärer Antikörper gegen ER-assoziierte Protein-Disulfidisomerase (PDI) verwendet, zum Nachweis von Zytocrom c kommt ein primärer Antikörper gegen Zytocrom c zum Einsatz.

Molecular Probes Europe BV
2333 AA Leiden, The Netherlands
Tel +31 71 524 1894
Fax +31 71 524 1883
www.probes.com

Spezifische Reagenzien und Software für Protein-Expressionsanalyse: schneller und umfassender

Applied Biosystems hat die neuen iTRAQ-Reagenzien auf den Markt gebracht, die die Messung der Expressionsprofile mehrerer Proteine gleichzeitig möglich machen. Beispielsweise Normal-, Krankheits- und behandelter Zustand eines Proteins.

Vorgänger waren die ICAT-Reagenzien für die Protein-Expressionsanalyse mittels LC/MS (ESI und MALDI), besonders für Proteine mit der Aminosäure Cystein. Mit den iTRAQ-Reagenzien können Forscher alle Peptide markieren, was einen größeren Anteil des Proteoms abdeckt, inklusive der post-translationalen Modifikationen. Es können vier Proben pro Experiment verglichen werden.

Zusätzlich gibt es bei Applied Biosystems die Software Pro Quant für die automatische Analyse von LC/MS-Daten aus der Expressionsanalyse mit iTRAQ-Reagenzi-

en. Die Software beinhaltet alle erforderlichen Prozesse, von der Proteinidentifikation bis zur Echtzeit-Aufzeichnung. Die Protein-Information kann direkt mit dem Celera Discovery System und der Panther Protein Datenbank verbunden werden.

Die iTRAQ-Reagenzien sind mit QSTAR und QTRAP der LC/MS/MS Systeme kompatibel.

Applied Biosystems
Warrington, Cheshire, WA3 7QH, UK
Tel+44 (0) 1925 825650
Fax+44 (0) 1925 282502
<http://europe.appliedbiosystems.com>



Inerte Miniatur-Magnetpumpen

Flow-Control-Spezialist Bio-Chem Valve hat ein Sortiment an inerten Magnetpumpen mit Dosierungen im Mikroliterbereich entwickelt, das in Europa über Omnifit Ltd erhältlich ist. Damit stellt das Unternehmen jetzt selbstansaugende Mikropumpen mit Dosierungen zwischen 8 und 250 μl her und bietet so OEM-Entwicklern und Herstellern wissenschaftlicher und medizinischer Geräte kompakte, zuverlässige und wirtschaftliche Alternativen zu Peristaltik-Pumpen oder Pumpe-/Ventil-Kombinationen an.

Die Mikropumpen haben einen nicht-metallischen, inerten Flüssigkeitspfad, um hochreine oder aggressive Flüssigkeiten zu dosieren, und bieten eine hohe und wiederholbare Dosiergenauigkeit im Mikroliterbereich. Der Wartungsbedarf der Pumpen ist minimal. Die Pumpen überzeugen außerdem durch eine lange Lebensdauer. Die neue Pumpe kann auf 120 bis 250 Zyklen pro Minute mit einer Dosiergenauigkeit von $\pm 2\%$ voreingestellt werden.

Als inerte Materialien für den nicht-metallischen Flüssigkeitspfad der Mikropumpen stehen

PPS, PEEK, EPDM und Teflon zur Auswahl. Merkmale der Pumpen sind positive Absperrung, niedriges Innenvolumen, ein vollständig isolierter Magnet und geringer Stromverbrauch. Die Pumpen eignen sich hervorragend für Dosieranwendungen mit hohem Präzisionsbedarf, z.B. Dosiergeräte für Reagenzien, Waschpumpen, Verdüner und Ablaufpumpen.

Für Entwickler und Hersteller bietet Bio-Chem Valve ein kostengünstiges Quick-Change Customization Verfahren an, in dem Standardkomponenten so umgerüstet werden, dass sie anwendungsspezifische Forderungen erfüllen, z.B. durch einzigartige Konstruktionsmaterialien, Anschlussgewinde, Öffnungen, Dosiermengen, Spezialanschlüsse und verschiedene Verteilerkonfigurationen.

