

Inhalt

<i>H. Meier</i>			
1.1	Theoretische Einführung	... 2	
1.1.1	Elektronenübergänge	... 2	
1.1.2	Lichtabsorption und Spektrum	... 8	
1.2	Probenvorbereitung und Aufnahme der Spektren	... 11	
1.3	Chromophore	... 13	
1.3.1	Einzelne chromophore Gruppen und ihre Wechselwirkung	... 13	
1.3.2	Olefine, Polyene	... 14	
1.3.3	Benzen und benzoide Aromaten	... 17	
1.3.4	Heteroaromaten	... 22	
1.3.5	Carbonyl-Verbindungen	... 23	
1.3.6	Konjugierte Oligomere und Polymere	... 26	
1.3.7	Aggregierte Moleküle, Charge-Transfer-Komplexe	... 29	
1.4	Anwendungen der UV/Vis-Spektroskopie	... 30	
1.5	Derivativ-Spektroskopie	... 32	
1.6	Chiroptische Methoden	... 33	
	Literatur	... 38	
<i>T. Fox</i>			
2.1	Einführung	... 40	
2.2	Grundlagen	... 40	
2.3	IR-Spektrometer	... 42	
2.3.1	Klassisches (scanning) IR-Spektrometer	... 43	
2.3.2	Fourier-Transform-(FT)-Spektrometer	... 43	
2.4	Probenzubereitung	... 44	
2.4.1	Messung in der Gasphase	... 44	
2.4.2	Messung als Flüssigkeit	... 45	
2.4.3	Messung in Lösung	... 45	
2.4.4	Messung im festen Zustand	... 46	
2.5	IR-Spektrum	... 46	
2.5.1	Anzahl und Arten von Schwingungen	... 47	
2.5.2	Spektrinterpretation	... 48	
2.6	Charakteristische Absorptionen: Übersicht	... 52	
2.7	IR-Absorptionen von Einfachbindungen zu Wasserstoff	... 55	
2.7.1	(C—H)-Absorption	... 55	
2.7.2	(O—H)- und (N—H)-Absorptionen	... 55	
2.8	IR-Absorptionen von Dreifachbindungen und kumulierten Doppelbindungen	... 58	
2.9	IR-Absorptionen von Doppelbindungen	... 58	
	C=O, C=N, C=C, N=N, N=O	... 58	
2.10	IR-Absorptionen aromatischer Verbindungen	... 64	
2.11	IR-Absorptionen im <i>Fingerprint</i>-Bereich	... 64	
2.12	Beispiele von IR-Spektren	... 64	
2.13	EDV als Hilfsmittel für die IR-Spektroskopie	... 66	
2.14	Quantitative IR-Spektroskopie	... 68	
2.15	Raman-Spektroskopie	... 74	
2.15.1	Anregungsmechanismen	... 74	
2.15.2	Auswahlregeln	... 75	
2.15.3	Raman-Spektrometer	... 77	
2.15.4	Anwendungen	... 78	
2.15.5	Gegenüberstellung von IR und Raman	... 80	
	Literatur	... 81	
<i>H. Meier</i>			
3.1	Physikalische Grundlagen	... 84	
3.1.1	Resonanzphänomen	... 84	
3.1.2	Chemische Verschiebung	... 86	
3.1.3	Spin-Spin-Kopplung	... 87	
3.1.4	Linienbreite	... 96	
3.1.5	Intensität	... 97	
3.2	NMR-Spektren und Molekülstruktur	... 99	
3.2.1	Moleküle mit „festen“ Kernpositionen	... 99	
3.2.2	Innermolekulare Beweglichkeit	... 99	
3.2.3	Chemische Austauschprozesse	... 109	
3.3	¹H-Kernresonanz-Spektroskopie	... 115	
3.3.1	Probenvorbereitung und Aufnahme von ¹ H-NMR-Spektren	... 115	
3.3.2	¹ H-chemische Verschiebungen	... 119	
3.3.3	¹ H, ¹ H-Kopplungen	... 125	
3.3.4	Kopplungen mit anderen Kernen	... 133	
3.3.5	Korrelation von ¹ H-Verschiebungen mit Strukturelementen	... 134	
3.3.6	Inkrement-Systeme zur Abschätzung von ¹ H-Verschiebungen	... 135	
3.3.7	¹ H-NMR-Daten exemplarischer Vertreter der wichtigsten Verbindungsklassen	... 143	
3.3.8	Besondere Methoden	... 143	
3.4	¹³C-Kernresonanz-Spektroskopie	... 171	
3.4.1	Probenvorbereitung und Spektren-Aufnahme	... 171	

