

Spektroskopische Daten zur Strukturaufklärung organischer Verbindungen

Bearbeitet von

Ernö Pretsch, Philippe Bühlmann, Martin Badertscher

5., überarb. u. erw. Aufl. 2010. Taschenbuch. xv, 455 S. Paperback

ISBN 978 3 540 76865 4

Format (B x L): 15,5 x 23,5 cm

Gewicht: 684 g

[Weitere Fachgebiete > Chemie, Biowissenschaften, Agrarwissenschaften > Analytische Chemie > Kernspinresonanz, Spektroskopie](#)

schnell und portofrei erhältlich bei

beck-shop.de
DIE FACHBUCHHANDLUNG

Die Online-Fachbuchhandlung beck-shop.de ist spezialisiert auf Fachbücher, insbesondere Recht, Steuern und Wirtschaft. Im Sortiment finden Sie alle Medien (Bücher, Zeitschriften, CDs, eBooks, etc.) aller Verlage. Ergänzt wird das Programm durch Services wie Neuerscheinungsdienst oder Zusammenstellungen von Büchern zu Sonderpreisen. Der Shop führt mehr als 8 Millionen Produkte.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Inhalt und Aufbau	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	25
2.5.3 Isotopenverteilungsmuster von natürlich vorkommenden Elementen	26
2.5.4 Berechnung der Isotopenverteilungsmuster	27
2.5.5 Isotopenhäufigkeiten verschiedener Kombinationen von Chlor, Brom, Schwefel und Silicium	29
2.5.6 Isotopenmuster einiger Kombinationen von Cl und Br	31
2.5.7 Indikatoren für Heteroatome	32
2.5.8 Regeln zur Bestimmung der relativen Molmasse (M_r)	34
2.5.9 Homologe Massensequenzen als Hinweise auf den Strukturtyp	35
2.5.10 Massenkorrelationstabelle	37
2.5.11 Literatur	45
2.6 UV/Vis-Spektroskopie	46
3 Kombinationstabellen	49
3.1 Alkane, Cycloalkane	49
3.2 Alkene, Cycloalkene	50

VIII Inhaltsverzeichnis

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	61
3.10	Carbonylverbindungen	62
3.10.1	Aldehyde	62
3.10.2	Ketone	63
3.10.3	Carbonsäuren	64
3.10.4	Ester und Lactone	65
3.10.5	Amide und Lactame	67
4	^{13}C-NMR-Spektroskopie	69
4.1	Alkane	69
4.1.1	Chemische Verschiebungen	69
4.1.2	Kopplungskonstanten	78
4.1.3	Literatur	79
4.2	Alkene	80
4.2.1	Chemische Verschiebungen	80
4.2.2	Kopplungskonstanten	84
4.2.3	Literatur	84
4.3	Alkine	85
4.3.1	Chemische Verschiebungen	85
4.3.2	Kopplungskonstanten	85
4.3.3	Literatur	86
4.4	Alicyclen	87
4.4.1	Chemische Verschiebungen	87
4.4.2	Kopplungskonstanten	92
4.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	93
4.5.1	Chemische Verschiebungen	93
4.5.2	Kopplungskonstanten	100
4.5.3	Literatur	100
4.6	Heteroaromatische Verbindungen	101
4.6.1	Chemische Verschiebungen	101
4.6.2	Kopplungskonstanten	108