Zusammen liefern Bio-Chem und Omnifit ein vollständiges Programm an inerten Fluid-Handling-Komponenten und bieten Kunden damit Complete Fluid System Solutions an.

Omnifit Ltd
Tel +44(1)1223 416642
www.omnifit.com



Neues GPC-System von Polymer Laboratories

Für hochauflösende, kostengünstige, integrierte GPC hat Polymer Laboratories den PL-GPC 50 auf den Markt gebracht. Der PL-GPC 50 ist konzipiert für einen Einsatz von Raumtemperatur bis 50°C. Das System besteht standardmäßig aus einer Präzisions-Pumpe (Fluss-Reproduzierbarkeit besser als 0,1%), einem manuellen Injektionsventil, einem Hochleistungs-Differential-Brechungsindex-Detektor mit ausgezeichnete Basislinien-Stabilität, einem integrierten Säulenofen und der Cirrus GPC-Software. Zur größtmöglichen Flexibilität und Einsetzbarkeit kann der PL-GPC 50 mit einer Auswahl von Detektorsystemen, einschließlich UV, Viskosität und Lichtstreuung plus

einem Online-Entgaser, Autosampler und Netzwerk-Kontroll-Optionen an Kundenwünsche angepasst werden.

Das Design und das intuitive PC-Interface des PL-GPC 50 machen den Betrieb äußerst einfach. Ein integriertes, PC-gestütztes Kontrollsystem, die Cirrus-Daten-Erfassung und -Analyse garantieren problemlosen Betrieb. Dies, kombiniert mit hoher Trennleistung und Verlässlichkeit, machen den PL-GPC 50 zur idealen Wahl für jedes Labor.

Polymer Laboratories GmbH
64293 Darmstadt
Tel 06151 860690
Fax 06151 860670
www.polymerlabs.com



Schlauchquetschventile für aggressive, partikelführende Flüssigkeiten

Bio-Chem Valve hat ein Sortiment inerte Schlauchquetschventile mit breiter Öffnung und Antihafbeschichtung entwickelt, mittels derer der Flüssigkeits- und Gasstrom in medizinischen Apparaten und wissenschaftlichen Analysegeräten präzise gesteuert werden kann. Die durch Zylinderspulen betriebenen Ventile sind in Europa über Om-



nifit Ltd. erhältlich und weisen außergewöhnlich widerstandsfähige, nicht-haftende Silikonschläuche auf, die aus dem Hause Bio-Chem stammen. Die Schläuche lassen sich problemlos abnehmen und austauschen, wodurch das Ausbauen und Entfernen des Ventils aus dem Gerät hinfällig wird.

Die Ventile eignen sich zur Verwendung bei aggressiven, partikelführenden Flüssigkeiten, korrosiven Substanzen, Reagenzien sowie anderen Flüssigkeiten und sind mit geschlossener und geöffneter Voreinstellung erhältlich, ferner in einer 3-Wege-Konfiguration, die einen Flüssigkeitsstromwechsel ermöglicht. Die chemisch resistenten Silikonschläuche verhindern, dass Flüssigkeiten an den Schlauchwänden haften oder den Durchlauf blockieren. Außerdem verlängern sie unter Umständen den normalen Präventivwartungszyklus auf eine Spanne, die der Funktionsdauer des Geräts nahe

kommt. Die Ventile sind in verschiedenen Größen erhältlich, für Schläuche mit einem Innendurchmesser von 0,81 Millimeter bis 7,95 Millimeter. Des Weiteren haben sie folgende Eigenschaften: Nulleigenvolumen, was bedeutet, dass keinerlei Flüssigkeit im Ventil verbleibt, geringen Energieverbrauch, lange Funktionsdauer und hohe Reaktionsgeschwindigkeit, maßgeschneiderte Modifikationen sind auf Wunsch lieferbar.

Zusammen liefern Bio-chem Valve und Omnifit ein vollständiges Programm an inerten Fluid-Handling-Komponenten und bieten Kunden damit Complete Fluid System Solutions an.

