

# ANGEWANDTE CHEMIE

103. Jahrgang 1991

Heft 1

Seite 1–116

## Darstellungen in der Chemie – die Sprache der Chemiker

Von Roald Hoffmann\* und Pierre Laszlo\*

### Modes of Representation

If you look in old chemistry books  
you see  
all those line cuts  
of laboratory experiments  
in cross-section.  
The sign for water  
is a containing line, the meniscus  
(which rarely curls up the walls of the beaker),  
and below it  
a sea  
of straight horizontal dashes  
carefully unaligned vertically.  
Every cork or rubber stopper  
is cutaway.  
You can see inside  
every vessel  
without reflections, without getting wet,  
and explore every kink  
in a copper condenser.  
Flames are outlined cypresses  
or a tulip at dawn,  
and some Klee arrows  
help to move gases and liquids the right way.  
Sometimes a disembodied hand  
holds up a flask.  
Sometimes there is an unblinking observer's eye.

Around 1920  
photoengraving  
became economically feasible  
and took over.  
Seven-story distillation columns  
(polished up for the occasion),  
like giant clarinets,  
rose in every text, along  
with heaps of chemicals, eventually in color.  
Suddenly  
water and glass, all reflection  
became difficult.  
One had to worry about light,  
about the sex  
and length of dress or cut of suit  
of the person sitting at the controls of this impressive  
instrument.  
Car models and hairstyles  
dated the books more  
than the chemistry in them.  
Around that time  
teachers noted a deterioration  
in the students' ability to follow  
a simple experimental procedure.

Roald Hoffmann<sup>[54]</sup>

### 1. Einleitung

Chemische Strukturen gehören genauso wie Glaskolben, Bechergläser und Destillationskolonnen zu den Markenzei-

chen unseres Berufs. Wird eine(r) von uns beim Kritzeln von Formeln und Strukturen gesehen, so ist er oder sie schnell als Chemiker(in) identifiziert. Dennoch sind diese wohlbekannten Objekte, die unsere Arbeit von Anfang bis Ende, von den anfänglichen Kritzeleien (Abb. 1) bis zu den sorgfältig gezeichneten Formeln und Abbildungen in einer Publikation (Abb. 2) begleiten, *täuschend* einfach. An ihnen entzünden sich Fragen der Darstellung. In diesem Aufsatz soll über Molekülgraphiken nachgedacht werden.

Wir sind ganz verrückt nach diesen kleinen Diagrammen, nicht wahr? Aber was sind sie? Stellen sie die Wirklichkeit

[\*] Prof. R. Hoffmann  
Department of Chemistry, Cornell University  
Ithaca, NY 14850 (USA)  
Prof. P. Laszlo  
Laboratoire de Chimie, Ecole Polytechnique  
F-91128 Palaiseau  
Cedex (Frankreich)

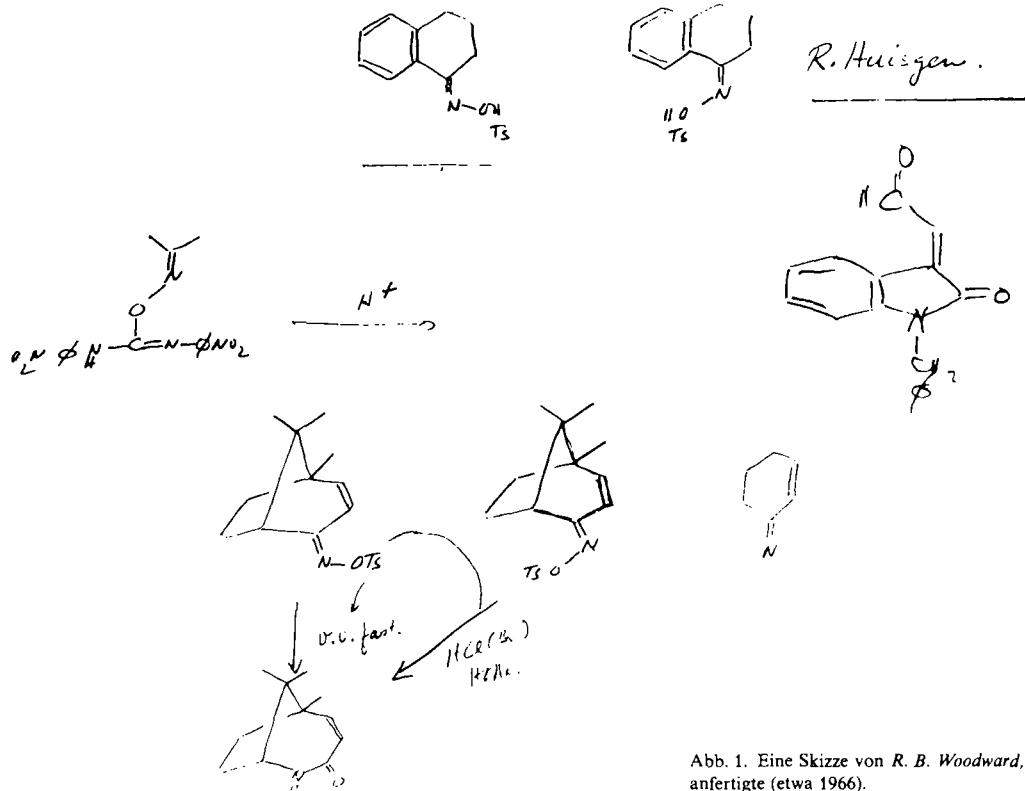


Abb. 1. Eine Skizze von R. B. Woodward, die er im Verlauf einer Diskussion anfertigte (etwa 1966).

dar, sind sie nur eine zweidimensionale Version des Modells, das sich aus Röntgendiffraktionsmustern eines Molekülkristalls bauen lässt – mit einem Wort, sind die *realistisch*? Ein Blick auf einige Publikationen von anderen (natürlich nicht von uns) wird zeigen, wie weit von der Wirklichkeit diese Strukturen entfernt sind. Sie vermischen Konvention und

Realismus in der unschuldigsten Weise. Man betrachte z. B. das Gerüst von Bicyclo[2.2.1]heptan 1. Tatsächlich nimmt



*Roald Hoffmann wurde am 18. Juli 1937 in Złoczów, Polen, geboren. Nachdem er den 2. Weltkrieg überlebt hatte, kam er 1949 in die USA, wo er an der Columbia University und der Harvard University Chemie studierte (Promotion 1962 bei Martin Gouterman und William N. Lipscomb). Seit 1965 ist er an der Cornell University, jetzt als John A. Newman Professor of Physical Science. Er hat viele Ehrungen erhalten, darunter den Nobel-Preis für Chemie 1981 (zusammen mit Kenichi Fukui). „Angewandte Theoretische Chemie“ beliebt Roald Hoffmann sein Arbeitsgebiet zu nennen; er macht Rechnungen, die von experimentellen Ergebnissen stimuliert werden (oder zu Experimenten anregen), und er entwickelt generalisierende Modelle, die uns das Verständnis vieler chemischer Phänomene erleichtern. Roald Hoffmann schreibt auch Essays und Gedichte. Zwei Gedichtsammlungen „The Metamict State“ (1987) und „Gaps and Verges“ (1990) sind veröffentlicht (University Presses of Florida). Seit neuestem tritt er auch im Fernsehen auf, und zwar als Moderator der vierteiligen Serie „The World of Chemistry“.*



*Pierre Laszlo, geboren am 15. August 1938 in Algier, ging in Grenoble, Rio de Janeiro und Paris zur Schule und studierte Naturwissenschaften an der Sorbonne (Promotion 1965 bei E. Lederer) und Princeton (1962/1963 bei P. von R. Schleyer). Nach einer Postdoktorandenzeit in Orsay war er Assistant Professor in Princeton (1966–1970). Seit 1970 ist er Professor für Physikoorganische Chemie an der Université de Liège (Belgien) und seit 1986 zugleich Professor an der Ecole Polytechnique in Palaiseau (Frankreich). Pierre Laszlo hat viele Gastprofessuren innegehabt und ist mit einer Reihe von Preisen ausgezeichnet worden, darunter dem Prix Biennal de la Société Chimique de Belgique (1981). Seine Hauptarbeitsgebiete sind NMR-Spektroskopie, Trägergebundene Reagenzien und Physikoorganische Chemie. Neben ca. 200 Zeitschriftenpublikationen ist Pierre Laszlo Autor oder Herausgeber von sieben Büchern. In seiner Freizeit widmet er sich der Übersetzung von Gedichten von Petrarca ins Französische, und er verfaßt Literaturkritiken.*

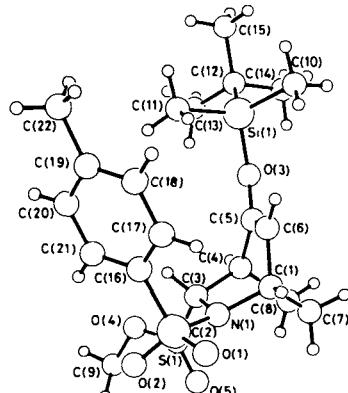
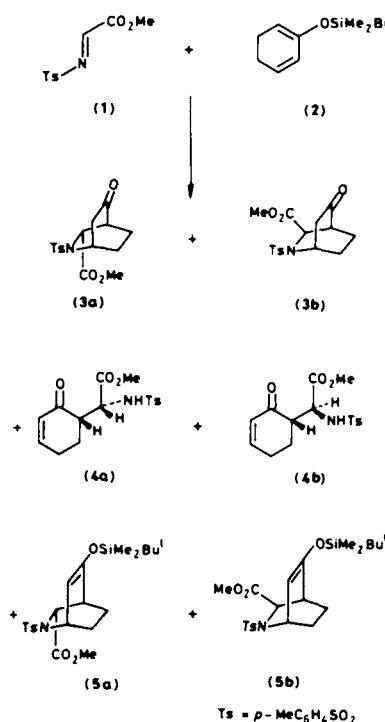
Figure 1. The structure of the *exo* silyl enol ether (5a).

Abb. 2. Die zweite Seite eines zweiseitigen Artikels: T. N. Birkinshaw, A. B. Tabor, A. B. Holmes, P. R. Raithby („Imino Diels-Alder Reaction of 2-t-Butyldimethylsilyloxy cyclohexadiene: Isolation of an Azabicyclo[2.2.2]octene Silyl Enol Ether Adduct“) J. Chem. Soc. Chem. Commun. 1988, 1601.

The results of a systematic variation of solvent, temperature, and Lewis acid on the outcome of the reaction of (1) with (2) resemble the pattern reported for the trimethylsilyl analogue of (2), but with several important differences. Firstly, the *exo/endo* ratio of bicyclic adducts derived from (2) is greater than that for the trimethylsilyl analogue, and secondly, there is a corresponding greater preference for (4a) over (4b). Under certain low temperature conditions only cyclohexenone products (4a,b) and no bicyclic products were obtained. Hydrolysis of the hindered bicyclic silyl enol ether (5a) under relatively forcing conditions ( $\text{AcOH}-\text{THF}, 50^\circ\text{C}$ ) barely produced any retro-Michael addition product (4b). These observations are consistent with (3a) and (5a) being derived from a [2 + 4] transition state in which the unfavourable steric

interaction between the *N*-tosyl and *t*-butyldimethylsilyl groups is minimised,<sup>5</sup> while (4a) is derived from an open transition state in which the bulky silyl substituent avoids the steric clash with the ester group of the imine (1). Thus the proposed mechanism (c) in the previous paper,<sup>1</sup> involving a dual pathway explanation<sup>6</sup> for the origin of bicyclic and monocyclic products, seems to be supported in the present study.

We thank the S.E.R.C. for supporting this work, Merck, Sharp and Dohme, Harlow for a CASE award (A. B. T.), and Clare College for financial support (T. N. B.) and the award of the Denman Baynes Studentship (A. B. T.).

Received, 11th May 1988; Com. 8/01856A

#### References

- T. N. Birkinshaw, A. B. Tabor, A. B. Holmes, P. Kaye, P. M. Mayne, and P. R. Raithby, preceding communication.
- W. G. Dauben and R. A. Bunce, J. Org. Chem., 1982, 47, 5042.
- F. Brisse, D. Thoraval, and T. H. Chan, Can. J. Chem., 1986, 64, 739.
- A. J. Kirby, 'The Anomeric Effect and Related Stereoelectronic Effects at Oxygen,' Springer-Verlag, Berlin, 1983; K. L. Brown, L. Damm, J. D. Dunietz, A. Eschenmoser, R. Hobl, and C. Kratky, Helv. Chim. Acta, 1978, 61, 3108; L. I. Kruse, C. W. DeBrosse, and C. H. Kruse, J. Am. Chem. Soc., 1985, 107, 5435 and references cited therein.
- S. M. Weinreb and R. R. Stahl, Tetrahedron, 1982, 38, 3087.
- S. J. Danishefsky, E. Larson, D. Askin, and N. Kato, J. Am. Chem. Soc., 1985, 107, 1246.

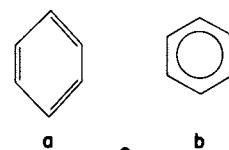
diese häufig gesehene, dreidimensionale Darstellung eine invertierte Perspektive ein, da der Fluchtpunkt nicht im Hintergrund ist, wo er sein sollte, sondern auf der Seite des Betrachters. Die meisten chemischen Zeichnungen vermeiden offensichtliche primitiv-künstlerische Kriegslisten, um Dreidimensionalität vorzugaukeln; sie existieren in ihrer eigenen Welt.

Vielleicht sind sie „Kunst“, und dann sind sie eine Abstraktion der Realität des Wesentlichen von Norbornan. Wenn das der Fall ist, dann muß darüber nachgedacht werden, welche Art von Kunst sie sind. Dies soll in diesem Aufsatz (auch) getan werden.

Vielleicht müssen chemische Zeichnungen keine realistischen Darstellungen sein, da sie Symbole sind, Zeichen, die im Kopf eines Chemikers in die dreidimensionale Struktur oder zumindest in das Kugel-Stab-Modell umgewandelt werden. Chemische Strukturen sind dann Teil der chemischen Sprache. Interessant an Sprachen ist (egal, ob Englisch oder Deutsch oder ...), daß a) trotz ihrer Ungenauigkeit durch sie kommuniziert werden kann und b) sie uns unvermeidliche Komplikationen, Mehrdeutigkeiten und Reichtümer bescheren, die wir nicht erwartet haben. Oder die wir vielleicht unbewußt beabsichtigen.

