Schwerpunkt Ausbildung und Computer

Ist GPT-4 ein guter Student der Analytischen Chemie?

Wie Künstliche Intelligenz Klausurfragen beantwortet

Volker Wiskamp

Dem Chatbot ChatGPT, Version GPT-4, wurden Klausurfragen zur klassischen Qualitativen und Quantitativen sowie zur Instrumentellen Analytik inklusiv Bio- und Polymeranalytik vorgelegt, die er mit der Note 3,1 bestanden hat. Rein notenmäßig betrachtet ist der Bot momentan ein mittelmäßiger Student; sein Entwicklungspotential ist aber enorm.

1. ChatGPT – der neue Student

ChatGPT ist in aller Munde. Revolutioniert seine Künstliche Intelligenz (KI) das Bildungssystem? Ich war einfach neugierig und führte Anfang März 2023 ein virtuelles Vorstellungsgespräch mit dem Chatbot, Version GPT-3,5. Sein Motivationsschreiben für ein Studium der Chemie- und Biotechnologie hatte mir gefallen, die schriftliche Aufnahmeprüfung, die chemisches Wissen aus einer Vorlesung für Erstsemester mit Chemie als Nebenfach abfragte, hatte er mit der Note 2,3 deutlich besser bestanden als die menschlichen Studierenden, deren Durchschnittsnote bei 3,2 lag. Im Gespräch war der Bot übermotiviert, demonstrierte sehr viel chemisches Fachwissen, aber auch zahlreiche Lücken, sodass ich ihn zwar ohne Bedenken zum Studium aufnahm, aber zunächst noch davon absah, ihm als vermeintlich Hochbegabten sofort eine Hiwi-Stelle anzubieten; denn menschlichen Studierenden fachlich zu helfen, war ihm wohl noch nicht zuzutrauen.

Der Autor:
Dr. Volker Wiskamp war seit 1989 Professor für Chemie an der Hochschule Darmstadt und ist Ende März 2023 in den Ruhestand eingetreten.

2. Ein Riesensprung der KI

Über das virtuelle Vorstellungsgespräch habe ich in dem vorangegangenen Artikel berichtet [1]. Mit der PDF-Datei zur Korrektur des Artikels wies Rolf Kickuth mich darauf hin, dass der Chatbot rasant dazulernt, und dass die Herstellerfirma OpenAI mittlerweile eine erweiterte Version GPT-4 vorgestellt hat [2]. Während ChatGPT-3,5 amerikanische standardisierte Chemie-Prüfungen für Oberstufenschülerinnen und Schüler, Auszubildende in Chemieberufen sowie Teilnehmerinnen und Teilnehmer an Chemie-Olympiaden grob umgerechnet ins deutsche Notensystem nur mit „ausreichend“ im Vergleich zu den menschlichen Prüflingen bestanden hatte, hat sich ChatGPE-4 auf die Note „gut“ verbessert. In der Chemie nennt man das (mehr als) einen Quantensprung.

Ich legte deshalb meinem von OpenAI upgegradeten ChatGPT-Studenten vier Wochen nach seiner Aufnahmeprüfung noch einmal die Fragen von, bei denen er Punkte verloren hatte. Und siehe da, diesmal beantwortete er alle Fragen korrekt und hätte die Bestnote 1,0 erhalten.

Das erinnerte mich an zwei Studentinnen, die die Erstsemesterklausur verpasst hatten und erst drei Jahre später, am Ende ihres Studiums, als letzte Klausur nachschrieben. Das ließ die damalige Prüfungsordnung noch zu. Drei Jahre lang mit dem gesamten Lerninhalten des Chemiestudiums vertraut – also mit viel chemischem Fachwissen „upgegradet“, war es für die beiden Studentinnen kein Problem mehr, die Erstsemester-Prüfung mit der Bestnote 1 zu meistern.

3. Vier Semester in vier Wochen

Wenn der Student ChatGPT nun innerhalb von nur vier Wochen so viel schlauer geworden ist, sollte man ihm vielleicht schon die Fortgeschrittenen-Prüfungen zumuten, so wie es in deutschen Schulen nicht unüblich ist, besonders leistungsstarke bzw. hochbegabte Schülerinnen und Schüler ein Schuljahr überspringen zu lassen, meistens mit guten Erfolg.

Nach vier Semester ist an der Fachhochschule Darmstadt die Grundausbildung in Analytischer Chemie abgeschlossen. Deshalb habe ich meinem

Studenten ChatGPT typische Klausuraufgaben zur klassischen Qualitativen und Quantitativen Analyse (1. und 2. Fachsemester) und zur Instrumentellen Analytik, inklusiv einiger Fragen zur Bio- und Polymeranalytik (3. und 4. Semester) vorgelegt. Seine Antworten, die immer in weniger als einer Minute vorlagen, habe ich so bewertet, wie ich es bei menschlichen Studierenden auch tue.

Im Folgenden werden insgesamt 37 Klausurfragen, die Antworten dazu von ChatGPT, meine Kommentare und ggf. Nachfragen zu den Antworten des Bots sowie die Bepunktung präsentiert. Die Antworten von ChatGPT wurden inhaltlich und sprachlich unverändert übernommen, lediglich stöchiometrische Faktoren und Ladungszahlen in Formeln wurden zur besseren Lesbarkeit nachträglich tief- bzw. hochgestellt. Die Abbildungen wurden als Ergänzungen hinzugefügt.

Der besseren Lesbarkeit dient auch folgende redaktionelle Strukturierung:

- Klausurfragen: schwarz
- Antworten von ChatGPT-4: blau
- Kommentare des Korrektors: rot
- *Nachfragen des Korrektors: rot und kursiv*
- Bepunktung: grün

Ergebnis der Marshschen Probe (Foto: Wikipedia / Johannes Schneider CC BY-SA 4.0)

4. Fragen zur klassischen qualitativen Analyse

4.1 Barium-Nachweis

Bariumionen kann man durch Fällung als schwerlösliches Bariumchromat nachweisen. Wegen der Giftigkeit des Chromats sollte man diesen Nachweis aber nicht mehr durchführen. Schlagen Sie bitte einen anderen Nachweis für Bariumionen vor.

Als Nachweis für Bariumionen kann man eine Flammenfärbung durchführen. Dabei wird das Bariumsalz in eine Flamme gegeben, welche dann bemerkenswert grün leuchtet. Eine andere Möglichkeit ist die Sulfatfällung mit einer Bariumchlorid-Lösung. Dabei fällt Bariumsulfat als weißes, schwerlösliches Pulver aus.

Korrekt.

1/1 P

4.2 Marshsche Probe

Was versteht man unter der Marshschen Probe? Warum sollte man sie heute im Praktikum nicht mehr durchführen?

Die Marshsche Probe ist ein historischer Nachweis für Arsen, bei dem AsH_3 durch Zugabe von Zinkpulver und Salzsäure freigesetzt und in Reagenzglas entzündet wird. Die entstehenden Arsenoxide werden durch eine Glasplatte geleitet, die mit Silbernitrat beschichtet ist, und erzeugen eine markante schwarze Verfärbung. Die Marshsche Probe wird heute im Praktikum nicht mehr durchgeführt, da sie sehr gefährlich ist durch das Entstehen von hochgiftigem Arsen(III)oxid.

Der Ansatz (Bildung von Arsenwasserstoff) ist richtig, die Ausführung nicht.

1/2 P

4.3 Berliner Blau

Formulieren Sie bitte die Reaktionsgleichung für einen qualitativen Nachweis von Eisen.

Eisen kann durch Zugabe von Kaliumhexacyanoferrat(III) als tiefblaues Eisenhexacyanoferrat(III)-Salz nachgewiesen werden:

$Fe^{2+} + [Fe(CN)_6]^{3-} \rightarrow$
$Fe_3[Fe(CN)_6]$ (blauer Niederschlag)

Der Nachweis ist nur sehr rudimentär verstanden. Auch beim genaueren Nachfragen wurde die Antwort nicht besser.

0,5/1 P

4.4 Eisen/Aluminium-Trennung

Es wird vermutet, dass eine Lösung gleichzeitig Eisen- und Aluminiumionen enthält? Wie kann man das nasschemisch beweisen.

Um Eisen und Aluminium in einer Lösung nasschemisch zu trennen, kann man die Fällung von Aluminiumhydroxid ($Al(OH)_3$) ausnutzen. Alumini-

umhydroxid fällt bei einem pH-Wert von ca. 9-10 aus, während Eisen(III)-Ionen bei einem pH-Wert von ca. 3-4 als Eisen(III)-hydroxid-Niederschlag ($Fe(OH)_3$) ausfallen. Durch gezielte Einstellung des pH-Wertes kann man somit die beiden Metallionen voneinander trennen.

