

Inhaltsverzeichnis

I Molekülspektroskopie

1	Allgemeines	5
2	Massenspektrometrie (MS)	7
2.1	Massen	8
2.2	Massenspektrometer	12
2.3	Ionisierungsmethoden	12
2.4	Fragmentierungen	16
2.4.1	Bindungsspaltungen	17
2.4.2	Umlagerungen	21
2.4.3	Und jetzt einmal Schritt für Schritt	23
3	Kernresonanzspektroskopie (NMR)	27
3.1	Physikalische Grundlagen	28
3.1.1	Spinzustände im Magnetfeld	29
3.1.2	Energetische Überlegungen	30
3.2	Erste NMR-Spektren	32
3.2.1	Einfluss der Elektronendichte	33
3.2.2	Multipletts	36
3.2.3	Die chemische Verschiebung δ , genauer betrachtet	39
3.2.4	Anisotropieeffekte	44
3.3	^1H-NMR	46
3.3.1	Chemische Äquivalenz	47
3.3.2	Kopplungen	48
3.4	^{13}C-NMR	57
3.4.1	Verschiebungen, Kopplungen, Spektren	57
3.4.2	Zweidimensionale NMR	61
3.5	Andere nutzbare Kerne	64
	Antworten	66
	Weiterführende Literatur	79

II Elektroanalytische Methoden

4	Allgemeines	85
5	Potentiometrie	97
5.1	Elektroaktive Analyten	98
5.1.1	Direktpotentiometrie	101
5.1.2	Potentiometrische Titrationen	105
5.2	Ionenselektive Elektroden (ISE)	106
5.2.1	pH-Messung mit der Glaselektrode	106
5.2.2	Weitere ionensensitive Elektroden (ISE)	109
6	Coulometrie	117
7	Amperometrie	121
8	Voltammetrie	125
	Antworten	132
	Weiterführende Literatur	136

III Weitere analytische Verfahren

9 Gravimetrische Analysen 141

9.1 Elektrogravimetrie 142

9.2 Thermische Verfahren – Thermogravimetrie (TG) 147

10 Thermische Verfahren 151

10.1 Differentialthermoanalyse 152

10.2 Kalorimetrie 154

11 Einsatz radioaktiver Nuklide 157

11.1 Radiochemische Analyse: Neutronenaktivierungsmethoden 159

11.2 Radioaktive *Tracer* 161

11.3 Radioaktive Altersbestimmung 163

11.4 Radioimmunoassay (RIA) 165

12 Fluoreszenz-Verfahren 175

12.1 Grundlagen der Fluoreszenz – eine kurze Wiederholung und Erweiterung 176

12.2 Fluoreszenzspektrometrie 182

12.3 Fluoreszenzmikroskopie 187

Antworten 191

Weiterführende Literatur 194

IV Sensoren und Automatisierungstechniken

13 Allgemeines zu Sensoren 201

14 Elektrochemische Sensoren 203

14.1 Klassisch anorganische Sensoren 204

14.2 Amperometrische und voltametrische Biosensoren 208

15 Optische Sensoren (Optoden) 213

15.1 Ein anorganisches Beispiel 214

15.2 Ein bio-organisches Beispiel 216

15.3 Ein anorganisches Beispiel in lebenden Zellen 216

16 Fließinjektions-Analyse (FIA) 221

Antworten 227

Weiterführende Literatur 228

V Statistik

17 Experimentelle Fehler 233

18 Statistische Auswertung 235

18.1 Mittelwert ($\bar{x}$) 236

18.2 Standardabweichung (s) 240

18.3 Vertrauensbereich 246

19 Fehlerfortpflanzung nach Gauß 249

19.1 Lineare Regression/Ausgleichsgerade 251

19.2 Anpassung von Fit-Parametern für Ausgleichskurven/-parabeln 255

20	Messwertverteilung	259
20.1	Diskrete Gleichverteilungen	260
20.2	Zweipunktverteilung	261
20.3	Binomialverteilung	263
20.4	Hypergeometrische Verteilung	268
20.5	Poisson-Verteilung	274
20.6	Stetige Gleichverteilung	278
20.7	Exponentialverteilung	281
20.8	Gauß'sche Normalverteilung	283
20.9	Logarithmische Normalverteilung	289
21	Parameterschätzungen	291
21.1	Chi-Quadrat-Verteilung (χ^2 -Verteilung)	292
21.2	Student t-Verteilung	295
21.3	Schätzmethoden	298
21.4	<i>Maximum-Likelihood-Verfahren</i>	302
21.5	Vertrauens- und Konfidenzintervalle für die unbekannten Parameter θ einer Verteilung	306
21.6	Parametertests	314
22	Methodenvalidierung	325
22.1	Standardzusatz/Standardaddition	326
22.2	Interner Standard und externer Standard	328
23	Ausreißertests	335
	Antworten	341
	Weiterführende Literatur	346
	Serviceteil	
	Glossar	348
	Stichwortverzeichnis	363