Heidelberger Taschenbücher

H. A. Bartels

Chemische Analyse

Basiswissen

H. A. Bartels

Chemische Analyse

Basiswissen

Mit 21 Abbildungen

Springer-Verlag
Berlin Heidelberg New York 1977

Priv.-Doz. Dr. Hermann A. Bartels
c/o Ciba-Geigy AG, CH-4002 Basel

ISBN 3-540-08321-9 Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York
ISBN 0-387-08321-9 Springer-Verlag New York Heidelberg Berlin

Library of Congress Cataloging in Publication Data. Bartels, Hermann August, 1938- Chemische Analyse. (Heidelberger Taschenbücher; Bd. 190) I. Chemistry, Analytic. I. Werder, R. D. II. Title. QD75.2.B385 543 77-22345

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der Entnahme von Abbildungen, der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Wege und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten.

Bei Vervielfältigungen für gewerbliche Zwecke ist gemäß § 54 UrhG eine Vergütung an den Verlag zu zahlen, deren Höhe mit dem Verlag zu vereinbaren ist.

© by Springer-Verlag Berlin · Heidelberg 1977
Printed in Germany

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Herstellung: Julius Beltz KG/Hemsbach. 2124/3140-543210

Heidelberger Taschenbücher Band 190

Chemische Analyse

Basiswissen

Prof. Dr. G. Schneider

Springer-Verlag

Berlin Heidelberg 1974

Vorwort

Im Zeitalter der Analysenautomaten ist es einfach geworden, Analysenergebnisse zu produzieren. Aber immer wieder muß man feststellen, daß bei der Lösung analytischer Aufgaben überaus „großzügig“ verfahren wird. Die Wichtigkeit der Probenahme, Probeaufbereitung, die Beachtung der Fehlergrenzen, Fehlerrechnung, die gesamte Deutung und Auswertung der Resultate werden oft übersehen: Es fehlt an „Fingerspitzengefühl“ für analytische Grundfragen.

Zu dieser Situation trägt bei, daß die chemische Analytik – insbesondere dank der modernen Instrumentation – eine weite Verbreitung gefunden hat. Analytisch unerfahrene Naturwissenschaftler, Ingenieure, Kaufleute und Handwerker müssen in der analytischen Chemie ein Gewirr aus Empirie, handwerklichem Können und etwas exakter Naturwissenschaft vermuten.

Hier soll das Buch einen Leitfaden geben. Auf knappem Raum wird gezeigt, wie man die eigentliche Problemstellung herauskristallisiert, welche Analysenverfahren tauglich und kostengünstig sind, wie man sie findet, was alles analysiert und kontrolliert werden muß, wie man die Analysenergebnisse interpretieren muß und wie man zur Lösung des Problems kommt.

Es geht um Basiswissen, um das Allgemeine, den Blick für die großen Zusammenhänge, das Einfühlungsvermögen in die Problematik der analytischen Chemie. Fachwissen wird nicht vermittelt, jedoch über Literaturzitate größtenteils zugänglich gemacht.

Um eine allgemeine Darstellung zu ermöglichen, war eine breite Diskussion mit vielen Kollegen notwendig.

Dieses Buch ist das Resultat vieler Jahre praktischer Arbeit auf mehreren Teilgebieten der chemischen Analytik und langer Diskussionen mit vielen Fachkollegen, denen an dieser Stelle gedankt sei.

Besonderen Dank gebührt Frau M. Böhmer für ihre Hilfsbereitschaft und Herrn Dr. R. Werder für seine stets objektive Kritik.

Basel, April 1977

H.A. Bartels

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Das Lösen von Problemen mit chemisch-analytischen Methoden	3
3. Vom Problem zur Hypothese	7
3.1 Das Problem	7
3.2 Die Hypothesen	8
3.3 Prüfung von Hypothesen	10
4. Die chemisch-analytischen Fragestellungen	11
4.1 Identität	13
4.2 Qualitative Zusammensetzung	13
4.3 Quantitative Zusammensetzung	13
4.4 Strukturen	13
4.5 Geschwindigkeiten	14
5. Transformation der Hypothesen in Fragestellungen	15
5.1 Prüfen der Fragestellung	15
6. Das Analysenverfahren	16
7. Gütekriterien der Analysenvorschrift	20
7.1 Genauigkeit	22
7.2 Präzision	29
8. Die passende Analysenvorschrift	32
8.1 Auswahlkriterien	32
8.2 Die Suche der Vorschrift	33
9. Die zu analysierenden Systeme	39
9.1 Das Analysensystem	39
9.2 Das Referenzsystem	43
9.3 Das Vergleichssystem	46

