

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Inhalt und Aufbau	1
1.2	Abkürzungen und Symbole	3
<b>2</b>	<b>Übersichtstabellen</b>	<b>5</b>
2.1	Allgemeine Tabellen	5
2.1.1	Berechnung der Anzahl Doppelbindungsäquivalente aus der Molekülformel	5
2.1.2	Eigenschaften ausgewählter Atomkerne	6
2.2	$^{13}\text{C}$ -NMR-Spektroskopie	7
2.3	$^1\text{H}$ -NMR-Spektroskopie	10
2.4	IR-Spektroskopie	13
2.5	Massenspektrometrie	18
2.5.1	Mittlere Massen der natürlich vorkommenden Elemente mit den Massen und typischen relativen Häufigkeiten ihrer Isotope	18
2.5.2	Bereiche natürlicher Isotopenhäufigkeiten für ausgewählte Elemente	25
2.5.3	Isotopenverteilungsmuster von natürlich vorkommenden Elementen	26
2.5.4	Berechnung der Isotopenverteilungsmuster	27
2.5.5	Isotopenhäufigkeiten verschiedener Kombinationen von Chlor, Brom, Schwefel und Silicium	29
2.5.6	Isotopenmuster einiger Kombinationen von Cl und Br	31
2.5.7	Indikatoren für Heteroatome	32
2.5.8	Regeln zur Bestimmung der relativen Molmasse ( $M_r$ )	34
2.5.9	Homologe Massensequenzen als Hinweise auf den Strukturtyp	35
2.5.10	Massenkorrelationstabelle	37
2.5.11	Literatur	45
2.6	UV/Vis-Spektroskopie	46
<b>3</b>	<b>Kombinationstabellen</b>	<b>49</b>
3.1	Alkane, Cycloalkane	49
3.2	Alkene, Cycloalkene	50

## VIII Inhaltsverzeichnis

3.3	Alkine . . . . .	51
3.4	Aromatische Kohlenwasserstoffe . . . . .	52
3.5	Heteroaromatische Verbindungen . . . . .	53
3.6	Halogenverbindungen . . . . .	54
3.7	Sauerstoffverbindungen . . . . .	56
	3.7.1 Alkohole und Phenole . . . . .	56
	3.7.2 Ether . . . . .	57
3.8	Stickstoffverbindungen . . . . .	59
	3.8.1 Amine . . . . .	59
	3.8.2 Nitroverbindungen . . . . .	60
3.9	Thiole und Sulfide . . . . .	61
3.10	Carbonylverbindungen . . . . .	62
	3.10.1 Aldehyde . . . . .	62
	3.10.2 Ketone . . . . .	63
	3.10.3 Carbonsäuren . . . . .	64
	3.10.4 Ester und Lactone . . . . .	65
	3.10.5 Amide und Lactame . . . . .	67
<b>4</b>	<b><sup>13</sup>C-NMR-Spektroskopie . . . . .</b>	<b>69</b>
4.1	Alkane . . . . .	69
	4.1.1 Chemische Verschiebungen . . . . .	69
	4.1.2 Kopplungskonstanten . . . . .	78
	4.1.3 Literatur . . . . .	79
4.2	Alkene . . . . .	80
	4.2.1 Chemische Verschiebungen . . . . .	80
	4.2.2 Kopplungskonstanten . . . . .	84
	4.2.3 Literatur . . . . .	84
4.3	Alkine . . . . .	85
	4.3.1 Chemische Verschiebungen . . . . .	85
	4.3.2 Kopplungskonstanten . . . . .	85
	4.3.3 Literatur . . . . .	86
4.4	Alicyclen . . . . .	87
	4.4.1 Chemische Verschiebungen . . . . .	87
	4.4.2 Kopplungskonstanten . . . . .	92
4.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe . . . . .	93
	4.5.1 Chemische Verschiebungen . . . . .	93
	4.5.2 Kopplungskonstanten . . . . .	100
	4.5.3 Literatur . . . . .	100
4.6	Heteroaromatische Verbindungen . . . . .	101
	4.6.1 Chemische Verschiebungen . . . . .	101
	4.6.2 Kopplungskonstanten . . . . .	108

