

Vorlesung B201 - Geochemische Analytik

Im SS 2020 wird die Vorlesungsteil „Organische Analytik“ bis auf weiteres in Form des Selbststudiums auf der Basis der on-line verfügbaren Lehrmaterialien angeboten. Der von Dr. Garbe-Schönberg beigetragene Teil der Vorlesung wird hier nicht aktualisiert sondern ist über OLAT einzusehen.

Rückfragen zu Lehrinhalten oder zur Organisation bitte per e-mail (sekretariat.geochemie@ifg.uni-kiel.de) oder zu Sprechzeiten in Raum 416 an Frau Fischer-Garbrecht.

Fragen werden individuell per e-mail beantwortet oder bei häufig gestellten Fragen (FAQ) wird eine Erläuterung auf der Webseite der Arbeitsgruppe „Organische Geochemie“ platziert.

Vorlesung B201 - Geochemische Analytik

Zur Vorlesung werden 7 Kapitel (entspricht 8 Vorlesungsstunden)
für das Eigenstudium bereitgestellt:

- 1) Einführung
- 2) Probennahme/-vorbereitung
- 3) Elementaranalyse
- 4) Lösungsmittelextraktion
- 5) Präparative Chromatographie
- 6) Analytische Chromatographie (GC, GC/MS)
- 7) Analytische Chromatographie (LC, LC/MS)

Geochemie 1 (MNF-geow-B201)

Modulveranstaltung(en)		
Veranstaltungsart	Lehrveranstaltungstitel	Pflicht /Wahl
Vorlesung	Geochemische Analytik (2 SWS) Thermodynamik (1 SWS) Geochemie der organischer Naturstoffe (1 SWS)	Pflicht

Kurzzusammenfassung

Grundlagen der Anwendung des chemischen Methodeninventars in den Geowissenschaften

Lehrinhalte

Einführung in die Analytik komplexer organischer und anorganischer Stoffgemische aus der Geobiosphäre. Extraktion und Aufreinigung von Elementen und Molekülen aus wässriger, sedimentärer oder biogener Matrix, gefolgt von qualitativer und quantitativer spektroskopischer Analyse. Diskussion von analytischen Fehlern und Interpretierbarkeit der Resultate.

Einführung in die Prinzipien der Thermodynamik, um die Energieflüsse und Entwicklung geologischer Reaktionen in offenen und geschlossenen Systemen zu verstehen. Erläuterung der wechselseitigen Beeinflussung und von Abhängigkeit von Temperatur, Druck, Konzentration und chemischem Potential der beteiligten Reaktanden.

Einführung in die Chemie ausgewählter organischer Naturstoffe, die in der Biogeosphäre von besonderer Bedeutung sind. Aufbau und Nomenklatur von (funktionalisierten) Kohlenwasserstoffen, ihr Vorkommen in der Biosphäre und ihr chemotaxonomisches Potential. Transformationsprozesse beim Transfer von Biomolekülen in die Geosphäre und Stabilität der Produkte über geologische Zeiträume.

Lernziele

Die Studierenden entwickeln ein Verständnis für die Reaktionsmechanismen und Anwendung chemischer Diagnostik in den Geowissenschaften.

Kapitel 1 - Einführung

Apparative Analysenmethoden?

- Moderne (und traditionelle) Analysenverfahren in der **organischen** Geochemie/Umweltgeochemie
- Einsatz der Verfahren in Erdölgeologie, Fazies-/Umweltanalytik
- Vielzahl der Verfahren entwickelt für Biochemie oder Medizin, heute aber Anwendungen darüber hinaus
- **Ziel der Veranstaltung: Einführung und Erläuterung moderner Analysenverfahren in der Geochemie/Umweltanalytik**

Wofür apparative Analysenmethoden?

- Charakterisierung verschiedenster Proben (z.B. Erdöl, Gesteine, Sedimente, Böden, Pflanzen)
- Ermittlung verschiedener organischer Inhaltsstoffe (natürliche und Kontaminationen)
- Reife/Fazies-Determinierung von Erdölmuttergesteinen
- Erkennung von Belastungen mit z.B. polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK), PCB, DDT...
- ...

Wozu dient Elementaranalyse?

Screeningverfahren zur Ermittlung des Gehaltes an OM (organischem Material)

Ziele: Datenreduktion und Probenauswahl

Determinierung von Qualität und Zusammensetzung von Kerogen/OM

Alternativen zu 1.:

OM = TOC x 1.2~1.4

OM = Glühverlust beim Veraschen um 600°C

pot. Fehler:

Karbonatersetzung

Wasser aus Tonmineralen

Wasser aus Dehydrierung von Hydroxiden (z.B. Eisenhydroxiden oder Eisenoxidhydraten)

OM = indirekt über Oxidation mit Cr⁶⁺, dabei Übertragung von Elektronen auf Cr⁶⁺ → Cr³⁺, d.h. OM stellt Reduktionsäquivalente für Cr.

pot. Fehler:

nicht alle Reduktionsäquivalente aus OM

Problem bei der Anzahl der Elektronen, die übertragen werden (Folge: z.B. Erzeugung von Cr⁴⁺)

Umrechnungsfaktoren müssen eingesetzt werden, die empirisch ermittelt sind (DIN 19684/T2).