10.	Die Instrumentation	50
10.1	Meßinstrumente	50
10.2	Mechanisierte Analysenkanäle	52
10.3	Die Beziehung Analysenkanal – Analysenvorschrift	54
10.4	Die Computerisierung	56
10.5	Vor- und Nachteile der Automation	59
11.	Die Qualitätskontrolle	61
11.1	Die Kontrollverfahren	62
11.2	Die Durchführung der quantitativen Qualitätskontrolle	64
11.3	Die Auswertung	65
11.4	Die Fehlersuche	74
12.	Die Informationsdarstellung	79
12.1	Die Resultatmitteilung	79
12.2	Die Dokumentation der Analysenverfahren	81
13.	Die Interpretation	84
13.1	Der Identitätsnachweis	84
13.2	Die zusammengesetzten Urteile	85
13.3	Die Hilfsmittel zur Interpretation	86
13.4	Die Verifikation	87
13.5	Die Interpretation von Resultaten aus verschiedenen Laboratorien	87
13.6	Zusammenfassende Urteile	88
14.	Sachverzeichnis	89

1. Einleitung

Was ist eigentlich „Chemische Analytik“?

Womit setzt sie sich auseinander?

Der Vorstand der Gesellschaft Deutscher Chemiker beantwortet diese Frage in einer 1974 zur Vernehmlassung vorgelegten Definition wie folgt: „*Sie ist die Wissenschaft von der Gewinnung und verwertungsbezogenen Interpretation von Information über stoffliche Systeme mit Hilfe naturwissenschaftlicher Methoden*“.

Das ist eine sehr weit gefaßte Abgrenzung, in der das Wort „Chemie“ gar nicht mehr enthalten ist. Sie wird der Tatsache gerecht, daß die Methoden der chemischen Analytik nicht mehr die Domäne des analytischen Chemikers allein sind. Naturwissenschaftler der verschiedensten Fachrichtungen und Disziplinen bedienen sich der chemischen Analytik, um die von ihnen untersuchten Systeme auch mit den Methoden dieses Fachgebietes zu charakterisieren. Die Vielfalt der Problemstellungen tritt deutlicher hervor, wenn man sich vor Augen führt, daß nicht nur die Wissenschaften – von Medizin über Biologie zur Physik – sondern auch eine große Anzahl von Wirtschaftszweigen – wie Agrikultur, Lebensmittel- und Textilproduktion, pharmazeutische Industrie und Schwerindustrie, um nur einige zu nennen – auf die Methoden der chemischen Analytik angewiesen sind.

Dementsprechend gibt es chemisch-analytische Methoden zur Überwachung von Produktionsprozessen, zum Auffinden biologisch wirksamer Substanzen, zur Entscheidungshilfe bei juristischen Fragestellungen, zu medizinisch-diagnostischen Zwecken und zur Befriedigung rein wissenschaftlicher Neugier. Die Aufzählung der verschiedenen Zielsetzungen ließe sich über mehrere Seiten fortführen.

Die breite Anwendung stellt viele *Nichtchemiker* vor die Aufgabe, sich mit den Problemen der chemischen Analytik zu beschäftigen, oft ohne die Gelegenheit gehabt zu haben, sich zuvor mit der grundsätzlichen Denkweise innerhalb dieser Wissenschaft eingehend auseinanderzusetzen. Diese Lücke soll die vorliegende Abhandlung schließen. Sie wendet sich in erster Linie also nicht an „Vollblutanalytiker“, sondern an all jene, die nebenamtlich chemische Analysen durchführen oder veranlassen, also an Naturwissenschaftler aller Schattierungen: an Biologen und Geologen, an Physiker und Mediziner, an Generalisten, ganz allgemein an Projektleiter in Industrie und Wissenschaft, sofern sie sich mit chemischen Problemen beschäftigen und nicht

zuletzt an die Studenten der naturwissenschaftlichen und medizinischen Fakultäten. Es werden in diesem Buch keine Analysenvorschriften gegeben, mit denen man kochbuchartig Analysen durchführen könnte. Es werden auch keine experimentellen Details, keine handwerklichen Kniffe und keine neuartigen Apparaturen vorgestellt.