Omnifit Ltd
Cambridge, CB1 3HD, England
Tel 0044 (0) 1223 416642
Fax 0044 (0) 1223 416787
www.omnifit.com

Proteomik: Proteinanalyse sensitiver und schneller

Die „MRC Protein Phosphorylation Unit“ der Dundee University hat den 4700 Proteomics Analyzer von Applied Biosystems in Betrieb genommen, auf der Suche nach Protein-Kinase- und Protein-Phosphatase-Bindungsproteinen, die bei der Signal-Transduktion eine Rolle spielen könnten. Nick Mor-

rice, Leiter der Proteom-Abteilung, erklärt: „Die meisten Forschungsprojekte dieser Abteilung betreffen die Zellsignale bei Diabetes, Krebs und allgemeinen Zellschädigungen. Wir charakterisieren einige Vertreter der 518 Proteinkinasen des menschlichen Genoms mit bisher unbekannter Funktion, indem wir ihre Bindungspartner und ihre Substrate analysieren. Wir beteiligen uns auch an einer Kooperation zwischen sechs Pharmafirmen (beispielsweise Astra Zeneca und GlaxoSmithKline), die Kinase-Forschung betreiben und der Universität.“

Im Jahre 2002 wurde ich von Applied Biosystems nach Framingham eingeladen, um den 4700 Proteomics Analyzer auszuprobieren. Damals war ich von dem System so

beeindruckt, dass ich sofort entschied, es zu kaufen. Damals war die Protein- und Phosphopeptid-Identifikation ein zeitraubender, arbeitsintensiver Prozess, unter Einschluss mehrerer Instrumente. Für die Analyse einer einzigen Probe brauchte man eineinhalb Stunden und nicht selten die Hälfte der zur Verfügung stehenden Proben-substanz.

Jetzt, mit dem wesentlich sensitiveren und schnelleren Proteomics Analyzer bleibt genügend Probenmaterial für die post-translationale Analyse übrig.

Applied Biosystems
Warrington, Cheshire, WA3 7QH, UK
Tel+44 (0) 1925 825650
Fax+44 (0) 1925 282502
<http://europe.appliedbiosystems.com>



Bezugsquellenverzeichnis

ANALYSEN

Analytische Laboratorien
Prof. Dr. H. Malissa u. G. Reuter GmbH
Postfach 1106, D-51779 LINDLAR
Tel. 02266 4745-0, Fax 02266 4745-19

Ilse Beetz
Mikroanalytisches Laboratorium
Postfach 1104, D-96301 Kronach
Industriestr. 10, D-96317 Kronach
Tel. 09261 2426, Fax 09261 92376

ARÄOMETER

Amarell GmbH & Co KG
D-97889 Kreuzwertheim
Postfach 1280
Tel. 09342 9283-0
Fax 99342 39860



ARBEITSSCHUTZARTIKEL

Carl Roth GmbH + Co.
Postfach 21 11 62
D-76161 Karlsruhe
Tel. 0721 56060



BSB-BESTIMMUNG

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0 Fax 0881 62539

CHEMIKALIEN

Carl Roth GmbH + Co.
Postfach 21 11 62
D-76161 Karlsruhe
Tel. 0721 56060



GERBU Biotechnik GmbH
Am Kirchwald 6, D-69251 Gaiberg
Tel. 06223 9513 0, Fax: 06223 9513 19
www.gerbu.de, E-mail: gerbu@t-online.de

DEUTERIUMLAMPEN

LOT
061 51/88 06-0
Fax 061 51/89 66 67
www.LOT-Oriel.com



DICHTUNGSSCHEIBEN AUS GUMMI MIT AUFVULKANISIERTER PTFE-FOLIE

GUMMI WÖHLEKE GmbH
Siemensstr. 25, D-31135 Hildesheim
Teletex 5 121 845 GUMWOE
Tel. 05121 7825-0

FTIR-SPEKTROMETER-ZUBEHÖR

LOT
061 51/88 06-0
Fax 061 51/89 66 67
www.LOT-Oriel.com



GEFRIERTROCKNER

Zirbus technology
D-37539 Bad Grund
Tel. 05327 8380-0, Fax 05327 8380-80
Internet: <http://www.zirbus.de>

GEFRIERTROCKNUNGSANLAGEN

CHRIST
Gefrier- und Trocknungsanlagen

Martin Christ GmbH
Postfach 1713
D-37507 Osterode/Harz
Tel. 05522 5007-0
Fax 05522 5007-12