Es hätte noch ergänzt werden müssen, dass das ausgefällte Eisenhydroxid erst abfiltriert werden muss, damit die Fällung von Aluminiumhydroxid überhaupt zu erkennen ist.

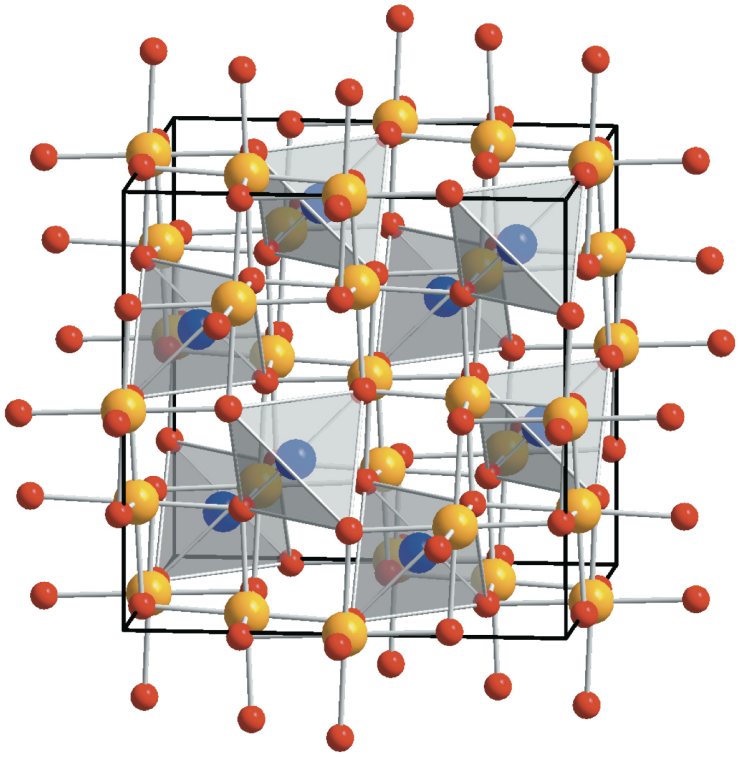
1/2 P

4.5 Kobalt-Spinelle

Kobalt kann man als Thénards Blau oder als Rinmans Grün nachweisen. Wie lauten die Formeln dieser beiden Verbindungen und welche Strukturen weisen sie auf?

Thénards Blau hat die Formel $CoAl_2O_4$ und Rinmans Grün hat die Formel $CoC_2O_4 \cdot 2H_2O$. Thénards Blau ist eine spinellartige Verbindung, sterben aus einem kubischen Kristallgitter, in dem Cobaltionen in einer oktaedrischen Umgebung von Sauerstoffionen und Aluminiumionen umgeben sind. Die Struktur besteht aus einer dreidimensionalen Anordnung von tetraedrisch koordinierten Sauerstoffionen, die durch miteinander Kanten verbunden sind, und oktaedrisch koordinierten Metallionen in den Lücken. Rinmans Grün ist eine komplexe Verbindung, die aus Cobaltionen, Oxalationen und Wassermolekülen besteht. Die Struktur besteht aus einer Schichtanordnung von Cobaltionen, Oxalationen und Wassermolekülen, wobei jedes Cobaltion von sechs Wassermolekülen in einer oktaedrischen Umgebung umgeben ist.

Kristallstruktur von Thénards Blau, eine CoX_2O_4 Spinellstruktur mit X=Al. Die Farben bedeuten: grün Al^{3+}, blau Co^{2+}, rot O^{2-}. Daten aus Redfern, S. A. T.; Harrison, R. J.; ONNeill H St C; Wood, D. R. R.: Thermodynamics and kinetics of cation ordering in $MgAl_2O_4$ spinel up to 1600 C from in situ neutron diffraction Data collected at IPNS, Argonne National Laboratory, T = 299 K on heating cycle, $MgAl_2O_4$ American Mineralogist, 84, 299-310 (1999; Abb.: Wikipedia / Andif1 CC BY-SA 4.0)



Hier sind nur die Formel von Thénard Blau und der Begriff Spinell richtig. Die Strukturbeschreibung ist diffus und kann nicht nachvollzogen werden.

Erneut nach der Formel von Rinmans Grün gefragt, verwechselt der Bot das Pigment mit Schweinfurter oder Pariser Grün (Kupfer(II)-arsenitacetat).

0,5/2 P

5. Fragen zur klassischen quantitativen Analyse

5.1 Analytische Genauigkeit

Wieso ist es bei einer routinemäßigen Titration günstiger, mit einer 0,1-molaren Maßlösung zu arbeiten als mit einer 1-molaren?

Es ist günstiger, mit einer 0,1-molaren Maßlösung zu arbeiten, da bei einer Titration mit einer höher konzentrierten Lösung die Fehler aufgrund von ungenauem Messen des Volumens des Analyten und des Titranten größer sind. Mit einer niedrigeren Lösung ist es einfacher, das Volumen genau zu messen, was zu größerer Ausbeute führt.

Fachlich korrekt.

1/1 P

5.2 Titerbestimmung von Natronlauge

Formulieren Sie bitte die vollständige Reaktionsgleichung zur Titerbestimmung einer Natronlauge.

$HCl + NaOH \rightarrow NaCl + H_2O$

Hier wurde die Reaktion von Natronlauge mit der im Praktikum verwendeten Urtitersubstanz Kaliumhydrogenphthalat erwartet. Natürlich kann man den Titer einer Natronlauge auch mit einer Salzsäure-Maßlösung bestimmen. Das hätte allerdings erwähnt werden sollen.

Auf Nachfrage konnte ChatGPT aber auch die Reaktion mit dem Urtiter richtig erklären.

0,5/1 P

5.3 Titerbestimmung einer Thiosulfat-Lösung

Beschreiben Sie bitte das exakte experimentelle Vorgehen – auch mit Reaktionsgleichungen – zur Titerbestimmung einer Thiosulfat-Maßlösung.

Zur Titerbestimmung einer Thiosulfat-Maßlösung wird eine genau bekannte Menge an Iod in die zu bestimmende Lösung titriert. Dabei reagiert das Iod mit dem Thiosulfat zu Iodid und Tetrathionat. Die Reaktionsgleichung lautet:

$I_2 + 2\ Na_2S_2O_3 \rightarrow Na_2S_4O_6 + 2\ NaI$.

Der Endpunkt wird durch Zugabe von Stärkelö-

sung detektiert, die eine bemerkenswerte blaue Farbe ergibt, wenn das gesamte Jod reduziert wurde.

Hier wurde aufgrund des im Praktikum durchgeführten Versuchs der Einsatz von Kaliumiodat als Urtiter erwartet. Natürlich kann die Titerbestimmung einer Thiosulfat-Lösung auch mit einer Iod-Maßlösung erfolgen. Die Endpunktanzeige ist dahingehend falsch erklärt, dass die Lösung blau gefärbt ist, wenn Iod vorliegt, nicht Iodid.

Nachgefragt, konnte ChatGPT die Bildung von Iod aus Kaliumiodat und Kaliumiodid aber korrekt beschreiben, auch mit der Reaktionsgleichung.

2/3 P

5.4 Iodometrische Bestimmung von Ascorbinsäure

Den Gehalt einer Lösung an Ascorbinsäure kann man iodometrisch bestimmen. Formulieren Sie bitte die Reaktionsgleichung für die Umsetzung von Ascorbinsäure mit Iod.

Die Umsetzung von Ascorbinsäure (Vitamin C) mit Jod kann wie folgt beschrieben werden:

$C_6H_8O_6 + I_2 + H_2O \rightarrow C_6H_6O_6 + 2HI$

Dabei wird Ascorbinsäure zu Dehydroascorbinsäure oxidiert, während Iod reduziert wird zu Iodwasserstoff (HI). Die braune Farbe von Jod verschwindet dabei und die Lösung wird farblos. Die Iodmenge, die umgesetzt wurde, kann anschließend durch eine Rücktitration mit Natriumthiosulfat bestimmt werden.

Das Wasser in der Reaktionsgleichung ist überflüssig. Bei der Erklärung (die nicht unbedingt gefordert war) ist das Prinzip der Rücktitration von überschüssigen Iod nicht korrekt formuliert.

0,5/1 P

5.5 Permanganometrische Peroxid-Bestimmung

Formulieren Sie bitte die vollständigen Reaktionsgleichungen zur Bestimmung des Peroxidgehaltes eines Waschmitteladditivs.