Der Begriff der „chemischen Analytik“ ist hier weiter gefaßt. Das Buch will die *Grundlagen* des chemisch-analytischen Denkens und Vorgehens diskutieren, um ein prinzipielles Verstehen bei der Problematik zu fördern. Es wird gezeigt, wie man Probleme mit chemisch-analytischen Methoden generell lösen kann, welche Vorgehensweise sinnvoll und welche eher problematisch ist. Es wird diskutiert, welche allgemeinen Schwierigkeiten zu erwarten sind, und wie man diese meistern kann.

Für spezielle Probleme wird auf die einschlägige Literatur, Bücher, Zeitschriften und wissenschaftliche Abhandlungen verwiesen.

2. Das Lösen von Problemen mit chemisch-analytischen Methoden

Auf den ersten Blick sieht es nun so aus, als hätten die analytischen Methoden, die in den verschiedenen Wissenschaften und Wirtschaftszweigen angewendet werden, nichts miteinander zu tun. Das chemisch-analytische Vorgehen in einem Stahlwerk scheint sich weitgehend von den Methoden des Lebensmittelchemikers, des Enzymologen oder gar des Mediziners zu unterscheiden.

Obwohl aber die Problemstellungen verschieden sind, und obwohl sie die verschiedensten Materialien betreffen: Bei näherem Hinsehen wird deutlich, daß das prinzipielle Vorgehen bei allen Fragestellungen gleich ist. Es folgt den Gesetzen der chemischen Analytik, die so gesehen ein Spezialgebiet der allgemeinen Analytik ist, wie sie vor allem auf vielen Gebieten der Wirtschaftswissenschaften, des Managements oder allgemein in der Philosophie entwickelt wurde. Auch in der chemischen Analytik geht es darum, die auftretenden Probleme logisch zu zergliedern und zu strukturieren, um so einen Einblick in das zu beurteilende System zu bekommen.

Der allgemein gangbare Weg zum Lösen von Problemen mit chemisch-analytischen Methoden ist in Abb. 1 schematisiert. Je nach Problemstellung wird man ihn in der ganzen Breite gehen, schnell durcheilen, möglicherweise auch wiederholt mit leicht geänderter Zielsetzung benützen. Es lohnt sich, das Vorgehen etwas genauer zu studieren.

Zunächst jedoch eine globale Beschreibung:

In jedem Fall muß *das Problem* in einem ersten Schritt eindeutig erfaßt und dargestellt werden. Man wird sich fragen:

„Wie ist das zu klärende Phänomen?“

„Was ist bekannt?“

„Was ist nicht bekannt?“

„Was will ich wissen?“

Bei praktischen Problemen wird man spezifischer fragen: „Worin besteht die zu beseitigende Schwierigkeit?“ „Wie ist die Situation, wie sollte sie sein?“ Ist das Problem klar definiert, so geht es darum, herauszufinden, warum die Schwierigkeit besteht, wie das Phänomen erklärt werden kann. In der Regel kommt man zu mehreren Erklärungsmöglichkeiten, sogenannten Hypothesen. Diese sind anhand der bekannten Information auf ihre Plausibilität zu prüfen. Anschließend werden die Hypothesen nach Kriterien wie Wichtigkeit und Wahrscheinlichkeit des Zutreffens geordnet und so weit als möglich in experimentell angehbare Fragestellungen zergliedert.

Abb. 1. Schema des in der chemischen Analytik allgemein gangbaren Wegs vom Problem zur Lösung. Die Kontrollverfahren der einzelnen Schritte beziehen sich entweder auf den Schritt oder auf das nächstfolgende Zwischenresultat

Die Fragestellungen müssen so formuliert werden, daß die zu erwartenden Ergebnisse die Hypothesen in wesentlichen Punkten stützen oder widerlegen. Andererseits ist auf die Durchführbarkeit und auf die mit dem Experimentieren verbundenen Kosten Rücksicht zu nehmen.

