

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Inhalt und Gestaltung.....	1
1.2 Abkürzungen und Symbole.....	3
2 Übersichtstabellen	5
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}C -NMR-Spektroskopie.....	7
2.3 ^1H -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.....	24
2.5.3 Isotopenverteilungsmuster von natürlich vorkommenden Elementen.....	25
2.5.4 Berechnung der Isotopenverteilungsmuster.....	26
2.5.5 Isotopenhäufigkeiten verschiedener Kombinationen von Chlor, Brom, Schwefel und Silicium.....	28
2.5.6 Isotopenmuster einiger Kombinationen von Cl und Br... ..	30
2.5.7 Indikatoren für Heteroatome.....	31
2.5.8 Regeln zur Bestimmung der relativen Molmasse (M_r)....	33
2.5.9 Homologe Massensequenzen als Hinweise auf den Strukturtyp.....	34
2.5.10 Massenkorrelationstabelle.....	36
2.5.11 Literatur.....	46
2.6 UV/Vis-Spektroskopie.....	47
3 Kombinationstabellen	49
3.1 Alkane, Cycloalkane.....	49
3.2 Alkene, Cycloalkene.....	50
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.....	62
3.10	Carbonylverbindungen	63
3.10.1	Aldehyde	63
3.10.2	Ketone.....	64
3.10.3	Carbonsäuren.....	65
3.10.4	Carbonsäureester und Lactone.....	66
3.10.5	Amide und Lactame.....	68
4	¹³C-NMR-Spektroskopie.....	71
4.1	Alkane.....	71
4.1.1	Chemische Verschiebungen	71
4.1.2	Kopplungskonstanten	80
4.1.3	Literatur.....	81
4.2	Alkene.....	82
4.2.1	Chemische Verschiebungen	82
4.2.2	Kopplungskonstanten	86
4.2.3	Literatur.....	87
4.3	Alkine	88
4.3.1	Chemische Verschiebungen	88
4.3.2	Kopplungskonstanten	89
4.3.3	Literatur.....	89
4.4	Alicyclen.....	90
4.4.1	Chemische Verschiebungen	90
4.4.2	Kopplungskonstanten	95
4.4.3	Literatur.....	95
4.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	96
4.5.1	Chemische Verschiebungen	96
4.5.2	Kopplungskonstanten	103
4.5.3	Literatur.....	103
4.6	Heteroaromatische Verbindungen.....	104
4.6.1	Chemische Verschiebungen	104
4.6.2	Kopplungskonstanten	111
4.7	Halogenverbindungen.....	112
4.7.1	Fluorverbindungen	112
4.7.2	Chlorverbindungen.....	114
4.7.3	Bromverbindungen	115
4.7.4	Iodverbindungen	116
4.7.5	Literatur.....	116
4.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen	117
4.8.1	Alkohole.....	117
4.8.2	Ether	119

4.9	Stickstoffverbindungen.....	121
4.9.1	Amine.....	121
4.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen.....	123
4.9.3	Nitrosamine und Nitramine.....	124
4.9.4	Imine und Oxime.....	124
4.9.5	Hydrazone und Carbodiimide.....	125
4.9.6	Nitrile und Isonitrile.....	126
4.9.7	Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate.....	127
4.9.8	Literatur.....	127
4.10	Schwefelverbindungen.....	128
4.10.1	Thiole.....	128
4.10.2	Sulfide.....	128
4.10.3	Disulfide und Sulfoniumsalze.....	130
4.10.4	Sulfoxide und Sulfone.....	130
4.10.5	Sulfon- und Sulfinsäuren und Derivate.....	131
4.10.6	Derivate der schwefligen Säure und Schwefelsäure.....	131
4.10.7	Schwefelhaltige Carbonylderivate.....	132
4.11	Carbonylverbindungen.....	133
4.11.1	Aldehyde.....	133
4.11.2	Ketone.....	134
4.11.3	Carbonsäuren und Carboxylate.....	136
4.11.4	Ester und Lactone.....	138
4.11.5	Amide und Lactame.....	140
4.11.6	Verschiedene Carbonylderivate.....	142
4.12	Verschiedene Verbindungen.....	144
4.12.1	Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV.....	144
4.12.2	Phosphorverbindungen.....	145
4.12.3	Verschiedene metallorganische Verbindungen.....	147
4.13	Naturstoffe.....	148
4.13.1	Aminosäuren.....	148
4.13.2	Kohlenhydrate.....	152
4.13.3	Nucleotide und Nucleoside.....	154
4.13.4	Steroide.....	156
4.14	Spektren von Lösungsmitteln und Referenzen.....	157
4.14.1	^{13}C -NMR-Spektren von deuterierten Lösungsmitteln.....	157
4.14.2	^{13}C -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen.....	159
4.14.3	^{13}C -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher nicht-deuterierter Lösungsmittel.....	160
5	^1H-NMR-Spektroskopie.....	161
5.1	Alkane.....	161
5.1.1	Chemische Verschiebungen.....	161
5.1.2	Kopplungskonstanten.....	166
5.1.3	Literatur.....	167
5.2	Alkene.....	168
5.2.1	Substituierte Ethylene.....	168
5.2.2	Diene.....	174