STERIS

Steris GmbH
Kalscheurener Str. 92
D-50354 Hürth/Germany
Tel. 02233 6999-0
Fax 02233 6999-10



HOHLKATHODENLAMPEN

LOT
061 51/88 06-0
Fax 061 51/89 66 67
www.LOT-Oriel.com



KÜHL- UND TIEFKÜHLGERÄTE

Hettich
ZENTRIFUGEN

Gartenstr 100
D-78532 Tuttlingen
Tel. 07461 705-0, Fax 07461 705-125
www.hettichlab.com
info@hettichlab.com



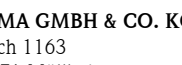
Kendro
Quality Products - Lifetime Care

Kendro Laboratory Products GmbH
Herausstr. 12-14, D-63450 Hanau
Tel. 01805 536376 Fax 01805 112114
www.kendro.de, info@kendro.de



KÜVETTEN

HELLMA GMBH & CO. KG
Postfach 1163
D-79371 Müllheim
Tel. 07631 182-0
Fax 07631 135-46
www.hellma-worldwide.com
aus Glas, Spezialgläser, Quarzgläser



LABORCHEMIKALIEN

Carl Roth GmbH + Co.
Postfach 21 11 62
D-76161 Karlsruhe
Tel. 0721 56060



LABOREINRICHTUNGEN

Köttermann GmbH & Co KG
Industriestr. 2-10
D-31311 Uetze/Hänigsen
Tel. 05147 976-0 Fax 05146 976-844
www.koettermann.com, info@koettermann.de

Wesemann GmbH & Co. KG
Postfach 1461, D-28848 Syke
Tel. 04242 594-0, Fax 04242 594-222
<http://www.wesemann.com>

LABORHILFSMITTEL

Carl Roth GmbH + Co.
Postfach 21 11 62
D-76161 Karlsruhe
Tel. 0721 56060



LABOR-SCHLÄUCHE UND -STOPFEN AUS GUMMI

GUMMI WÖHLEKE GmbH
Siemensstr. 25, D-31135 Hildesheim
TeleTex 5121845 GUMWOE
Tel. 05121 7825-0

LABORZENTRIFUGEN, KÜHLZENTRIFUGEN

Hettich
ZENTRIFUGEN

Gartenstr 100
D-78532 Tuttlingen
Tel. 07461 705-0, Fax 07461 705-125
www.hettichlab.com
info@hettichlab.com



Kendro
Quality Products - Lifetime Care

Kendro Laboratory Products GmbH
Herausstr. 12-14, D-63450 Hanau
Tel. 01805 536376 Fax 01805 112114
info@kendro.de, www.kendro.de



Sigma
Laborzentrifugen

Sigma Laborzentrifugen GmbH
Postfach 1713
D-37507 Osterode/Harz
Tel. 05522 5007-0
Fax 05522 5007-12



Große
Anzeigen zu
teuer? Hier
kostet ein
Eintrag nur
4,50 Euro
pro Zeile,
ein Milli-
meter pro
Spalte 2,25
Euro!

LEITFÄHIGKEITS-MESSGERÄTE



HANNA Instruments
Deutschland GmbH
Lazarus-Mannheimer-Straße 2-6
D-77694 Kehl am Rhein
Tel. 07851 9129-0 Fax 07851 9129-99

LEITFÄHIGKEITSMESSUNG

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0, Fax 0881 62539

MIKROSKOPE



**Labor- und Routine-
Mikroskope
Stereolupen und
Stereomikroskope**

Helmut Hund GmbH
Postfach 1669 · 35526 Wetzlar
Telefon: (0 64 41) 20 04-0
Telefax: (0 64 41) 20 04-44

OLYMPUS OPTICAL CO. (EUROPA) GMBH

Produktgruppe Mikroskope
Wendenstr. 14-18
D-20097 Hamburg
Tel. 040 237730
Fax 040 230817
email: microscopy@olympus-europa.com

OPTISCHE TAUCHSONDEN

HELLMA GMBH & CO. KG
Postfach 1163
D-79371 Müllheim
Tel. 07631 182-0
Fax 07631 135-46
www.hellma-worldwide.com
aus Glas, Spezialgläser, Quarzgläser

