



DUDEN

BASISWISSEN
SCHULE

ABITUR

Chemie



BUCH

+



WEB

+



APP

Das Standardwerk für Abiturienten

LERNHELPER – DEIN ONLINEPORTAL ZUM BUCH

Ergänzende Lernkartensets und Abitur-
Originalklausuren zur Prüfungsvorbereitung

Lernen, wann du willst, wo du willst und wie du willst! So funktioniert's:



BUCH

Mit deinem Nachschlagewerk für den gesamten Schulstoff der Oberstufe kannst du dich gezielt auf Unterrichtsinhalte vorbereiten und verpasste Themen nachholen.



WEB

Melde dich bei unserem Lernportal über www.lernhelfer.de/basiswissen-abitur an und nutze alle zusätzlichen Features:

- das Schülerlexikon mit zahlreichen Beiträgen und Wissenstests
- deinen persönlichen Lernbereich mit Lernkarten und Originalprüfungen zum Abitur
- die Möglichkeit, eigene Lernkartensets zu erstellen



APP

Mit der kostenlosen Lernhelfer-App kannst du bequem unterwegs lernen:

- mobiler Zugriff auf die Inhalte des Webportals www.lernhelfer.de
- Bearbeiten, Sortieren und Erstellen von deinen Lernkarten

Passendes Übungsmaterial bei Lernhelfer

Mit deinem Basiswissen Abitur erhältst du Lernkarten für die Oberstufe und Originalklausuren mit Lösungen zur Prüfungsvorbereitung.

Alles exklusiv im Paket für nur 1,– Euro.

Melde Dich einfach an unter:

www.lernhelfer.de/basiswissen-abitur

Dein Lernpaket zum Abitur
für nur **1,– Euro!**

Duden

BASISWISSEN SCHULE

Chemie

ABITUR

4., aktualisierte Auflage

Dudenverlag
Berlin

Inhaltsverzeichnis

1	Die Chemie – eine Naturwissenschaft	7	
1.1	Die Chemie im Kanon der Naturwissenschaften	8	
1.2	Denk- und Arbeitsweisen in der Chemie	11	
1.2.1	Begriffe und Größen	11	
1.2.2	Gesetze, Modelle und Theorien in der Chemie	14	
1.2.3	Erkenntnisgewinn in der Chemie	16	
1.2.4	Vorbereitung, Durchführung und Auswertung chemischer Experimente	22	
1.3	Stöchiometrie	27	
1.3.1	Molare und Zusammensetzungsgrößen	27	
1.3.2	Berechnungen zu chemischen Reaktionen	31	
2	Kernchemie und Entstehung der Elemente	33	
2.1	Kernchemie	34	
2.1.1	Kernbausteine – Nukleonen	34	
2.1.2	Stabilität von Atomkernen und Kernreaktionen	35	
2.2	Entstehung der Elemente	44	
2.2.1	Kernsynthese der Elemente	44	
2.2.2	Häufigkeit der Elemente	46	Überblick 48
3	Atombau und Periodensystem	49	
3.1	Atombau	50	
3.1.1	Historische Entwicklung des Atommodells	50	
3.1.2	Das Atommodell nach Bohr und Sommerfeld	52	
3.1.3	Das moderne quantenmechanische Atommodell	55	Überblick 63
3.2	Das Periodensystem der Elemente	64	
3.2.1	Historie	64	
3.2.2	Ordnungsprinzip im Periodensystem	65	
3.2.3	Periodizität der Eigenschaften	67	Überblick 76
4	Chemische Bindung	77	
4.1	Hauptbindungsarten	78	
4.1.1	Überblick	78	
4.1.2	Atombindung	79	
4.1.3	Ionenbindung	96	
4.1.4	Metallbindung	102	
4.2	Besondere Wechselwirkungen zwischen Molekülen	105	
4.2.1	Van-der-Waals-Kräfte	105	
4.2.2	Wasserstoffbrückenbindungen	106	Überblick 108
5	Grundzüge der physikalischen Chemie	109	
5.1	Chemische Thermodynamik	110	
5.1.1	Energie und Energieerhaltung	110	
5.1.2	Der erste Hauptsatz der Thermodynamik	114	
5.1.3	Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik	119	
5.1.4	Die freie Enthalpie	123	Überblick 127
5.2	Chemische Kinetik	128	
5.2.1	Zeitlicher Ablauf chemischer Reaktionen	128	
5.2.2	Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit	134	