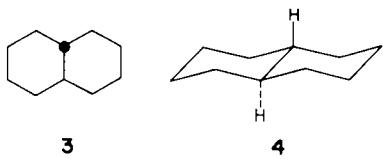
Wir beide studierten Chemie zu einer Zeit, als längliche Benzolringe (**2a**) unmodern wurden. Zwei Dinge können dazu gesagt werden. Die alte Darstellungweise konnte den unglaublichen Fortschritt in der Organischen Synthese nicht

verhindern, auch nicht das scharfsinnige Theoretisieren Hückels. Andererseits diente die neuere und genauere Darstellung durch ein gleichseitiges Hexagon (**2b**) nicht nur kosmetischen und PR-Zwecken für die neue Physikorganische und Theoretische Chemie, die mit Namen wie *Saul Winstein* und *Charles Coulson* verbunden ist. Ein neuer Blickwinkel deutete sich subtil an. Zur selben Zeit wurde die Konformationsanalyse allgemein gebräuchlich. Nach Jahrzehnten der Entfremdung kehrten Strukturchemie und Reaktivitätsstudien unter dasselbe Dach zurück. Das Zeichnen einer Struktur ist nicht unschuldig, es ist ideologiebeladen und vermittelt auch noch etwas anderes; in diesem Fall die moderne Wiedervereinigung von Theorie und Experiment.



Die Fähigkeit, hinter einer Konstitution eine Konformation zu sehen, daß der Organiker, wenn er den Symbolsatz 3 sieht, sofort an **4** denkt, setzt zwei Talente voraus. Die Imagination, die visuelle Fähigkeit, eine Form im dreidimensionalen Raum wahrzunehmen, kommt erst nach der Übersetzung. Der Weg vom ersten „flachen“ Symbolsatz zum zwei-

ten „verzerrten“ Symbolsatz entspricht etwa dem Übergang von einer Sprache (das Wort „science“) in eine andere (das Wort „Wissenschaft“). Dieses Beispiel zeigt, wie groß die linguistische Komponente in jenen Gedankenvorgängen ist, die durch diese kleinen Zeichnungen, die wir chemische Strukturen nennen, ausgelöst werden. Ein Teil unseres Auf-



satzes beschäftigt sich explizit mit chemischen Strukturen als den Konstituenten einer Sprache.

## 2. Die Form von Molekülen und wie sie vermittelt wird

Wenn wir etwas untersuchen wollen, das so tief in uns eingegraben ist, daß es zur zweiten Natur geworden ist (wie die Strukturformeln), so ist es nützlich, sich einmal außen vorzustellen. Man stelle sich vor, jemandem, der intelligent, aufmerksam und verständnisvoll ist, aber kein Chemiker, von Strukturen und der Kommunikation darüber in unserer Wissenschaft zu erzählen. Vielleicht würden wir Folgendes sagen<sup>[1]</sup>:

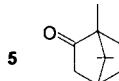
Formen sind in der Chemie sehr wichtig. Zwei Moleküle, die sich so wenig voneinander unterscheiden wie die linke von der rechten Hand, können ganz unterschiedliche physikalische, chemische und biologische Eigenschaften haben. So riecht z. B. das Spiegelbild von Carvon, dem Hauptbestandteil des Öls der grünen Minze nach Kümmel. Die Anordnung der Atome im Raum ist nicht nur eine Kuriosität im Laboratorium, sie kann über Leben oder Tod entscheiden. Thalidomid, ein Sedativum der frühen sechziger Jahre, war für Tausende von fötalen Mißbildungen in Europa verantwortlich. Das betreffende Medikament bestand aus einer Mischung von links- und rechtshändigen, spiegelbildlichen Molekülen. Die eine Form war teratogen und verursachte Mißbildungen, sein Spiegelbild nicht. Wäre das damals bekannt gewesen, so hätte viel menschliches Leid vermieden werden können<sup>[2]</sup>. Moleküle bestehen aus Atomen. Aber die molekulare Struktur wird nicht nur von der Identität der Atome bestimmt, und auch nicht allein von der Verknüpfung der atomaren Bausteine innerhalb des Moleküls. In der modernen Chemie bezeichnet das Wort Struktur die dreidimensionale Anordnung der Atome im Raum<sup>[3]</sup>. Dabei handelt es sich zumindest um einen Graph, eine dreidimensionale Zusammenstellung von Punkten, die durch Linien, die „Bindungen“, verbunden sind.

Es ist entscheidend, daß Chemiker diese Strukturinformation leicht vermitteln können, etwa über zweidimensionale Medien wie Papier oder Leinwand. Die Information ist komplex, viele Atome, viele Bindungen, eine Fülle von geometrischen Strukturen. Die Information ist auf einer wichtigen Ebene von Natur aus graphisch – es ist eine zu zeichnende Form. Und jetzt kommen wir zur Crux dieser Angelegenheit. Die Kollegen, für die diese visuelle dreidimensionale Information wichtig ist, haben im Grunde nicht die Begabung

(manche mehr, manche weniger), solche Informationen zu vermitteln. Chemiker werden für ihren Beruf nicht aufgrund ihrer künstlerischen Talente ausgesucht. Zudem werden ihnen grundlegende künstlerische Techniken nicht beigebracht. Die Fähigkeit der Autoren dieses Beitrags, ein Gesicht zu malen, entspricht etwa der eines zehnjährigen Kindes.

Wie machen sie es also? Wie machen wir es? Mit Leichtigkeit, fast ohne nachzudenken, aber, wie wir sehen werden, mit mehr Zweideutigkeiten, als wir Chemiker vermuten. Der Vorgang heißt *Darstellung*, eine Transformation der Realität in Symbole. Er ist sowohl *graphisch* als auch *linguistisch*. Er hat *Historizität*. Er ist *künstlerisch* und *wissenschaftlich*. Die Darstellungen in der Chemie sind ein Code, der von allen Chemikern genutzt wird.

Wir wollen diesen Vorgang betrachten und mit dem Ergebnis beginnen. Dieses wurde in Abbildung 2 gezeigt, einer typischen Seite aus einer modernen chemischen Veröffentlichung. Der hohe Anteil an Graphiken ist sehr auffallend. Es gibt viele kleine Bilder zu sehen. Aber der intelligente Beobachter, so er nicht Chemiker ist, ist aufgeschmissen. Er befindet sich in einer Situation, wie sie Roland Barthes anlässlich seines ersten Besuches in Japan in seinem „The Empire of Signs“ beschreibt<sup>[4]</sup>. Was bedeuten diese Zeichen? Er weiß, daß Moleküle aus Atomen aufgebaut sind, aber was soll er von einem Polygon wie Struktur 5 halten? Dabei handelt es



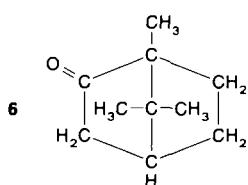
sich um eine weiße, wachsige Verbindung mit durchdringendem Aroma, Campher<sup>[\*]</sup>. Nur ein einziges bekanntes Atomsymbol, das O für Sauerstoff, fällt auf.

Nun, das ist eine Art Kurzschrift. Genauso, wie ein Soldat nicht Commander in Chief, South Pacific Operations schreibt, sondern CICSPO, so zeichnet der Chemiker nicht alle Kohlenstoff- und Wasserstoffatome, diese ubiquitären Elemente, sondern nur ein Kohlenstoffgerüst. Jede Ecke, die nicht besonders in der Darstellung der Struktur von Campher markiert wird, bedeutet ein Kohlenstoffatom. Da die Valenz eines Kohlenstoffatoms typischerweise vier ist, werden die in den Code eingeweihten Chemiker wissen, wieviel Wasserstoffatome an jedes Kohlenstoffatom gehören. Tat-

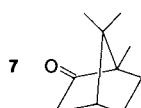
[\*] Eine wichtige und teilweise amüsante Ergänzung zum Campher in letzter Minute: Wir hatten das Camphermolekül zur Illustrierung unserer Argumentation gewählt, da die Substanz über den Kreis der Chemiker hinaus bekannt ist und sich die Komplexität der graphischen Darstellung in Grenzen hält. Ich (R. H.) hatte die genaue Struktur nicht mehr im Kopf und schaute deshalb in einem Lehrbuch nach. Danach zeigte ich die Bilder, die ich für diesen Beitrag verwenden wollte, Freunden. Alle meine Strukturen waren Spiegelbilder von dem, was Sie jetzt als 5 – 11 sehen. Die hier abgebildeten Strukturen 5 – 11 geben die richtige (1R,4R)-Konfiguration des natürlichen, rechtsdrehenden Campfers wieder. Daß wir die falsche absolute Konfiguration hatten, darauf machte uns ein sorgfältiger Leser, Ryoji Noyori, Baker Lecturer an der Cornell University 1990, aufmerksam. Ein genaueres Literaturstudium ergab dann, daß sich die falsche Konfiguration in sehr vielen Lehrbüchern findet, im Merck Index und auch in vielen wissenschaftlichen Veröffentlichungen, z. B. einer wichtigen von G. M. Whitesides, und D. W. Lewis über ein NMR-Shift-Reagens zur Bestimmung der Enantiomerenreinheit (J. Am. Chem. Soc. 92 (1970) 6979). Sigma, Aldrich und Fluka haben in ihren Katalogen die richtige Struktur, die auch dem folgenden Werk entnommen werden kann: W. Klyne, J. Buckingham: *Atlas of Stereochemistry. Absolute Configuration of Organic Molecules*, Vol. 1, Chapman and Hall, London 1978, S. 85.

sächlich ist das oben gezeichnete Polygon eine graphische Kurzschrift der Struktur **6**.

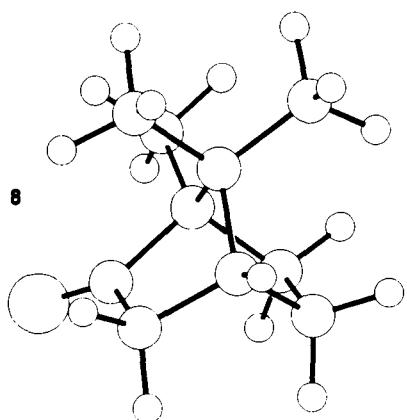
Aber ist **6** die wahre Struktur des Campheroleküls? Ja und nein. Auf einer bestimmten Ebene trifft das zu, auf einer



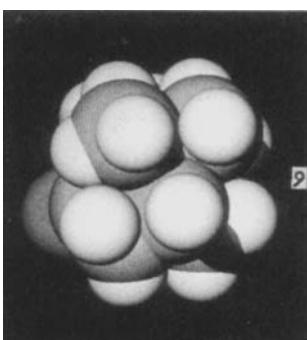
anderen möchte der Chemiker das dreidimensionale Bild sehen und zeichnet **7**. Auf noch einer anderen Ebene möchte sie oder er die „wirklichen“ interatomaren Abstände sehen, d.h. das Molekül in seinen korrekten Proportionen. Solche



kritischen Details können mit etwas Geld und Arbeit durch die Röntgenkristallographie aufgeklärt werden. Und dann würde wahrscheinlich ein Computer die Darstellung **8** zeichnen<sup>[5]</sup>.

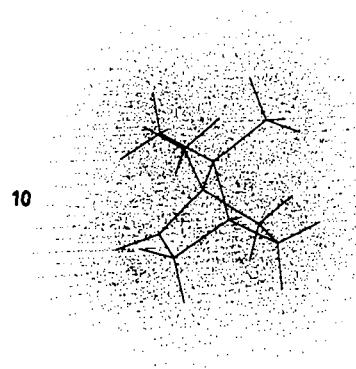


Dies ist ein sogenanntes Kugel-Stab-Modell, vielleicht die bekannteste Art der Darstellung von Molekülen in diesem Jahrhundert. Die Größen der Kugeln, die Kohlenstoff-, Wasserstoff- und Sauerstoffatome darstellen, sind eher willkürlich. Eine „realistischere“ Darstellung des Volumens, das die einzelnen Atome einnehmen, ermöglicht das Kalottenmodell **9**. Man beachte, daß die Position der Atome, besser

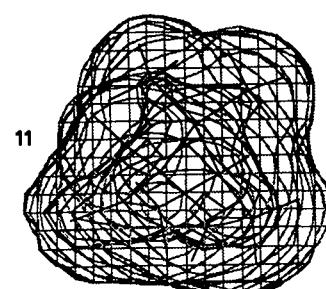


der Kerne, nur ungenau in Modell **9** zu sehen ist. Zudem sind weder **8** noch **9** „transportabel“; sie können in den 20 Sekunden, die ein Dia gewöhnlich auf der Leinwand inmitten einer Schnellfeuerpräsentation von neuen Daten eines Vortragenden erscheint, nicht zeichnerisch erfaßt werden.

Die ansteigende (absteigende?) Komplexitätsleiter von Darstellungen endet hier noch nicht. Der Physikochemiker wird die Organiker daran erinnern, daß die Atome nicht im Raum an bestimmten Positionen festgenagelt sind, sondern sich in fast harmonischer Weise um diese Orte herum bewegen. Das Moleköl vibriert, es hat keine statische Struktur. Ein anderer Chemiker wird sagen: „Du hast nur die Positionen der Kerne gezeichnet, aber die Chemie wird von den Elektronen bestimmt. Du solltest die Wahrscheinlichkeit, sie an einem bestimmten Ort im Raum anzutreffen, also die Elektronenverteilung, zeichnen“. So wie es in **10** und **11** versucht wird.



Wir könnten hier fortfahren. Die Chemicliteratur tut dies. Wir jedoch halten inne und fragen: Welche der Darstellungen **5** bis **11** ist richtig? Welche *ist* das Moleköl? Nun, alle sind es und keine. Oder – um wieder ernst zu werden – alle sind Modelle, nützliche Darstellungen für bestimmte Zwecke, nicht für alle<sup>[6]</sup>. Manchmal reicht allein der Name „Campher“. Manchmal genügt die Summenformel C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O. Oft wird die Struktur gewünscht und **5** oder **7** reichen aus. Manchmal braucht man **8** oder **9** oder sogar **10** oder **11**<sup>[7]</sup>.