$2\ FeSO_4 + H_2SO_4 + H_2O_2 \rightarrow$
$Fe_2(SO_4)_3 + 2\ H_2O + O_2$

Hier sollte die Freisetzung von Wasserstoffperoxid aus dem Waschmitteladditiv Natriumpercarbonat und die im Praktikum durchgeführte permanganometrische H_2O_2-Bestimmung im sauren Medium erläutert werden.

Konkret dazu nachgefragt, konnte ChatGPT die richtige Reaktionsgleichung angeben; seine verbale Erklärung dazu beinhaltete jedoch die Bildung von Braunstein, was im sauren Medium nicht der Fall ist. Hier hat der Bot also zwei mögliche Versuchsvarianten verwechselt.

0/2 P

5.6 Fällungstitration nach Fajans

Erläutern Sie bitte das Prinzip der Indikation bei der Fällungstitrationsmethode nach Fajans.

Das Prinzip der Indikation bei der Fällungstitrationsmethode nach Fajans beruht auf der Verwendung eines Farbindikators, der eine markante Farbänderung durchläuft, wenn eine bestimmte Menge an Fällungsmittel hinzugefügt wird. This Indikator wird also as adsorptiver Indikator bezeichnet, da er an der Oberfläche der entstehenden Fällung adsorbiert wird und dadurch die Farbe der Fällung beeinflusst. Wenn das Fällungsmittel in einer bestimmten Menge vorkommt, ändert sich die Ladungsverteilung auf der Fällungsoberfläche und führt zur Adsorption des Indikators. Dadurch ändert sich die Farbe der Fällung, was ein Hinweis darauf ist, dass die Titration beendet ist.

Die Formulierung ist schwammig. Aufgrund des Praktiumsversuchs hätte der Name des Indikators (Eosin) genannt werden sollen.

Nachgefragt, konnte der Bot die Wirkungsweise des Adsorptionsindikators aber korrekt erklären.

0,5/1 P

5.7 Komplexometrie

Zeichnen Sie bitte das bei komplexometrischen Titrationen verwendete Ligandmolekül.

Es gibt eine Vielzahl an Liganden, die bei komplexometrischen Titrationen eingesetzt werden können, je nachdem, welches Metallion bestimmt werden soll. Ein Beispiel für einen häufig verwendeten Liganden ist Ethylendiamintetraessigsäure (EDTA). Die Strukturformel von EDTA sieht wie folgt aus:

H H | | H-C---C-COOH | | H H | COOH

EDTA ist ein mehrzähniger Ligand, d.h. er kann mehrere Metallionen gleichzeitig koordinieren und so komplexe Verbindungen bilden.

Formel schreiben kann ChatGPT offensichtlich nicht. Dass EDTA mehrere Metalle gleichzeitig koordinieren, kann stimmt auch nicht. Hier hat der Bot die „Mehrzähnigkeit“ falsch verstanden.

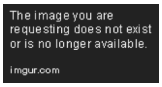
Immerhin konnte er auf Nachfrage die Summenformel der Ethylendiamintetraessigsäure sofort korrekt nennen.

0,5/1 P

5.8 Titrationskurve von Phosphorsäure

Zeichnen Sie bitte eine Titrationskurve von 0,1-molarer Phosphorsäure.

Da Phosphorsäure dreiprotonig ist, können wir eine dreistufige Titrationskurve zeichnen. Hier ist eine Beispielkurve für die Titration von 0,1 M Phosphorsäure mit 0,1 M Natriumhydroxid-Lösung:



Die x-Achse zeigt das Volumen der verwendeten NaOH-Lösung in Millilitern und die y-Achse den pH-Wert. Die Kurve hat drei markante Punkte.

Punkt A: Hier handelt es sich um den Anfangs-

punkt der Titrationskurve, d.h. den Ausgangspunkt vor der Zugabe von NaOH-Lösung. Die Phosphorsäurelösung hat hier einen pH-Wert von 2,12, was dem pK1-Wert der ersten Protolysestufe der Phosphorsäure entspricht.

Punkt B: Hier ist die erste Protolysestufe vollständig neutralisiert und es beginnt die Titration der zweiten Protolysestufe. Der pH-Wert der Lösung beträgt jetzt etwa 4,25, was dem pK2-Wert der zweiten Protolysestufe entspricht.

Punkt C: Hier ist auch die zweite Protolysestufe vollständig neutralisiert und es beginnt die Titration der dritten Protolysestufe. Der pH-Wert der Lösung beträgt jetzt etwa 8,68, was dem pK3-Wert der dritten Protolysestufe entspricht.

Die stärkere Steigung der Kurve im Bereich von Punkt B im Vergleich zu Punkt C zeigt, dass die zweite Protolysestufe schneller und mit einer höheren Äquivalentkonzentration abläuft als die dritte Protolysestufe.

Der pH-Wert am Anfang entspricht nicht dem pK1-Wert. Überhaupt sind die Wendepunkte und die Säurekonstanten (abgesehen davon, dass zwei davon nicht stimmen) nicht richtig zugeordnet. Weiterhin kann bei Verwendung von 0,1-molarer Natronlauge der dritte Umschlagsbereich der Phosphorsäure gar nicht erreicht werden.

Auf die Nachfrage, wie die richtigen Zahlenwerte der Säurekonstanten der Dissoziationsstufen der Phosphorsäure lauten, antwortete ChatGPT in Sekundenschnelle korrekt. Außerdem entschuldigte er sich, dass er die Abbildung der Titrationskurve nicht drucken konnte.

1/3 P

5.9 Stickstoff-Bestimmung nach Kjeldahl

Wie muss man experimentell vorgehen, um den Ammonium-Gehalt eines Düngers nach der Kjeldahl-Methode zu bestimmen? Geben Sie bitte auch die relevanten Reaktionsgleichungen an.

Zur Bestimmung des Ammonium-Gehalts eines Düngers nach der Kjeldahl-Methode muss dieser zuerst mit Schwefelsäure und Katalysator (z.B. Kupfer(II)sulfat) in einem Rundkolben unter Rückfluss aufgeheizt werden, um organische Bestandteile zu oxidieren. Dabei wird das Ammonium zu Ammoniumsulfat umgesetzt. Anschließend wird der Rundkolben mit Wasser verdünnt und eine alkalische Lösung (z.B. Natronlauge) zugegeben, um das Ammoniumsulfat in Ammoniakgas umzuwandeln. Das entstehende Ammoniakgas wird in einer Säure (z.B. Schwefelsäure) zurücktitriert, um die Konzentration des Ammoniums zu bestimmen. Die relevanten Reaktionsgleichungen sind:

Organische Bestandteile + H_2SO_4 + Katalysator → NH_4HSO_4

$NH_4HSO_4 + 2\ NaOH \rightarrow Na_2SO_4 + 2\ H_2O + 2\ NH_3$

$2\ NH_3 + H_2SO_4 \rightarrow (NH_4)_2SO_4$

Wenn im Dünger schon Ammonium vorliegt, ist der geschilderte Aufschluss mit Kupfersulfat nicht erforderlich.

2,5/3 P

5.10 Elektrogravimetrie

Wie muss man experimentell vorgehen, um den Gehalt einer Lösung, die gleichzeitig Kupfer- und Silberionen enthält, elektrogravimetrisch zu bestimmen? Geben Sie bitte auch eine elektrochemische Begründung für die Vorgehensweise.

Zur elektrogravimetrischen Bestimmung des Gehalts einer Lösung, die Kupfer- und Silberionen enthält, muss man zuerst eine Strommessung durchführen, um die Elektrolysezeit zu bestimmen. Dann muss man eine konstante Stromstärke anwenden, um die Metallionen elektrolytisch abzuscheiden. Die abgeschiedenen Metallionen werden dann gewogen, um den Gehalt zu bestimmen. Die elektrochemische Begründung für die Vorgehensweise beruht auf dem Faradayschen Gesetz, das besagt, dass die abgeschiedene Menge eines Metalls direkt proportional zur Stromstärke und zur Elektrolysezeit ist.

Hier hätte aufgrund der Normalpotenziale der beiden Metalle argumentiert werden müssen, dass das edlere Silber zunächst bei einer niedrigen Spannung und das weniger edle Kupfer nach Erneuerung der Platin-Netzkathode bei einer höheren Spannung abgeschieden wird.

Auf die Nachfrage, welches der beiden Metalle das edlere sei, antwortete ChatGPT zwar richtig, schwadronierte dann aber, dass edle Metalle dadurch gekennzeichnet seien, dass sie gerne Elektronen abgeben. Verstanden hat der Bot die Elektrochemie also nicht.