PARTIKELANALYSE



0 61 51/88 06 - 0
Fax 0 61 51/89 66 67
www.LOT-Oriel.com

PH/REDOX-ISE-MESSUNG

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0, Fax 0881 62539

PH-MESSGERÄTE

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0, Fax 0881 62539



HANNA Instruments
Deutschland GmbH
Lazarus-Mannheimer-Straße 2-6
D-77694 Kehl am Rhein
Tel. 07851 9129-0 Fax 07851 9129-99

PHOTOMETR. WASSERANALYSE GERÄTE UND TESTSÄTZE

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0, Fax 0881 62539

POLARIMETER



SCHMIDT + HAENSCH GmbH & Co
Waldstr. 80/81; D-13403 Berlin
Tel: 030 417072-0; Fax 030 417072-99

REFRAKTOMETER



SCHMIDT + HAENSCH GmbH & Co
Waldstr. 80/81; D-13403 Berlin
Tel: 030 417072-0; Fax 030 417072-99

REINIGUNGSMITTEL FÜR LABORGLAS



Carl Roth GmbH + Co.
Postfach 21 11 62
D-76161 Karlsruhe
Tel. 0721 56060

SAUERSTOFF-MESSGERÄTE



HANNA Instruments
Deutschland GmbH
Lazarus-Mannheimer-Straße 2-6
D-77694 Kehl am Rhein
Tel. 07851 9129-0 Fax 07851 9129-99

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0, Fax 0881 62539

STERILISATOREN

Zirbus technology
D-37539 Bad Grund
Tel. 05327 8380-0, Fax 05327 838080
Internet: <http://www.zirbus.de>

TEMPERATUR-MESSGERÄTE

Amarell GmbH & Co KG
D-97889 Kreuzwertheim
Postfach 1280
Tel. 09342 9283-0
Fax 99342 39860



HANNA Instruments
Deutschland GmbH
Lazarus-Mannheimer-Straße 2-6
D-77694 Kehl am Rhein
Tel. 07851 9129-0 Fax 07851 9129-99

WTW, Weilheim
Tel. 0881 183-0, Fax 0881 62539

THERMOMETER

Amarell GmbH & Co KG
D-97889 Kreuzwertheim
Postfach 1280
Tel. 09342 9283-0
Fax 99342 39860



TIEFSTTEMPERATURMESSUNG

Cryophysics GmbH
Dolivostr. 9, D-64293 Darmstadt
Tel. 06151 8157-0, Fax 06151 8157-99
info@cryophysics.de

VAKUUMKONZENTRATOREN

Zirbus technology
D-37539 Bad Grund
Tel. 05327 8380-0, Fax 05327 838080
Internet: <http://www.zirbus.de>

WASSERDESTILLIERAPPARATE



Ges. f. Labortechnik mbH
Postfach 1152
D-30927 Burgwedel
Tel. 05139 9958-0
Fax 05139 9958-21
info@GFL.de
www.GFL.de

Große
Anzeigen zu
teuer? Hier
kostet ein
Eintrag nur
4,50 Euro
pro Zeile,
ein Milli-
meter pro
Spalte 2,25
Euro!

werden müssen, um wirksam zu werden. Diese Hinweise sollen zeigen, daß die Bedeutung und der Wirkungsmechanismus auch gerade dieser besonders hervor-gehobenen charakteristischen Bestandteile noch durchaus nicht in allen Fällen eindeutig geklärt sind. Hier sei ausdrücklich vermerkt, daß auch Heilgase, vor allem Kohlendioxidgas, zu natürlichen Gasbädern verwandt werden. Eine besondere Gruppe bilden die natürlichen Pelloide, Torfe, bituminöse Schlammte, Tonschlammte, Kalkschlammte, Kieselschlammte, Schlicke und Sonderschlammte, die vielfältige Anwendungen in der Therapie finden.

Untersuchung von Heilwässern

Die Untersuchung von Heilwässern, die aber praktisch mit der Untersuchung der auch sonst verwandten Mineralwässer übereinstimmt, unterscheidet sich durchaus von der üblichen Trinkwasseranalyse. In den Begriffsbestimmungen des Deutschen Bäderverbandes sind Normativbestimmungen für den Umfang der Untersuchungen aufgenommen. Man unterscheidet: „große Heilwasseranalysen“, „kleine Heilwasseranalyse“, „Kontrollanalysen“ und „hygienische Untersuchungen“.