4.7	Halogenverbindungen . . . . .	109
4.7.1	Fluorverbindungen . . . . .	109
4.7.2	Chlorverbindungen . . . . .	111
4.7.3	Bromverbindungen . . . . .	112
4.7.4	Iodverbindungen . . . . .	113
4.7.5	Literatur. . . . .	113
4.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen. . . . .	114
4.8.1	Alkohole . . . . .	114
4.8.2	Ether . . . . .	115
4.9	Stickstoffverbindungen. . . . .	117
4.9.1	Amine . . . . .	117
4.9.2	Nitro- und Nitroverbindungen . . . . .	119
4.9.3	Nitrosamine und Nitramine . . . . .	120
4.9.4	Azo- und Azoxyverbindungen . . . . .	120
4.9.5	Imine und Oxime. . . . .	120
4.9.6	Hydrazone und Carbodiimide. . . . .	121
4.9.7	Nitrile und Isonitrile. . . . .	122
4.9.8	Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate . . . . .	122
4.10	Schwefelverbindungen . . . . .	123
4.10.1	Thiole . . . . .	123
4.10.2	Sulfide . . . . .	123
4.10.3	Disulfide und Sulfoniumsalze . . . . .	124
4.10.4	Sulfoxide und Sulfone. . . . .	125
4.10.5	Sulfon- und Sulfinsäuren und Derivate . . . . .	126
4.10.6	Derivate der schwefligen Säure und Schwefelsäure. . . . .	126
4.10.7	Schwefelhaltige Carbonylderivate . . . . .	127
4.11	Carbonylverbindungen . . . . .	128
4.11.1	Aldehyde . . . . .	128
4.11.2	Ketone . . . . .	129
4.11.3	Carbonsäuren und Carboxylate . . . . .	131
4.11.4	Ester und Lactone. . . . .	133
4.11.5	Amide and Lactame . . . . .	135
4.11.6	Verschiedene Carbonylderivate . . . . .	137
4.12	Verschiedene Verbindungen. . . . .	139
4.12.1	Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV . . . . .	139
4.12.2	Phosphorverbindungen . . . . .	140
4.12.3	Verschiedene metallorganische Verbindungen . . . . .	142
4.13	Naturstoffe. . . . .	144
4.13.1	Aminosäuren. . . . .	144
4.13.2	Kohlenhydrate. . . . .	148
4.13.3	Nucleotide und Nucleoside . . . . .	150

## X Inhaltsverzeichnis

4.13.4	Steroide	152
4.14	Spektren von Lösungsmitteln und Referenzverbindungen	153
4.14.1	$^{13}\text{C}$ -NMR-Spektren von deuterierten Lösungsmitteln	153
4.14.2	$^{13}\text{C}$ -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen	157
4.14.3	$^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher nicht-deuterierter Lösungsmittel	158
5	<b><math>^1\text{H}</math>-NMR-Spektroskopie</b>	159
5.1	Alkane	159
5.1.1	Chemische Verschiebungen	159
5.1.2	Kopplungskonstanten	164
5.2	Alkene	166
5.2.1	Ethylene	166
5.2.2	Konjugierte Diene	172
5.2.3	Allene	173
5.3	Alkine	174
5.4	Alicyclen	175
5.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	179
5.6	Heteroaromatische Verbindungen	186
5.6.1	Nichtkondensierte heteroaromatische Ringe	186
5.6.2	Kondensierte heteroaromatische Ringe	193
5.7	Halogenverbindungen	198
5.7.1	Fluorverbindungen	198
5.7.2	Chlorverbindungen	200
5.7.3	Bromverbindungen	201
5.7.4	Iodverbindungen	202
5.7.5	Literatur	202
5.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen	203
5.8.1	Alkohole	203
5.8.2	Ether	205
5.9	Stickstoffverbindungen	208
5.9.1	Amine	208
5.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen	210
5.9.3	Nitrite und Nitrate	211
5.9.4	Nitrosamine, Azo- und Azoxyverbindungen	211
5.9.5	Imine, Oxime, Hydrazone und Azine	212
5.9.6	Nitrile und Isonitrile	213
5.9.7	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate	214
5.10	Schwefelverbindungen	215
5.10.1	Thiole	215
5.10.2	Sulfide	216