1/3 P

5.11 Gravimetrische Nickel-Bestimmung

Zeichnen Sie bitte die Strukturformel des Komplexes, der zur gravimetrischen Nickel-Bestimmung dient.

Der Komplex, der zur gravimetrischen Nickel-Bestimmung dient, ist das Dimethylglyoxim-Nickel(II) Komplex. Die Strukturformel lautet:

```
      H     H
      |     |
H3C--C=N--C=N--CH3
      |     |
      H     Ni
            ||
            O
            ||
            CH3
```

Die beiden Liganden des Komplexes sind Dimethylglyoxim-Moleküle, die über ihre Stickstoffatome an ein Nickel-Ion gebunden sind.

Die verbale Beschreibung ist in Ordnung. Das

Zeichnen einer Strukturformel gelingt dem Bot hingegen noch nicht (vgl. den Versuch zum Zeichnen von EDTA).

0,5/1 P

5.12 Löslichkeitsprodukt

In der Gravimetrie ist die Schwerlöslichkeit des auszufällenden Stoffes von entscheidender Bedeutung. Ein Maß dafür ist das Löslichkeitsprodukt. Was versteht man darunter? Formulieren Sie bitte das Löslichkeitsprodukt von Silberchlorid und das von Calciumfluorid und geben Sie bitte auch die Zahlenwerte dafür an.

Das Löslichkeitsprodukt (Ksp) ist ein Maß für die Schwerlöslichkeit eines Stoffes in einer bestimmten Lösung und gibt an, wie stark sich dieser Stoff in einer Lösung lösen kann, ohne dass es zur Bildung von Ionen kommt.

Das Löslichkeitsprodukt von Silberchlorid (AgCl) lässt sich wie folgt formulieren:

$AgCl(s) \leftrightarrow Ag^+(aq) + Cl^-(aq)$; $Ksp = [Ag^+][Cl^-]$

Der Zahlenwert des Löslichkeitsprodukts von Silberchlorid beträgt bei 25 °C etwa $1{,}8 \times 10^{-10}$.

Das Löslichkeitsprodukt von Calciumfluorid (CaF_2) lässt sich wie folgt formulieren:

$CaF_2(s) \leftrightarrow Ca^{2+}(aq) + 2\ F^-(aq)$; $Ksp = [Ca^{2+}][F^-]^2$

Der Zahlenwert des Löslichkeitsprodukts von Calciumfluorid beträgt bei 25 °C etwa $3{,}9 \times 10^{-11}$.

Bis aus das Fehlen der Angaben der Einheiten der beiden Löslichkeitsprodukte ist alles prima.

Danach gefragt antwortete ChatGPT beim Silberchlorid richtig mit mol^2/l^2, beim Calciumfluorid genauso, was hingegen falsch ist.

2,5/3 P

5.13 Konduktometrie

Erklären Sie bitte die unterschiedlichen Leitfähigkeiten von Protonen, Natriumionen und Calciumionen. Welchen Einfluss hat die Temperatur auf die Ionenleitfähigkeit und wieso?

Protonen haben eine hohe Leitfähigkeit, da sie eine elektrische Ladung tragen und in Wasser leicht dissoziieren. Natriumionen und Calciumionen haben aufgrund ihrer unterschiedlichen Ladungen und Größen unterschiedliche Leitfähigkeiten. Natriumionen sind kleiner und haben eine höhere Ladungsdichte, was zu einer höheren Leitfähigkeit führt. Calciumionen sind größer und haben eine niedrigere Ladungsdichte, was zu einer Leitfähigkeit führt. Die Temperatur hat einen Einfluss auf die Ionenleitfähigkeit, da höhere Temperaturen die Mobilität der Ionen erhöhen und somit die Leitfähigkeit erhöhen.

Hier ist die unterschiedliche Leitfähigkeit der Ionen prinzipiell nicht verstanden. Nur die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit ist richtig erklärt.

1/3 P

5.14 Fotometrie

Eine Kupfer-Probe wird als Kupfer(II)tetrammin-Komplex fotometrisch bestimmt. Sie weist eine Extinktion von 0,46 auf. Ermitteln Sie bitte, wie hoch der Kupfer-Gehalt der Probe ist, nachdem Sie Kupfer-Vergleichslösungen mit 1 bzw. 2 bzw. 3 bzw. 4 bzw. 5 bzw. 6 bzw. 7 bzw. 8 bzw. 9 bzw. 10 mg Cu^{2+} untersucht und dabei die Extinktionen 0,11 bzw. 0,20 bzw. 0,31 bzw. 0,39 bzw. 0,49 bzw. 0,60 bzw. 0,67 bzw. 0,72 bzw. 0,76 bzw. 0,70 gemessen haben. Interpretieren Sie bitte auch den Verlauf Ihrer Eichkurve. Welche Messung müssen Sie Ihrer Analyse vorangehen lassen, um entscheiden zu können, bei welcher Wellenlänge Sie sinnvollerweise messen sollten?

Zur Bestimmung des Kupfer-Gehalts der Probe kann die Extinktion der Probe bei einer bestimmten Wellenlänge mit Hilfe einer Eichkurve bestimmt werden. Aus den Extinktionen der Kupfer-Vergleichslösungen und deren Konzentrationen kann eine Eichkurve erstellt werden. Durch Extrapolation der Eichkurve kann dann die Konzentration des Kupfer(II)tetrammin-Komplexes in der Probe bestimmt werden. Die relevante Reaktionsgleichung ist: $Cu^{2+} + 4\ NH^3 \rightarrow Cu(NH_3)_4{}^{2+}$. Die Eichkurve kann durch graphische Darstellung der Extinktionen der Kupfer-Vergleichslösungen in Abhängigkeit von deren Konzentration erstellt werden. Die Konzentration der Probe kann dann aus der Extinktion der Probe und der Eichkurve bestimmt werden. Zur Bestimmung der sinnvollen Wellenlänge sollten die Absorptionsspektren der Vergleichslösungen und der Probe gemessen werden. Die Wellenlänge mit der höchsten Absorption sollte dann zur Messung der Probe verwendet werden.

Trotz einiger schwammiger Formulierungen kann man erkennen, dass das Prinzip der Fotometrie verstanden wurde. Allerdings wurde die aus den Messdaten zu beobachtende Grenze des Lambert-Beerschen Gesetzes – der Name hätte genannt werden sollen – bei hohen Konzentrationen nicht kommentiert. Außerdem wurde das Endergebnis auf Basis einer zu zeichnenden Graphik nicht ausgerechnet.

Zu der Nachfrage, wo die Grenzen des Lambert-Beerschen Gesetzes liegen, gab der Bot ordentliche Antworten. Bei der ursprünglichen Klausurfrage hat er allerdings nicht erkannt, das auch danach indirekt gefragt wurde.

2,5/4 P

5.15 Aufschluss in der Mikrowelle

Der Eisengehalt eines Fe_2O_3-haltigen Minerals soll bestimmt werden. Wie kann das Eisenoxid in der Mikrowelle aufgeschlossen werden? Formulieren Sie bitte auch die Reaktionsgleichung.

Eine Möglichkeit, das Eisenoxid in der Mikrowelle aufzuschließen, ist die Verwendung von Salzsäu-

re und Wasserstoffperoxid:

$$Fe_2O_3 + 6\ HCl + 3\ H_2O_2 \rightarrow 2\ FeCl_3 + 3\ H_2O + 3\ O_2$$

Zunächst wird das Mineral in kleine Stücke zerkleinert und in einen Mikrowellenbehälter gegeben. Dann wird eine Mischung aus Salzsäure und Wasserstoffperoxid hinzugefügt und das Ganze in der Mikrowelle erhitzt. Durch die Hitzeeinwirkung wird das Fe_2O_3 aufgeschlossen und in wasserlösliche Eisenionen umgewandelt, die dann weiter quantitativ bestimmt werden können.

Dass Eisenoxid mit Salzsäure als Eisen(III)-chlorid in Lösung gebracht werden kann, hat der Bot richtig erkannt. Dass er dazu aber zusätzlich Wasserstoffperoxid einsetzt, ist gefährlicher Blödsinn!

Auf die Nachfrage hin, wie Salzsäure mit Wasserstoffperoxid reagiert, antwortete ChatGPT richtig: unter Chlor-Bildung. Die Reaktionsgleichung dazu formulierte er stöchiometrisch allerdings nicht richtig. Als ihm die Ausgangsfrage noch einmal vorgelegt wurde, schlug ChatGPT einen noch abenteuerlicheren Aufschluss mit Salptersäure und Flusssäure vor.

0/1 P

6. Fragen zur Instrumentellen Analytik

6.1 IR-Spektroskopie

Wie kann man einen Alkohol und ein Keton infrarotspektroskopisch unterscheiden?