Alternativen zu 2.:

HI/OI vs. H/C / O/C Diagramm: Beispiel für Kerogenzusammensetzung

Methoden der Strukturaufklärung organischen Materials wurden entwickelt für Analyse von Reinsubstanzen

Methodeninventar ist aber meist auch (nach Adaption) einsetzbar für komplexe Stoffgemische, vorzugsweise wenn diese zuvor in Stoffklassen mit ähnlichen Eigenschaften aufgetrennt wurden. Dies erfolgt für lösliche Komponenten über präparative Chromatographie oder Festphasenextraktion (SPE). Zur Identifizierung dienen dann typische spektroskopische Analyseverfahren:

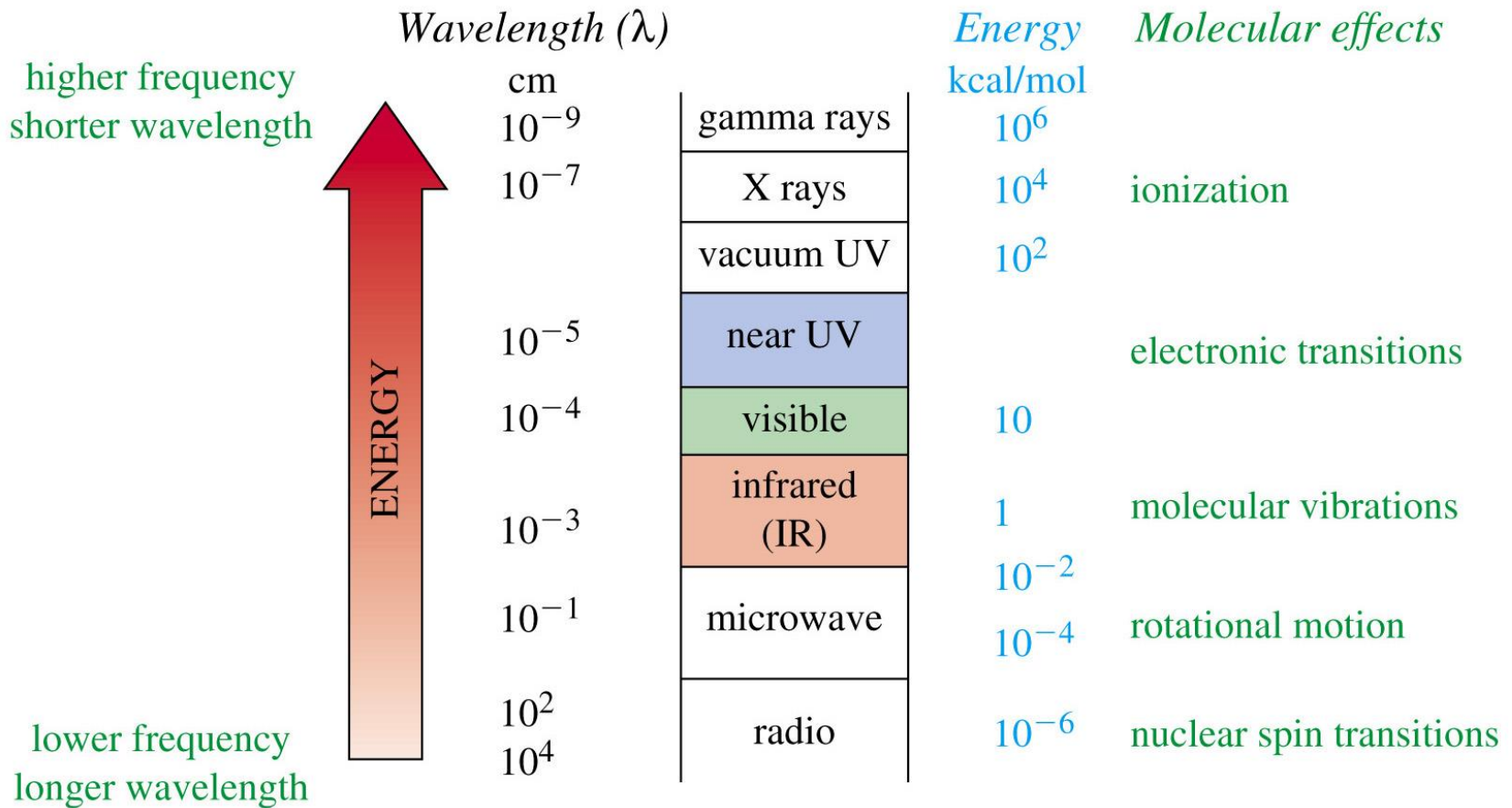
NMR – Spektroskopie

UV-vis - Spektroskopie

IR – Spektroskopie

Massenspektroskopie

Das elektromagnetische Spektrum



Das elektromagnetische Spektrum reicht von niedrigen Radiofrequenzen bis zu hochenergetischer Gammastrahlung. Je höher die Frequenz, desto kürzer die Wellenlänge. Wellenlängen üben über ihre unterschiedliche Energieinhalte molekulare Effekte aus.

Analysentechniken