5.10.3	Disulfide und Sulfoniumsalze . . . . .	217
5.10.4	Sulfoxide und Sulfone . . . . .	217
5.10.5	Sulfon- und Sulfin säuren, schweflige Säure, Schwefelsäure sowie Derivate . . . . .	218
5.10.6	Thiocarboxylatderivate . . . . .	218
5.11	Carbonylverbindungen . . . . .	219
5.11.1	Aldehyde . . . . .	219
5.11.2	Ketone . . . . .	220
5.11.3	Carbonsäuren und Carboxylate . . . . .	221
5.11.4	Ester und Lactone . . . . .	222
5.11.5	Amide und Lactame . . . . .	223
5.11.6	Verschiedene Carbonylderivate . . . . .	227
5.12	Verschiedene Verbindungen . . . . .	229
5.12.1	Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV . . . . .	229
5.12.2	Phosphorverbindungen . . . . .	230
5.12.3	Verschiedene Verbindungen . . . . .	233
5.12.4	Literatur . . . . .	234
5.13	Naturstoffe . . . . .	235
5.13.1	Aminosäuren . . . . .	235
5.13.2	Kohlenhydrate . . . . .	239
5.13.3	Nucleotide und Nucleoside . . . . .	241
5.13.2	Literatur . . . . .	242
5.14	Spektren von Lösungsmitteln und Referenzverbindungen . . . . .	243
5.14.1	$^1\text{H}$ -NMR-Spektren von üblichen deuterierten Lösungs- mitteln . . . . .	243
5.14.2	$^1\text{H}$ -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen . . . . .	245
5.14.3	$^1\text{H}$ -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher nicht- deuterierter Lösungsmittel . . . . .	246
<b>6</b>	<b>Heteronukleare NMR-Spektroskopie . . . . .</b>	<b>247</b>
6.1	$^{19}\text{F}$ -NMR-Spektroskopie . . . . .	247
6.1.1	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Perfluoralkanen . . . . .	247
6.1.2	Abschätzung der $^{19}\text{F}$ -chemischen Verschiebungen von Fluorethylenen . . . . .	251
6.1.3	Kopplungskonstanten in Alkanen und Alkenen . . . . .	252
6.1.4	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Allenen und Alkinen . . . . .	253
6.1.5	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten von Alicyclen . . . . .	254
6.1.6	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten von Aromaten und Heteroaromaten . . . . .	255
6.1.7	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Alkoholen und Ethern . . . . .	258