Die große Heilwasseranalyse soll ein möglichst vollständiges Bild der Quelle geben unter Berücksichtigung der geologischen Verhältnisse und der technischen Gegebenheiten; sie soll mit Hilfe physikalischer, physikalisch-chemischer und chemischer Methoden die Zusammensetzung und die physikalischen Eigenschaften des Wassers möglichst umfassend wiedergeben. Auch bakteriologische und mikroskopische Untersuchungen gehören zur großen Heilwasseranalyse.

Die kleine Heilwasseranalyse soll auch eine kurze Beschreibung der technischen Gegebenheiten der Quelle bzw. Bohrung beinhalten. Bei der Untersuchung wird Wert gelegt auf die quantitative Bestimmung der Hauptbestandteile, d. h. praktisch Kalium-, Natrium-, Ammonium-, Calcium-, Magnesium-, Eisen-, Mangan-Ionen sowie Nitrit-, Nitrat-, Chlorid-, Sulfat- und Hydrogencarbonat-Ionen, der Kieselsäure und des Kohlendioxides. Sollten besondere charakteristische Bestandteile vorhanden sein, so müssen selbstverständlich auch diese mit erfaßt werden.

Die Kontrollanalyse soll dazu dienen festzustellen, ob sich innerhalb kürzerer Zeitspannen Veränderungen in der Zusammensetzung der Quelle ergeben haben. Die hygienische Untersuchung umfaßt neben den üblichen Laboratoriums-Untersuchungen auch eine Ortsbesichtigung, bei der die gesamten Verhältnisse überprüft werden.

Eine wesentliche Weiterentwicklung der Normativbestimmungen ist die Forderung, daß die wertbestimmenden Bestandteile eines Heilwassers am Orte der Verwendung zu ermitteln sind. Um als praktisches Beispiel den Gehalt an freier gelöster Kohlensäure zu nehmen, so kann durchaus auf dem Wege von der Quelle bis zum Ort des Verbrauches (Badewanne, Trinkglas) ein erheblicher

Verlust durch ungeeignete technische Einrichtungen eintreten. Entscheidend für die Wirkung des Wassers ist aber häufig der beim Gebrauch noch enthaltene Anteil an freier Kohlensäure. Diese Forderung und Verpflichtung führt naturgemäß dazu, den Leitungen und möglichen Zwischenbehältern besondere Aufmerksamkeit zu schenken, so daß ein möglichst unverändertes Wasser dem Benutzer zur Verfügung steht. Auch beim Gehalt an Schwefelwasserstoff, an Eisen-Ionen, an Radon spielen solche Verluste eine Rolle, und die Forderung, die Grenzwerte am Ort des Verbrauches anzuwenden, hat dazu geführt, daß den technischen Fragen sehr viel mehr Aufmerksamkeit gewidmet wird.

Für Umfang und Form der Analyse sind Normen vorhanden. Dagegen sind für die Untersuchungsverfahren selbst bisher keine verbindlichen Vereinbarungen getroffen. Einige Methoden werden allerdings jetzt im Rahmen der Einheitsverfahren für die Wasseruntersuchung als übliche Verfahren festgelegt werden.

Betrachtet man die besonderen Probleme der Analyse, so ist als Beispiel darauf hinzuweisen, daß in einer Sole, die in einem Kilogramm etwa 100 g Kochsalz enthält, daneben Fluorid- und Jodid-Mengen zu bestimmen sind in der Größenordnung von etwa 1 mg und darunter. Diese extremen Konzentrationsverhältnisse sind verantwortlich dafür, daß die Übertragung sonst üblicher Verfahren häufig auf erhebliche Schwierigkeiten stößt. Bemerkenswert ist, daß wohl gerade die Mineralwasseranalyse immer wieder zur Förderung der analytischen Chemie beigetragen hat. So haben schon Schüler von Paracelsus recht weitgehende Aussagen über die Zusammensetzung von damals bekannten Heilwässern gemacht, und manche Verfahren, die heute allgemein angewandt werden, sind seit langem im Rahmen der Mineralwasseranalyse bekannt. Erkenntnis sei nur an Anreicherungsverfahren durch Mitfällung, zum Beispiel Ausfällung des Eisens zur Anreicherung des Arsens, oder Ausschüttelungsverfahren.