Der naive Realismus behauptet, daß chemische Formeln der Wirklichkeit ähneln: Das stimmt. Es ist möglich, Bilder von Benzolringen mit physikalischen Methoden zu erhalten. Manchmal sehen diese wie die Benzolringe des Chemikers aus (**2**). Manchmal nicht. Der Wissenschaftler, der glaubt, daß jetzt endlich mit dem Rastertunnelmikroskop (STM) die Atome in den Molekülen sichtbar werden, ist schockiert beim Anblick eines STM-Bildes von Graphit<sup>[8]</sup>. Die eine

Hälften der Atome des hexagonalen Gitters ist im Bild hervorgehoben, die andere Hälften nicht. Das hat gute Gründe. Sehen und Glauben stehen in komplexer Beziehung zueinander. Die Benzolringe des Chemikers sind grobe Annäherungen. Sie beschreiben das dargestellte molekulare Objekt wie eine Metapher.

Sehen wir uns die *typischen* Präsentationen (in Abb. 1 und 2) an, die eines Polygons (5) oder seiner dreidimensionalen Idealisierung (7). Was aber *sind* diese merkwürdigen Konstruktionen, diese Zeichnungen, die die Seiten der chemischen Zeitschriften füllen? Wir stellen diese Frage jetzt aus dem Blickwinkel eines Künstlers oder Zeichners. Sie sind keine isometrischen Projektionen, sicherlich auch keine Photographien. Dennoch sind sie deutliche Versuche, ein dreidimensionales Objekt zweidimensional zu zeichnen, um seinen Aufbau den Lesern klarzumachen.

Die Hinweise auf die Dreidimensionalität in diesen Zeichnungen sind minimal. Einige sind konventionell: Hier und da – ein Beispiel bietet 7 – ist eine Linie unterbrochen, um anzudeuten, daß ein Teil der Struktur vor einem anderen liegt (siehe auch 12 und 13). Dies ist keine moderne Erfin-



12



13

dung, etwas, was man an einer Kunsthochschule lernen müßte. Abbildung 3 zeigt ein Höhlenbild aus Lascaux<sup>[9]</sup>. Man beachte die Darstellung der Beine des Bisons und wie sie in den Körper übergehen. Schlaue Chemiker sollten heute imstande sein, das zu schaffen, was Höhlenmenschen vor 15 000 Jahren konnten, nicht wahr. Viel zu oft denken sie jedoch gar nicht daran.



Abb. 3. Zwei Bisons aus der Höhle von Lascaux. Aus J. Vouvé, J. Brunet, P. Vidal, J. Marsal: *Lascaux en Périgord Noir*, Pierre Fanlac, Périgueux 1982, S. 31. Reproduziert mit freundlicher Genehmigung des Verlags.

In den Zeichnungen der Abbildung 2 sind Keile und gestrichelte Linien zu sehen. Dieses sind Teile eines einfachen visuellen Codes: Eine durchgezogene Linie liegt in der Papierebene, ein Keil davor und eine gestrichelte Linie dahinter<sup>[\*]</sup>. In 14 werden also mehrere Ansichten des tetraedri-

schen Moleküls CH<sub>4</sub> gezeigt, die alle für Chemiker leicht erkennbar sind (seid geduldig, Kollegen, stellt Euch vor, Eurem Schwiegervater von Eurem Beruf zu erzählen ...).

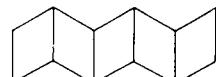


14

Dieses Zeichensystem mag für manche Leute ausreichen, um die Strukturen aus dem Papier zu locken, aber die neuronalen Netzwerke, die eine Darstellung kontrollieren, sind lebenslang eingeprägt, wenn man (mit Händen und nicht in einem Computer) beim Betrachten eines Bildes ein Kugel-Stab-Modell handhabt.

Ein Blick auf ein komplizierteres Molekül in Abbildung 2 zeigt, daß die Konvention mit Keil und gestrichelter Linie nicht konsequent durchgeholt wird. Die meisten Verbindungen haben mehr als eine interessierende Ebene. Was hinter einer ist, kann vor einer noch anderen liegen. So wird diese Konvention fast immer unsystematisch angewendet, so daß der Autor oder Vortragende die Ebene hervorhebt, die er oder sie für wichtig hält. Das Ergebnis ist eine kubistische Perspektive, nach Art einer Photocollage von Hockney<sup>[10]</sup>. Das Molekül wird sicherlich gesehen, aber vielleicht nicht so, wie der Wissenschaftler (in einem dogmatischen Moment) glaubt. Es ist so dargestellt, wie er es sehen will, und es überlagert eine menschliche Unlogik eine ebenso menschliche Logik.

Diese Darstellungen schweben seltsam frei im Raum. Man sucht umsonst nach einem Bezugsrahmen, einem Stuhl oder einer Figur zur Orientierung. Der wird nicht gegeben. Der Leser muß die Dreidimensionalität ohne viel Hilfe decodieren. So schwer ist das nicht – wir haben einen angeborenen Trieb, die Dinge dreidimensional zu sehen. Sehen Sie selbst, wie schwer es ist, 15, ein Muster verbundener Rhomben, flach zu sehen<sup>[11a]</sup>.



15

Wir möchten jetzt aus dem didaktischen Monolog herauskommen. Der hypothetische Nicht-Chemiker, falls er oder sie gut aufgepaßt hat, verfügt jetzt über das Wissen (die Vorurteile?) eines Chemikers über Strukturen. Wir können jetzt gemeinsam fortfahren.

Die Frage bleibt: Was stellen diese chemischen Strukturen dar? Wie werden sie gezeichnet und gelesen? *Philostratus* erzählt die sehr mythologisierte Geschichte von *Apollonius von Tyana*, einem Pythagoräer, der etwa zur Zeit Christi lebte. In einem Dialog mit einem Schüler erklärt *Apollonius*, was ein Bild ist. Es wird gemalt, um Ähnlichkeit zu erreichen, um zu imitieren. Aber was ist mit Wolken am Himmel, die von uns als Pferde oder Kühe gesehen werden? Sind das auch Imitationen? *Apollonius* und sein Schüler stimmen darin überein, daß dieses nur zufällige Formen sind, die von uns interpretiert werden und denen wir Bedeutung verleihen. Er fährt fort: „Aber bedeutet dies nicht, daß die Kunst der Imitation nicht eine doppelte ist? Ein Aspekt ist der Einsatz von Händen und Geist bei der Herstellung von Imitationen,

[\*] Anmerkung der Redaktion: Statt der gestrichelten Linie (---) verwenden wir in der Regel mehrere kurze senkrechte Striche, die „Flohleiter“ (|||).

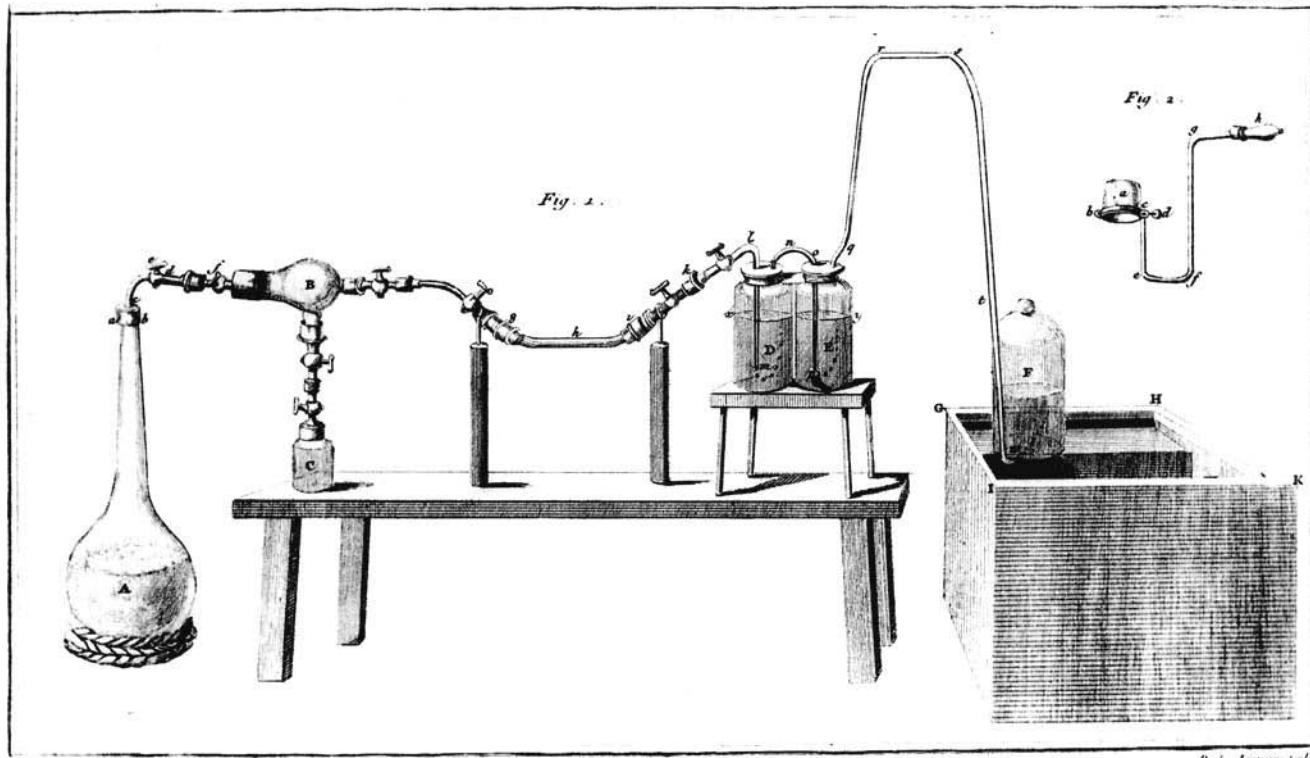


Abb. 4. Tafel X aus A. Lavoisiers klassischer „Traité Elementaire de Chimie“ (Cuchet, Paris 1789). Die Zeichnung stammt von Mme. Lavoisier.

ein anderer Aspekt ist die Ähnlichkeit, die im Geist allein produziert wird ... Ich sollte sagen, daß diejenigen, die ein Gemälde oder eine Zeichnung betrachten, die imitierende Begabung haben müssen und daß niemand die gemalten Pferde oder Kühe verstehen könnte, wenn er nicht wüßte, wie sie aussehen“<sup>[11b]</sup>.

Wissen ist kein unproblematisches Konzept. Wie entfaltet sich eine dreidimensionale Struktur in ihrer ganzen Größe und Schönheit im Kopf eines Chemikers? Wie wir schon sagten, direkte Bilder, wie sie von modernen Techniken wie der Rastertunnelmikroskopie oder der Elektronenmikroskopie erzeugt werden (und diese sind bei genauerem Hinsehen gar nicht so „direkt“) sind selten. Indirekte Bilder („sekundäres Wissen“) wie sie durch Röntgenkristallographie, Mikrowellenspektroskopie oder Elektronenbeugungsanalyse erhalten werden, sind nur Spezialisten zugänglich. Für die meisten von uns steckt das wirkliche, physische Hantieren mit Modellen den Rahmen – die Analogie zum Erkennen der Pferde und Kühe des *Apollonius*; oder das Betrachten vieler Molekülbilder, die andere gezeichnet haben, wobei die Konventionen der Chemiker aufgenommen werden. Vieles ist wie in der Kunst, wir werden später darauf zurückkommen.

### 3. Geschichte, Medien

Wie entwickelten sich die Seh- und Zeichengewohnheiten des Chemikers? Man kann den Beginn der Chemie fast beliebig festsetzen, wir starten bei *Lavoisier*. Zu seiner Zeit, am Ende des 18. Jahrhunderts, gab es keine chemischen Strukturen vom Typ 5 bis 11. Das Konzept der Elemente nahm gerade Gestalt an; die Symbole für diese Elemente waren noch nicht codiert. Die Ergebnisse chemischer Experimente

konnten perfekt durch Worte und – besonders nach *Lavoisier* – durch Zahlen beschrieben werden.

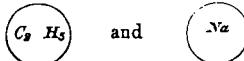
Illustrationen waren jedoch auch im Werk *Lavoisiers* von Bedeutung. Oft handelte es sich dabei um Zeichnungen seiner Ausrüstung, z. B. Glas- und Metallbehälter, Eichmaße, Barometer, alle hervorragend genau wiedergegeben. In Abbildung 4 ist eine Tafel aus *Lavoisiers* klassischem „Traité Elementaire de Chimie“ von 1789 gezeigt<sup>[12a]</sup>.

Das Gefällige verdanken diese Zeichnungen hauptsächlich ihrer Schöpferin Mme. *Lavoisier*, Marie Anne Pierrette Paulze. Ihre Originalentwürfe und ihre Korrekturen der Stiche sind erhalten geblieben. Mme. *Lavoisier* war eine anerkannte Künstlerin und Schülerin *Davids*<sup>[12b]</sup>.

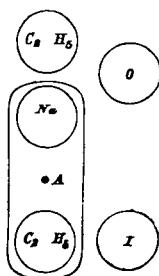
Die Medien, die der wissenschaftlichen Kommunikation der damaligen Zeit zur Verfügung standen, waren eingeschränkt. In Vorlesungen waren es Stimme, Vorführungen, Tafel und Kreide. Die Lichtverhältnisse waren mangelhaft. Für gedruckte Präsentationen standen neben dem normalen Schriftsatz auch Holzschnitte und Stiche, hauptsächlich Kupferstiche, zur Verfügung.

Wann wurde es wichtig, dreidimensionale Informationen weiterzugeben? Um die Mitte des 19. Jahrhunderts mußte die Verknüpfung von Atomen dargestellt werden. Abbildung 5 zeigt eine Seite aus einer wichtigen Publikation von A. W. Williamson aus dem Jahre 1852<sup>[13]</sup>. Man beachte die wahrscheinlich gestochene Illustration und die Art und Weise, wie die damaligen Chemiker innerhalb der Zeilen eines gedruckten Textes zu zeigen versuchten, daß in Ethanol eine C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>-Gruppe und ein H-Atom an ein O-Atom gebunden sind. Wir sehen hier den Beginn des Spannungsverhältnisses zwischen Medium und Inhalt. Der Inhalt ist insofern faszinierend, als er die Anstrengung zeigt, der Molekülfomel gleichzeitig eine Struktur zu geben und sie ihr vorzuenthalten.

The reaction is easily understood by the following diagram, in which the atoms



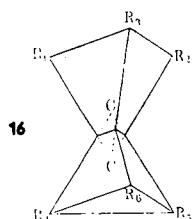
are supposed to be capable of changing places by turning round upon the central point A.