	5.2.3	Mechanismus chemischer Reaktionen	137
■ Überblick 143	5.2.4	Katalysatoren und Katalyse	140
	5.3	Elektrochemische Prozesse	144
	5.3.1	Elektrische Leitung und Elektrolyte	144
	5.3.2	Elektroden und Elektrodenpotenziale	145
■ Überblick 166	5.3.3	Elektrochemische Zellen und Zellspannung	151
	5.3.4	Elektrolytische Prozesse	162
	6	Chemisches Gleichgewicht und Massenwirkungsgesetz	167
	6.1	Das chemische Gleichgewicht	168
	6.1.1	Umkehrbarkeit chemischer Reaktionen	168
	6.1.2	Einstellung des chemischen Gleichgewichts	169
	6.1.3	Massenwirkungsgesetz und Gleichgewichtskonstante	170
	6.2	Beeinflussung des chemischen Gleichgewichts	174
	6.2.1	Einfluss der Temperatur und des Drucks	174
	6.2.2	Einfluss weiterer Reaktionsbedingungen	176
	6.3	Anwendungen des Massenwirkungsgesetzes	178
■ Überblick 182	6.3.1	Gleichgewichtsreaktionen in der Industrie	178
	6.3.2	Löslichkeitsgleichgewichte von Salzen	179
	7	Protonen- und Elektronenübertragungsreaktionen	183
	7.1	Säuren und Basen	184
	7.1.1	Säure-Base-Theorie nach Brönsted	184
	7.1.2	Säure-Base-Gleichgewichte	186
	7.1.3	Amphoterie	197
	7.1.4	Neutralisationsreaktionen	198
■ Überblick 207	7.1.5	Säure-Base-Theorie nach Lewis	204
	7.1.6	Säuren und Basen im Alltag	205
	7.2	Redoxreaktionen	208
	7.2.1	Redoxreaktionen als Donator-Akzeptor-Reaktionen	208
	7.2.2	Oxidationszahlen	210
	7.2.3	Entwickeln von Redoxgleichungen	212
■ Überblick 218	7.2.4	Standardredoxpotenziale und Redoxgleichgewichte	213
	7.2.5	Anwendungen von Redoxreaktionen	216
	8	Grundzüge der anorganischen Chemie	219
	8.1	Hauptgruppenelemente und Verbindungen	220
■ Überblick 232	8.1.1	Vorkommen und Darstellung der Elemente	220
	8.1.2	Verbindungen der Hauptgruppenelemente	224
	8.2	Eigenschaften der Nebengruppenelemente	233
	8.2.1	Vorkommen und Darstellung der d-Block-Elemente	233
	8.2.2	Eigenschaften und Verwendung von d-Block-Elementen	236
■ Überblick 245	8.2.3	Nanotechnologie	243
	8.3	Komplexchemie	246
	8.3.1	Aufbau und Nomenklatur von Komplexen	246
	8.3.2	Struktur und Eigenschaften von Komplexverbindungen	248
	8.3.3	Stabilität von Komplexverbindungen	252
	8.3.4	Darstellung und Bedeutung von Komplexen	254
■ Überblick 258	8.3.5	Komplexometrie	257

9	Strukturen und Reaktionen organischer Verbindungen	259	
9.1	Allgemeine Grundlagen der organischen Chemie	260	
9.1.1	Namen, Formeln und Strukturen	260	
9.1.2	Elektronische Effekte in organischen Verbindungen	262	■ Überblick 264
9.1.3	Der Isomeriebegriff	265	
9.1.4	Reagenzien, Substrate, Reaktionen	271	
9.1.5	Reaktionstypen in der organischen Chemie	273	■ Überblick 288
9.2	Aliphatische Kohlenwasserstoffe	289	
9.2.1	Nomenklatur aliphatischer Kohlenwasserstoffe	289	
9.2.2	Gesättigte kettenförmige Kohlenwasserstoffe	292	
9.2.3	Ungesättigte kettenförmige Kohlenwasserstoffe	295	
9.3	Aromatische Kohlenwasserstoffe	298	
9.3.1	Der aromatische Zustand	298	
9.3.2	Substituierte Benzene	302	
9.3.3	Biologische Aktivität aromatischer Verbindungen	304	■ Überblick 306
9.4	Organische Verbindungen mit funktionellen Gruppen	307	
9.4.1	Funktionelle Gruppen	307	
9.4.2	Halogenalkane	308	
9.4.3	Amine	310	
9.4.4	Alkohole und Phenole	312	
9.4.5	Ether	318	
9.4.6	Carbonylverbindungen	319	
9.4.7	Carbonsäuren und Carbonsäurederivate	322	■ Überblick 328
9.5	Naturstoffe	329	
9.5.1	Kohlenhydrate	329	
9.5.2	Fette	337	
9.5.3	Aminosäuren, Peptide und Proteine	340	■ Überblick 350
9.6	Chemie in Biosystemen	351	
9.6.1	Stoffwechsel und Biokatalyse	351	
9.6.2	Autotrophe Assimilation – Fotosynthese	355	
9.6.3	Heterotrophe Assimilation	357	
9.6.4	Dissimilation – Atmung	359	
9.6.5	Dissimilation – Gärung	362	
9.6.6	Nucleinsäuren	366	■ Überblick 368
10	Ausgewählte Anwendungen in der Chemie	369	
10.1	Werkstoffe	370	
10.1.1	Aufbau und Bildung synthetischer organischer Polymere . . .	370	
10.1.2	Struktur und Eigenschaften von Kunststoffen	380	
10.1.3	Verarbeitung von Kunststoffen	384	
10.1.4	Maßgeschneiderte synthetische Polymere	385	
10.1.5	Verwertung von Kunststoffen	389	■ Überblick 393
10.1.6	Metallische Werkstoffe	394	
10.1.7	Silicone, Silicate und Glas	398	
10.2	Farbstoffe	403	
10.2.1	Grundlagen der Farbigkeit	403	
10.2.2	Natürliche Farbstoffe	406	
10.2.3	Synthetische Farbstoffe	407	
10.2.4	Färbeverfahren	408	
10.3	Tenside und Waschmittel	410	
10.3.1	Tenside als grenzflächenaktive Stoffe	410	