## XII Inhaltsverzeichnis

6.1.8	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Aminen, Iminen und Hydroxylaminderivaten. . . . .	259
6.1.9	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Schwefelverbindungen. . . . .	260
6.1.10	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Carbonyl- und Thiocarbonylverbindungen. . . . .	261
6.1.11	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Bor-, Phosphor- und Siliciumverbindungen. . . . .	262
6.1.12	$^{19}\text{F}$ -Chemische Verschiebungen von Naturstoffderivaten . . . . .	263
6.1.13	Literatur. . . . .	264
6.2	$^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie. . . . .	265
6.2.1	$^{31}\text{P}$ -Chemische Verschiebungen von trikoordiniertem Phosphor $\text{PR}^1\text{R}^2\text{R}^3$ . . . . .	265
6.2.2	$^{31}\text{P}$ -Chemische Verschiebungen von tetrakoordinierten Phosphoniumverbindungen . . . . .	266
6.2.3	$^{31}\text{P}$ -Chemische Verschiebungen von Verbindungen mit einer $\text{P}=\text{C}$ - oder $\text{P}=\text{N}$ -Bindung . . . . .	267
6.2.4	$^{31}\text{P}$ -Chemische Verschiebungen von tetrakoordinierten $\text{P}(=\text{O})$ - und $\text{P}(=\text{S})$ -Verbindungen. . . . .	268
6.2.5	$^{31}\text{P}$ -Chemische Verschiebungen von penta- und hexa-koordinierten Phosphorverbindungen . . . . .	270
6.2.6	$^{31}\text{P}$ -Chemische Verschiebungen von phosphorhaltigen Naturstoffen . . . . .	271
7	<b>IR-Spektroskopie. . . . .</b>	<b>273</b>
7.1	Alkane. . . . .	273
7.2	Alkene. . . . .	276
7.2.1	Monoene . . . . .	276
7.2.2	Allene . . . . .	279
7.3	Alkine . . . . .	280
7.4	Alicyclen . . . . .	281
7.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe . . . . .	283
7.6	Heteroaromatische Verbindungen . . . . .	286
7.7	Halogenverbindungen . . . . .	288
7.7.1	Fluorverbindungen. . . . .	288
7.7.2	Chlorverbindungen . . . . .	289
7.7.3	Bromverbindungen . . . . .	290
7.7.4	Iodverbindungen . . . . .	290
7.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen. . . . .	291
7.8.1	Alkohole und Phenole. . . . .	291
7.8.2	Ether, Acetale, Ketale . . . . .	292
7.8.3	Epoxide . . . . .	294
7.8.4	Peroxide und Hydroperoxide . . . . .	295

7.9	Stickstoffverbindungen . . . . .	296
7.9.1	Amine und verwandte Verbindungen . . . . .	296
7.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen . . . . .	298
7.9.3	Imine und Oxime . . . . .	300
7.9.4	Azo-, Azoxy- und Azothioverbindungen . . . . .	302
7.9.5	Nitrile und Isonitrile . . . . .	303
7.9.6	Diazoverbindungen . . . . .	304
7.9.7	Cyanate und Isocyanate . . . . .	305
7.9.8	Thiocyanate und Isothiocyanate . . . . .	306
7.10	Schwefelverbindungen . . . . .	308
7.10.1	Thiole und Sulfide . . . . .	308
7.10.2	Sulfoxide und Sulfone . . . . .	309
7.10.3	Thiocarbonylderivate . . . . .	311
7.10.4	Thiokohlensäurederivate . . . . .	311
7.11	Carbonylverbindungen . . . . .	314
7.11.1	Aldehyde . . . . .	314
7.11.2	Ketone . . . . .	315
7.11.3	Carbonsäuren . . . . .	318
7.11.4	Ester und Lactone . . . . .	320
7.11.5	Amide und Lactame . . . . .	323
7.11.6	Säureanhydride . . . . .	326
7.11.7	Säurehalogenide . . . . .	327
7.11.8	Kohlensäurederivate . . . . .	328
7.12	Verschiedene Verbindungen . . . . .	331
7.12.1	Siliciumverbindungen . . . . .	331
7.12.2	Phosphorverbindungen . . . . .	332
7.12.3	Borverbindungen . . . . .	335
7.13	Aminosäuren . . . . .	336
7.14	Lösungsmittel, Suspensionsmittel und Interferenzen . . . . .	337
7.14.1	Infrarotspektren üblicher Lösungsmittel . . . . .	337
7.14.2	Infrarotspektren von Suspensionsmitteln . . . . .	338
7.14.3	Interferenzen in Infrarotspektren . . . . .	339
<b>8</b>	<b>Massenspektrometrie . . . . .</b>	<b>341</b>
8.1	Alkane . . . . .	341
8.2	Alkene . . . . .	343
8.3	Alkine . . . . .	345
8.4	Alicyclische Kohlenwasserstoffe . . . . .	346
8.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe . . . . .	349
8.6	Heteroaromatische Verbindungen . . . . .	351
8.7	Halogenverbindungen . . . . .	356