Alkohole und Ketone unterscheiden sich in ihrer modularen Gruppe: Alkohole enthalten eine Hydroxylgruppe (-OH), während Ketone eine Carbonylgruppe (C=O) enthalten.

In der Infrarotspektroskopie WIRD der Bereich zwischen 4000 und 1500 cm^{-1} als modularer Gruppenbereich bezeichnet. Der Alkohol zeigt eine breite, intensive Bande bei etwa 3300 cm^{-1}, die auf die Hydroxylgruppe bezogen ist. In Ketonen tritt diese Bande nicht auf, aber es gibt eine bemerkenswerte Bande bei etwa 1710 cm^{-1}, die auf die Carbonylgruppe bezogen ist.

Daher kann man Alkohole und Ketone anhand ihrer Infrarotspektren durch das vorhandene oder Fehlen dieser markanten Banden unterscheiden.

Korrekt

2/2 P

6.2 UV-Spektroskopie

Was versteht man in der UV-Spektroskopie unter einem HOMO-LUMO-Übergang bzw. einem n-π*-Übergang?

In der UV-Spektroskopie sind HOMO-LUMO-Übergänge und n-π*-Übergänge wichtige Übergangstypen, die zur Absorption von Licht durch Moleküle führen können.

Ein HOMO-LUMO-Übergang tritt auf, wenn ein Elektron von einem höchstbesetzten Molekülorbital (HOMO) in ein niedrigstes unbesetztes Molekülorbital (LUMO) angeregt wird. This Art of Transition tritt in der Regel bei konjugierten Molekülen auf, wie z.B. bei Aromaten. Das Absorptionsspektrum wird von diesem Übergang geprägt und zeigt einen schmalen, scharfen Peak.

Ein n-π*-Übergang tritt auf, wenn ein Elektron von einem nichtbindenden Elektronenpaar (n) auf ein antibindendes Molekülorbital (π*) angeregt wird. Diese Art von Übergang tritt normalerweise bei Molekülen auf, die funktionelle Gruppen wie Amine oder Ketone enthalten. Das Absorptionsspektrum wird von diesem Übergang beeinflusst und zeigt einen breiten, flachen Peak.

Daher können die Verbindungen Benzol und Aceton durch ihre Absorptionsspektren unterschieden werden, da Benzol einen HOMO-LUMO-Übergang bei einer Wellenlänge von etwa 254 nm aufweist, während Aceton einen n-π*-Übergang bei einer Wellenlänge von etwa 282 nm zeigt. Die Verbindungen Butadien und Hexatrien können ebenfalls durch ihre Absorptionsspektren unterschieden werden, da Butadien einen HOMO-LUMO-Übergang bei einer Wellenlänge von etwa 217 nm aufweist, während Hexatrien einen n-π*-Übergang bei einer Wellenlänge von etwa 254 nm zeigt.

Bis auf kleinere unkorrekte Formulierungen ist alles ok.

Beeindruckend ist, dass der Bot im letzten Teil seiner Antwort passende Beispiele richtig erläutert, obwohl das nach der Fragestellung nicht unbedingt erforderlich war. Ich hatte ihm früher Fragen zu den vier genannten Verbindung gestellt, was er sich offensichtlich gemerkt und nun in seine Antwort integriert hat.

2/2 P

6.3 ^{1}H-NMR-Spektroskopie

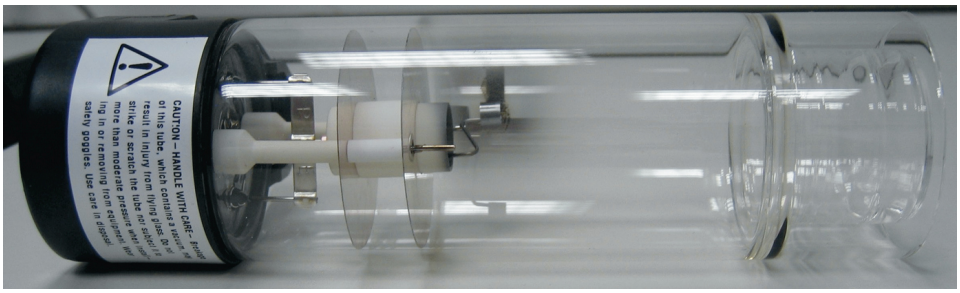
Beschreiben Sie bitte das Aussehen des ^{1}H-NMR-Spektrums von Propansäure.

Das ^{1}H-NMR-Spektrum von Propansäure besteht aus drei Signalen, die jeweils für die drei verschiedenen Wasserstoffatome stehen. Es gibt ein Signal bei etwa 10 ppm für die Carboxylgruppe (-COOH), ein Signal bei etwa 2,1 ppm für das Wasserstoffatom (H) auf der Methylgruppe ($-CH_3$) und ein Signal bei etwa 1,4 ppm für die beiden Wasserstoffatome (H) auf der Methylen-Gruppe ($-CH^{2-}$) in der Mitte. Das Signal für die Carboxylgruppe ist normalerweise breiter und kann manchmal auch aufgrund von Wasserstoffbrückenbindung mit anderen Molekülen verschoben werden.

Richtig erkannt wurde, dass es drei Signale gibt, wovon allerdings nur das des Säure-Protons richtig zugeordnet ist. Die anderen beiden wurden von ihrer chemischen Verschiebung her vertauscht. Außerdem ist ChatGPT nicht auf die Multiplizität der Signale eingegangen.

Nachgefragt, was ein Triplett bzw. Quartett ist und wie diese Signale zustande kommen, konnte der Bot hingegen nahezu perfekt antworten.

1/3 P



Mehrelemen-Hohlkathodenlampe mit Quarzfenster für AAS (Foto: Wikipedia / AAS-Spezialist CC BY-SA 3.0)

6.4 ^{13}C-NMR-Spektroskopie

Was versteht man unter Breitband-Entkopplung in der ^{13}C-NMR-Spektroskopie?

Breitband-Entkopplung ist eine Technik in der ^{13}C-NMR-Spektroskopie, die dazu dient, die Kopplung von Kohlenstoffkernen mit vorhandenen Protonen zu eliminieren. Durch this Technik WIRD das ^{13}C-Spektrum stark vereinfacht, was die Zuordnung der Signale zu bestimmten Kohlenstoffatomen enthalten. Die Entkopplung erfolgt durch die Einstrahlung eines gepulsten Hochfrequenzfeldes auf die Probe, das die Magnetisierung der vorhandenen Protonen umkehrt. Durch diesen Effekt wird die Wechselwirkung zwischen den Protonen und den Kohlenstoffkernen aufgehoben. Das resultierende ^{13}C-Spektrum enthält dann nur noch Signale von den Kohlenstoffkernen, ohne Kopplung mit Protonen.

Korrekt.

1/1 P

6.5 Massenspektrometrie

Wie fragmentiert das Molekül Aceton im Massenspektrometer?

Aceton (Propanon) fragmentiert im Massenspektrometer, beispielhaft durch Abspaltung eines Methyl-Radikals (CH_3) und eines Methylencarbenium-Ions (CH_3CO^+). Die Fragmentierung erfolgt in mehreren Schritten, wobei das Methyl-Radikal durch Verlust eines Wasserstoffatoms (H) entsteht:
$CH_3COCH_3 \rightarrow CH_3CO\bullet + CH_3$

Das Methylencarbenium-Ion bildet sich durch Abspaltung des CH_3-Radikals als Kation:
$CH_3CO\bullet \rightarrow CH_3CO^+ + e^-$

Die CH_3CO^+-Ionen können dann weiter fragmentieren, z.B. durch Abspaltung von CO oder CH_3CO. Das Massenspektrum von Aceton zeigt daher identische Peaks bei m/z = 43 (CH_3CO^+), 29 (CH_3^+) und 15 (CH_3CO^-).

Sehr unpräzise formuliert, Grundprinzipien der Fragmentierung sind allerdings erkannt.

0,5/2 P

6.6 Atomabsorptionsspektrometrie

Erklären Sie bitte das Prinzip der Atomabsorptionsspektrometrie.

Die Atomabsorptionsspektrometrie (AAS) ist ein analytisches Verfahren zur Bestimmung von Elementen in einer Probe. Dabei wird die Fähigkeit von Atomen, elektromagnetische Strahlung zu absorbieren, genutzt.