■ Überblick 417	10.3.2 Anwendungen von Tensiden	412
	10.3.3 Waschmittel	414
	10.4 Arzneimittel	418
	10.4.1 Entwicklung von Arzneimitteln	418
	10.4.2 Wirkungsweise von Arzneistoffen	419
	10.4.3 Arzneistoffsynthese	422
	10.5 Ausgewählte chemisch-technische Verfahren	423
	10.5.1 Technische Herstellung von Ammoniak	423
	10.5.2 Technische Herstellung von Salpetersäure	426
	10.5.3 Technische Herstellung von Schwefelsäure	428
	10.5.4 Technische Herstellung von Chlor und Natronlauge – Chloralkali-Elektrolyse nach dem Membranverfahren	430
	10.5.5 Aluminiumgewinnung durch Schmelzflusselektrolyse	432
	10.5.6 Erdölverarbeitung – Gewinnung von Treibstoffen und Rohstoffen für die chemische Industrie	434
■ Überblick 440	10.6 Umweltbezogene Chemie	441
	10.6.1 Der Kreislauf des Kohlenstoffs	441
	10.6.2 Der Kreislauf des Stickstoffs	443
	10.6.3 Belastungen der Atmosphäre	444
	10.6.4 Belastungen der Gewässer	450
	10.6.5 Belastungen des Bodens	454
■ Überblick 456	11 Analyseverfahren	457
	11.1 Klassische Analyseverfahren	458
	11.1.1 Qualitative anorganische Analyse	458
	11.1.2 Analyse organischer Verbindungen	462
	11.2 Instrumentelle Analyseverfahren	466
	11.2.1 Elektrochemische Analysemethoden	466
	11.2.2 Chromatografische Analysemethoden	472
	11.2.3 Spektroskopische Analysemethoden	477
■ Überblick 482	A Anhang	483
	PSE	484
	Register	485
	Bildquellenverzeichnis	496

Die Chemie – eine Naturwissenschaft

1



1.1 Die Chemie im Kanon der Naturwissenschaften

Bereits ein flüchtiger Blick auf unsere Umgebung zeigt uns die alltägliche Gegenwart chemischer Prozesse und Strukturen: Fast alle Gegenstände, die uns umgeben, sind in ihrer Entstehung an chemische Vorgänge geknüpft, seien es metallische Objekte, Kunststoffe, Farben oder ganze Bauwerke. Müssen wir nach Medikamenten greifen, so ist deren Herstellung und Wirkungsweise an chemische Strukturen und Reaktionen gebunden (↗ S.419ff.). Nutzen wir ein Transportmittel, so wird hier in den meisten Fällen chemische Energie in mechanische umgewandelt. Treibstoffe müssen in chemischen Prozessen synthetisiert und in Motoren effektiv



verbrannt werden. Die entstandenen Abgase werden zu einer chemischen Belastung unserer Umwelt.

Auch unser Planet Erde ist in seiner heutigen Erscheinungsform das Ergebnis des Zusammenwirkens physikalischer, chemischer und biologischer Prozesse. Eine wesentliche Grundlage für die Entstehung der Erde war die kosmologische Entwicklung der chemischen Elemente durch kernchemische Reaktionen (↗ S.44ff.). Wir befinden uns hier in einem Grenzgebiet, das von der Kosmologie, der **Physik** und der **Chemie** beschrieben wird.

Die chemischen Elemente mit ihrer Eigenschaft, Verbindungen einzugehen, bilden die Grundlage chemischer Vorgänge. Solche Vorgänge der Stoffumwandlung, bei denen chemische Bindungen (↗ S.78ff.) zwischen Teilchen gelöst und neu gebildet werden, bezeichnet man als chemische Reaktionen.