Die Fragestellungen werden je nach Problem nur teilweise chemischer Art sein, viele werden die Nachbarggebiete Physiologie, Pharmakologie, Bakteriologie, Kristallographie, Geologie und andere betreffen.

Ist die analytische Fragestellung formuliert, so wird in der Folge ein geeignetes *Analysenverfahren* geplant und ausgearbeitet bzw. gesucht und adaptiert werden müssen. Diese Phase führt zu einer gut dokumentierten Analysenvorschrift.

In einer weiteren Phase wird das Analysenverfahren angewendet. Dazu muß den zu beurteilenden Systemen eine repräsentative Probe entnommen und mit dem für tauglich befundenen Analysenverfahren untersucht werden: Es wird ein Analysenresultat gewonnen.

Eine Evaluation dieses Analysenresultats bezüglich Genauigkeit und Reproduzierbarkeit ist Gegenstand der nächsten Phase. Sie führt zu der in der analytischen Fragestellung geforderten Information.

In der letzten Phase findet die zusammenfassende *Interpretation* verschiedener Informationen – möglicherweise auch aus anderen Wissenschaftsbereichen – statt. Die Interpretation führt entweder über ein Konzept für gezieltes Vorgehen zur Lösung des Problems oder sie gibt Anlaß zum Verwerfen der Hypothese bzw. zur Umformulierung der analytischen Fragestellung, so daß der Prozeß zur Informationsgewinnung mit neuen Aspekten beginnen kann. Der Kreislauf zur Informationsgewinnung sei an einem *Beispiel* demonstriert. Es bestand folgende Problemsituation (Anal. Chem. 46, 1230A (1974)): Bei der Entschalung von Betonkonstruktionen in einem New Yorker „Multimillionen-Dollar-Projekt“ hielt jederman den Atem an. An mehreren Stellen floß der Beton unabgebunden aus der Konstruktion. Der Bau wurde einstweilen gestoppt. Warum hatte der Beton nicht abgebunden?

Hypothese: Sabotage! – In diesem Fall war es naheliegend, daß dem Beton Zucker zugesetzt worden war (eine Tasse Zucker kann das Abbinden von mehreren Kubikmetern Beton während Wochen verhindern). Analytische Fragestellung: Enthält der Beton Zucker? Analysenmethode: Photometrische Bestimmung im Betonextrakt. Resultat: kein Zucker nachweisbar, die analytische Fragestellung wurde verneint, die Hypothese widerlegt und verworfen. Zweite Hypothese: Es handelt sich um eine Überdosis normalerweise verwendeter Verzögerungszusätze. Analytische Fragestellung: Wieviel Polysaccharide und Lignosulfate enthält der Beton? Die Resultate der entsprechenden Analysenverfahren zeigten das Vorliegen normaler Konzentrationen. Die zweite Hypothese wurde ebenfalls verworfen.

Dritte Hypothese: Die Verzögerung des Abbindens trat auf Grund hoher Konzentrationen anorganischer Bestandteile auf. Analytische Fragestellung: Wie hoch ist die Konzentration anorganischer Elemente? Analysenverfahren: Röntgenfluoreszenz. Resultat: Der Beton enthält je etwa 0,03% Zink und Blei. Die Zuverlässigkeit des Analyseergebnisses wurde durch Wiederholung der Bestimmung mit der Atomabsorptionsmethode abgeschätzt und das Resultat so zu einer Information verdichtet.

Fachleuten fällt die Interpretation nicht schwer. Von so hohen Konzentrationen ist bekannt, daß sie das Abbinden des Betons stark verzögern. Damit war die chemische Seite erledigt. Die Frage, wie die Metallionen in den Beton

kamen, konnte durch ein ähnliches Vorgehen geklärt werden: Es war eine neue Charge Sand eingesetzt worden, die die Schwermetalle enthielt.

Noch ein zweiter Aspekt chemisch-analytischen Vorgehens wird hier deutlich: Im allgemeinen sind am Lösungsprozeß Mitarbeiter der verschiedensten Fachbereiche beteiligt. Im erwähnten Beispiel waren es wahrscheinlich Facharbeiter, Baumeister, Manager, Chemiker und Juristen.

