

# Inhalt

<b>1</b>	<b>UV/Vis-Spektren</b>	<b>1</b>	<b>2.12</b>	<b>Beispiele von IR-Spektren</b>	... 59
	<i>H. Meier</i>		<b>2.13</b>	<b>EDV als Hilfsmittel für die IR-Spektroskopie</b>	... 63
<b>1.1</b>	<b>Theoretische Einführung</b>	... 2	<b>2.14</b>	<b>Quantitative IR-Spektroskopie</b>	... 67
1.1.1	Elektromagnetische Wellen und Elektronenübergänge	... 2	<b>2.15</b>	<b>Raman-Spektroskopie</b>	... 68
1.1.2	Lichtabsorption und Spektrum	... 7	2.15.1	Anregungsmechanismen	... 68
<b>1.2</b>	<b>Probenvorbereitung und Aufnahme der Spektren</b>	... 10	2.15.2	Auswahlregeln	... 69
<b>1.3</b>	<b>Chromophore</b>	... 11	2.15.3	Raman-Spektrometer	... 70
1.3.1	Einzelne chromophore Gruppen und ihre Wechselwirkung	... 11	2.15.4	Anwendungen	... 71
1.3.2	Olefine, Polyene	... 12	2.15.5	Gegenüberstellung von IR und Raman Literatur	... 73 ... 74
1.3.3	Benzen und benzoide Aromaten	... 15			
1.3.4	Heteroaromaten	... 19	<b>3</b>	<b>Kernresonanz-Spektren</b>	<b>75</b>
1.3.5	Carbonyl-Verbindungen	... 20		<i>H. Meier</i>	
1.3.6	Konjugierte Oligomere und Polymere	... 22	<b>3.1</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	... 76
1.3.7	Aggregierte Moleküle, Charge-Transfer-Komplexe	... 25	3.1.1	Resonanzphänomen	... 76
<b>1.4</b>	<b>Anwendungen der UV/Vis-Spektroskopie</b>	... 26	3.1.2	Chemische Verschiebung	... 77
<b>1.5</b>	<b>Derivativ-Spektroskopie</b>	... 29	3.1.3	Spin-Spin-Kopplung	... 79
<b>1.6</b>	<b>Chiroptische Methoden</b>	... 29	3.1.4	Linienbreite	... 86
	Literatur	... 34	3.1.5	Intensität	... 87
			<b>3.2</b>	<b>NMR-Spektren und Molekülstruktur</b>	... 89
<b>2</b>	<b>Infrarot- und Raman-Spektren</b>	<b>37</b>	3.2.1	Moleküle mit „festen“ Kernpositionen	... 89
	<i>T. Fox</i>		3.2.2	Innermolekulare Beweglichkeit	... 89
<b>2.1</b>	<b>Einführung</b>	... 38	3.2.3	Chemische Austauschprozesse	... 97
<b>2.2</b>	<b>Grundlagen</b>	... 38	<b>3.3</b>	<b><sup>1</sup>H-Kernresonanz-Spektroskopie</b>	... 104
<b>2.3</b>	<b>IR-Spektrometer</b>	... 40	3.3.1	Probenvorbereitung und Aufnahme von <sup>1</sup> H-NMR-Spektren	... 104
2.3.1	Klassisches (scanning) IR-Spektrometer	... 41	3.3.2	<sup>1</sup> H-chemische Verschiebungen	... 108
2.3.2	Fourier-Transform-(FT)-Spektrometer	... 41	3.3.3	<sup>1</sup> H-, <sup>1</sup> H-Kopplungen	... 113
<b>2.4</b>	<b>Probenzubereitung</b>	... 42	3.3.4	Kopplungen mit anderen Kernen	... 120
2.4.1	Messungen in Transmission	... 43	3.3.5	Korrelation von <sup>1</sup> H-Verschiebungen mit Struktur- elementen	... 121
2.4.2	Reflexionsmessungen	... 43	3.3.6	Inkrement-Systeme zur Abschätzung von <sup>1</sup> H-Verschiebungen	... 129
2.4.3	Raman-Messungen	... 44	3.3.7	<sup>1</sup> H-NMR-Daten exemplarischer Vertreter der wichtigsten Verbindungsklassen	... 129
<b>2.5</b>	<b>IR-Spektrum</b>	... 44	3.3.8	Besondere Methoden	... 129
2.5.1	Anzahl und Arten von Schwingungen	... 44	3.3.9	Zweidimensionale <sup>1</sup> H-NMR-Spektroskopie (2D- <sup>1</sup> H-NMR)	... 143
2.5.2	Spektrinterpretation	... 45	3.3.10	Spektr-Simulation	... 151
<b>2.6</b>	<b>Charakteristische Absorptionen: Übersicht</b>	... 48	3.3.11	Kernresonanz-Spektren von orientierten Phasen und Festkörpern	... 152
<b>2.7</b>	<b>IR-Absorptionen von Einfachbindungen zu Wasserstoff</b>	... 49	3.3.12	Kopplung von Trennmethode und NMR-Messung	... 153
2.7.1	(C—H)-Absorption	... 49	<b>3.4</b>	<b><sup>13</sup>C-Kernresonanz-Spektroskopie</b>	... 154
2.7.2	(O—H)- und (N—H)-Absorptionen	... 49	3.4.1	Probenvorbereitung und Aufnahme von <sup>13</sup> C-NMR-Spektren	... 154
<b>2.8</b>	<b>IR-Absorptionen von Dreifachbindungen und kumulierten Doppelbindungen</b>	... 54	3.4.2	<sup>13</sup> C-chemische Verschiebungen	... 156
<b>2.9</b>	<b>IR-Absorptionen von Doppelbindungen C=O, C=N, C=C, N=N, N=O</b>	... 54	3.4.3	Korrelation von <sup>13</sup> C-Verschiebungen mit Strukturelementen	... 167
<b>2.10</b>	<b>IR-Absorptionen aromatischer Verbindungen</b>	... 59	3.4.4	Inkrement-Systeme zur Abschätzung von <sup>13</sup> C-Verschiebungen	... 167
<b>2.11</b>	<b>IR-Absorptionen im <i>Fingerprint</i>-Bereich</b>	... 59	3.4.5	<sup>13</sup> C-, <sup>1</sup> H-Kopplungen	... 172
			3.4.6	Kopplungen von <sup>13</sup> C mit anderen Kernen (D, F, N, P)	... 173
			3.4.7	<sup>13</sup> C <sup>13</sup> C-Kopplungen	... 176
			3.4.8	Besondere Methoden	... 180
			3.4.9	Mehrdimensionale <sup>13</sup> C-NMR-Spektren	... 191
			3.4.10	Festkörperspektren	... 202