4.7	Halogenverbindungen	109
4.7.1	Fluorverbindungen	109
4.7.2	Chlorverbindungen	111
4.7.3	Bromverbindungen	112
4.7.4	Iodverbindungen	113
4.7.5	Literatur	113
4.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen	114
4.8.1	Alkohole	114
4.8.2	Ether	115
4.9	Stickstoffverbindungen	117
4.9.1	Amine	117
4.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen	119
4.9.3	Nitrosamine und Nitramine	120
4.9.4	Azo- und Azoxyverbindungen	120
4.9.5	Imine und Oxime	120
4.9.6	Hydrazone und Carbodiimide	121
4.9.7	Nitrile und Isonitrile	122
4.9.8	Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate	122
4.10	Schwefelverbindungen	123
4.10.1	Thiole	123
4.10.2	Sulfide	123
4.10.3	Disulfide und Sulfoniumsalze	124
4.10.4	Sulfoxide und Sulfone	125
4.10.5	Sulfon- und Sulfinsäuren und Derivate	126
4.10.6	Derivate der schwefligen Säure und Schwefelsäure	126
4.10.7	Schwefelhaltige Carbonylderivate	127
4.11	Carbonylverbindungen	128
4.11.1	Aldehyde	128
4.11.2	Ketone	129
4.11.3	Carbonsäuren und Carboxylate	131
4.11.4	Ester und Lactone	133
4.11.5	Amide and Lactame	135
4.11.6	Verschiedene Carbonylderivate	137
4.12	Verschiedene Verbindungen	139
4.12.1	Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV	139
4.12.2	Phosphorverbindungen	140
4.12.3	Verschiedene metallorganische Verbindungen	142
4.13	Naturstoffe	144
4.13.1	Aminosäuren	144
4.13.2	Kohlenhydrate	148
4.13.3	Nucleotide und Nucleoside	150

X Inhaltsverzeichnis

4.13.4	Steroide	152
4.14	Spektren von Lösungsmitteln und Referenzverbindungen	153
4.14.1	^{13}C -NMR-Spektren von deuterierten Lösungsmitteln	153
4.14.2	^{13}C -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen	157
4.14.3	^{13}C -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher nicht-deuterierter Lösungsmittel	158
5	^1H-NMR-Spektroskopie	159
5.1	Alkane	159
5.1.1	Chemische Verschiebungen	159
5.1.2	Kopplungskonstanten	164
5.2	Alkene	166
5.2.1	Ethylene	166
5.2.2	Konjugierte Diene	172
5.2.3	Allene	173
5.3	Alkine	174
5.4	Alicyclen	175
5.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	179
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	200
5.7.3	Bromverbindungen	201
5.7.4	Iodverbindungen	202
5.7.5	Literatur	202
5.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen	203
5.8.1	Alkohole	203
5.8.2	Ether	205
5.9	Stickstoffverbindungen	208
5.9.1	Amine	208
5.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen	210
5.9.3	Nitrite und Nitrato	211
5.9.4	Nitrosamine, Azo- und Azoxyverbindungen	211
5.9.5	Imine, Oxime, Hydrazone und Azine	212
5.9.6	Nitrile und Isonitrile	213
5.9.7	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate	214
5.10	Schwefelverbindungen	215
5.10.1	Thiole	215
5.10.2	Sulfide	216

5.10.3	Disulfide und Sulfoniumsalze	217
5.10.4	Sulfoxide und Sulfone	217
5.10.5	Sulfon- und Sulfinsäuren, schweflige Säure, Schwefelsäure sowie Derivate	218
5.10.6	Thiocarboxylatderivate	218
5.11	Carbonylverbindungen	219
5.11.1	Aldehyde	219
5.11.2	Ketone	220
5.11.3	Carbonsäuren und Carboxylate	221
5.11.4	Ester und Lactone	222
5.11.5	Amide und Lactame	223
5.11.6	Verschiedene Carbonylderivate	227
5.12	Verschiedene Verbindungen	229
5.12.1	Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV	229
5.12.2	Phosphorverbindungen	230
5.12.3	Verschiedene Verbindungen	233
5.12.4	Literatur	234
5.13	Naturstoffe	235
5.13.1	Aminosäuren	235
5.13.2	Kohlenhydrate	239
5.13.3	Nucleotide und Nucleoside	241
5.13.2	Literatur	242
5.14	Spektren von Lösungsmitteln und Referenzverbindungen	243
5.14.1	^1H -NMR-Spektren von üblichen deuterierten Lösungsmitteln	243
5.14.2	^1H -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen	245
5.14.3	^1H -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher nicht-deuterierter Lösungsmittel	246
6	Heteronukleare NMR-Spektroskopie	247
6.1	^{19}F -NMR-Spektroskopie	247
6.1.1	^{19}F -Chemische Verschiebungen von Perfluoralkanen	247
6.1.2	Abschätzung der ^{19}F -chemischen Verschiebungen von Fluorethylenen	251
6.1.3	Kopplungskonstanten in Alkanen und Alkenen	252
6.1.4	^{19}F -Chemische Verschiebungen von Allenen und Alkinen	253
6.1.5	^{19}F -Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten von Alicyclen	254
6.1.6	^{19}F -Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten von Aromaten und Heteroaromatien	255
6.1.7	^{19}F -Chemische Verschiebungen von Alkoholen und Ethern	258