Um ein möglichst reibungsloses, fruchtbares Zusammenarbeiten aller Beteiligten zu fördern, ist es wichtig, daß der Lösungsweg von allen verstanden und akzeptiert wird. Darüberhinaus muß die über das Problem bestehende Information weitgehend allgemein zugänglich sein:

Einerseits kann langwieriges Spekulieren und Abschätzen von Vermutungen durch schnell ausführbare Analysenverfahren kurzfristig obsolet werden. Andererseits können unter Umständen arbeitsreiche und mühevollen Analysenverfahren – und damit auch Kosten – eliminiert werden, wenn eine saubere Problemanalyse durchgeführt wird und plausible, detaillierte Hypothesen formuliert werden, die möglicherweise direkt – d.h. ohne Bemühung von Laborpersonal – zum Konzept und zur Lösung führen.

Eine genauere Beschreibung des eben vorgestellten Lösungsschemas ist daher angezeigt.

3. Vom Problem zur Hypothese

3.1 Das Problem

Zunächst geht es also darum, das Problem möglichst gut zu beschreiben und zu verstehen. Das Sammeln der Information wird durch ein systematisches Vorgehen erleichtert.

In den meisten Fällen ist es angezeigt, das Problem zu zergliedern, um so für Übersichtlichkeit zu sorgen. Im vorliegenden Beispiel würde das – aufgeteilt nach den normalerweise sinnvollen Untereinheiten: Elemente, Verknüpfungen, Prozesse – beispielsweise so aussehen (Tabelle 1):

Tabelle 1. Beispiel für das Strukturieren des Problems: „Nicht abbindender Beton“

Wann? – Viele Phänomene kommen nur bei einer bestimmten – oft wiederkehrenden – Konstellation von Ereignissen vor: über Mittag, am Montag, im Sommer. Häufiger als solchen Schwankungen begegnet man in der Praxis der Tatsache, daß das Phänomen seit einem bestimmten Zeitpunkt besteht. Hier sind diejenigen Ereignisse von besonderem Interesse, die unmittelbar vor diesem Zeitpunkt eingetreten sind: Neue Charge Ausgangspunkt (wie im Falle des New Yorker Bauprojekts)? Neues Personal?

Wieviel? – Hier ist das Ausmaß des zu klärenden Phänomens zu charakterisieren und wenn immer möglich auch das Ausmaß bestimmter Teilstrukturen.

Oft geht es darum, eine Abweichung von einer erwarteten Situation zu beurteilen: Der Beton darf nur eine bestimmte Menge Verzögerungszusätze enthalten, Stahl nur eine bestimmte Menge Kohlenstoff, Tabletten müssen einen bestimmten Wirkstoffgehalt aufweisen, der Blutzuckerspiegel darf nur innerhalb bestimmter Grenzen schwanken.

Bei Verdacht auf Abweichungen von der Norm hat man es mit zwei Systemen zu tun: dem Ist-System, in dem die Anomalität zu suchen ist und dem Soll-System, wie es normalerweise vorliegt. Über beide Systeme ist in diesem Fall die Information zu sammeln. Besonders aufschlußreich sind dabei Dinge und Tatsachen, die in den beiden Systemen verschieden sind.

Das Auffinden zweckdienlicher Information wird erleichtert, wenn man von einer Verdachtsdiagnose, einer Vermutung über mögliche Ursachen ausgeht. Durch dieses Vorgehen sollte man sich aber nicht zu früh verleiten lassen, die Problematik nur aus einem Blickwinkel zu sehen.

3.2 Die Hypothesen

Das Aufstellen von Hypothesen ist ein kreativer Akt, dem – darauf ist schon hingewiesen worden – eine entscheidende Bedeutung zukommt.

Sie bauen auf der genauen Problembeschreibung auf. Die Erfahrung lehrt, daß die Hypothesen umso zutreffender sind, je mehr über die Problematik bekannt ist.

Die Suche nach plausiblen Hypothesen kann mit verschiedenen Hilfsmitteln erleichtert werden.

Erfahrung

In der Praxis wird oft auf die Erfahrung zurückgegriffen, ein etwas schillerndes, nicht ganz logisches, aber praktikables Vorgehen, das die in längerem Umgang mit solchen Systemen empirisch gefundenen Regeln zum Tragen bringt.