5.3	Alkine.....	175
5.3.1	Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten...	175
5.4	Alicyclen.....	176
5.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe.....	180
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.....	199
5.7.3	Bromverbindungen.....	200
5.7.4	Iodverbindungen.....	201
5.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen.....	202
5.8.1	Alkohole.....	202
5.8.2	Ether.....	204
5.9	Stickstoffverbindungen.....	207
5.9.1	Amine.....	207
5.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen.....	210
5.9.3	Nitrosamine, Azo- und Azoxyverbindungen.....	210
5.9.4	Imine, Oxime, Hydrazone und Azide.....	211
5.9.5	Nitrile und Isonitrile.....	212
5.9.6	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate.....	213
5.10	Schwefelverbindungen.....	214
5.10.1	Thiole.....	214
5.10.2	Sulfide.....	215
5.10.3	Disulfide und Sulfoniumsalze.....	216
5.10.4	Sulfoxide und Sulfone.....	216
5.10.5	Sulfonsäuren, Sulfinsäuren, schweflige Säure, Schwefelsäure und Derivate.....	217
5.10.6	Thiocarboxylatderivate.....	217
5.11	Carbonylverbindungen.....	218
5.11.1	Aldehyde.....	218
5.11.2	Ketone.....	219
5.11.3	Carbonsäuren und Carboxylate.....	220
5.11.4	Ester und Lactone.....	221
5.11.5	Amide und Lactame.....	223
5.11.6	Verschiedene Carbonylderivate.....	226
5.12	Verschiedene Verbindungen.....	228
5.12.1	Siliciumverbindungen.....	228
5.12.2	Phosphorverbindungen.....	229
5.12.3	Verschiedene Verbindungen.....	232
5.13	Naturstoffe.....	233
5.13.1	Aminosäuren.....	233
5.13.2	Kohlenhydrate.....	236
5.13.3	Nucleotide und Nucleoside.....	237
5.13.4	Literatur.....	239

5.14	Spektren von Lösungsmitteln und Referenzen.....	240
5.14.1	¹ H-NMR-Spektren von üblichen deuterierten Lösungsmitteln.....	240
5.14.2	¹ H-NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen.....	242
5.14.3	¹ H-NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher nichtdeuterierter Lösungsmittel.....	243
6	IR-Spektroskopie	245
6.1	Alkane.....	245
6.2	Alkene.....	248
6.2.1	Monoene.....	248
6.2.2	Allene	251
6.3	Alkine	252
6.4	Alicyclen.....	253
6.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe.....	255
6.6	Heteroaromatische Verbindungen.....	258
6.7	Halogenverbindungen.....	260
6.7.1	Fluorverbindungen.....	260
6.7.2	Chlorverbindungen.....	261
6.7.3	Bromverbindungen.....	262
6.7.4	Iodverbindungen.....	262
6.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen.....	263
6.8.1	Alkohole und Phenole	263
6.8.2	Ether, Acetale, Ketale.....	264
6.8.3	Epoxide	266
6.8.4	Peroxide und Hydroperoxide.....	267
6.9	Stickstoffverbindungen.....	268
6.9.1	Amine und verwandte Verbindungen.....	268
6.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen.....	270
6.9.3	Imine und Oxime.....	272
6.9.4	Azoverbindungen.....	274
6.9.5	Nitrile und Isonitrile.....	275
6.9.6	Diazoverbindungen.....	276
6.9.7	Cyanate und Isocyanate.....	277
6.9.8	Thiocyanate und Isothiocyanate	278
6.10	Schwefelverbindungen.....	280
6.10.1	Thiole und Sulfide	280
6.10.2	Sulfoxide und Sulfone	281
6.10.3	Thiocarbonylderivate	283
6.10.4	Thiocarbonsäurederivate	283
6.11	Carbonylverbindungen	286
6.11.1	Aldehyde.....	286
6.11.2	Ketone.....	287
6.11.3	Carbonsäuren.....	290
6.11.4	Ester und Lactone	292
6.11.5	Amide und Lactame.....	295
6.11.6	Säureanhydride	298
6.11.7	Säurehalogenide.....	300