It is clear that we thus get  $C_2H_5O$  and  $NaI$ . The circles are merely used to separate off the atoms or units of comparison. To express the corresponding decomposition of iodide of ethyle by hydrate of potash, forming alcohol, we should replace the ethyle of the sodium-compound by hydrogen, and the same change of place between sodium and ethyle forms  $C_2H_5O$  (alcohol) and  $NaI$ .

Abb. 5. Ein Auszug aus einem Artikel von A. W. Williamson, („On Etherification“) *Q. J. Chem. Soc. London*, 4 (1852) 229. Das Original ist zweiseitig.

Durch die Untersuchung der optischen Isomerie gelangte L. Pasteur zu der Ansicht, daß die immer noch unsichtbaren, mikroskopischen Moleküle auf irgendeine Weise dreidimensional und zudem links- oder rechtshändig sein müssen<sup>[14]</sup>. Rückblickend scheint es fast unglaublich, daß es ein weiteres Vierteljahrhundert dauerte, bis ein korrektes Modell Gestalt annahm. Im Jahre 1874 fanden J. H. van't Hoff und J. A. Le Bel das tetraedrische Kohlenstoffatom<sup>[15]</sup>. 16 zeigt eine Originalzeichnung von van't Hoff.



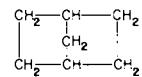
Je ein Kohlenstoffatom liegt in der Mitte der beiden Tetraeder. van't Hoff kam auf dieses Modell etwa 40 Jahre bevor man die räumliche Anordnung von Atomen in einem Molekül auch nur indirekt „sehen“ konnte. N. J. Turro hat in einem klugen Aufsatz, der sich zum Teil mit ähnlichen Themen wie dieses hier beschäftigte, das Konzept des tetraedrischen Kohlenstoffatoms einen „Triumph des topologischen Denkens“ genannt<sup>[16]</sup>.

Das zunehmende Vertrauen in Molekülformeln geht auf eine andere zentrale Figur des 19. Jahrhunderts, Kekulé, zurück. Als Jugendlicher hatte Kekulé zwischen zwei Berufen geschwankt, dem des Architekten und dem des Chemikers. Sein ausgeprägter Hang zur Architektur zeigt sich in seinen routinierten Konstruktionen von Molekülmodellen, die er in seinen Vorlesungen verwendete. Er projizierte die Modelle auf Tafeln und benutzte die Projektionen als graphische Formeln in seinen Publikationen.

Durch die Arbeiten von Kekulé, van't Hoff und vielen anderen entwickelte sich schrittweise die Strukturtheorie der Organischen Chemie und um 1890, vor einhundert Jahren, war klar, daß man eine Möglichkeit finden mußte, quasidreidimensionale Zeichnungen des Typs 7 zu drucken.

Auf der Tafel klappte das problemlos, aber die Drucktechniken waren noch nicht so weit, jedenfalls nicht zu Preisen, die die weite Verbreitung einer wissenschaftlichen Zeitschrift erlaubt hätten. Die Photographic existierte zwar schon länger, hatte aber noch nicht in den routinemäßigen Druckprozeß Einzug gehalten. Sie hat übrigens bis heute keine Bedeutung für die Vermittlung chemischer Strukturen. Wir kommen darauf später zurück, um die Frage zu klären, was man mit diesen Strukturzeichnungen vermitteln will.

Vor hundert Jahren war der Stich noch immer am wichtigsten beim Druck chemischer Formeln. Gewinkelte Linien waren teuer. Wenn eine Zeitschrift die Strukturformel von Norbornan,  $C_7H_{12}$ , dem Kohlenwasserstoffgerüst des Camphers, setzen wollte, so wurde eher 17 als 18 gewählt. Das war nicht nur 1890 so, sondern dauerte bis 1950, auch wenn der Stich durch Photogravur ersetzt wurde.



17



18

Die Politik und Praxis von Zeitschriften, ihre ökonomischen Grenzen und die verfügbaren Technologien bestimmen nicht nur das, was gedruckt wird, sondern auch unser Denken über Moleküle. Seit 1874 wußte jeder (in der Chemie), daß das Kohlenstoffatom „tetraedrisch“ ist, daß seine vier Bindungen zu den Ecken des Tetraeders zeigen. Molekülmodelle standen zur Verfügung oder konnten relativ leicht gebaut werden. Wir vermuten trotzdem, daß das Bild oder die Vorstellung, die ein typischer Chemiker um 1925 von Norbornan im Kopf hatte, 17 und nicht 18 glich. Der Chemiker wird von dem, was er in Zeitschriften und Lehrbüchern sieht, konditioniert – von Bildern, die ihn anregen, eine Verbindung zu synthetisieren, z. B. das unrealistische Bild 17<sup>[17]</sup>. Und doch gelang es G. Komppa mit diesem Bild im Kopf, Norbornan zu synthetisieren<sup>[18]</sup>!

Vielleicht unterscheidet sich dies alles nicht so sehr von der Art, wie wir in unserem Leben an die Liebe herangehen, ausgestattet mit einem partiell zuverlässigen Satz von Bildern aus Romanen und Filmen.

#### 4. Die chemische Darstellung als Sprache

Viele, wenn nicht alle Wissenschaftler benutzen Bildersymbolik, um Probleme zu lösen, Informationen zu sortieren und zu organisieren, Analogien zu finden, ja und schlicht zu denken<sup>[19, 20]</sup>. Aber Chemiker unterscheiden sich von anderen Wissenschaftlern (nicht von Architekten) dadurch, daß sie eine Bildersprache haben, die Formeln.

Eine chemische Formel gleicht einem Wort. Sie soll die chemische Spezies, für die sie steht, genau bezeichnen. Chemische Formeln verkörpern das uralte Dictum (was die Lehre betrifft, kann man bis zu dem tschechischen Theologen und Pädagogen Comenius in die Renaissance zurückge-

hen): „Ein Ding, ein Wort“<sup>[21]</sup>. Tatsächlich ist die chemische Systematik darauf bedacht, mehrdeutige Situationen zu vermeiden; durch unsere Nomenklatur-Systeme kann jeder vorstellbare Typ von Isomer eindeutig beschrieben werden.

Ein erstes Problem ist schnell gelöst. Wenn wir ein bekanntes Objekt der Außenwelt benennen wollen, so projizieren wir unsere persönliche Erfahrung in die Identifizierung. Wenn ich „Hund“ sage, so mache ich mir das flüchtige geistige Bild eines behaarten und temperamentvollen Vierbeiners, der mit dem Schwanz wedelt oder die Zähne fletscht, irgendetwas zwischen Freund und Bedrohung<sup>[22]</sup>. Die Trivialnamen von Chemikalien, die wir oft schon seit Jahrhunderten kennen, sind nichts anderes, auch wenn sie mit überholten Vorstellungen angefüllt sind, z. B. Schwefelsäure, Pottasche, Albumin, Stickstoff, ...

Das bringt uns zu einem zweiten, ernsteren Problem. Die Chemie ist eine reife Wissenschaft; sie hat die Gewohnheit, nicht mehr als eine phänomenologische Beschreibung von Eigenschaften auf makroskopischer Ebene zu liefern, zum größten Teil hinter sich gelassen. Die phänomenologische Beschreibung beruhte häufig auf sinnlichen Wahrnehmungen, von denen passende Bezeichnungen abgeleitet wurden, z. B. die Bezeichnung „Pottasche“, weil die Verbindung (Kaliumcarbonat) tatsächlich zuerst in Pottasche – dem durch Auslaugen der Pflanzenasche, Abdampfen der Lauge zur Trockne und Glühen erhaltenen Rückstand – gefunden wurde.

Die Chemie ist eine mikroskopische Wissenschaft geworden. Heutzutage gehen Erklärungen routinemäßig und paradigmatisch vom Mikroskopischen zum Beobachtbaren: von der Elektronenverteilung in einem Farbstoffmolekül bis zu seiner Farbe; von der genauen Form eines Moleküls und seines umgebenden elektrostatischen Potentials bis zu seiner pharmakologischen Aktivität; von Bindungsenergien bis zur Zugfestigkeit von Kevlar.

Dieser fruchtbare Charakterzug der chemischen Wissenschaften wurde schon zu Zeiten der Aufklärung bemerkt. Der Eintrag unter „Chemie“ in der Enzyklopädie von *Diderot* und *D'Alembert* streicht heraus, daß Chemiker (aber nicht die „Newtonischen“ Physiker der damaligen Zeit, die alles mit zentralen Kräften auf Materiepunkte erklärten) unsichtbare und unberührbare Einheiten oder Qualitäten postulierten, um ihre Beobachtungen zu erklären, und daß die Kleinheit ihrer Partikel sie dazu zwinge. Wir stehen immer noch unter ähnlichen Zwängen, obwohl „Bilder“ einiger Moleküle und Atome seit kurzem verfügbar sind. Tatsächlich kennen wir heute unsere Bausteine, die Moleküle, viel besser. Trotzdem bleibt die große Distanz zwischen dem molekularen Maßstab und der makroskopischen Welt der Sinne bestehen. Wir müssen immer noch Moleküle darstellen, Chemiker genauso wie andere Leute. Wir tendieren dazu, Moleküle so darzustellen, als seien sie normale Objekte des täglichen Lebens: Mit einer gewissen Größe, einer Härte oder Weichheit, mit meßbaren Affinitäten zu anderen Atomen oder Elektronen und so weiter. Das ist etwas naiv, unvermeidbar und liebenswert – dem Glauben an Engel in vergangenen Jahrhunderten nicht unähnlich.

Schon im letzten Satz von Abschnitt 3 („Geschichte, Medien“) haben wir auf diesen Punkt aufmerksam gemacht. Die Menschen täuschen sich mit, auf die Realität projizierten, geistigen Konstrukten, die oft für „Realismus“ gehalten werden. In ähnlicher Weise ist die Chemie eine Mischung aus

molekularem „Engineering“, das auf Extrapolation des Makroskopischen in das Mikroskopische basiert, und einer Wissenschaft, die sich direkt mit dem Mikroskopischen beschäftigt. Die Puritaner unter uns möchten das erste loswerden und nur mit Abstraktionen arbeiten wie die Mathematik. Sie tendieren dazu, unser Verständnis der physikalischen Welt mit seiner Entfernung von der alltäglichen Erfahrung zu messen. Obwohl wir großen Respekt vor solch einer Forderung haben, die eine ständige Versuchung für die meisten Wissenschaftler ist, sind wir selbst nicht solche Puristen. Die Belange der Kommunikation und der Lehre sind ein Grund dafür. Ein zweiter und wichtiger Grund ist die zentrale Bedeutung von semi-realistischen Darstellungen für das chemische Denken. Dies ist das zentrale Thema in unserer Diskussion.

Wir haben hier ein faszinierendes philosophisches Dilemma und auch einen Fall von quasi-zirkulärem Denken<sup>[23]</sup>. Die oben genannten Größen – das Ausmaß einer Elektronenwolke in einem Atom, die Elektronegativität des Atoms – können weder aus ersten Prinzipien abgeleitet werden<sup>[24]</sup>, noch sind sie beobachtbar. Diese Archetypen haben sich unter Chemikern langsam, auf induktive Weise aus experimentellen Befunden herausgebildet; und wir versuchen, aus ihnen Konsequenzen für Objekte in der physikalischen Welt zu deduzieren, die sich nur sehr wenig von jenen unterscheiden, die die Basis zur Formulierung dieser Qualitäten bildeten. Dieser Komplex ist eine der größten Hürden für Chemiestudenten. Unsere Disziplin ist eine merkwürdige Mischung aus empirischer Beobachtung und abstraktem Denken. Insofern ähnelt sie der Musik – und unterscheidet sich von der strengen Mathematik. Studenten, die mit deduktiver Logik groß geworden sind, tun sich mit der Chemie schwer!

Es ist wahr, daß chemische Formeln zum beträchtlichen Teil von subjektiver Lebenserfahrung frei sind, freier jedenfalls als Wörter wie „Hund“, „Automobil“ oder „Empfängnisverhütung“. Trotzdem haben chemische Strukturen eine enge Beziehung zu Sinneserfahrungen; im Gegensatz zu den Alltagsworten verfügen sie aber auch über eine wichtige symbolische Komponente.

Wir möchten dieses interessante Paradoxon etwas genauer betrachten. Wie schon *Ferdinand de Saussure* bei seinen fundamentalen Überlegungen feststellte, ist die Wort-Ding-Beziehung eine des Bezeichnenden (Signifikanten) zum Bezeichneten (Signifikat); und ein wichtiger Punkt ist die Zufälligkeit des Bezeichnenden<sup>[25]</sup>. Das Wort „Hund“ (oder „cachorro“ oder „dog“) wurde mehr oder weniger zufällig während der Entwicklung der Sprache ausgewählt. Es hätte auch „snark“ oder „livel“ oder „rop“ im Englischen heißen können! Das Wort „Hund“ hat eine Nische gefunden, nicht zuletzt dank zahlreicher Querverbindungen zu anderen Wörtern im Lexikon (wie etwa „Leine“, „Hundefutter“, „Hündin“ oder „sehendes Auge“). Wir formen ein Wort, weil wir es mit unserer privaten empirischen Erfahrung beladen, und genauso machen wir es mit den Atomen. Tatsächlich ist das Wort eine totale Erfindung. Es hätte auch ganz anders heißen können<sup>[26]</sup>.

Wir merken uns dies und wenden uns folgendem Paradoxon zu: Formeln haben einerseits keine Realität und sollen andererseits für die Realität stehen. Tatsächlich unterscheiden sich chemische Strukturen von Wörtern der normalen Sprache, da sie symbolische und bildhafte Werte verbinden. Nehmen wir z. B. das Molekül Methan, dessen Struktur in 14

gezeichnet ist. Die verschiedenen Strichtypen in **14** bedeuten die Verknüpfung des Kohlenstoffatoms mit den Wasserstoffatomen durch chemische Bindungen (die symbolische Aussage) und zeigen auch, ob die Bindungen aus der Papierebene herausragen oder nach hinten wegstehen (die bildhafte oder geometrische Ebene). Die chemische Formel versucht, mit äußerster graphischer Schlichtheit viel auszusagen (zu „bezeichnen“). Sie will die Verknüpfungen von Atomen genau zeigen – die Nächste-Nachbarn-Beziehungen, die sich aus chemischen Bindungen ergeben – und die Geometrie.