3.4.2	¹³ C-chemische Verschiebungen	... 174	4.4	Strukturaufklärung	... 321
3.4.3	¹³ C, ¹ H-Kopplungen	... 179	4.4.1	Vorbereitung der Interpretation	... 321
3.4.4	Kopplungen von ¹³ C mit anderen Kernen (D, F, N, P)	... 180	4.4.2	Strukturinformation aus der HR-MS	... 323
3.4.5	¹³ C, ¹³ C-Kopplungen	... 184	4.4.3	Fragmentierungen in der EI-MS	... 326
3.4.6	Korrelation von ¹³ C-Verschiebungen mit Strukturelementen	... 187	4.4.4	Collision Induced Decomposition (CID)	... 348
3.4.7	Inkrement-Systeme zur Abschätzung von ¹³ C-Verschiebungen	... 188	4.4.5	Nachbargruppenwechselwirkung und Stereoisomere	... 354
3.4.8	Besondere Methoden	... 193	4.4.6	Spektrbibliotheken	... 357
			4.4.7	Spezielle Techniken	... 360
			4.4.8	Aufklärung von Fragmentierungsmechanismen	... 365
3.5	Kombination von ¹H- und ¹³C-NMR-Spektroskopie	... 221	4.5	Probenvorbereitung	... 368
3.5.1	Vollständige Zuordnung der ¹ H- und ¹³ C-NMR-Signale	... 221	4.5.1	Reinigung, Aufbereitung und Aufkonzentration	... 368
3.5.2	Verwendung von Datenbanken	... 225	4.5.2	Abgabe und Angabe der Probeneigenschaften	... 370
3.5.3	¹ H- und ¹³ C-NMR-Daten exemplarischer Vertreter der wichtigsten Verbindungsklassen	... 229	4.5.3	Spezifische Vorbereitungen für die Messung	... 371
3.6	Kernresonanz-Spektroskopie anderer Kerne	... 251	4.6	Artefakte	... 372
3.6.1	¹⁹ F-Kernresonanz-Spektroskopie	... 251	4.6.1	Memory-Effekt	... 372
3.6.2	³¹ P-Kernresonanz-Spektroskopie	... 253	4.6.2	Artefakt-Bildung in der Quelle	... 373
3.6.3	¹⁵ N-Kernresonanz-Spektroskopie	... 257	4.6.3	Erkennen von Artefakten	... 375
3.6.4	Vollständige Zuordnung der Signale von ¹ H, ¹³ C und Heterokernen	... 263	4.6.4	Verhinderung von Artefakt-Bildung	... 377
3.6.5	Weitere Kerne	... 264	4.7	Tabellen zur Massenspektrometrie	... 377
	Literatur	... 264	4.7.1	Häufig detektierte Ionen	... 378
			4.7.2	Häufig beobachtete Massendifferenzen	... 388
			4.7.3	Isotopenverhältnisse halogener Verbindungen	... 395
			4.7.4	Lösungsmittel und Verunreinigungen	... 396
			4.7.5	Isotopen der natürlichen Elemente	... 402
			4.8	Literatur	... 407
<i>S. Bienz und L. Bigler</i>					
4.1	Einführung	... 270	5.1	Einführung	... 412
4.2	Grundsätzliches zur Massenspektrometrie	... 271	5.2	Übungsbeispiele	... 412
4.2.1	Prinzip der Massenspektrometrie	... 271	5.3	Lösungen der Übungsbeispiele	... 454
4.2.2	Das Massenspektrum	... 272			
4.3	Instrumentelle Aspekte	... 285			
4.3.1	Probenzuführung und Ionen-Typen	... 285	6.1	Sachverzeichnis	... 478
4.3.2	Ionisation	... 288	6.2	Spezifische Verbindungen	... 486
4.3.3	Analysatoren und Detektoren	... 301			
4.3.4	Kopplung zu chromatographischen Methoden	... 313			
4.3.5	Auswahl der Methode	... 319			