► Bereits beim Erkalten der Erdoberfläche fanden unzählige **chemische Reaktionen** statt, die u. a. zu verschiedenen Gesteinen, Oxiden, Salzen, Wasser und zur Ausbildung einer Gashölle führten.

Einige im Urozean gelöste Substanzen wurden mithilfe der Sonnenenergie, von Gewitterentladungen und anderen natürlichen Energieformen zu komplexeren chemischen Strukturen umgewandelt, die schließlich die Fähigkeit zur Selbstreproduktion erlangten. Aus den anfangs primitiven Lebensformen entwickelten sich höhere – bis schließlich zum Menschen. Die Entstehung und Entwicklung des Lebens ist an biochemische Prozesse wie die Bildung von Aminosäuren und Kohlenhydraten (↗ S.329ff.), die Speicherung der Erbinformation in der DNA oder die Herausbildung der Photosynthese (↗ S.355) gebunden.

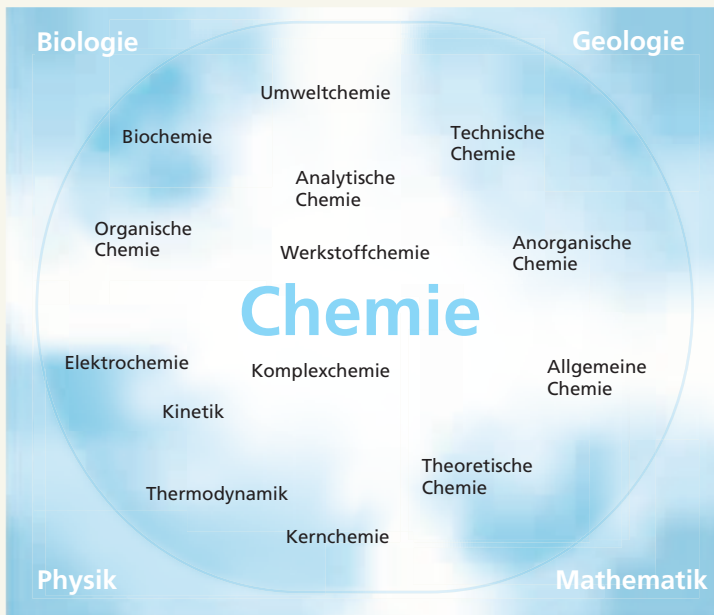
Jede Nahrung, die wir aufnehmen, besteht aus unterschiedlichen chemischen Verbindungen oder Stoffgemischen; in unserem Körper laufen **biochemische Reaktionen** ab, ohne die wir nicht lebensfähig wären. Selbst das Lesen dieses Texts ist ohne chemische Veränderungen im Auge und innerhalb des Gehirns nicht möglich.



► Das komplexe **Zusammenwirken chemischer Reaktionen und biologischer Vorgänge** ist die Grundlage des Lebens.

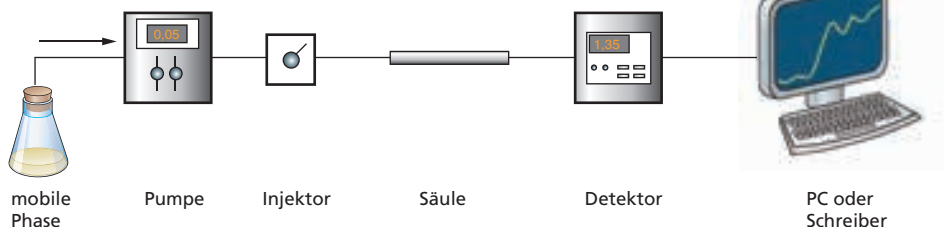
Die modernen Naturwissenschaften erforschen und beschreiben häufig gleiche Objekte aus unterschiedlichem Blickwinkel. Zur Natur zählen alle materiellen Gegenstände, Strukturen und Prozesse in der unendlichen Mannigfaltigkeit ihrer Erscheinungsformen. Aus dieser Tatsache ergeben sich zwei wichtige Hinweise: Erstens ist eine absolute Abgrenzung der Naturwissenschaften voneinander nicht möglich; zweitens bedarf es für die Erforschung eines Objekts häufig des kooperativen Zusammenwirkens verschiedener Wissenschaften. Dennoch hat jede Wissenschaft ihre Spezifik – so auch die Chemie.

Die Naturwissenschaft **Chemie** untersucht den Aufbau, die Eigenschaften und die Umwandlung von Stoffen, insbesondere die stofflichen und energetischen Veränderungen, die mit der Lösung und Neubildung chemischer Bindungen einhergehen.



► Im Laufe der Zeit kristallisierten sich unterschiedliche **Teilgebiete der Chemie** heraus. Eine strikte Abgrenzung zwischen den verwandten Disziplinen ist jedoch ebenso wenig möglich wie die strikte Trennung der Chemie von den anderen Naturwissenschaften. Die Disziplinen Thermodynamik, Kinetik, Elektrochemie, theoretische und Kernchemie werden auch unter dem Oberbegriff physikalische Chemie zusammengefasst.