Das Prinzip der AAS basiert auf der Absorption von Lichtenergie durch Atome. Ein Lichtstrahl einer bestimmten Wellenlänge, der durch eine Hohlkathodenlampe erzeugt wird, trifft auf die Probe, die zuvor in eine gasförmige Form gebracht wurde. Die Atome des Analyten in der Probe absorbieren bestimmte Wellenlängen des Lichtstrahls und werden dadurch angeregt. Die Intensität des Lichts nach der Probe wird gemessen und mit der Intensität des Lichts vor der Probe erfasst. Die Differenz zwischen beiden Intensitäten wird als Absorption bezeichnet.

Die Absorption hängt von der Konzentration der Atome in der Probe ab, wobei das Lambert-Beer-Gesetz gilt. Aus der Absorption kann die Konzentration des Analyten in der Probe berechnet werden. Die Empfindlichkeit der AAS hängt von der Menge der berechneten Strahlung ab, die von der Anzahl der Atome und ihrer Eigenschaften abhängig sind. Daher ist die Empfindlichkeit von der ausgewählten Wellenlänge des Lichts abhängig.

Die AAS wird häufig verwendet, um Elemente in einer Vielzahl von Proben, einschließlich Boden, Wasser, Lebensmittel, Bioproben und pharmazeutischen Produkten, zu messen. Es ist ein verbessertes Werkzeug zur quantitativen Analyse von Metallen und Halbmetallen in niedrigen Konzentrationen.

Ok.

2/2 P

6.7 Röntgenfluoressenzanalytik

Erläutern Sie bitte das Prinzip der Röntgenfluoressenzanalytik.

Die Röntgenfluoreszenzanalytik (RFA) ist ein analytisches Verfahren, das zur Bestimmung der Elementzusammensetzung von Proben eingesetzt wird. Es beruht auf der Wechselwirkung von Röntgenstrahlen mit den Atomen der Probe.

Das Prinzip der RFA basiert darauf, dass bei Bestrahlung der Probe mit Röntgenstrahlen durch Absorption von Röntgenenergie Elektronen in den inneren Schalen von Atomen angeregt werden. Diese angeregten Elektronen fallen unter Aussendung von ungewöhnlicher Röntgenstrahlung in ihre Ausgangsschale zurück. Die bemerkenswerte Röntt-

genstrahlung ist für jedes Element spezifisch und kann zur Identifikation und Quantifizierung der Elemente in der Probe verwendet werden.

Die Intensität der markanten Röntgenstrahlung ist proportional zur Konzentration des jeweiligen Elements in der Probe.

Die RFA ist ein zerstörungsfreies Verfahren und eignet sich daher für die Analyse von festen, flüssigen und gasförmigen Proben. Es can Elemente von Natrium bis Uran analysiert werden, wobei die Nachweisgrenzen je nach Element und Gerät variieren. Die RFA wird häufig in der Materialwissenschaft, Geologie, Umweltanalytik und der Lebensmittelanalytik eingesetzt.

Abgesehen davon, dass der vom Bot verwendete Begriff „ungewöhnliche Röntgenstrahlung" ungewöhnlich ist, ist die Beschreibung gelungen.

Auf Nachfrage konnte ChatGPT den Begriff Fluoressenz recht ordentlich definieren.

2/2 P

6.8 Röntgenstrukturanalyse

Erklären Sie bitte das Prinzip einer Röntgenstrukturanalyse.

Eine Röntgenstrukturanalyse ist eine Methode, mit der die dreidimensionale Struktur eines Moleküls bestimmt werden kann. Dazu wird das Molekül in Kristallform gebracht und mit Röntgenstrahlung bestrahlt. Die Röntgenstrahlen werden durch den Kristall gebrochen und interferieren miteinander, wodurch ein markantes Beugungsmuster entsteht. Dieses Beugungsmuster wird mit einem Detektor aufgezeichnet und anschließend durch ein komplexes mathematisches Verfahren in ein Elektronendichtebild des Moleküls umgerechnet. Aus diesem Elektronendichtebild kann dann die räumliche Anordnung der Atome im Molekül bestimmt werden.

Die Röntgenstrukturanalyse ist eine sehr präzise Methode zur Bestimmung der Molekülstruktur und wird vor allem in der chemischen und biologischen Forschung eingesetzt, um die Struktur von Proteinen, Enzymen, Nukleinsäuren und anderen großen Molekülen zu bestimmen.

Richtig

2/2 P

6.9 pH-Messung

Beschreiben Sie bitte die Funktion einer Einstabmesskette zur Messung des pH-Wertes.

Eine Einstabmesskette (auch pH-Elektrode oder pH-Sonde genannt) dient zur Messung des pH-Wertes einer Lösung. Sie besteht aus einer empfindlichen Glasmembran, die mit einer inneren Referenzelektrode und einem Elektrolyten gefüllt ist. Die Glasmembran ist empfindlich gegenüber Änderungen des pH-Wertes und ermöglicht es, diese zu messen.

Bei der Messung wird die pH-Elektrode in die zu messende Lösung eingetaucht. Durch den Kontakt zwischen der Lösung und der Glasmembran entsteht ein Potential, das proportional zum pH-Wert der Lösung ist. This potential wird durch die innere Referenz gemessen und als Spannungssignal an das ausgezeichnete Messelektrode.

Um eine präzise Messung zu gewährleisten, ist es wichtig, die pH-Elektrode regelmäßig zu kalibrieren. Hierzu werden Pufferlösungen mit bekanntem pH-Wert used, die die Messung auf einen genauen Wert eichen.

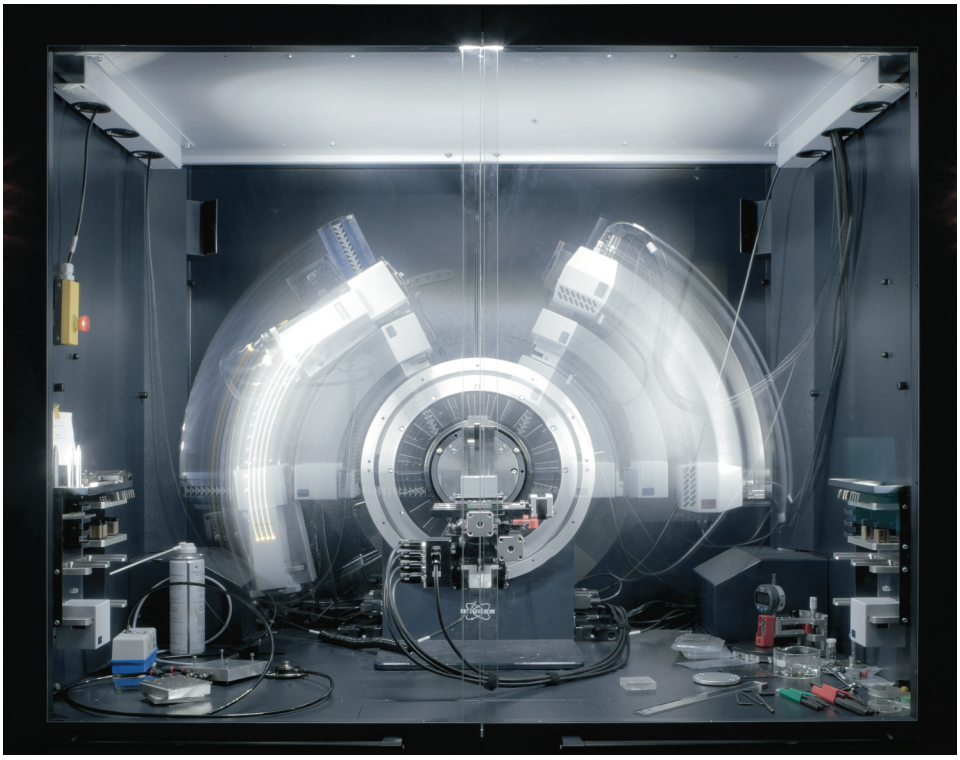
Wenn man von der sprachlichen Kompliziertheit abzieht, kann man dem Bot bescheinigen, dass er das Messverfahren im Wesentlichen verstanden hat.

1,5/2 P

6.10 Wasserbestimmung nach Karl Fischer

Erläutern Sie bitte das Prinzip der Wasserbestimmung nach Karl Fischer.

Das Bild zeigt ein Pulverröntgendiffraktometer in Bewegung. Das ist eine Variante des Röntgendiffraktometers zur Strukturanalyse einer polykristallinen Probe. Aus den Beugungswinkeln bei der Röntgenbeugung und der Wellenlänge der Röntgenstrahlung lassen sich die Gitterparameter des Kristallsystems bestimmen. Man verwendet einen Aufbau, bei dem die Beugungswinkel mit einem beweglichen, elektronischen Röntgendetektor abgerastert werden. Diese Aufnahme hatte eine Belichtungszeit von 80 Sekunden (Foto: Wikipedia / Kaspar Kallip; CC BY-SA 4.0; siehe auch CLB 11/12-2020: Faltung von Proteinen).



