

Inhalt

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

3.5	Kombination von ^1H- und ^{13}C-NMR-Spektroskopie	... 205	4.5	Probenvorbereitung	... 346
3.5.1	Vollständige Zuordnung der ^1H - und ^{13}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	^1H - und ^{13}C -NMR-Daten exemplarischer Vertreter der wichtigsten Verbindungsklassen	... 212	4.5.3	Spezifische Vorbereitungen für die Messung	... 349
3.6	Kernresonanz-Spektroskopie anderer Kerne	... 244	4.6	Artefakte	... 351
3.6.1	^{19}F -Kernresonanz-Spektroskopie	... 244	4.6.1	Memory-Effekt	... 351
3.6.2	^{31}P -Kernresonanz-Spektroskopie	... 246	4.6.2	Artefakt-Bildung in der Quelle	... 351
3.6.3	^{15}N -Kernresonanz-Spektroskopie	... 248	4.6.3	Erkennen von Artefakten	... 354
3.6.4	Vollständige Zuordnung der Signale von ^1H , ^{13}C und Heterokernen	... 253	4.6.4	Verhinderung von Artefakt-Bildung	... 355
3.6.5	Weitere Kerne Literatur	... 255 ... 256	4.7	Tabellen zur Massenspektrometrie	... 355
			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
4	Massenspektren	261	4.8	Literatur	... 384
<i>S. Bienz und L. Bigler</i>					
4.1	Einführung	... 262	5	Umgang mit Spektren und analytischen Daten an Beispielen	387
4.2	Grundsätzliches zur Massenspektrometrie	... 263	<i>S. Bienz und L. Bigler</i>		
4.2.1	Prinzip der Massenspektrometrie	... 263	5.1	Einführung	... 388
4.2.2	Das Massenspektrum	... 264	5.2	Charakterisierung von Verbindungen	... 388
4.3	Instrumentelle Aspekte	... 275	5.3	Strukturaufklärung von vermeintlich bekannten Verbindungen und unerwarteten Produkten aus Synthesen	... 397
4.3.1	Probenezuführung und Ionen-Typen	... 275	5.4	Strukturaufklärung von vollständig unbekanntem Verbindungen	... 405
4.3.2	Ionisation	... 277	5.5	Literatur	... 424
4.3.3	Analysatoren und Detektoren	... 288	6	Anhang	425
4.3.4	Kopplung zu chromatographischen Methoden	... 299	6.1	Sachverzeichnis	... 426
4.3.5	Auswahl der Methode	... 303	6.2	Spezifische Verbindungen	... 433
4.4	Strukturaufklärung	... 306			
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	Spektrbibliotheken	... 337			
4.4.7	Spezielle Techniken	... 340			
4.4.8	Aufklärung von Fragmentierungsmechanismen	... 344			

Kostenfreie Übungen zum Download

Jetzt herunterladen! Zusätzlich zu den im Buch enthaltenen Beispielen gibt es unter www.thieme-chemistry.com Übungsaufgaben kostenfrei für alle Interessierten.

Zugang zum Downloadbereich für Dozenten

Alle Spektren aus dem Buch sind für Dozenten zum Download im Internet verfügbar. Um diesen kostenfreien Service nutzen zu können, ist eine Registrierung aus urheberrechtlichen Gründen notwendig. Dozenten können ihre persönlichen Zugangsdaten zum Downloadbereich per E-Mail an marketing@thieme-chemistry.com unter Angabe der vollständigen Universitätsadresse anfordern.