Die modernen Analyseverfahren haben auch wesentliche Fortschritte bei der Untersuchung der Mineralwässer mit sich gebracht. Hingewiesen sei auf die sehr wichtige pH-Bestimmung, die vielfach nur elektrometrisch durchzuführen ist, da z. B. in Gegenwart von Schwefelwasserstoff usw. andere Verfahren versagen. Die Komplexometrie hat vor allen Dingen für Kontrollen eine erhebliche Bedeutung auch bei der Mineralwasseranalyse bekommen, obwohl gerade hier gelegentliche Störungen durchaus nicht zu übersehen sind. Die große Gruppe der spektralphotometrischen und photometrischen Verfahren ist zur quantitativen Spurenbestimmung sehr wertvoll geworden, z. B. bei der Bestimmung des Eisens, bei der es wichtig ist, Fe in der zweiwertigen Form, z. B. als α, α' -Dipyridyl, festlegen zu können und gleichzeitig die Möglichkeit zu haben, mit Thioglykolsäure das Gesamteisen bestimmen zu können. Die vielfältige Anwendung des Dithionitverfahrens zur Bestimmung von Blei-, Zink-, Silber- und Kupfer-Ionen ist von erheblicher praktischer Bedeutung. Bei der Spektralanalyse, die vor allen Dingen zur qualitativen Fest-

stellung von Spurenelementen geeignet ist, ist es im allgemeinen erforderlich, Gruppentrennungen durchzuführen, um bei den sehr unterschiedlichen Konzentrationsverhältnissen doch zu brauchbaren Werten zu kommen. Für die Alkalien und einige andere Elemente hat sich die flammenphotometrische Bestimmung überraschend gut bewährt, und die Übereinstimmung mit den nach gravimetrischen Verfahren erzielten Werten ist durchaus befriedigend. Die Verwendung von Ionenaustauschern ist zur Bestimmung der Summe von Anionen und Kationen vorgeschlagen worden. Säulenchromatographische Verfahren sind für Barium-, Strontium- und Lithium-Ionen ausgearbeitet worden und papierchromatische Verfahren ebenfalls für Barium- und Strontium-Ionen, aber auch für Borsäure.

Bei der Bestimmung von Spurenelementen ist bemerkenswert, daß sich auch z. B. Beryllium, Germanium, Yttrium haben nachweisen lassen. Erinnert

Tabelle

Kleine Analyse der „Hauptquelle“ der Römerbrunnen „Romanis“ A.G., Grundschwalheim. Analyse ausgeführt im Chemischen Laboratorium Fresenius, Wiesbaden 1959.

Temperatur des Wassers: 14,4°C.

pH-Wert des Wassers: 6,2.

	mg/kg	mval/kg	mval-%/kg
Kationen:			
Natrium-Ion (Na ⁺)	700,0	30,45	31,63
Kalium-Ion (K ⁺)	40,0	1,023	1,06
Ammonium-Ion (NH ₄ ⁺)	0,4	0,0222	0,02
Magnesium-Ion (Mg ²⁺)	500,1	41,13	42,73
Calcium-Ion (Ca ²⁺)	458,2	22,86	23,75
Mangan(II)-Ion (Mn ²⁺)	1,75	0,0637	0,07
Eisen-Ion (Fe ^{2+/3+})	19,8	0,7090	0,74
		96,26	100,00
Anionen:			
Chlorid-Ion (Cl ⁻)	1244	35,08	36,44
Sulfat-Ion (SO ₄ ²⁻)	106,8	2,223	2,31
Nitrat-Ion (NO ₃ ⁻)	7,6	0,1226	0,13
Hydrogencarbonat-Ion (HCO ₃ ⁻)	3590	58,83	61,12
	6669	96,26	100,00
Undissoziierte Bestandteile:			
Kieselsäure (meta) (H ₂ SiO ₃)	119,6	1,531	
	6788		
Gasförmige Bestandteile:			
Freies Kohlendioxyd (CO ₂)	2307*)	52,41	
	9095		

Nicht nachweisbar ist Nitrit-Ion (NO₂⁻).

