

Grundlagen der Spektroskopie, Teil II

Vorlesung im SS 2019

1. Einführung

- 1.1 Literatur
- 1.2 Bedeutung für die Organische Chemie
- 1.3 Summenformel: Verbrennungsanalyse
- 1.4 Summenformel: Molmasse

2. Massenspektrometrie Teil 1

- 2.1 Molpeak
 - 2.1.1 Molmasse
 - 2.1.2 Isotopenmuster
 - 2.1.3 Hochauflösung und exakte Masse
 - 2.1.4 Doppelbindungsäquivalente
 - 2.1.5 Stickstoffgehalt

3. Infrarotspektren organischer Verbindungen

- 3.1 C-H und X-H-Schwingungen
- 3.2 Dreifachbindungen
- 3.3 Doppelbindungen
- 3.4 Fingerprintbereich

4. Kernresonanzspektroskopie

- 4.1 Kernspin
- 4.2 Spektrometer
 - 4.2.1 CW-Spektrometer
 - 4.2.2 PFT-Technik
- 4.3 Protonenresonanzspektroskopie
 - 4.3.1 Chemische Verschiebung aliphatischer Verbindungen: Methyl-, Methylen- und Methin-Protonen, Inkrementsystem
 - 4.3.2 Anisotropieeffekte bei chemischen Verschiebungen: Alkene, Alkine, Aromaten, Carbonylverbindungen, Inkrementsysteme für Alkene und Benzol-Derivate
 - 4.3.3 Spinsysteme erster Ordnung: AX-, AX₂-, AX₃-, A₂X₃-, AMX-System
 - 4.3.4 Spinsysteme höherer Ordnung: AB-, AB₂-, ABX-, AA'XX'-, AA'BB'-, AA'MM'X-, AA'BB'C-System
 - 4.3.5 Topizität: Homotopie, Enantiotopie, Diastereotopie, Karplus-Kurve, ²J-, ³J- und ⁴J-Kopplungskonstanten
- 4.4 ¹³C-Resonanz
 - 4.4.1 ¹³C-Satelliten im Protonenspektrum, Kopplungen im ¹³C-NMR, ¹J(¹H, ¹³C), ²J(¹H, ¹³C), ³J(¹H, ¹³C),
 - 4.4.2 Protonen-Entkopplung, NOE-Effekt, Doppelresonanzexperimente: DEPT, APT.

4.4.3 ^{13}C -Inkrementensystem für Aliphaten

4.4.4 ^{13}C -Inkrementensystem für Alkene

4.4.5 ^{13}C -Inkrementensystem für Benzolderivate

5. Massenspektrometrie, Teil II

5.2 Massenspektrometer

5.2.1 Elektronenstoß-Ionisation

5.2.2 Alternative Ionisierungstechniken

5.2.3 Kopplungstechniken

5.3 Fragmentierungen und Konstitutionsaufklärung