Wir kennen jetzt ein zweites Problem mit chemischen Formeln: Sie sind zwischen *Modellen* und *Symbolen* angesiedelt. Dieser Hybridstatus ist kritisch. Beide Pole verlangen nach gegensätzlichen und manchmal unvereinbaren Bedingungen. Als Modelle sollten chemische Formeln verlässliche und genaue Darstellungen dessen sein, was man „molekulare Realität“ nennen kann (wir werden später auf diesen nützlichen Begriff der kollektiven Psyche von Chemikern zurückkommen). Als Symbole müssen sie größtenteils zufällig sein. Dies wird deutlich, wenn man an das großgeschriebene O, das ein Sauerstoffatom symbolisiert, denkt: Hinter dieser universellen Konvention wird Übertragbarkeit angenommen (ein Sauerstoffatom hier ist ähnlich wie ein Sauerstoffatom dort), die theoretisch gar nicht so leicht zu begründen ist. Ein freies Sauerstoffatom ist von einem anderen freien Sauerstoffatom nicht zu unterscheiden. Aber in einem Molekül unterscheidet sich ein Ketonsauerstoffatom sehr stark von einem Ethersauerstoffatom.

Wörter der Alltagssprache sind mehrdeutig. Man betrachte das Wort „Darstellung“ selbst. Es kann entweder den Akt der Darstellung oder das Ergebnis solch einer geistigen oder physischen Aktion bedeuten. Eine Darstellung kann eine Beschreibung innerhalb eines bestimmten Rahmens sein: Darstellungen sind theoriebeladen. Eine Darstellung wird von der Weltsicht und vom Stil des Darstellenden (Darstellers) beeinflußt; das ist die subjektivere Bedeutung von Darstellung. In einer noch anderen Bedeutung (z. B. für einen Dichter) meint Darstellung eine Art „Erscheinung“, so daß das dargestellte Objekt sichtbar erscheint, obwohl es tatsächlich abwesend ist. Das ist Darstellung als Illusion. Es gibt noch andere Bedeutungen: Chemiker denken häufig sofort an Synthese und Herstellung, wenn sie Darstellung hören. Die in einem Gedicht arrangierten Wortreihen, eigentlich jeder Text, haben viele Bedeutungen. Die Hermeneutik arbeitet aus einem Text auch die tiefere Bedeutung zusätzlich zu den offensichtlichen und banalen heraus<sup>[27]</sup>.

Ist die Welt der Chemie und der chemischen Strukturen eindeutig und nur durch eine Zeichnung, ein Molekül charakterisiert? In gewisser Weise stimmt das, weil die Chemie „ein in die Materie eingeprägtes Zeichen“ ist, wie *J. M. Lehn* einmal schrieb<sup>[28]</sup>. Die Arbeitsvorschrift für Aspirin funktioniert hier genausogut wie in Montevideo und Karaganda. Eine Veröffentlichung, die über die Synthese eines neuen Pharmawirkstoffs berichtet, muß vielleicht übersetzt werden, in einem anderen Sinne aber auch nicht, da sie in der ganzen Welt verstanden wird; sie ist unendlich paraphrasierbar. Chemische Strukturen, chemische Formeln sind die Werkzeuge dieser Sprache.

Die graphische Sprache der Chemie ist jedoch auch mehrdeutig. Deutlicher Beweis dafür sind die vielen verschiedenen Formeln, die auf die einfache Bitte: „Zeichne mir die Struktur des Moleküls auf“ angeboten werden. Man kann argu-

mentieren, daß das Molekül Campher einmal gezeichnet – egal wie – in den Köpfen der Chemiker ist. Wie wir aber etwas später sehen werden, ist der Umgang mit einem Molekül sehr durch unsere Vorstellungen beeinflußt.

Eine chemische Formel ist zugleich eine Metapher, ein Modell (im Sinne eines technischen Diagramms) und ein theoretisches Konstrukt. Eine chemische Formel ist teilweise pure Imagination und teilweise Schlußfolgerung. Sie ist der Versuch, etwas Existierendes durch Symbole darzustellen, genauso wie die Sprache es ermöglicht, über uns selbst und die Welt durch Kombination arbiträrer Äußerungen zu berichten. Diese Ähnlichkeit kann gar nicht genug betont werden. In einem tiefen philosophischen Sinn sind etwas „Säure“ nennen und etwas anderes „rot“ identische geistige Vorgänge. So gleichen auch die Bezeichnungen „Ethanol“ oder „Reserpin“ den Ausdrücken „Rockefeller Center“ oder „Eiffel-Turm“.

„Säure“ und „rot“ sind schlecht definierte, aber sehr nützliche Begriffe für den täglichen Gebrauch. Im Gegensatz dazu sind „Ethanol“ und „Eiffel-Turm“ eindeutig definiert, es handelt sich aber nicht um alltägliche Objekte, sondern um Kulturobjekte im weitesten Sinne.

C. P. Snow betonte in seiner Vorlesung über die „zwei Kulturen“, daß wir zwei Kulturobjekten, z. B. den Romanen von *Jane Austen* einerseits und der Struktur der DNA oder dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik andererseits, den gleichen Status einräumen sollten und daß Werturteile entweder gar nicht gemacht werden oder entsprechend ausfallen sollten.

Wenn „Ethanol“ in einer ähnlichen geistigen Kategorie wie „Eiffel-Turm“ ist, dann entspricht die chemische Formel für Ethanol etwa der Lexikondefinition für „Eiffel-Turm“: eine chemische Formel ist eine präzise Paraphrase der Attribute eines Objektes in halb symbolischer, halb bildlicher Sprache, so daß das Objekt eindeutig identifiziert werden und von anderen Objekten unterschieden werden kann (der Eiffel-Turm von der Madeleine oder dem Centre Pompidou, Ethanol von Ethan oder Essigsäure).

Sprache und chemische Darstellung haben noch andere Ähnlichkeiten. Sie verfügen über invariable Elemente. Viele Wörter und die meisten chemischen Verbindungen sind genau das, nämlich Verbindungen, zusammengesetzt aus Strukturfragmenten. Ein Wort wie „Donaudampfschiffahrtsgesellschaft“ und eine Formel wie  $C_6H_5\text{-CH}_2\text{-CO-OH}$  sind sich sehr ähnlich. In dieser Formel (wie im zusammengesetzten Wort) sind die Strukturelemente (Phenyl, Methylen, Carbonyl, Hydroxy) stabile Elemente: In erster Nähe rung behalten sie ihre grundsätzliche Bedeutung unabhängig von den anderen mit ihnen verbundenen Modulen bei.

Die Chemie ist die Wissenschaft von den Veränderungen, von Transformationen. Jede Wissenschaft beginnt mit Axiomen über die Integrität einiger ihrer Objekte. Der Ingenieur glaubt an die Integrität eines Stahlträgers. Der Zellbiologe glaubt an die Integrität von Chloroplasten oder Mitochondrien: Er oder sie ist überzeugt davon, daß diese Organellen austauschbar sind und die gleiche Rolle in verschiedenen Zellen spielen.

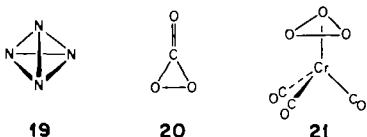
Für die Chemie ist es entscheidend, Veränderung zu verstehen, und zwar dadurch, daß sie zwischen zwei gut definierten Zuständen ablaufen. Die Unveränderlichkeit und ihr Äquivalent, die Übertragbarkeit, sind grundsätzliche Annahmen in der Chemie. Auf jeder Verständnisebene (oder

Komplexitätsebene) ist die Basis unveränderlich: Das beginnt mit Atomen, reicht über die einfachen Strukturfragmente wie die oben genannten ( $C_6H_5, CH_2, CO, OH$ ) bis zu einfachen Molekülen, weiter zu Ketten oder Polymeren, den Helices von Proteinen und Nucleinsäuren und so weiter.

Das Konzept der Übertragbarkeit geht zurück, noch hinter Dalton, bis auf Lavoisiers Revolution: „Rien ne se perd, rien ne se crée“ (nichts geht verloren, nicht kommt hinzu). Durch einen Zufall in der Wissenschaftsgeschichte machte Lavoisier durch die Anwendung der Waage die Entdeckung des Gesetzes von der Erhaltung der Masse. Aber die Vorliebe für Sprache, die er von Condillac geerbt hatte, ließ ihn dies Gesetz mit Worten ausdrücken. Lavoisier begründete die moderne Sprache der Chemie in expliziter Analogie zur natürlichen Sprache. Kein Wunder, daß die chemische Formelsprache bis heute eine wichtige allgemeinsprachliche Komponente beibehalten hat.

Es ist möglich, eine formale Beziehung zwischen Chemie und Sprache herzustellen; einen interessanten Schritt in diese Richtung hat schon H. W. Whitlock, Jr. gemacht<sup>[29]</sup>. In der Terminologie von Chomsky ist eine Sprache durch einen Symbolvorrat (Vokabular) definiert, aus dem Verknüpfungen (Satz) durch Produktionen und/oder Transformationen (Regeln zum Verändern) geformt werden können<sup>[30]</sup>. Die Gleichsetzung von Symbolen mit chemischen Elementen oder jenen einfachen Strukturelementen ( $CH_2, CO, OH$ ), die wir oben nannten, und von Produktionen mit chemischen Reaktionen ist offensichtlich. Whitlock zeigte interessanterweise, daß bestimmte Probleme der Organischen Synthese durch Analyse im Kontext der formalen Sprache gelöst werden können<sup>[31]</sup>.

Die Produktivität der Sprache – sei sie eine natürliche oder eine formale – und der Chemie erstreckt sich auf die Dinge, die noch nicht gesagt, geschrieben oder synthetisiert worden sind. Es existieren Regeln; z. B. wissen wir, wie ein Wort, das wir noch nie gehört haben, ausgesprochen wird: Ein „Roor“, „roten“, der „Peut“. Genauso können wir utopische Formeln für (bis jetzt) unbekannte chemische Verbindungen schreiben (z. B. 19–21). Häufig wirkt das als Anregung, ihre Synthese zu probieren.



Diese Strukturen, die ungeduldig ihrer Synthese harren, sehen für Chemiker attraktiv und schockierend zugleich aus, wie neuartige Objekte, die manche für unmöglich hielten. Der erste Blick des Chemikers auf diese Strukturen ähnelt dem ersten Blick auf einen arbeitenden Laserdrucker oder eine Magnetschwebebahn, auf einen Stealth-Bomber oder eine Weltraumstation von der Größe einer Stadt.

Die Analogie von Sprache und Chemie ist sehr groß. Der kleine Bereich, wo sie nicht gültig ist, betrifft die Homonyme (Lärche und Lerche oder Fest und fest). Sie kommen in der Chemie nicht oder nur selten vor: „periodic table“ und „periodic acid“ z. B. sehen zwar sehr ähnlich aus, können aber durch Kontext und Aussprache leicht auseinander gehalten werden.

Beide Sprachen, die natürliche und die chemische, durchliefen eine Bedeutungsevolution, von sogenanntem Non-sense bis zu hoch signifikanten Aussagen. Obwohl das „Jabberwocky“-Gedicht von Lewis Carroll nicht aus wohlbekannten („domestizierten“) Wörtern aufgebaut ist und stattdessen neue („wilde“) Wörter erfindet, so macht es doch Sinn aufgrund seiner tadellosen Syntax, die die Imagination des Lesers durch Wortspiele umschmeichelt und einigen Wörtern durch Assoziationen Bedeutung verleiht. In der Chemie gibt es ähnliche wilde Spezies (Dehydrobenzol, Tetrahedran, 19–21 etc.) neben den gewöhnlichen Verbindungen, die man in Flaschen aufbewahren kann. Tatsächlich sind die meisten Moleküle, wilde Träume oder nicht, erfunden oder synthetisiert. Sie sind Geschöpfe der Chemiker und existierten vorher nicht in der Welt.

Die chemische Darstellung ist der natürlichen Sprache auch dann ähnlich, wenn man die Umwandlungen (chemischen Reaktionen) betrachtet. In einem wichtigen Sinn ist die Chemie die Untersuchung symbolischer Transformationen, angewendet auf graphische Objekte, die Formeln. In diesem Zusammenhang gibt es eine 1:1-Beziehung zwischen den chemischen Verbindungen und ihren Formeln. In ähnlicher Weise kann die Umwandlung einer Verbindung in eine andere eindeutig spezifiziert werden. Wenn man sich chemische Verbindungen als Knoten in einem multidimensionalen Gitter vorstellt, dann sind die verbindenden Linien in solch einem Netzwerk die Umwandlungen. Die Chemie hat daher zwei Facetten, eine strukturelle, wenn der Blick starr auf die Punkte des Gitters gerichtet ist, und eine dynamische, wenn man die Umwandlungen entlang der Verbindungslien des Netzwerkes betrachtet. Strenge Regeln gelten für das Umschreiben von Formeln, um Umwandlungen auszudrücken; diese sind den Regeln der Komposition von Musik nicht unähnlich.

Chemische Umwandlungen sind den Handlungssätzen der natürlichen Sprache analog. Die Parallele läßt sich mit 22 beschreiben:

Subjekt Substrat	transitives Verb Reagens	Objekt Produkt	22
---------------------	-----------------------------	-------------------	----

Beispiele sind „Hans zersägt einen Baum“ und „der Aldehyd wird durch Natriumborhydrid zu einem Alkohol reduziert“. Genauso wie in einfache Handlungssätze Angaben über Zeit, Ort, Quantität und Qualität eingebaut werden können, so kann in chemischen Gleichungen das Lösungsmittel, die Reaktionstemperatur, die Reaktionszeit, die Ausbeute etc. spezifiziert werden.

Diese Parallele ist aber in vielerlei Hinsicht zu allgemein. Die Produktmoleküle in einer chemischen Reaktion enthalten dieselben Atome wie die Reaktanten, aber ihre Verknüpfung ist unterschiedlich. Die Beziehung von Subjekt zu Objekt ist anders – außer in einer Satzkategorie, in der pronomiale oder reflexive Verben enthalten sind. Ein Satz wie „Klärchen wäscht sich“ oder „Hans bewundert sich im Spiegel“ ähneln in gewisser Weise den Aussagen über chemische Umwandlungen. Es ist kurios, daß chemische Gleichungen von psychologischen Aussagen gar nicht so verschieden sind.

Der 1809 erschienene Roman „Die Wahlverwandtschaften“ von Goethe erhält von einer schon damals überholten Theorie der chemischen Kombination dichterische Kraft<sup>[32]</sup>.