Intuition

Manchmal ist auch eine gehörige Portion Phantasie und Intuition behilflich, um eine mögliche Erklärung chemischer Verhaltensweisen zu finden. Die Intuition ist dem menschlichen Willen nicht unterworfen, sie stellt sich oft nach intensivem Studium einer Problemsituation ein. Sie wird gefördert durch „Brainstorming“.

Brainstorming

Brainstorming ist eine Gruppenaktivität, die darauf abzielt, die Kreativität der Mitglieder zu fördern. Vom Einzelnen werden Lösungsmöglichkeiten – ohne vorheriges, tiefgründiges Studieren – vorgebracht, die bei anderen Mitgliedern Assoziationen hervorrufen sollen, die zu weiterentwickelten bzw. neuen Lösungsmöglichkeiten führen. Wichtig ist, daß man den Ideen freien Lauf läßt und abwertende Bemerkungen unterläßt. Das Gremium soll klein, kompetent und heterogen sein, z.B. Biologe, Statistiker und Chemiker ergänzt durch einen Protokollführer.

Morphologie

Die morphologischen Studien gehören zu den systematischen Suchstrategien zum Auffinden von Lösungsalternativen. Sie gehen vom möglichst weitgehend zergliederten Problem aus, verallgemeinern die Phänomene und suchen nach strukturellen Beziehungen.

Vorproben

Helfen solche Methoden allein nicht weiter, so kann auf das Rezept der Vorproben zurückgegriffen werden. Auf Grund vager Vermutungen wird versucht, mittels unaufwendiger, orientierender Analysenverfahren Anhaltspunkte für das Aufstellen einer sinnvollen Hypothese zu finden. Dieses Vorgehen läuft darauf hinaus, daß der Kreislauf zur Gewinnung chemischer Information in iterativen, immer mehr ins Detail gehenden Schritten durchlaufen wird.

Modelle

Ist das System zu unübersichtlich, um mit den angegebenen Methoden zu einer plausiblen Hypothese zu kommen (oder um die Gültigkeit einer Hypothese zu testen), so kann das System in einem übersichtlichen Modell nachgebildet werden. Das Modell soll alle wesentlichen Zusammenhänge des Gesamtsystems abbilden bzw. nachahmen. Gegebenenfalls muß es auch in mehreren iterativen Schritten gewonnen werden. Es muß hierzu jedoch angemerkt werden, daß dieser in der Physik so dankbare Weg in der Chemie und erst recht in der Biologie eher dornenreich ist, da hier die Zusammenhänge nicht so gut verstanden werden.

Auf vielen Gebieten der chemischen Analytik kommt man jedoch um Modelle nicht herum: Über die chemische Reaktivität, gegebenenfalls über die sterische Hinderung läßt sich anhand von Strukturformeln oder Kalottenmodellen in vielen Fällen eine Aussage machen. Zur Prüfung der Wirksamkeit

und Güte von Pharmaka wird der Mensch weitgehend durch Laboratoriumstiere ersetzt, um zu einer genügend fundierten Hypothese zu kommen.

3.3 Prüfung von Hypothesen

Die gefundenen Hypothesen müssen nun auf Plausibilität geprüft werden. In der Betonaffäre war eine Hypothese: „Der Beton ist falsch gemischt worden, er enthält zuviel Verzögerungszusatz“.

Man wird sich gefragt haben: „Wer hat den Beton gemischt?“, „Hat dieser Mann schon öfters den Beton gemischt?“, „Ist er generell zuverlässig?“.

Mit solchen und ähnlichen Fragen wird man zusätzliche, zielgerichtete Informationen über das Problem einholen. Ein großer Teil der Hypothesen wird auf Grund solcher Informationen verworfen werden können. Im günstigsten Fall verbleibt eine einzige, die alle Phänomene erklärt. Diese führt dann zum Konzept, nach dem das Problem zu lösen ist. Aufwendiges Experimentieren wurde umgangen.

Ist das nicht der Fall, so müssen Untersuchungen angestellt werden, die es erlauben, die Richtigkeit der Hypothesen abzuschätzen. Einige sind chemischer Art, sie müssen als chemisch-analytische Fragestellungen formuliert werden.