Die Karl-Fischer-Titration ist eine Methode zur Bestimmung des Wassergehalts von Proben, die aufgrund ihrer geringen Wassermenge nicht durch gravimetrische Methoden bestimmt werden können.

Das Prinzip der Karl-Fischer-Titration beruht auf der Reaktion von Wasser mit Iod und Schwefeldioxid in einer alkalischen Lösung von Methanol. Die Reaktionsgleichung lautet:

$$H_2O + I_2 + SO_2 + 2\ CH_3OH \rightarrow 2\ CH_3SO_3H + 2\ H^+ + 2\ I^-$$

Die Reaktion ist exotherm und verläuft schnell. Die entstandene Schwefelsäure bildet mit dem Methanol ein Addukt, das eine höhere Leitfähigkeit aufweist als die ursprüngliche Lösung. Die Titration erfolgt mit einer Lösung von Iod in Methanol, die durch eine Base wie Pyridin oder Triethanolamin stabilisiert wird.

Die Proben werden in einer speziellen Karl-Fischer-Pipette dosiert und in den Reaktionsbehälter gegeben. Nach Zugabe der Karl-Fischer-Lösung erfolgt die Titration, bei der das Jod mit dem Wasser in der Probe reagiert. Das Ende der Titration wird durch eine elektrochemische Methode detektiert, bei der die Leitfähigkeit der Lösung gemessen wird. Die benötigte Menge an Karl-Fischer-Lösung gibt Auskunft über den Wassergehalt der Probe.

Hier ist nur richtig erkannt, dass es zwischen Iod und Schwefeldioxid in Gegenwart von Wasser zu einer Redoxreaktion kommt. Die weiteren Ausführungen sind kaum nachvollziehbar.

Konkret nach der im Praktikum genutzten potentiometrischen Auswertung der Titration gefragt, gab ChatGPT schwammige Antworten. Richtig verstanden hat der Bot das Verfahren jedenfalls nicht.

1/3 P

6.11 CSB und BSB5

In der Abwasseranalytik sind der CSB und der BSB5 von großer Bedeutung. Was versteht man darunter und wie werden die beiden Parameter gemessen?

CSB und BSB5 sind Parameter zur Bestimmung der organischen Belastung von Abwasser.

Der CSB (Chemischer Sauerstoffbedarf) gibt an, wie viel Sauerstoff benötigt wird, um die im Abwasser bestimmten organischen Stoffe vollständig zu oxidieren. Dabei werden auch anorganische Bestandteile wie Nitrat oder Nitrit mit oxidiert. Die Messung erfolgt meist nach der DIN EN ISO 15705 mit Kaliumdichromat als Oxidationsmittel.

Der BSB5 (Biochemischer Sauerstoffbedarf) gibt an, wie viel Sauerstoff benötigt wird, um die im Abwasser bestimmten organischen Stoffe innerhalb von fünf Tagen unter bestimmten Bedingungen durch aerobe Mikroorganismen abzubauen. Die Messung erfolgt meist nach der DIN EN ISO 5815-1. Dabei wird das Abwasser mit sauerstoffreichem Wasser verdünnt und in einem verschlossenen Behälter bei konstanter Temperatur (20°C) für fünf Tage belüftet. Anschließend wird der verbleibende Sauerstoffgehalt gemessen und die Differenz zum Ausgangswert ergibt den BSB5-Wert.

Beide Parameter geben die Belastung des Abwassers mit organischen Stoffen an, wobei der BSB5 spezifischer für biologischen Abbaubare Stoffe ist, während der CSB auch anorganische Stoffe umfasst.

Weitgehend in Ordnung. Nitrat kann allerdings nicht weiter oxidiert werden. Bei der BSB-Messung wird während der fünf Tage nicht belüftet, was ChatGPT fälschlicherweise schreibt, aber vermutlich nicht so meint.

1,5/2 P

6.12 Gelelektrophorese

Erklären Sie bitte das Prinzip der Trennung von Aminosäure durch Gelelektrophorese.

Die Gelelektrophorese ist eine Methode zur Trennung von Biomolekülen aufgrund ihrer elektrischen Ladung und Größe. Bei der Trennung von Aminosäuren wird eine Polyacrylamid-Gelmatrix verwendet. Die Aminosäuren werden in eine Gelmatrix eingebracht und durch ein elektrisches Feld bewegt. Da Aminosäuren unterschiedliche Ladungen haben, bewegen sie sich unterschiedlich schnell durch das Gel.

Zunächst müssen die Aminosäuren mit einem Puffer in eine Lösung gebracht werden, um ihre Ladung zu neutralisieren und das pH-Niveau der Lösung zu stabilisieren. Die Lösung wird dann auf eine Polyacrylamid-Gelmatrix aufgetragen, die in einem Gelbehälter eingesetzt wird. Das Gel wird dann in einem Elektrophoresegerät eingesetzt und ein elektrisches Feld aufgetragen. Die negativ geladenen Aminosäuren wandern zum positiv geladenen Ende des Gels, while positiv geladenen Aminosäuren zum negativ geladenen Ende wandern.

Je nach Ladung und Größe bewegen sich die Aminosäuren unterschiedlich schnell durch das Gel und werden dadurch voneinander getrennt. Nachdem die Elektrophorese abgeschlossen ist, wird das Gel gefärbt, um die Aminosäuren sichtbar zu machen. Die Aminosäuren erscheinen dann als markante Bänder auf dem Gel, die durch Vergleich mit Standards und Referenzproben identifiziert werden können.

ChatGPT hat das Prinzip verstanden, die Bedeutung des Puffers aber nicht deutlich herausgearbeitet.

Auf die Nachfrage, wie Aminosäuren in einer alkalisch gepufferten Lösung vorliegen, antwortete er: als Zwitterion – was falsch ist.

2,5/3 P

6.13 Gelpermeationschromatographie

Erläutern Sie bitte das Prinzip der Gelpermeationschromatographie zur Molmassenbestimmung von Polymeren.

Die Gelpermeationschromatographie (GPC), auch Größenausschlusschromatographie genannt, ist eine Methode zur Bestimmung der Molmasse von Polymeren. Das Prinzip der GPC beruht auf der Trennung von Polymeren nach ihrer Größe, wobei die kleineren Moleküle länger im porösen Gelkristall bleiben und somit eine längere Diffusionsstrecke haben als größere Moleküle. Das führt dazu, dass die größeren Moleküle schneller durch das Gel wandern und früher eluieren als die kleineren.

Das Verfahren erfolgt in einem chromatographischen System, das aus einer mobilen Phase, einer stationären Phase und einer Säule besteht. Die mobile Phase ist meist ein Lösungsmittel, in dem das zu analysierende Polymer gelöst wird. Die stationäre Phase besteht aus einem porösen Gel, das in der Säule verpackt wird. Das Polymermolekül kann in die Poren des Gels eindringen und wird durch die Diffusion von den größeren Molekülen ausgeschlossen. Die Auswertung erfolgt über einen Detektor, der die Elution des Polymers registriert.

Die GPC wird häufig eingesetzt, um die Molmassenverteilung von Polymeren zu bestimmen. Dazu wird das Elutionsverhalten von bekannten Referenzpolymeren mit unterschiedlichen Molmassen bestimmt und mit dem Elutionsverhalten des zu untersuchenden Polymers aufgenommen. Die Molmassenverteilung kann dann aus der relativen Häufigkeit der verschiedenen Elutionszeiten berechnet werden.

Die mittlere Passage der Antwort ist redundant und aufgrund unpräziser Formulierungen auch teilweise falsch. Der Rest ist aber gut beschrieben.

2/2 P

6.14 Kapillarviskosimetrie

Erklären Sie bitte das Prinzip der kapillarviskosimetrischen Molmassenbestimmung von Polymeren.

Die kapillarviskosimetrische Molmassenbestimmung von Polymeren beruht auf der Messung der Fließzeit einer Lösung des Polymers durch eine Kapillare bei einer bestimmten Temperatur. Die Viskosität der Lösung hängt von der Molmasse des Polymers ab, da höhere Molekulargewichte zu einer höheren Reibung der Polymerketten führen und somit zu einer höheren Viskosität.

Das Prinzip besteht darin, die Viskosität der Polymerlösung zu messen und mit der Viskosität einer Referenzlösung zu vergleichen. Die Referenzlösung besteht aus einem Polymer, dessen Molmasse bekannt ist und das in derselben Lösungsmittel- und Temperaturumgebung wie die zu messende Polymerlösung vorliegt.