Die Handlungen und Gefühle der Charaktere dieses Romans verkörpern (und erproben), was manche Leute über das Verhalten von Molekülen dachten. Man wünscht, auch heute auf einen ähnlich inspirierten literarischen Text hinweisen zu können. Am nächsten kommt dieser Vorstellung *Primo Levis „Das Periodische System“*. Trotzdem ist es interessant, über die tiefe morphologische Ähnlichkeit von Chemie und, wenn schon nicht Leben, so doch Sprache nachzudenken.

Die Parallele zwischen chemischen Formeln und der Alltagssprache mag vorhin eher künstlich und etwas gewollt erschienen sein. Wir können sie trotzdem mit einer Anekdote verteidigen. Einer von uns besuchte vor kurzem das Büro von *C. Tamm* an der Universität Basel. Die Konversation wandte sich der Struktur eines komplexen Naturstoffs zu, die an der Tafel geschrieben stand und die erst vor kurzem in *Tamms* Laboratorium aufgeklärt worden war. So nebenbei sagte einer von uns: „Ich betrachte diese Struktur beginnend mit dem sechsgliedrigen Ring, über die Spiroverknüpfung mit dem fünfgliedrigen Ring etc. ....“. Professor *Tamm* stimmte zu. Wir entdeckten, daß wir dieses Molekül auf die gleiche Weise betrachteten. Wir beide „lasen“ dieses komplexe Netzwerk (Bindungen und Atome) in praktisch gleicher Weise – offensichtlich ein Ergebnis unserer Erziehung.

Wir behaupten also, daß chemische Formeln in konventioneller Folge gelesen werden. Tatsächlich lehren uns neueste Ergebnisse der Neuropsychologie, daß mentale Muster nicht als Ganzes auf einmal entstehen. Sie werden schrittweise aufgebaut, ein Teil nach dem anderen. Die Teile werden dann in etwa der gleichen Reihenfolge visualisiert, in der sie typischerweise gezeichnet werden. Für diese zwei Aufgabentypen (Abfragen von gespeicherten Formen und Zusammenfügen der Formen zu einem geistigen Bild) spielen die zwei Hirnhemisphären verschiedene Rollen<sup>[33, 34]</sup>.

Der entgegengesetzte Blickwinkel ist allerdings eine notwendige Ergänzung. *Verbrugge* stellte fest, als er das Beispiel von *Kekulé*s architektonischen Formeln, seine Ringstruktur für Benzol und die Oszillation von Benzol zwischen zwei äquivalenten Ringsformen diskutierte: „Wissenschaftliches Verständnis entwickelt sich nur, wenn wir bereit sind, unsere Darstellungssysteme grundsätzlich umzustellen“<sup>[35]</sup>.

Wir weisen darauf hin, daß der kombinierte Druck durch 1) das Lernen der chemischen Nomenklatur, 2) die unablässigen Konfrontationen mit Formeln in Seminaren, dem Lesen von Publikationen, dem Hantieren mit Molekülmodellen und 3) die erforderliche Kommunikation mit anderen Chemikern diese größtenteils unbewußte und stereotype kollektive Sichtweise hervorbrachte. Wahrscheinlich handeln Kunsthistoriker ähnlich; es ist möglich, sogar wahrscheinlich, daß zwei Spezialisten der Quattrocento-Malerei ein Bild in ganz ähnlicher Weise analysieren.

Wir wollen jetzt den entgegengesetzten Standpunkt betrachten. Weil die Perzeption von chemischen Formeln so stereotyp ist, kann die Fähigkeit, eine Struktur neu zu sehen, sehr fruchtbar sein. Die Chemie teilt mit der Poesie den Begriff der Eleganz. Es werden neue Beziehungen zwischen den Objekten entdeckt. Sehr oft liegt die Eleganz eines Schlüsselschrittes in einer Serie von chemischen Umwandlungen im Erkennen eines nicht offensichtlichen Zusammenhangs zwischen den Teilen eines molekularen Objektes. Allgemeiner gesagt, es würde sich für einen Studenten der Psychologie der Erfindungen lohnen, einen genauen Blick auf die Sequenz von Molekülen zu werfen, die bei der Synthese von Natur-

stoffen „dargestellt“ und transformiert wurden. Tatsächlich bieten ausgefeilte Synthesen komplizierter chemischer Strukturen faszinierende Einblicke in kreative Prozesse. In den Händen eines Meisters, wie *R. B. Woodward* einer war, erfahren Strukturfragmente bei der Synthese etwas, was für den Ausführenden und den Leser genuine *Gestaltveränderungen* sind. Wenn man die Woodward-Synthesen studiert, kann man ihn fast beim geistigen Jonglieren mit dem Molekül und beim Betrachten einiger seiner Elemente aus neuen Blickwinkeln sehen. Die Strukturveränderungen im Verlauf einer Woodward-Synthese sind Metaphern der Kreativität<sup>[36]</sup>. Sie benutzen die Bedeutungsvielfalt, die in einer chemischen Struktur liegt. Wir glauben, daß es schwierig sein dürfte, der kreativen Imagination näher zu kommen<sup>[37]</sup>.

Ein letzter Punkt, der von *H. Hopf* angemerkt wurde<sup>[38]</sup>: In der Chemie gibt es auch andere Darstellungen als Formeln und Strukturen – z. B. die verschiedenen Spektren, IR-, NMR-, Photoelektronenspektren, alle anders (das Medium ist die Botschaft; im Deutschen heißt der „plotter“ sogar Schreiber), und ihre Musik (die Töne, Obertöne und Harmonie der Spektroskopien) verrät unglaubliche, dynamische Details, die weit über die statische Struktur hinausreichen. Einige (NOESY-NMR-Plots) beanspruchen für sich, den gleichen Informationsgehalt wie Konformationszeichnungen zu vermitteln. Es gibt dort draußen eine wundersame Vielfalt von Darstellungsmetaphorik; Künstler/Wissenschaftler, die in so vielen Disziplinen arbeiten, um das Wesen des Wirklichen einzufangen.

## 5. Aber ist das Kunst ...

Kunst und die Reaktion auf sie war noch nie leicht zu definieren. Es gibt so viele Formen „gefälliger“ menschlicher Erfindungen, so viele konstruierte Objekte oder Muster, die Gefühlsreaktionen hervorrufen. Im Angesicht der Komplexität und ehrwürdigen Geschichte der Ästhetik wollen wir dennoch eine Definition wagen<sup>[39, 40]</sup>. Während sie in allen ihren Einzelheiten angezweifelt werden kann, so berührt sie doch die meisten Eigenschaften dessen, was wir Kunst nennen. Dann werden wir die Darstellungen in der Chemie gemessen an dieser Definition betrachten.

Wir wollen jene symbolischen Handlungen oder menschlichen Schöpfungen als Kunst bezeichnen, die versuchen, aus dem komplexen Bereich der Natur oder der Emotionen, Aspekte der Essenz dieser Welten zu extrahieren. Die Kunst will durch Symbole Informationen vermitteln und/oder ein Gefühl provozieren.

Die wichtigsten Komponenten eines ästhetischen Systems sind a) der kreativ Schaffende – Maler, Komponist, Photograph, Schriftsteller, Tänzer, b) das Publikum, sowohl das im Kopf des Künstlers als auch das wirkliche, die Betrachter, c) der Symbolsatz, durch den Kommunikation stattfindet – die Wasserfarbe, Schallwellen und sich mit der Zeit entwickelnde Bilder, ein Text, d) der Akt der Kommunikation selbst – mit einem Publikum, das anwesend (einen Tanz betrachtend, einer Kantate zuhörend) oder abwesend (einen Roman lesend) ist.

Wenn diese Definition zu rational, zu „wissenschaftlich“ klingt, ohne die Gefühle zu berücksichtigen, die anzusprechen wir von der Kunst erwarten, sei's drum. *Nelson Goodman* meint, daß „die Emotionen während der ästhetischen

Erfahrung kognitiv funktionieren“, daß Fühlen also Wissen bedeutet. Er prüft des weiteren die üblichen Attribute der Kunst (daß die Ästhetik nicht praxisbezogen ist, daß sie sofortige Befriedigung verspricht, daß in der Kunst allein durch Befragung eine Befriedigung erreicht werden kann ... all das sind Attribute der Kunst im Gegensatz zu denen, die der Wissenschaft zugeordnet werden), und er findet sie nicht. Er schreibt „... der Unterschied zwischen Kunst und Wissenschaft ist nicht der zwischen Gefühl und Realität, Intuition und Schlußfolgerung, Freude und Überlegung, Synthese und Analyse, Empfindung und Reflexion, Gegenständlichkeit und Abstraktion, Leidenschaft und Tat, Mittelbarkeit und Unmittelbarkeit, Wahrheit und Schönheit, sondern ein Unterschied in der Dominanz von gewissen spezifischen Charakteristika von Symbolen“<sup>[41]</sup>.

Um zur Frage zurückzukommen, die diesem Abschnitt überschrieben ist: Sind chemische Strukturen Kunst? Es scheint klar, daß sie alle Komponenten des „ästhetischen Systems“ aufweisen. Strukturformeln sind die von einem (oder mehreren) Chemikern geschaffenen Symbole, durch die Information an andere Chemiker weitergegeben werden soll. Die Zeichnung der Campherstruktur ist sicherlich ein symbolischer Akt, die Übermittlung von etwas Essentiallem, der Anordnung der Atome dieses Moleküls im Raum. Einige mögen darin nur eine Skizze sehen, eine informationsreduzierende List von jemandem, der nicht so gut rechnen kann oder will, um anderen die so wichtige Elektronendichte um die Kerne herum zu zeigen. Elektronendichte sei das wirkliche Molekül, die Strukturformel – nun ja, das ist nur „eine armselige Darstellung“.

Natürlich ist eine einfache Strukturzeichnung mehr als das. Sie ist das geeignete Werkzeug, das richtige Modell. In der Tat ist sie das Extrakt eines Aspektes aus der Essenz einer Komplexität (von etwas so einfaches, wie einem Molekül!). Natürlich übermittelt diese Struktur Information. Und in einigen wenigen Lesern mag die Struktur auch Gefühle ansprechen, ein Verwundern darüber, daß sie synthetisiert werden konnte, Eifersucht auf den Mann oder die Frau, die sie zuerst gemacht hat.

Ist es wichtig, ob die ästhetische Antwort nur in den Köpfen derjenigen erfolgt, die in den chemischen Code eingeweiht sind? Wir glauben das nicht. Um sicher zu sein, muß man die Zeichen der Chemiker verstehen lernen. Aber das ist gar nicht so schwer. Die Reaktionen der meisten Leute auf abstrakte Kunst oder die von primitiven Stämmen auf realistische westliche Kunst waren und sind auch nicht von einem spontanen Verständnis begleitet.

Die chemische Struktur ist ein künstlerisches Konstrukt, weil sie eine Transformation eines Wirklichkeitsmodells (man beachte die zweite, wenn nicht xte Beziehung zur Realität) zum Zwecke der Kommunikation ist. Weder Veröffentlichungen in der Chemie noch Anatomiebücher sind mit vielen Photographien ausgestattet. Einige Photos sind meistens vorhanden. Aber im großen und ganzen enthält ein Photo zu viele Einzelheiten (wir wollen natürlich nicht andeuten, daß eine Photographie ein schlichtes Abbild ist, weit gefehlt ...). Was mitgeteilt werden soll, ist das Wichtigste für den Moment. Man möchte etwas lehren, eine Reaktion provozieren. Zeichnungen mit ihren künstlerisch ausgesuchten Einzelheiten sind für diesen Zweck viel besser geeignet<sup>[42]</sup>.

Die symbolische Natur der chemischen Formel, die Tatsache, daß Chemiker wissen, daß ein Hexagon für einen

Kohlenstoffring steht, der viel viel kleiner ist, das implizite Wissen, daß das Hexagon keine vergrößerte Photographie eines Ringes ist, all diese symbolische Distanz verstärkt die metaphorische Natur des chemischen Diskurses. Strukturen sind nicht das, wofür sie stehen; sie stehen für etwas, was sie nicht sind.

Aber ist das Kunst? Nachdem wir Argumente dafür gesammelt haben, daß chemische Darstellungen, z. B. Strukturformeln, alle Merkmale von Kunst aufweisen, wollen wir jetzt Argumente für das Gegenteil zusammentragen.

Genauso wie es unmöglich ist, den Künstler und sein Publikum zu ignorieren, kann man den Kontext eines Gemäldes oder einer wissenschaftlichen Illustration nicht außer acht lassen. Und besonders chemische Strukturen sind oft wirkliche Teile des Textes. Sie können ihren eigenen künstlerischen Wert und ihre eigene Ausdrucks Kraft haben. Man könnte eine gute Kunstausstellung um sie herum organisieren. Aber ihre Funktion, ihre organisierende Bezugsebene ist der Text.

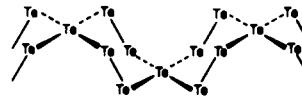
Abbildung 6 zeigt den Anfang einer unserer Publikationen<sup>[43]</sup>. Man beachte die vier kleinen Zeichnungen. Sie

The recent literature contains a number of examples of a square-planar tellurium structural unit which may formally be defined as  $\text{Te}_5^{2-}$  (1). In some cases such as  $\text{Rb}_2\text{Te}_5$ <sup>1</sup> and  $\text{Cs}_2\text{Te}_5$ <sup>2</sup>

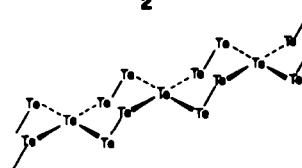


1

the stoichiometry clearly defines the charge on the unit as 2-. In these instances the unit is the basic building block of a one-dimensional anionic chain. In  $\text{Cs}_2\text{Te}_5$ , the  $\text{Te}_5^{2-}$  units are screw axis related (2) while in  $\text{Rb}_2\text{Te}_5$ , the  $\text{Te}_5^{2-}$  units are related by translation (3).



2



3

For most of the other cases in which the  $\text{Te}_5^{2-}$  unit appears, the attribution of a particular charge to the unit is more ambiguous. For instance, on  $\text{K}_2\text{SnTe}_5$ ,<sup>3</sup> the unit again appears embedded in a one-dimensional chain (4) but the  $\text{Te}_5^{2-}$  units alternate



4

with tetrahedral Sn in making up the chain. Formally, at least, the square-planar units could still be considered  $\text{Te}_5^{2-}$  if the tin is Sn(0), but the Te-Sn bond length of 2.74 Å is almost identical with the sum of the tetrahedral covalent radii (2.72 Å) given by Pauling.<sup>4</sup> This suggests a formal oxidation state of 6+ for the Sn and a net charge of 6- on the  $\text{Te}_5^{2-}$  unit.