## XIV Inhaltsverzeichnis

8.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen. . . . .	358
8.8.1	Alkohole und Phenole. . . . .	358
8.8.2	Hydroperoxide . . . . .	360
8.8.3	Ether. . . . .	361
8.8.4	Aliphatische Epoxide . . . . .	364
8.8.5	Aliphatische Peroxide . . . . .	365
8.9	Stickstoffverbindungen . . . . .	366
8.9.1	Amine. . . . .	366
8.9.2	Nitroverbindungen. . . . .	368
8.9.3	Diazoverbindungen und Azobenzole . . . . .	369
8.9.4	Azide . . . . .	369
8.9.5	Nitrile und Isonitrile . . . . .	370
8.9.6	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate. . . . .	371
8.9.7	Literatur . . . . .	374
8.10	Schwefelverbindungen . . . . .	375
8.10.1	Thiole . . . . .	375
8.10.2	Sulfide und Disulfide . . . . .	376
8.10.3	Sulfoxide und Sulfone . . . . .	377
8.10.4	Sulfonsäuren, Sulfonsäureester und Sulfonamide. . . . .	380
8.10.5	Thiocarbonsäure-S-ester . . . . .	382
8.10.6	Literatur. . . . .	382
8.11	Carbonylverbindungen . . . . .	383
8.11.1	Aldehyde . . . . .	383
8.11.2	Ketone. . . . .	384
8.11.3	Carbonsäuren . . . . .	385
8.11.4	Carbonsäureanhydride . . . . .	386
8.11.5	Ester und Lactone . . . . .	386
8.11.6	Amide und Lactame . . . . .	389
8.11.7	Imide. . . . .	390
8.11.8	Literatur. . . . .	391
8.12	Verschiedene Verbindungen. . . . .	392
8.12.1	Trialkylsilylether . . . . .	392
8.12.2	Phosphorverbindungen . . . . .	392
8.12.3	Literatur. . . . .	393
8.13	Massenspektren üblicher Lösungsmittel und Matrixkomponenten. . . . .	394
8.13.1	Elektronenstoß-Massenspektren üblicher Lösungsmittel . . . . .	394
8.13.2	Spektren der üblichen FAB-MS-Matrix- und Kalibrations- substanzen. . . . .	397
8.13.3	Spektren der üblichen MALDI-MS-Matrixsubstanzen . . . . .	402
8.13.4	Literatur. . . . .	404



<b>9 UV/Vis-Spektroskopie</b> . . . . .	405
9.1 Zusammenhang zwischen der Wellenlänge des absorbierten Lichts und der beobachteten Farbe . . . . .	405
9.2 Einfache Chromophore . . . . .	405
9.3 Konjugierte Alkene . . . . .	407
9.3.1 Diene und Polyene . . . . .	407
9.3.2 $\alpha,\beta$ -Ungesättigte Carbonylverbindungen . . . . .	408
9.4 Aromatische Verbindungen . . . . .	410
9.4.1 Monosubstituierte Benzole . . . . .	410
9.4.2 Mehrfach substituierte Benzole. . . . .	411
9.4.3 Aromatische Carbonylverbindungen . . . . .	412
9.5 Referenzspektren. . . . .	413
9.5.1 Alkene und Alkine . . . . .	413
9.5.2 Aromatische Verbindungen . . . . .	414
9.5.3 Heteroaromatische Verbindungen . . . . .	419
9.5.4 Verschiedene Verbindungen . . . . .	421
9.5.5 Nucleotide . . . . .	423
9.6 Übliche Lösungsmittel . . . . .	424
<b>Sachverzeichnis</b> . . . . .	425