XII Inhaltsverzeichnis

6.1.8	¹⁹ F-Chemische Verschiebungen von Aminen, Iminen und Hydroxylaminderivaten	259
6.1.9	¹⁹ F-Chemische Verschiebungen von Schwefelverbindungen	260
6.1.10	¹⁹ F-Chemische Verschiebungen von Carbonyl- und Thiocarbonylverbindungen	261
6.1.11	¹⁹ F-Chemische Verschiebungen von Bor-, Phosphor- und Siliciumverbindungen	262
6.1.12	¹⁹ F-Chemische Verschiebungen von Naturstoffderivaten	263
6.1.13	Literatur	264
6.2	³¹ P-NMR-Spektroskopie	265
6.2.1	³¹ P-Chemische Verschiebungen von trikoordiniertem Phosphor PR ¹ R ² R ³	265
6.2.2	³¹ P-Chemische Verschiebungen von tetrakoordinierten Phosphoniumverbindungen	266
6.2.3	³¹ P-Chemische Verschiebungen von Verbindungen mit einer P=C- oder P=N-Bindung	267
6.2.4	³¹ P-Chemische Verschiebungen von tetrakoordinierten P(=O)- und P(=S)-Verbindungen	268
6.2.5	³¹ P-Chemische Verschiebungen von penta- und hexakoordinierten Phosphorverbindungen	270
6.2.6	³¹ P-Chemische Verschiebungen von phosphorhaltigen Naturstoffen	271
7	IR-Spektroskopie	273
7.1	Alkane	273
7.2	Alkene	276
7.2.1	Monoene	276
7.2.2	Allene	279
7.3	Alkine	280
7.4	Alicyclen	281
7.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	283
7.6	Heteroaromatische Verbindungen	286
7.7	Halogenverbindungen	288
7.7.1	Fluorverbindungen	288
7.7.2	Chlorverbindungen	289
7.7.3	Bromverbindungen	290
7.7.4	Iodverbindungen	290
7.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen	291
7.8.1	Alkohole und Phenole	291
7.8.2	Ether, Acetale, Ketale	292
7.8.3	Epoxide	294
7.8.4	Peroxide und Hydroperoxide	295