Abb. 6. Der Anfang einer Arbeit mit dem Titel „Hypervalent Tellurium in One-dimensional Extended Structures Containing  $\text{Te}_5^{2-}$  Units“: J. Bernstein, R. Hoffmann, *Inorg. Chem.* 24 (1985) 4100. Das Original ist dreispalting.

schweben sehr typisch zwischen dem Text (auf Mitte gestellt) und benutzen die Keil-Strich-Notation. Die Strukturen sind mit fettgedruckten Zahlen nummeriert, auf die der Text sich bezieht. Sie sind tatsächlich Teile des Textes und diese Rolle wird noch deutlicher, wenn man bedenkt, daß sich der Text sogar in der Mitte eines Satzes auf sie bezieht (mit Hilfe der fettgedruckten Nummern). In einer Kette (mit 2 in Abb. 6 bezeichnet) sind die Einheiten von fünf Telluratomen über eine sogenannte Schraubenachse miteinander in Beziehung gesetzt, während sie in einer anderen Kette (mit 3 in Abb. 6 bezeichnet) einfach versetzt sind (Translationssymmetrie). All das hätte auch durch Wörter ausgedrückt werden können. Aber es war einfacher, ein Bild zu zeichnen. So wurde eine Struktur geboren.

Tatsächlich sind die Motive der Darstellung hier nicht so einfach. Die Autoren benutzen die Bilder nicht nur, um Raum zu sparen. Sie entwickeln auch Strategien, um die Aufmerksamkeit ihres Publikums zu fesseln. Diese Tellurverbindungen sind nicht auf Anhieb für jeden Chemiker interessant. Die Spezialisierung ist in jedem Fach ein Problem. Die Geometrien von Tellurverbindungen sind schwer zu sehen. In der Wissenschaft gilt wie überall, daß wir uns vor dem fürchten, was wir nicht verstehen, daß uns nicht interessiert, was wir nicht verstehen. Die Autoren benutzten die visuelle Anziehungskraft (und die hohe Dichte an erklärender Kraft) einer Zeichnung, um zu informieren, anzuziehen und zu verführen. Noch ein anderes Motiv: Es ist der Stil eines der beiden Autoren (R. H.), seine Publikationen mit solchen Zeichnungen zu schmücken. Er hat eine Art visueller Signatur geprägt.

Ein anderes Argument gegen den künstlerischen Wert einer chemischen Zeichnung ist, daß sie in *Goodmans* Terminologie – nicht mit Information vollgestopft ist<sup>[44]</sup>. Es kommt nicht auf jeden Strich in der Darstellung an; die Linien könnten eine andere Farbe haben, und das Molekül könnte schnell als solches erkannt werden, auch wenn ein anderer Blickwinkel eingenommen würde. Das unterscheidet sie von einer Radierung von *Goya*, die nach ähnlicher Veränderung eine andere Radierung wäre, ein anderes Kunstwerk oder wenigstens ein anderer „état“<sup>[45]</sup>. Um es anders auszudrücken, die chemische Struktur spricht die inhärente Paraphrasierbarkeit des wissenschaftlichen Gedankengutes an (die Paraphrase als eine der (wenigen) Unterschiede zwischen Kunst und Wissenschaft wurde überzeugend von *G. Stent* vertreten<sup>[46]</sup>). Es handelt sich um dasselbe Molekül, gedacht als dasselbe und wahrgenommen als dasselbe. Was aber, wenn eine leicht unterschiedliche Darstellung in einem ungewöhnlichen Kopf (einem „Querdenker“) ein bislang untersuchtes Experiment provoziert? Das Bild regt den Bildersünder an.

Ein anderer Zugang zum künstlerischen Inhalt von chemischen Zeichnungen liegt in ihrer Beziehung zu den verschiedenen visuellen Kunstgattungen. Wir sehen z. B. eine Ähnlichkeit zwischen den chemischen Strukturen und der – nicht ohne Widerspruch so genannten – primitiven Kunst. Eingeborenenkunst, z. B. die der australischen Aborigines oder der Eskimos, erscheint uns oft sehr schematisch und ohne Perspektive. Das ist unser Problem, da den Eingeborenen der Kultur, die diese Kunst hervorbringt, die Darstellung sehr genau und einfühlsam erscheinen mag. So ähnlich geht es auch mit chemischen Zeichnungen, ihre Perspektive mag ungenügend sein und ihre Darstellung künstlerisch unvollkommen.

men. Aber sie erzählen dem chemischen Leser eine genaue Geschichte. Wie primitive Bilder oder Skulpturen, so verzerrt auch chemische Zeichnungen gewöhnlich dann die Perspektive, wenn dem Betrachter die Klassifikation eines Objektes durch diese Verzerrung erleichtert werden soll. Wenn also die Information, daß jemand sechs Schafe besitzt, wichtig ist, dann werden diese Schafe deutlich und „realistisch“ dargestellt. Eine Gottheit wird durch ihre symbolischen Attribute dargestellt, so daß wir sie nicht mit einer anderen verwechseln.

Die bildliche Darstellung von Campher (siehe Zeichnung 7) ist vereinfacht und verzerrt (vergleiche 9 oder 10), so daß wir das Molekül identifizieren und wiedererkennen können. In der Aivilik-Zeichnung (Abb. 7<sup>[47]</sup>) einer Robbenjagd durch das Eis werden Raum (Blick von oben auf den Schlitten, „Röntgen“-Seitenblick auf den Jäger, das Eis und die Robbe) und Zeit (Annäherung der Robbe, die schon geworfene Harpune) so geordnet, daß dem Betrachter die Jagd in ihrem ganzen Ablauf sichtbar wird.

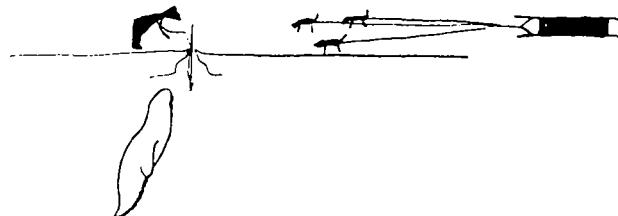


Abb. 7. Eine Aivilik-Zeichnung einer Robbenjagd. Aus E. Carpenter: *Eskimo Realities*, Holt, Rinehart und Winston, New York 1973, S. 177. Reproduziert mit freundlicher Genehmigung des Verlags.

Etwas Ähnliches passiert auch in der Bildersprache der Chemiker. Wenn ein Teil eines Moleküls, eine funktionelle Gruppe wie eine Aldehydgruppe, wichtig ist, wird sie – auch wenn sie hinter einem anderen Molekülteil versteckt liegt – in den Vordergrund geholt, ohne viel Rücksicht auf die Wirklichkeitstreue der Darstellung.

Es gibt noch einen anderen anthropologischen Berührungspunkt. In einigen Kulturen verleiht die Kenntnis des wahren Namens einer Person oder eines Objektes eine gewisse Kraft und schafft eine besondere Verbindung. So ist es auch in der Chemie. Kennt der Chemiker den Namen, d. h. die Struktur einer Verbindung, so besitzt er enorme Macht über das Molekül, dessen Verhalten und Eigenschaften von dieser Struktur bestimmt werden.

*Guy Ourisson* hat in einem hervorragenden Artikel, der sich mit unserem Thema befaßt, die chemische Struktur als Ideogramm oder Pictogramm bezeichnet, ein Symbol, das ein Objekt oder eine Idee direkt darstellt<sup>[7]</sup>. Dieser Bezug wurde auch von *R. Etiemble* vorgeschlagen. Er findet eine Analogie zu chinesischen Zeichen und wahrscheinlich könnte man hier auch die ägyptischen Hieroglyphen nennen. Wie diese Zeichen bei ihren Lesern dringt auch das chemische Zeichen direkt in das Bewußtsein eines Chemikers. Alle Bedeutungen sind dem Bild mitgegeben, und der Chemiker manipuliert es geistig auf die vielfältigste Weise. Die chemische Struktur bezeichnet nicht nur ein Molekül, sondern auch seine physikalischen, chemischen und sogar biologischen Eigenschaften.

Rudolf Hoppe hat einen seiner Übersichtsaufsätze mit stimulierenden Reflexionen über die symbolische Sprache der Chemiker begonnen; seine Zeichnungen sind bewundernswert gewählt – sie weisen hin (mehr als das) auf die Konvergenz des „wilden Denkens“ und der Sprache der Chemie<sup>[48]</sup>.

Chemische Strukturzeichnungen sind auch mit Karikaturen und Comic Strips verwandt. Bei genauerer Betrachtung eines erfolgreichen Cartoons oder einer schematischen Buchillustration findet man, daß ein weites Gefühlsspektrum – Trauer, Wut, Ekstase – häufig mit ein paar Strichen ausgedrückt ist. Man denke an die Bücher von Dr. Seuss, an Jean de Brunhoff's Babar, die Tintin-Bücher von Hergé, Tove Janssons Moomintrolls (siehe Abb. 8<sup>[49]</sup>) oder an die zahlreichen Cartoons von Walt Disney. Und nicht nur die für Kinder.



Abb. 8. Eine Illustration aus: Tove Jansson: *Moominsummer Madness*, Henry Z. Walck, New York 1955, S. 53. Reproduziert mit freundlicher Genehmigung des Verlags.

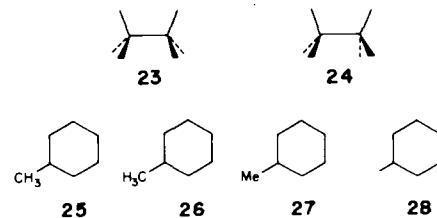
Gombrich diskutiert einsichtsvoll die Wirkungen von Cartoons und meint, daß wir „das Groteske und Vereinfachte teilweise deshalb akzeptieren, weil der Mangel an Ausführlichkeit die Abwesenheit von Widersprüchen garantiert“<sup>[50]</sup>. Betrachten wir ein Kunstwerk, so suchen wir nach Informationen in ihm und unbewußt nach Beziehungen. Nicht das pure Licht, das unser Auge von einem gemalten weißen Punkt aus erreicht, läßt ihn uns als hell erleuchtet erscheinen, sondern seine Unterscheidung von den benachbarten Farbflecken.

Der Akt des Sehens ist eine Zusammenarbeit von Maler und Betrachter, und er ist versöhnend. Wir erschaffen immer das Räumliche in unseren Köpfen, wenn wir eine zweidimensionale Darstellung sehen, und wir extrahieren mehr Information, indem wir die fehlenden Teile unter Ausnutzung unserer Erfahrung ergänzen. Natürlich nur dann, wenn keine widersprüchlichen Aussagen bestehen, keine Zeichen, die uns eines Besseren belehren. Karikaturen oder Cartoons (und wenn diese nicht ernsthaft genug sind, dann Radierungen von Goya oder Picasso) „funktionieren“ dadurch, daß sie die richtige minimale Information zur Verfügung stellen.

Das tun auch die chemischen Strukturen. Chemiker denken sehr tolerant. Sie werden sowohl **23** als auch **24** als Darstellung eines ekliptischen Ethanmoleküls akzeptieren. Sie werden den links unten gebundenen Substituenten am sechsgliedrigen Ring **25** bis **28** als Methylgruppe lesen. Die fehlende Dreidimensionalität, die diese Moleküle erst lebendig macht, wird im Geiste ergänzt, und die schwebende Welt dieser kleinen Symbole wird „geometrisiert“.

In jedem Fall existiert die Zeichnung nicht allein, sondern sie ist ein integraler Bestandteil des Textes. Es ist, als hätten

Chemiker eine neue Sprache erfunden, halb Text, halb Bild, halb Tastsinn, der hinter der Fähigkeit eines Chemikers, ein Molekül aus solch minimaler Information geistig zu rekonstruieren, versteckt liegt. Wir kommen wieder auf die Logik der Sprache zurück. Und auch darauf, den kombinierten Text-Struktur-Komplex als Kunstform zu betrachten.



*Anmerkung bei der letzten Überarbeitung (Juli 1990):* Die Aufmerksamkeit des Lesers sei noch auf zwei neuere Arbeiten gelenkt: Stephen T. Weininger, Worcester Polytechnic Institute, hat in einem wichtigen Vortrags-Essay eine semiotische Perspektive der Chemie dargelegt<sup>[51]</sup>. Pier-Luigi Luisi und Richard M. Thomas, ETH Zürich, präsentierten viele Überlegungen, die unseren ähneln (und viele andere) in einem Beitrag, der sich mit der pictographischen Vermittlung in Chemie und Biologie beschäftigt<sup>[52]</sup>. Zudem gibt es einen sehr schönen Beitrag über die Sprache der Chemiker in zwei kürzlich ins Englische übersetzten Essays von Primo Levi<sup>[53]</sup>.