Aufbau einer HPLC-Anlage



Die Aufgabe der flüssigen Probe erfolgt mit einer Spritze in den Injektor, wo sie von der mobilen Phase aufgenommen wird. Nach der Trennung in der Säule erreichen die einzelnen Substanzen nacheinander den Detektor, der die Zusammensetzung der mobilen Phase misst und so anzeigt, zu welchem Zeitpunkt ein Stoff die Säule verlassen hat. Für jede Komponente erhält man einen „Peak“. Das Chromatogramm besteht aus mehreren Peaks, aus denen man die Art und die Konzentration der getrennten Stoffe bestimmen kann.

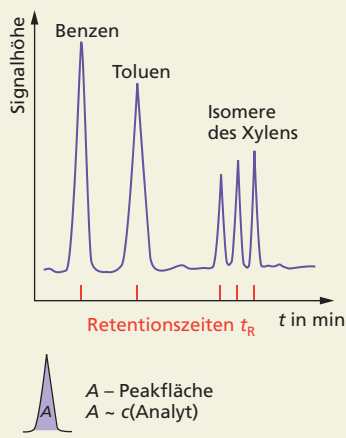
Der qualitative Nachweis wird über die **Retentionszeit** geführt, die sich aus der Verzögerung ergibt, mit der ein Analyt die Trennstrecke zwischen Injektor und Detektor passiert. Wie bei der Dünnschichtchromatografie arbeitet man mit Standards, um die Retentionszeiten für alle Komponenten zu ermitteln. Die Konzentration der Analyten wird aus der Fläche unter dem Peak berechnet. Je größer der Anteil der Komponente in der Probe ist, desto größer wird der Peak. Um die quantitative Bestimmung so genau wie möglich zu führen, kalibriert man die Methode mit Standards bekannter Zusammensetzung.

Auf diese Weise kann man speziell mit der HPLC eine sehr genaue und zuverlässige qualitative und quantitative Analyse durchführen, die automatisierbar und für viele analytische Zwecke einsetzbar ist.

Mithilfe der HPLC können Spuren von Dioxinen in Bodenproben oder in Lebensmitteln nachgewiesen werden. Die Konzentration von Dopingmitteln, wie Erythropoietin (Epo) im Blut von Sportlern, wird ebenfalls mittels HPLC bestimmt.

Die Methode findet auch in der Arzneistoffanalytik viele Anwendungen. So kann z. B. die Alterung von Aspirin® untersucht werden, indem man das Verhältnis von Acetylsalicylsäure (S. 422) und der Salicylsäure chromatografisch analysiert. Auch andere Verunreinigungen und Abbauprodukte des Präparats werden auf diese Weise zuverlässig nachgewiesen.

Auswertung des Chromatogramms



► Detektoren bei der Säulenchromatografie können UV-VIS-Fotometer (S. 478), Konduktometer (S. 469) und noch viele weitere Geräte sein, mit denen die Zusammensetzung der mobilen Phase gemessen werden kann.

Gaschromatografie (GC)

► Als mobile Phase (Trägergas) eignen sich He, N₂, Ar, H₂ und CO₂.

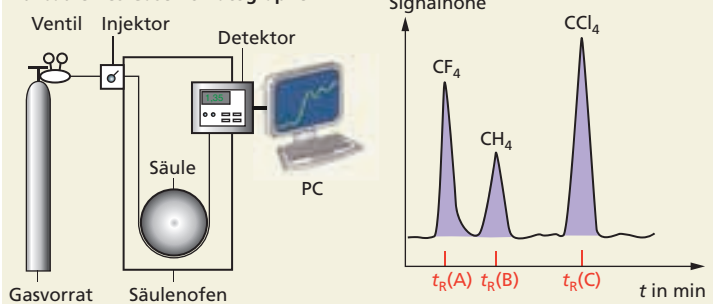
► Die Siedetemperaturen der analysierten Stoffe sollten zwischen 40 und 300 °C liegen. Viele schwerer flüchtige Verbindungen wandelt man in leichter flüchtige Derivate um, um sie gaschromatografisch zu untersuchen.

Die **Gaschromatografie** ist ein Trennverfahren für Stoffgemische, die gasförmig sind oder sich unzersetzt in die Gasphase als mobile Phase überführen lassen. Als stationäre Phase dient ein Feststoff oder eine flüssige Phase.

Die gaschromatografische Trennung beginnt mit dem Einspritzen der Probe in den Injektor. Flüssige Proben werden dort verdampft und vom Trägergasstrom durch die Trennsäule transportiert. Die Trennung der Komponenten erfolgt hauptsächlich aufgrund ihrer unterschiedlichen Siedetemperaturen und gegebenenfalls ihrer Polarität.