<b>3.5</b>	<b>Kombination von <sup>1</sup>H- und <sup>13</sup>C-NMR-Spektroskopie</b>	... 205	<b>4.5</b>	<b>Probenvorbereitung</b>	... 346
3.5.1	Vollständige Zuordnung der <sup>1</sup> H- und <sup>13</sup> C-NMR-Signale	... 205	4.5.1	Reinigung, Aufbereitung und Aufkonzentration	... 346
3.5.2	Verwendung von Datenbanken	... 208	4.5.2	Abgabe und Angabe der Probeneigenschaften	... 348
3.5.3	<sup>1</sup> H- und <sup>13</sup> C-NMR-Daten exemplarischer Vertreter der wichtigsten Verbindungsklassen	... 212	4.5.3	Spezifische Vorbereitungen für die Messung	... 349
<b>3.6</b>	<b>Kernresonanz-Spektroskopie anderer Kerne</b>	... 244	<b>4.6</b>	<b>Artefakte</b>	... 351
3.6.1	<sup>19</sup> F-Kernresonanz-Spektroskopie	... 244	4.6.1	Memory-Effekt	... 351
3.6.2	<sup>31</sup> P-Kernresonanz-Spektroskopie	... 246	4.6.2	Artefakt-Bildung in der Quelle	... 351
3.6.3	<sup>15</sup> N-Kernresonanz-Spektroskopie	... 248	4.6.3	Erkennen von Artefakten	... 354
3.6.4	Vollständige Zuordnung der Signale von <sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C und Heterokernen	... 253	4.6.4	Verhinderung von Artefakt-Bildung	... 355
3.6.5	Weitere Kerne	... 255	<b>4.7</b>	<b>Tabellen zur Massenspektrometrie</b>	... 355
	Literatur	... 256	4.7.1	Häufig detektierte Ionen	... 356
			4.7.2	Häufig beobachtete Massendifferenzen	... 365
			4.7.3	Isotopenverhältnisse halogener Verbindungen	... 372
			4.7.4	Lösungsmittel und Verunreinigungen	... 373
			4.7.5	Isotopen der natürlichen Elemente	... 379
			<b>4.8</b>	<b>Literatur</b>	... 384
<b>4</b>	<b>Massenspektren</b>	<b>261</b>			
	<i>S. Bienz und L. Bigler</i>				
<b>4.1</b>	<b>Einführung</b>	... 262	<b>5</b>	<b>Umgang mit Spektren und analytischen Daten an Beispielen</b>	<b>387</b>
<b>4.2</b>	<b>Grundsätzliches zur Massenspektrometrie</b>	... 263		<i>S. Bienz und L. Bigler</i>	
4.2.1	Prinzip der Massenspektrometrie	... 263	<b>5.1</b>	<b>Einführung</b>	... 388
4.2.2	Das Massenspektrum	... 264	<b>5.2</b>	<b>Charakterisierung von Verbindungen</b>	... 388
<b>4.3</b>	<b>Instrumentelle Aspekte</b>	... 275	<b>5.3</b>	<b>Strukturaufklärung von vermeintlich bekannten Verbindungen und unerwarteten Produkten aus Synthesen</b>	... 397
4.3.1	Probenzuführung und Ionen-Typen	... 275	<b>5.4</b>	<b>Strukturaufklärung von vollständig unbekanntem Verbindungen</b>	... 405
4.3.2	Ionisation	... 277	<b>5.5</b>	<b>Literatur</b>	... 424
4.3.3	Analysatoren und Detektoren	... 288			
4.3.4	Kopplung zu chromatographischen Methoden	... 299	<b>6</b>	<b>Anhang</b>	<b>425</b>
4.3.5	Auswahl der Methode	... 303	<b>6.1</b>	<b>Sachverzeichnis</b>	... 426
<b>4.4</b>	<b>Strukturaufklärung</b>	... 306	<b>6.2</b>	<b>Spezifische Verbindungen</b>	... 433
4.4.1	Vorbereitung der Interpretation	... 306			
4.4.2	Strukturinformation aus der HR-MS	... 308			
4.4.3	Fragmentierungen in der EI-MS	... 310			
4.4.4	Collision Induced Decomposition (CID)	... 329			
4.4.5	Nachbargruppenwechselwirkung und Stereoisomere	... 335			
4.4.6	Spektrenbibliotheken	... 337			
4.4.7	Spezielle Techniken	... 340			
4.4.8	Aufklärung von Fragmentierungsmechanismen	... 344			