*Wir verdanken viel den kritischen Kommentaren von Kurt Mislow, Hearne Pardee, Noel Carroll, Vivian Torrence, Gilles-Gaston Granger und Henning Hopf. Wir danken Dennis Underwood, Donald Boyd und Laura Linke für ihre Hilfe, Stephen R. Singer für die Photographien, Jane Jorgensen und Elisabeth Fields für die Zeichnungen und Joyce Barrows für das Tippen des Manuskripts. Dieser Aufsatz ist in Französisch und Englisch und auch sonst in etwas anderer Form in der Zeitschrift Diogène, Paris (Nr. 147, S. 24–54, Juli–September 1989) erschienen.*

Eingegangen am 21. Juli 1989,  
ergänzte Fassung am 2. August 1990 [A 800]  
Übersetzt von Dr. Christiane Koszka, Berlin

- [1] Für eine allgemeine Einführung in Moleküle verweisen wir diesen hypothetischen Zuhörer auf das wunderbare Buch P. W. Atkins: *Molecules*, Scientific American Library, New York 1987; Deutsch: P. W. Atkins: *Moleküle. Die chemischen Bausteine der Natur*, Spektrum der Wissenschaft, Heidelberg 1988.
- [2] Die Geschichte ist komplizierter. Es scheint, daß die unschädliche Form unter physiologischen Bedingungen in eine Mischung von spiegelbildlichen Formen, eine schädliche und eine unschädliche verwandelt wird. Siehe *Chem. Br.* 25 (1989) 259.
- [3] Über die präzise Definition der Molekülstruktur wird in der Chemie noch immer debattiert. Siehe zum Beispiel R. D. Brown, *Chem. Br.* 24 (1988) 770; R. G. Woolley, *J. Am. Chem. Soc.* 100 (1978) 1073 sowie die unten zitierten Artikel von Mislow und Tutto.
- [4] R. Barthes: *L'Empire des Signes*, Skira, Genf 1980; Englisch: R. Barthes: *The Empire of Signs*, Hill and Wang, New York 1982; Deutsch: R. Barthes: *Das Reich der Zeichen*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1981.
- [5] Nicht wirklich. Was wir haben, ist ein menschliches Wesen, das ein Werkzeug steuert, das seinerseits von anderen menschlichen Wesen programmiert wurde und wiederum von noch anderen und ihren Werkzeugen gebaut wurde. Ich bin Dennis Underwood und Don Boyd dankbar für ihre Hilfe beim zeichnen der Strukturen 8–11.
- [6] Für methodologische Diskussionen über den Gebrauch von Modellen in der Chemie siehe C. J. Suckling, K. E. Suckling, C. W. Suckling: *Chemistry Through Models*, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1978; C. Trindle, *Croat. Chim. Acta* 57 (1984) 1231; J. Tomasi, *J. Mol. Struct. (Theochem.)* 179 (1988) 273. Und für die unterschiedlichen Bedeutungen von „Modell“ siehe den amüsanten Kommentar von N. Goodman: *Languages of Art*, 2. Aufl., Hackett, Indianapolis, IN, USA 1976, S. 171.

- [7] Selbstverständlich ist der Gemeinschaft der Chemiker bewußt, daß es mehr als nur eine Sichtweise der Struktur eines Moleküls gibt, wir sagen hier nichts Neues. Siehe zum Beispiel G. Ourisson, *Actual. Chim.* 1986, 41.
- [8] H. Mizes, S. Park, W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* 36 (1977) 4491; G. Binnig, II. Fuchs, C. Gerber, H. Rohrer, E. Stoll, E. Tosatti, *Europophys. Lett.* 1 (1986) 32.
- [9] J. Vouvé, J. Brunet, P. Vidal, J. Marsal: *Lascaux en Périgord Noir*, Pierre Fanlac, Périgueux 1982, S. 31.
- [10] Für eine Einführung in *David Hockneys* neo-kubistische Perspektive siehe D. Hockney: *Cameraworks*, A. A. Knopf, New York 1984; Deutsch: D. Hockney: *Cameraworks*, Kindler, München 1984.
- [11] a) E. H. Gombrich, *Art and Illusion*, 2. Aufl., Bollingen Series, Princeton, Univ. Press, Princeton 1961, S. 262; Deutsch: E. H. Gombrich: *Kunst und Illusion. Zur Psychologie der bildlichen Darstellung*, Beiser, Stuttgart 1986. Siehe ebenso die Kommentare von R. Thom zur inhärenten Geometrie in unseren Gedanken. [R. Thom: *Stabilité Structurelle et Morphogenèse*, 2. Aufl., Interditions, Paris 1977; Englisch: R. Thom: *Structural Stability and Morphogenesis*, W. A. Benjamin, Reading 1975]. b) F. Philostratus: *Life of Apollonius of Tyana*, Buch II, Kap. 22, Macmillan, New York 1912, I, 175–179; Deutsch: Philostratus: *Appollonius von Tyana*, Artemis, Zürich 1983. Wir danken diese Geschichte E. H. Gombrich: *Art and Illusion* (siehe oben), S. 181–182.
- [12] a) A. Lavoisier, *Traité Élémentaire de Chimie*, Cuchet, Paris 1789; b) J. Brody, *New Sci.* 119 (1987), 24–31. Dezember 1987, S. 19. Die Originale vieler Zeichnungen von Mme. Lavoisier und ihre Anmerkungen auf den Probodrucken der Stiche befinden sich in der wissenschaftsgeschichtlichen Bibliothek der Cornell University.
- [13] A. W. Williamson, *Q. J. Chem. Soc., London* 4 (1852) 229.
- [14] Für eine gedanklich sehr schön entwickelte „epistemologische Betrachtung der Chiralität“, die Eigenschaft von Molekülen, in spiegelbildlichen Formen vorzukommen, siehe K. Mislow, P. Bickart, *Isr. J. Chem.* 15 (1976/1977) 1. Ein wichtiger Punkt in ihrer Diskussion ist die Unterscheidung zwischen geometrischen Figuren oder Modellen, wo das Konzept der Chiralität gut definiert ist, und realen Molekülen, wo es eher verschwommen ist und von den Meßmethoden abhängt.
- [15] J. H. van't Hoff: *Voorstel tot uitbreeding der tegenwoordig ...*, J. Greven, Utrecht 1874; Englisch: J. H. van't Hoff: *The Arrangement of Atoms in Space*, 2. Aufl., Longman, Green and Co., London 1898. J. A. Le Bel, *Bull. Soc. Chim. Fr.* 22 (1874) 337. · Le Bel und van't Hoff ließen in ihre voneinander unabhängigen und quasi simultanen Entdeckungen recht ausgeprägte, jedoch entgegengesetzte Weltsichten einfließen. Ihre wissenschaftlichen Ansätze waren unterschiedlich, und soweit wir wissen, unterschieden sich auch ihre „Themata“ (im Sinne von G. Holton) sowie ihr Einfluß auf die Nachwelt. Siehe zu diesem Punkt, von großem Interesse für Wissenschaftsphilosophen: J. Weyer, *Angew. Chem.* 86 (1974) 604; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 13 (1974) 591.
- [16] N. J. Turro, *Angew. Chem.* 98 (1986) 872; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 25 (1986) 882.
- [17] Die Gabe, räumliche Strukturen mit dem Auge erkennen zu können, und das damit verwandte räumliche Vorstellungsvormögen, d.h. sie mit dem geistigen Auge zu sehen, sind sehr wichtige Bestandteile der Kreativität eines Chemikers. Und möglicherweise nicht nur für Chemiker. Mathematiker diskutieren zum Beispiel seit Hadamards grundlegenden Untersuchungen über mathematische Kreativität (K. Hadamard: *The Psychology of Invention in the Mathematical Field*, Princeton Univ. Press, Princeton 1945.), ob bildliche Vorstellungen an den gedanklichen Prozessen von Mathematikern beteiligt sind. (A. Muir, *The Mathematical Intelligencer* 10 (1988) 33). Würde man sich auf das Beispiel der Chemiker verlassen, so wäre die Antwort „ja, selbstverständlich“.
- [18] G. Komppa, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* 41 (1908) 4470.
- [19] R. R. Hoffman: „Some Implications of Metaphor for Philosophy and Psychology of Science“ in R. Dirven, W. Paprotte (Hrsg.): *The Ubiquity of Metaphor*, John Benjamin, Amsterdam 1985.
- [20] Wir vertreten den Standpunkt, daß Sprachfiguren wie die Metapher als kognitive Werkzeuge zu betrachten sind, und nicht als Abweichungen von der prosaischen Norm. Siehe D. Sperber, D. S. M. Wilson: *Relevance: Communication and Cognition*, Blackwells, Oxford/Harvard Univ. Press, Cambridge, MA, USA 1986.
- [21] J. A. Comenius: *Orbis Sensualium Pictus*, Michael Endter, Nürnberg 1658.
- [22] Wir sind dem nominalistischen Trugschluß nicht erlegen. Wir wählen unser Hund-Beispiel, weil die – zugegebenermaßen restriktive und begrenzte – Sicht von Sprache als Nomenklatur genau die in der Sprache der Chemie verkörperte ist. Saussure hat mit seiner Idee, daß Zeichen einen Bezeichnenden und das Bezeichnete verbinden, die Illusion von Sprache als Nomenklatur für Objekte weggefegt. Das Wort „Hund“ bezieht sich nicht auf ein reales Objekt, sondern auf ein Attribut, das viele verschiedene Entitäten aufweist.
- [23] Zirkel-Argumentation ist nicht immer schlecht. An anderem Ort hat einer von uns versucht, ihre Nützlichkeit in der realen Chemie zu zeigen: R. Hoffmann, *Am. Sci.* 75 (1988) 182.
- [24] Obwohl in dieser Richtung kürzlich beeindruckende Fortschritte gemacht wurden. Siehe R. G. Parr, *Annu. Rev. Phys. Chem.* 34 (1983) 631.
- [25] J. Culler: *Ferdinand de Saussure*, überarbeitete Aufl., Cornell Univ. Press, Ithaca, NY, USA 1986.
- [26] K. Mislow machte uns in diesem Zusammenhang auf die Geschichte aufmerksam, in der Feynman erzählt, wie sein Vater ihm den Unterschied zwischen etwas kennen und den Namen von etwas kennen beibrachte: R. P. Feynman: *What do You Care What Other People Think?*, W. W. Norton, New York 1988, S. 13, 14.
- [27] P. Ricoeur in D. Ihde (Hrsg.): *The Conflict of Interpretation*, Northwestern Univ. Press, Evanston, IL, USA 1974.
- [28] J.-M. Léhn, *Traduire 116* (1983) 62.
- [29] H. W. Whitlock, Jr. in W. T. Wipke, W. J. Howe (Hrsg.): *Computer-Assisted Organic Synthesis* (ACS Symp. Ser. 61), American Chemical Society, Washington, D.C. 1977, S. 60. Wir danken K. Mislow dafür, daß er uns an diese Arbeit erinnert hat.
- [30] N. Chomsky in R. D. Luce, R. R. Bush, E. Galanter (Hrsg.): *Handbook of Mathematical Psychology*, Vol. 2, Wiley, New York 1963, S. 323; N. Chomsky: *Cartesian Linguistics*, Harper & Row, New York 1966.
- [31] Siehe auch D. I. Cooke-Fox, G. H. Kirby, J. D. Rayner, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 29 (1989) 101, 106, 112.
- [32] J. W. von Goethe: *Die Wahlverwandtschaften*, Insel Taschenbücher, Frankfurt am Main 1972.
- [33] Siehe S. M. Kosslyn, *Science (Washington D.C.)* 240 (1988) 1621.
- [34] Für eine erhelltende Artikelserie über biologische Aspekte der Ästhetik siehe I. Rentscher, B. Herzberger, D. Epstein (Hrsg.): *Beauty and the Brain*, Birkhäuser, Basel 1988.
- [35] R. R. Verbrugge, *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 433 (1984) 167.
- [36] Wir durften die bemerkenswerte Psychobiographie R. B. Woodwards, die *Crystal Woodward* über ihren Vater geschrieben hat, im Manuskript lesen. Einige Beobachtungen zu Wissenschaft, Kreativität und Kunst, die Frau Woodward in ihrer Studie machte, ähneln den unseren. Einer von uns (P. L.) bezieht sich an anderer Stelle auf das – von C. W. im Detail erforschte – Verhältnis zwischen Moleküllmodellen und Molekülen einerseits und den „Übergangsobjekten“ (transitional objects) D. W. Winnicott andererseits in dem noch unveröffentlichten Buch „La Parole des Chose“.
- [37] Meilensteine der neueren organischen Synthese sind beschrieben in: N. Anand, J. S. Bindra, S. Ranganathan: *Art in Organic Synthesis*, 2. Aufl. Wiley, New York 1988; E. J. Corey, X.-M. Cheng: *The Logic of Chemical Synthesis*, Wiley, New York 1989.
- [38] H. Hopf, Universität Braunschweig, persönliche Mitteilung.
- [39] Um ein Gefühl für die Komplexität der Definitionen und das Spektrum der Meinungen in diesem Gebiet zu bekommen, siehe M. C. Beardsley: *Aesthetics*, 2. Aufl., Hackett, Indianapolis, IN, USA 1981.
- [40] Zu diesem Abschnitt gibt es eine Artikelserie, die einer von uns über „Molecular Beauty“ geschrieben hat. Es ist eine Art anthropologische Studie der Objekte, denen Chemiker ästhetischen Wert zubilligen: R. Hoffmann, *Am. Sci.* 76 (1988) 389, 604; 77 (1989) 177, 330.
- [41] N. Goodman: *Languages of Art*, 2. Aufl., Hackett, Indianapolis, IN, USA 1976, S. 264.
- [42] Siehe in diesem Zusammenhang auch C. Rose-Innes, *New Sci.*, 7. Januar 1988, S. 42.
- [43] J. Bernstein, R. Hoffmann, *Inorg. Chem.* 24 (1985) 4100.
- [44] Siehe [41], S. 229, 230.
- [45] Dieses Argument stammt von H. Pardee, für dessen Kommentare zu dieser Arbeit wir dankbar sind.
- [46] G. Stent: *Engineering and Science* (California Institute of Technology), September 1985, S. 9; Nobel-Symposium, Königlich-schwedische Akademie der Wissenschaften, Stockholm 1986, persönliche Mitteilung.
- [47] Für einen sachverständigen, schön präsentierten Bericht über die Sicht- und Darstellungsweise der Eskimos siehe E. Carpenter: *Eskimo Realities*, Holt, Rinehart and Winston, New York 1973. Wir danken Vivian Torrence für ihren Hinweis auf dieses Buch.
- [48] R. Hoppe, *Angew. Chem.* 92 (1980) 106; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 19 (1980) 110.
- [49] T. Jansson: *Moominsummer Madness*, Henry Z. Walck, New York 1955, S. 53.
- [50] E. H. Gombrich: *Art and Illusion* (siehe Zitat [11]), Kap. 10; E. Kris, E. H. Gombrich, in E. Kris (Hrsg.): *Psychoanalytic Explorations in Art*, International Univ. Press, New York 1952, Kap. 7.
- [51] S. J. Weininger: *Contemplating the Finger: a Semiotic Perspective on Chemistry*, Vortrag bei der 3. Jahrestagung der Soc. for Literature and Science, 24. September 1989, Univ. of Michigan.
- [52] P.-L. Luisi, R. M. Thomas, *Naturwissenschaften* 77 (1990) 67.
- [53] P. Levi: *Other People's Trades*, Summit Books, New York 1989.
- [54] R. Hoffmann: *Gaps and Verges*, University of Central Florida Press, Orlando, FL, USA 1990, S. 55.