Auf diese Weise getrennt, erreichen die einzelnen Substanzen nacheinander das Säulenende. Dort befindet sich ein Detektor, der z. B. durch Messung der Wärmeleitfähigkeit Änderungen der Zusammensetzung der mobilen Phase anzeigt und diese an eine Auswerteeinheit, in der Regel einen Computer, weitergibt. Aus der unterschiedlichen Retentionszeit der Komponenten ergibt sich ein Gaschromatogramm. Anhand der Fläche unterhalb der Peaks kann man die Anteile der einzelnen Komponenten im Probengemisch ermitteln.

Aufbau eines Gaschromatographen



► Gepackte Säulen enthalten einen Feststoff als stationäre Phase. Sie sind 0,5–10 m lang und haben einen Durchmesser von 1–5 mm. Die Trennleistung ist deutlich schlechter als bei Kapillarsäulen.

Man verwendet heute hauptsächlich leistungsfähige Kapillarsäulen für die Trennung der Gase. Kapillarsäulen sind 15–300 m lang und haben einen Innendurchmesser von nur 0,1–1 mm. Sie sind innen mit einem sehr dünnen Film (0,1–5 μm) einer Trennflüssigkeit, z. B. Siliconöle oder Paraffine, als stationärer Phase beschichtet. An solchen Säulen können sogar Isomere (↗ S. 265) getrennt werden, deren Siedetemperaturen sehr dicht beieinanderliegen.

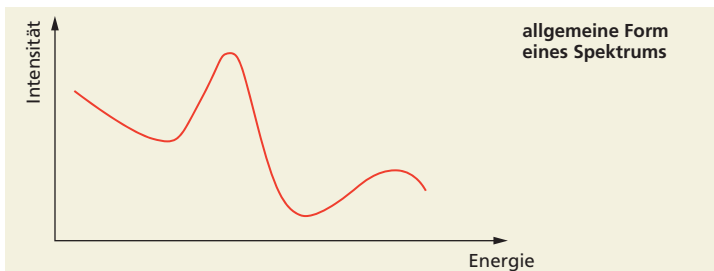
Mithilfe der Kapillar-GC können in der Umweltanalytik Gemische aus mehr als 20 verschiedenen aliphatischen oder aromatischen Kohlenwasserstoffen (z. B. PCBs, PAKs, ↗ S. 301) getrennt werden. Die Anwendungsbreite der Gaschromatografie reicht von der organischen Elementaranalyse (↗ S. 464), wo die Anteile an CO₂, H₂O und N₂ in der Gasphase chromatografisch bestimmt werden, bis zur Analyse des Blutalkoholgehalts. Auch Drogen wie Cannabis oder Kokain lassen sich noch lange Zeit nach ihrer Konsumierung gaschromatografisch nachweisen.

11.2.3 Spektroskopische Analysemethoden

Bei **spektroskopischen Analysemethoden** wird die Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit Materie, d. h. den Teilchen (Atomen, Molekülen oder Ionen) der Analysenprobe, gemessen.

Prinzipiell sind folgende Wechselwirkungen zwischen Materie und Strahlung möglich:

- Durch **Absorption** von Strahlung einer bestimmten Wellenlänge wird ein Übergang in ein höheres Energieniveau angeregt (↗ S. 53), z. B. UV-VIS- oder Atomabsorptionsspektroskopie.
- Bei der **Emission** sendet eine angeregte Probe beim Übergang in ein tieferes Energieniveau selbst elektromagnetische Strahlung aus, z. B. Flammenfotometrie, Fluoreszenz und Phosphoreszenz.
- Streuung der Strahlung geeigneter Wellenlänge
- Reflexion, Brechung oder Änderung der Polarisierung (Polarimetrie)



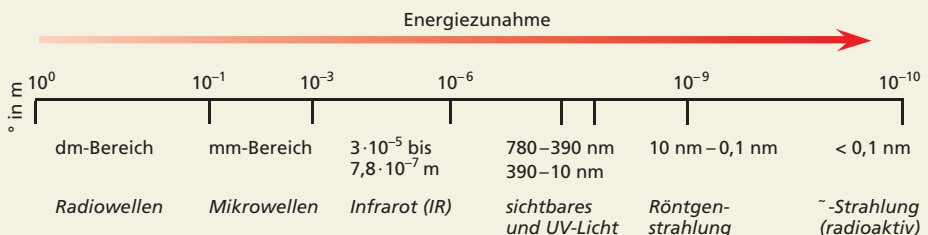
Absorptions- und Emissionsmessungen über einen bestimmten Energiebereich haben gemeinsam, dass durch Wechselwirkung von Materie mit elektromagnetischer Strahlung ein Spektrum erhalten wird. Durch Absorption wird die Intensität der Strahlung bei einer oder mehreren Wellenlängen verringert. Dagegen wird Strahlung emittiert, wenn Elektronen die durch Absorption aufgenommene Energie in Form von Licht wieder abgeben. Aus der Intensität und der Wellenlänge der absorbierten bzw. emittierten Strahlung kann man Schlussfolgerungen zur quantitativen Zusammensetzung und Struktur der Probe ziehen.