6.11.8	Kohlensäurederivate.....	301
6.12	Verschiedene Verbindungen.....	304
6.12.1	Siliciumverbindungen.....	304
6.12.2	Phosphorverbindungen.....	305
6.12.3	Borverbindungen.....	308
6.13	Aminosäuren.....	309
6.14	Lösungsmittel, Suspensionsmittel und Interferenzen.....	310
6.14.1	Infrarotspektren üblicher Lösungsmittel.....	310
6.14.2	Infrarotspektren von Suspensionsmitteln.....	311
6.14.3	Interferenzen in Infrarotspektren.....	312
7	Massenspektrometrie.....	313
7.1	Alkane.....	313
7.2	Alkene.....	315
7.2.1	Unverzweigte und verzweigte Alkene.....	315
7.2.2	Polyene und Polyine.....	316
7.2.3	Literatur.....	316
7.3	Alkine.....	317
7.4	Alicyclische Kohlenwasserstoffe.....	318
7.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe.....	321
7.6	Heteroaromatische Verbindungen.....	323
7.7	Halogenverbindungen.....	328
7.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen.....	330
7.8.1	Alkohole und Phenole.....	330
7.8.2	Hydroperoxide.....	333
7.8.3	Ether.....	333
7.8.4	Aliphatische Epoxide.....	336
7.8.5	Aliphatische Peroxide.....	337
7.8.6	Literatur.....	338
7.9	Stickstoffverbindungen.....	339
7.9.1	Amine.....	339
7.9.2	Nitroverbindungen.....	341
7.9.3	Diazoverbindungen und Azobenzole.....	342
7.9.4	Azide.....	342
7.9.5	Nitrile und Isonitrile.....	343
7.9.6	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate.....	345
7.9.7	Literatur.....	348
7.10	Schwefelverbindungen.....	349
7.10.1	Thiole.....	349
7.10.2	Sulfide.....	350
7.10.3	Disulfide.....	351
7.10.4	Sulfoxide und Sulfone.....	351
7.10.5	Sulfonsäuren, Sulfonsäureester und Sulfonamide.....	355
7.10.6	Thiocarbonsäure-S-ester.....	356
7.10.7	Literatur.....	357

7.11	Carbonylverbindungen	358
7.11.1	Aldehyde	358
7.11.2	Ketone	359
7.11.3	Carbonsäuren	360
7.11.4	Anhydride	361
7.11.5	Ester und Lactone	361
7.11.6	Amide und Lactame	364
7.11.7	Imide	366
7.11.8	Literatur	367
7.12	Verschiedene Verbindungen	368
7.12.1	Trialkylsilylether	368
7.12.2	Phosphorverbindungen	368
7.12.3	Literatur	369
7.13	Massenspektren üblicher Lösungsmittel und Matrixkomponenten	370
7.13.1	Elektronenstoß-Massenspektren üblicher Lösungsmittel	370
7.13.2	Spektren der üblichen FAB-MS-Matrix- und Kalibrationssubstanzen	373
7.13.3	Spektren der üblichen MALDI-MS-Matrixsubstanzen	379
7.13.4	Literatur	382
8	UV/Vis-Spektroskopie	383
8.1	Zusammenhang zwischen der Wellenlänge des absorbierten Lichts und der beobachteten Farbe	383
8.2	Einfache Chromophore	383
8.3	Konjugierte Alkene	385
8.3.1	Diene und Polyene	385
8.3.2	α,β -Ungesättigte Carbonylverbindungen	386
8.4	Aromatische Verbindungen	388
8.4.1	Monosubstituierte Benzole	388
8.4.2	Substituierte Benzole	389
8.4.3	Aromatische Carbonylverbindungen	390
8.5	Referenzspektren	391
8.5.1	Alkene und Alkine	391
8.5.2	Aromatische Verbindungen	392
8.5.3	Heteroaromatische Verbindungen	397
8.5.4	Verschiedene Verbindungen	399
8.5.5	Nucleotide	401
8.6	Übliche Lösungsmittel	402
	Sachverzeichnis	403