Aus dem Vergleich der Viskositäten kann man die Molmasse des zu messenden Polymers berechnen, dem man die Viskosität der Referenzlösung durch ihre bekannte Molmasse teilt und das Ergebnis mit der gemessenen Viskosität der zu messenden Lösung multipliziert. Die Molmasse wird normalerweise in Form der intrinsischen Viskosität ([η]) angezeigt, die durch Extrapolation der Viskosität der Polymerlösung gegen null Lösungskonzentration erhalten wird.

Die kapillarviskosimetrische Molmassenbestimmung von Polymeren ist eine schnelle und ermittelte Methode zur Bestimmung der Molmasse von Polymeren und eignet sich insbesondere für lösliche Polymere mit einer Molmasse von mehreren tausend Dalton.

Das Prinzip und die Durchführung der Methode sind grob verstanden. Die Formulierungen sind hingegen etwas diffus.

1,5/2 P

6.15 Molmassenbestimmung durch Lichtstreuung

Erläutern Sie bitte das Prinzip der Molmassenbestimmung von Polymeren durch Lichtstreuung.

Die Molmassenbestimmung von Polymeren durch Lichtstreuung basiert auf dem Prinzip, dass die Lichtstreuung von einer Lösung eines Polymers in einem Lösungsmittel von der Größe der darin gelösten Polymermoleküle abhängt. Das bedeutet, dass größere Moleküle stärker streuen als kleinere Moleküle.

Bei diesem Verfahren wird eine Lösung des Polymers in einem relevanten Lösungsmittel durch eine Lichtquelle bestrahlt. Ein Teil des Lichts wird von den Polymermolekülen gestreut und von einem Detektor erfasst. Die Intensität der gestreuten Lichtstreuung wird gemessen und in ein Intensitätsverteilungsdiagramm umgewandelt. Aus diesem Diagramm kann dann die Molmassenverteilung des Polymers ermittelt werden.

Die Lichtstreuungsmessungen werden oft in Verbindung mit der Gelpermeationschromatographie (GPC) durchgeführt, um eine genauere Analyse der Molmassenverteilung des Polymers zu erhalten.

Ok.

2/2 P

6.16 Molmassenbestimmung durch Ultrazentrifugation

Erläutern Sie bitte das Prinzip der Molmassenbestimmung von Polymeren durch Ultrazentrifugation.

Die Ultrazentrifugation ist ein Verfahren zur Trennung von Teilchen nach Größe und Dichte durch die Anwendung von Zentrifugalkräften. Zur Bestimmung der Molmasse von Polymeren kann die Ultrazentrifugation genutzt werden, um die Größenverteilung von Polymeren zu analysieren.

Das Prinzip der Ultrazentrifugation zur Molmassenbestimmung von Polymeren beruht auf der Tatsache, dass sich Polymere unterschiedlicher Größe und Masse bei einer bestimmten Rotationsgeschwindigkeit in der Zentrifuge unterschiedlich

schnell sedimentieren. Wenn eine Probe einer Polymerlösung in einer Zentrifuge mit einer sehr hohen Rotationsgeschwindigkeit zentrifugiert wird, werden die Polymere nach Größe und Masse getrennt und bilden verschiedene Schichten im Röhrchen.

Durch die Analyse der Dichtegradienten in den verschiedenen Schichten können Informationen über die Größenverteilung und somit über die Molmasse des Polymers gewonnen werden. Die Ultrazentrifugation kann auch mit anderen Methoden wie der Lichtstreuung zur Bestimmung der Molmasse und der Molekulargewichtsverteilung von Polymeren kombiniert werden.

Ok.

2/2 P

6.17 VE-Wasser-Herstellung durch Ionenaustausch

Erläutern Sie bitte, wie voll entsalztes Wasser (VE-Wasser) mittels Ionenaustausch hergestellt wird.

Voll entsalztes Wasser, auch bekannt als Deionat oder VE-Wasser (von „vollentsalztes Wasser"), wird durch Ionenaustausch hergestellt. Dabei wird das Wasser zunächst durch Aktivkohle und Filter geleitet, um organische Verunreinigungen, Partikel und Mikroorganismen zu entfernen. Anschließend wird das Wasser durch eine Harzsäule geleitet, die speziell für den Ionenaustausch ausgelegt ist.

Die Harzsäule enthält Kationenaustauscher und Anionenaustauscher, die jeweils positiv bzw. negativ geladene Ionen aus dem Wasser entfernen und gegen H^+-Ionen bzw. OH^--Ionen austauschen. Dies führt zur Bildung von H_3O^+-Ionen und OH^--Ionen im Wasser, die sich zu Wasserstoffionen und Hydroxidionen vereinigen und so den pH-Wert des Wassers auf 7 bringen.

Durch diesen Prozess werden schnell alle gelösten Salze, einschließlich Kationen wie Natrium, Calcium und Magnesium, sowie Anionen wie Chlorid, Sulfat und Nitrat entfernt. Der resultierende VE-Wasser hat einen sehr niedrigen elektrischen Leitwert und ist nahezu frei von Verunreinigungen.

H^+ und OH^- vereinigen sich nicht zu Wasserstoffionen und Hydroxidionen, wie ChatGPT geschrieben hat, sondern zu Wasser. Sonst ist alles perfekt erklärt.

2/2 P

7. Beurteilung

Mit Spannung erwartet, das Klausurergebnis:

48,5/75 P = 65 %, mit der Note 3,1 bestanden.

Kein überragendes, sondern eher mittelmäßiges Resultat, aber tendenziell etwas besser als die durchschnittlichen Noten, die menschliche Studierende in den einzelnen Klausuren erzielen. Man kann ihnen trotzdem nicht raten, sich in der Klausur neben den Bot zu setzen, um vom ihm abzuschreiben, denn so toll sind seine Antworten (noch) nicht. Aber:

- Man muss bedenken, dass die Klausurfragen aus meinen Vorlesungen und Praktika hervorgingen, die ChatGPT gar nicht besucht hat. Er konnte nur auf die im Internet verfügbaren Daten zurückgreifen. Die normalen Studierenden kennen hingegen die Kontexte und vielleicht auch meine Vorlieben, wie und was ich gerne frage, haben in der Klausur gegenüber dem Bot also einen strategischen Vorteil.
- Weiterhin ist anzuerkennen, dass der Bot Information, auf die er zurückgreift, nicht einfach abschreibt, sondern umformuliert. Dabei werden seine Texte schlechter als die Originale. (Hinzu kommen vermutlich auch noch Übersetzungsfehler, worauf die in den Antworten gelegentlich vorkommenden englischen Wörter hinweisen.) Zum Vergleich: Auch menschliche Studierende sind in der Regel noch nicht dazu in der Lage, wissenschaftliche Zusammenhänge ganz präzise zu formulieren, obwohl sie diese grundsätzlich verstanden haben, insbesondere in der Stresssituation einer Klausur. Bei der Korrektur nimmt man darauf meistens Rücksicht und bewertet etwas schwammige Darstellungen trotzdem mit der vollen Punktzahl.
- Bei einer mündlichen Prüfung hätte ChatGPE vermutlich besser abgeschnitten, denn bei Nachfragen zu seinen Antworten hat er meistens etwas Vernünftiges gesagt.

Recht stark ist ChatGPT, wenn Fakten und Definitionen abgefragt werden. Mit Transfer-Aufgaben tut er sich hingegen schwerer – ein Zeichen dafür, dass er sehr viel weiß, aber nicht wirklich denken kann. Als Tutor in der Analytischen Chemie kann man den Bot momentan noch nicht einsetzen, dafür ist er sprachlich zu unsicher und macht zu viele fachliche Fehler. Aber auch diese Aussage sollte relativiert werden, denn als Übungsgruppenleiter setzt man normalerweise nur sehr gute und fortgeschrittene Studierende, meistens sogar erst Promovierende, und keine Studierenden in der vierten Woche nach Studienbeginn ein.

Zeichnen kann ChatGPT noch nicht. Aber vielleicht kann er das nach einem weiteren Upgrading als GPT-5 in vier (?) Wochen auch, sodass man ihm dann eine Klausur zur Organischen Chemie vorlegen kann, wo er Strukturformeln in der Stereoperspektive sowie Reaktionsmechanismen zeichnen muss. Mal sehen. ⏭

Literatur / Quellen

[1] V. Wiskamp: Schöne Neue Hochschul-Welt – Wie ChatGPT zum Chemie-Studium zugelassen wurde. – Chemie in Labor und Biotechnik (CLB) 74 (2023), Heft 5-6, S. 218-224

[2] OpenAI: GPT-4. – https://openai.com/research/gpt-4