Die Energie E der elektromagnetischen Strahlung hängt von ihrer Wellenlänge λ bzw. Frequenz ν ab.

$$E = h \cdot \nu$$

$$c = \lambda \cdot \nu$$

Spektrum der elektromagnetischen Strahlung



Wichtige strukturanalytische Methoden

Bei der **Strukturanalyse** wird die räumliche Anordnung von Atomen, Molekülen und Ionen in chemischen Verbindungen und die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen untersucht. Dazu nutzt man verschiedene spektroskopische, röntgenografische oder andere physikalische Analysemethoden.

► Die **Röntgenstrukturanalyse** und die **Massenspektrometrie** sind im Gegensatz zur Infrarot- und zur **NMR-Spektroskopie** keine spektroskopischen Analysemethoden.

Mithilfe spektroskopischer Methoden erhält man beispielsweise Informationen zum Bau organischer Moleküle, ihrer Geometrie und den Bindungsverhältnissen. Die Röntgenstrukturanalyse liefert dagegen Daten zur Struktur kristalliner organischer und anorganischer Feststoffe.

Die Ergebnisse strukturanalytischer Untersuchungen werden in großen Datenbanken zusammengefasst und gespeichert. Durch Vergleich ihrer experimentell erhaltenen Spektren bzw. Röntgenanalysen mit den gespeicherten Daten können Chemiker schnell und einfach fast alle bekannten Reinstoffe eindeutig identifizieren.

Darüber hinaus können mithilfe der verschiedenen physikalischen Analyseverfahren noch viele weitere Erkenntnisse gewonnen werden (↗ Tab.).

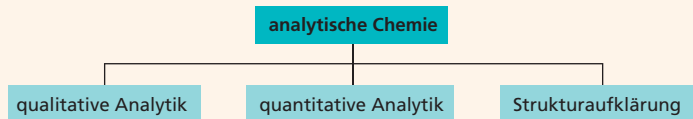
Wichtige strukturanalytische Verfahren

Verfahren	Prinzip	Informationen
Röntgenstrukturanalyse (Einkristall- oder Pulveranalyse)	<ul style="list-style-type: none"> – Bestrahlung von kristallinen Feststoffen mit Röntgen-, Neutronen- oder Synchrotronstrahlung definierter Wellenlänge – Beugung der Strahlen am Kristallgitter und Aufnahme eines für die Struktur des Festkörpers charakteristischen Beugungsmusters – Auswertung des Beugungsmusters anhand physikalischer Gesetzmäßigkeiten und Ableiten von Schlussfolgerungen zur Struktur, Reinheit und Kristallinität des Feststoffs 	<ul style="list-style-type: none"> – Aufklärung der Struktur unbekannter kristalliner Feststoffe, z. B. von Eiweißen, Nucleinsäuren oder anorganischen Verbindungen, hauptsächlich durch Analyse von Einkristallen – Berechnung der Elementarzelle (Gitterkonstanten, Symmetrie) und der geometrischen Anordnung der Atome und/oder Ionen in Einkristallen oder pulverförmigen Feststoffen – Identifizierung von kristallinen Stoffen auch in Stoffgemischen durch Vergleich experimentell erhaltener Beugungsmuster mit tabellierten Daten (Phasenanalyse) – Bestimmung der quantitativen Anteile verschiedener Feststoffe in Phasengemischen – Ermittlung von Partikelgrößen und Materialfehlern in Werkstoffen, z. B. bei der Qualitätskontrolle in der Metallurgie und der Bauindustrie