*) Entsprechend 1167 ml bei 0°C und 760 Torr.

sei daran, daß Rubidium und Caesium vor 100 Jahren von Bunsen in der Maxquelle von Bad Dürkheim festgestellt wurden.

Heilquellen

Die Charakterisierung einer Heilquelle ist am besten an Hand einer kleinen Mineralwasseranalyse möglich. Dabei werden für die Namengebung diejenigen Kationen und Anionen in absteigender Reihenfolge herangezogen, die den Mindestwert von 20 Millival-% überschreiten. Ferner werden die eingangs erwähnten charakteristischen Elemente mit aufgeführt, z. B. sprechen wir, sobald der Eisengehalt 10 mg überschreitet, von einem eisenhaltigen Wasser, soweit der Temperaturwert von 20°C überschritten wird, von einer Therme, falls der Mindestwert für einen Sauerling überschritten wird, von einem Sauerling. Bei einem Gehalt von insgesamt 14 g Natrium- und Chlorid-Ionen, entsprechend je 240 mval, spricht man von einer Sole. In den meisten Fällen ergibt sich somit zwangsläufig die Gesamtbezeichnung und Charakterisierung des Wassers. In nur wenigen Fällen ist zu entscheiden, ob der Hauptschwerpunkt bei der Charakterisierung als Sole oder als Therme oder als Sauerling zu sehen ist. Es muß dann der andere charakteristische Bestandteil vor der Gesamtbezeichnung mit aufgenommen werden, z. B. eine kohlendioxidhaltige Sole, wenn Sole das eigentliche entscheidende Charakteristikum der Quelle darstellt und über 1000 mg CO₂ im kg Wasser vorhanden sind.

Bei der in der Tabelle wiedergegebenen Analyse von der Hauptquelle „Römerbrunnen Romanis“ ergibt sich als Charakterisierung:

„eisenhaltiger Magnesium-Natrium-Calcium-Hydrogencarbonat-Chlorid-Sauerling“.

Bei der Tabelle ist auf den Abdruck der allgemeinen Angaben wie Lage der Quelle, Probenahme, Verrohrung, Schüttung, die Ergebnisse der Sinnenprüfung sowie die der physikalisch-chemischen Untersuchung verzichtet worden. Auch die zur Analyse gehörenden bakteriologischen Untersuchungsergebnisse sind hier nicht mit aufgeführt.

Über die Wirkung von Heilwässern sowohl bei Badekuren als auch bei Trinkkuren ist in den letzten Jahren wieder viel gearbeitet worden, und modernste naturwissenschaftliche Methoden tragen zur Zeit zur wesentlichen Erweiterung unserer Kenntnisse bei. Dazu kommt, daß in zunehmendem Maße in einzelnen Kurorten wieder Forschungsinstitute eingerichtet worden sind, so daß der ständig zunehmenden Benutzung unserer Heilwässer auch eine entsprechend erweiterte wissenschaftliche Durchforschung dieses Gebietes gegenübersteht, deren oberste Aufgabe es bleiben wird, die geeignetsten Wege zur Heilung kranker Menschen durch die uns von der Natur geschenkten Heilwässer zu finden.

InCom 2005

S Y M P O S I U M & E X P O S I T I O N

International Symposium on
Instrumentalized Analytical Chemistry and
Computer Technology

29. bis 31. März 2005
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Call for Papers/Topics

Liebe Leserinnen und Leser,

CLB

die **CLB** ist Partnerzeitschrift der InCom 2005. Beiträge des Symposiums können so auch Aufnahme in der CLB finden. Ich würde mich freuen – zusammen mit Prof. Dr. Karl Kleinermanns, Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf – wenn Sie sich mit neueren Ergebnissen aus Ihrem Arbeitsgebiet beteiligen. Bitte senden Sie doch Vorschläge an InCom@uni-duesseldorf.de oder redaktion@clb.de.

Einsendeschluss für Vorträge ist der **30. November 2004**.

Weitere Informationen finden Sie auf www.InCom-Symposium.de.

Ihr

