

# Grundlagen der Spektroskopie, Teil II

Vorlesung im SS 2017

## 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 Hochempfindlichkeit 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-, AX<sub>2</sub>-, AX<sub>3</sub>-, A<sub>2</sub>X<sub>3</sub>-, AMX-System
  - 4.3.4 Spinsysteme höherer Ordnung: AB-, AB<sub>2</sub>-, ABX-, AA'XX'-, AA'BB'-, AA'MM'X-, AA'BB'C-System
  - 4.3.5 Topizität: Homotopie, Enantiotopie, Diastereotopie, Karplus-Kurve, <sup>2</sup>J-, <sup>3</sup>J- und <sup>4</sup>J-Kopplungskonstanten
- 4.4 <sup>13</sup>C-Resonanz
  - 4.4.1 <sup>13</sup>C-Satelliten im Protonenspektrum, Kopplungen im <sup>13</sup>C-NMR, <sup>1</sup>J(<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C), <sup>2</sup>J(<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C), <sup>3</sup>J(<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C),
  - 4.4.2 Protonen-Entkopplung, NOE-Effekt, Doppelresonanzexperimente: DEPT, APT.

- 4.4.3  $^{13}\text{C}$ -Inkrementensystem für Aliphaten
- 4.4.4  $^{13}\text{C}$ -Inkrementensystem für Alkene
- 4.4.5  $^{13}\text{C}$ -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