Verfahren	Prinzip	Informationen
Massenspektrometrie	<ul style="list-style-type: none"> – Verdampfung und Ionisierung hauptsächlich von Molekülverbindungen im Hochvakuum – Beschuss der Moleküle mit Elektronen zur Erzeugung verschiedener Molekül-Ionen (Bruchstücke bzw. Fragmente) – Auftrennung der geladenen Fragmente im Magnetfeld und Aufnahme eines für die Verbindung charakteristischen Fragmentierungsmusters („Massenspektrum“) – Ableiten von Schlussfolgerungen zur Molekülstruktur aus dem Fragmentierungsmuster 	<ul style="list-style-type: none"> – exakte Bestimmung der Molekülmasse von Verbindungen und der Atommasse von Isotopen – Aufklärung der Struktur von organischen Molekülen durch Nachweis von „Schlüsselbruchstücken“, die z.B. speziellen funktionellen Gruppen zugeordnet werden können – Identifizierung von Reinstoffen durch Vergleich der experimenteller „Massenspektren“ mit Daten in Spektrenbibliotheken – Nachweis und quantitative Analyse von Substanzen in Stoffgemischen, z.B. in der Kriminalistik
Kernresonanzspektroskopie (NMR: <i>nuclear magnetic resonance</i>) und Kernspintomografie (MRT: Magnetresonanztomografie)	<ul style="list-style-type: none"> – Einbringen geeigneter Flüssigkeiten, Lösungen oder Feststoffe in ein starkes äußeres Magnetfeld – magnetische Wechselwirkungen NMR-aktiver Atomkerne (ungerade Ordnungs- bzw. Massenzahl) mit dem äußeren Feld – Absorption hochfrequenter elektromagnetischer Strahlung in Abhängigkeit von der elektronischen Umgebung der Atomkerne – Aufnahme eines für die Verbindung charakteristischen NMR-Resonanzspektrums – Auswerten des NMR-Spektrums und Ableiten von Schlussfolgerungen zur Struktur von Molekülen bzw. Feststoffen 	<ul style="list-style-type: none"> – Aufklärung der Struktur hauptsächlich von organischen Molekülen mithilfe der ^1H- und ^{13}C-NMR-Spektroskopie durch: Nachweis von Mehrfachbindungen und funktionellen Gruppen – Identifizierung von Reinstoffen durch Vergleich mit Daten in Spektrenbibliotheken – Untersuchung der elektronischen Umgebung von NMR-aktiven Atomen in anorganischen Festkörpern – Erzeugung von Schnittbildern eines Körpers in der Magnetresonanztomografie (MRT) durch Analyse des Wassergehalts im Gewebe; Diagnose von Krebserkrankungen usw. in der Medizin
Infrarot-Spektroskopie (IR-Spektroskopie)	<ul style="list-style-type: none"> – Bestrahlung hauptsächlich von Molekülverbindungen mit IR-Strahlung ($780\text{ nm} < \lambda < 1000\text{ }\mu\text{m}$) – Anregung von Molekülschwingungen durch Absorption von Strahlung – Aufnahme eines für die Verbindung charakteristischen Absorptionsspektrums – Ableiten von Schlussfolgerungen zur Struktur der Verbindungen aus der Wellenlänge und Intensität der absorbierten IR-Strahlung 	<ul style="list-style-type: none"> – Aufklärung der Struktur von IR-aktiven Molekülen durch: Nachweis von Mehrfachbindungen oder funktionellen Gruppen – Identifizierung von Reinstoffen durch Vergleich der experimenteller IR-Spektren mit Daten in Spektrenbibliotheken – Identifizierung von Kunststoffen und Abfällen in Recyclinganlagen anhand der IR-Reflexion

Chemische Analytik

■ Die **chemische Analytik** beschäftigt sich mit der Identifizierung der Bestandteile und der Bestimmung der Zusammensetzung von Reinstoffen und Stoffgemischen sowie der Aufklärung der Struktur von Verbindungen. Dementsprechend unterscheidet man drei Teilgebiete der analytischen Chemie.



Teilgebiet	Ziel	Wichtige Methoden
Qualitative Analytik	<ul style="list-style-type: none"> – Identifizierung von Elementen (Atome oder Ionen) bzw. funktionellen Gruppen in reinen Stoffen – Trennung von Stoffgemischen und Identifizierung aller oder nur einzelner Bestandteile des Gemisches 	<ul style="list-style-type: none"> – Vorproben – Fällungsreaktionen – Farbreaktionen – chromatografische Methoden (z. B. DC, SC, HPLC) – Elektrophorese – Röntgenbeugung (Phasenanalyse) – Massenspektrometrie – IR- und NMR-Spektroskopie
Quantitative Analytik	<ul style="list-style-type: none"> – genaue Bestimmung der quantitativen Zusammensetzung von Reinstoffen – genaue Gehaltsbestimmung eines oder mehrerer Bestandteile eines Stoffgemisches 	<ul style="list-style-type: none"> – quantitative Elementaranalyse organischer und anorganischer Stoffe – Säure-Base-, Redox- oder Komplextitration – elektrochemische Verfahren (z. B. Potenziometrie, Konduktometrie) – chromatografische Methoden (z. B. GC, HPLC) – Fotometrie – Massenspektrometrie – IR-Spektroskopie
Strukturaufklärung	<ul style="list-style-type: none"> – Bestimmung der räumlichen Anordnung von Atomen, Ionen und Molekülen in chemischen Verbindungen – Ableiten von Schlussfolgerungen zu den Eigenschaften der Verbindungen 	<ul style="list-style-type: none"> – Nachweis von Strukturelementen und funktionellen Gruppen spektroskopische Verfahren – Röntgenstrukturanalyse von kristallinen Feststoffen