7.9	Stickstoffverbindungen	296
7.9.1	Amine und verwandte Verbindungen	296
7.9.2	Nitro- und Nitrosoverbindungen	298
7.9.3	Imine und Oxime	300
7.9.4	Azo-, Azoxy- und Azothioverbindungen	302
7.9.5	Nitrile und Isonitrile	303
7.9.6	Diazoverbindungen	304
7.9.7	Cyanate und Isocyanate	305
7.9.8	Thiocyanate und Isothiocyanate	306
7.10	Schwefelverbindungen	308
7.10.1	Thiole und Sulfide	308
7.10.2	Sulfoxide und Sulfone	309
7.10.3	Thiocarbonylderivate	311
7.10.4	Thiokohlensäurederivate	311
7.11	Carbonylverbindungen	314
7.11.1	Aldehyde	314
7.11.2	Ketone	315
7.11.3	Carbonsäuren	318
7.11.4	Ester und Lactone	320
7.11.5	Amide und Lactame	323
7.11.6	Säureanhydride	326
7.11.7	Säurehalogenide	327
7.11.8	Kohlensäurederivate	328
7.12	Verschiedene Verbindungen	331
7.12.1	Siliciumverbindungen	331
7.12.2	Phosphorverbindungen	332
7.12.3	Borverbindungen	335
7.13	Aminosäuren	336
7.14	Lösungsmittel, Suspensionsmittel und Interferenzen	337
7.14.1	Infrarotspektren üblicher Lösungsmittel	337
7.14.2	Infrarotspektren von Suspensionsmitteln	338
7.14.3	Interferenzen in Infrarotspektren	339
8	Massenspektrometrie	341
8.1	Alkane	341
8.2	Alkene	343
8.3	Alkine	345
8.4	Alicyclische Kohlenwasserstoffe	346
8.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	349
8.6	Heteroaromatische Verbindungen	351
8.7	Halogenverbindungen	356

8.8	Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen	358
8.8.1	Alkohole und Phenole	358
8.8.2	Hydroperoxide	360
8.8.3	Ether	361
8.8.4	Aliphatische Epoxide	364
8.8.5	Aliphatische Peroxide	365
8.9	Stickstoffverbindungen	366
8.9.1	Amine	366
8.9.2	Nitroverbindungen	368
8.9.3	Diazoverbindungen und Azobenzole	369
8.9.4	Azide	369
8.9.5	Nitrile und Isonitrile	370
8.9.6	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate	371
8.9.7	Literatur	374
8.10	Schwefelverbindungen	375
8.10.1	Thiole	375
8.10.2	Sulfide und Disulfide	376
8.10.3	Sulfoxide und Sulfone	377
8.10.4	Sulfonsäuren, Sulfonsäureester und Sulfonamide	380
8.10.5	Thiocarbonsäure- <i>S</i> -ester	382
8.10.6	Literatur	382
8.11	Carbonylverbindungen	383
8.11.1	Aldehyde	383
8.11.2	Ketone	384
8.11.3	Carbonsäuren	385
8.11.4	Carbonsäureanhydride	386
8.11.5	Ester und Lactone	386
8.11.6	Amide und Lactame	389
8.11.7	Imide	390
8.11.8	Literatur	391
8.12	Verschiedene Verbindungen	392
8.12.1	Trialkylsilylether	392
8.12.2	Phosphorverbindungen	392
8.12.3	Literatur	393
8.13	Massenspektren üblicher Lösungsmittel und Matrixkomponenten	394
8.13.1	Elektronenstoß-Massenspektren üblicher Lösungsmittel	394
8.13.2	Spektren der üblichen FAB-MS-Matrix- und Kalibrations- substanzen	397
8.13.3	Spektren der üblichen MALDI-MS-Matrixsubstanzen	402
8.13.4	Literatur	404

9 UV/Vis-Spektroskopie	405
9.1 Zusammenhang zwischen der Wellenlänge des absorbierten Lichts und der beobachteten Farbe	405
9.2 Einfache Chromophore	405
9.3 Konjugierte Alkene	407
9.3.1 Diene und Polyene	407
9.3.2 α, β -Ungesättigte Carbonylverbindungen	408
9.4 Aromatische Verbindungen	410
9.4.1 Monosubstituierte Benzole	410
9.4.2 Mehrfach substituierte Benzole	411
9.4.3 Aromatische Carbonylverbindungen	412
9.5 Referenzspektren	413
9.5.1 Alkene und Alkine	413
9.5.2 Aromatische Verbindungen	414
9.5.3 Heteroaromatische Verbindungen	419
9.5.4 Verschiedene Verbindungen	421
9.5.5 Nucleotide	423
9.6 Übliche Lösungsmittel	424
Sachverzeichnis	425