

# Inhaltsverzeichnis

	<b>Verzeichnis der wichtigsten Symbole</b>	11
<b>1.</b>	<b>Theoretische Grundlagen und Einführung</b>	13
1.1.	Struktur und Wechselwirkung	13
1.1.1.	Energie und Wahrscheinlichkeit der Wechselwirkung	15
1.1.2.	Beispiel für die Aufnahme eines Spektrums	17
1.1.2.1.	Intensitätsmaße	19
1.1.2.2.	Energiemaße	20
1.1.3.	Elektromagnetische Strahlung	21
1.2.	Struktur und Zuordnung	22
1.3.	Beschreibung von Zuständen durch Quantenzahlen	26
1.3.1.	Quantenzahlen für Atome	27
1.3.1.1.	Termsymbole und Elektronenkonfiguration	29
1.3.1.2.	Auswahlregeln für Elektronenübergänge in Atomen	30
1.3.2.	Quantenzahlen für Moleküle	32
1.3.2.1.	Der starre Rotator	33
1.3.2.2.	Der Oszillator	34
1.3.2.3.	Elektronenzustände von Molekülen	36
1.3.2.4.	Auswahlregeln für Elektronenübergänge	37
1.3.2.5.	Schwingungs-Rotations-Übergänge	38
1.3.2.6.	Elektronen-Schwingungs-Übergänge	40
1.4.	Intensität und Bandenform	41
1.5.	Kontrollfragen und Aufgaben	43
1.5.1.	Kontrollfragen	43
1.5.2.	Aufgaben und Übungen	44
<b>2.</b>	<b>UVS-Spektroskopie</b>	46
2.1.	Allgemeine Grundlagen und Meßprinzip	46
2.1.1.	Der UVS-Spektralbereich	47
2.1.2.	Meßprinzip und Meßgrößen	48
2.2.	UVS-Absorption und Molekülbau	49
2.2.1.	Theoretische Grundlagen der Elektronenanregung	49
2.2.2.	UVS-Spektrum und Struktur	50
2.2.2.1.	Verbindungen mit isolierten $\pi$ -Bindungen — isolierte Chromophore	51
2.2.2.2.	Verbindungen mit konjugierten Chromophoren	52
2.2.2.3.	Aromatische Verbindungen	53
2.2.2.4.	Heteroaromaten	56

2.2.2.5.	Große Moleküle . . . . .	56
2.2.2.6.	UVS-Absorption anorganischer Verbindungen . . . . .	56
2.2.2.7.	Lösungsmittleinflüsse . . . . .	61
2.2.3.	Strukturanalyse . . . . .	62
2.3.	Anwendungsgebiete und Grenzen . . . . .	63
2.4.	Aufnahmetechnik der UVS-Spektroskopie . . . . .	63
2.5.	Anwendungsbeispiele . . . . .	64
2.6.	Kontrollfragen und Aufgaben . . . . .	67
2.6.1.	Kontrollfragen . . . . .	67
2.6.2.	Aufgaben und Übungen . . . . .	68
<b>3.</b>	<b>Kernresonanzspektroskopie . . . . .</b>	<b>72</b>
3.1.	Physikalische Grundlagen . . . . .	72
3.1.1.	Magnetische Eigenschaften der Atomkerne . . . . .	73
3.1.2.	Die Kerne im magnetischen Feld . . . . .	74
3.2.	Meßprinzip . . . . .	77
3.3.	Meßergebnisse . . . . .	79
3.3.1.	Chemische Verschiebungen . . . . .	81
3.3.2.	Struktur und chemische Verschiebung . . . . .	81
3.3.3.	Feinstruktur der Signale . . . . .	84
3.3.4.	Erscheinungsbild der NMR-Spektren . . . . .	86
3.4.	Anwendungsgebiete und Grenzen . . . . .	87
3.5.	Anwendungsbeispiele . . . . .	87
3.6.	Kontrollfragen und Aufgaben . . . . .	91
3.6.1.	Kontrollfragen . . . . .	92
3.6.2.	Aufgaben und Übungen . . . . .	92
<b>4.</b>	<b>IR-Spektroskopie . . . . .</b>	<b>96</b>
4.1.	Physikalische Grundlagen . . . . .	96
4.1.1.	Der IR-Spektralbereich . . . . .	96
4.1.2.	Meßprinzip und Meßgrößen . . . . .	97
4.2.	Das Schwingungsspektrum von Molekülen . . . . .	98
4.2.1.	Der Raman-Effekt . . . . .	99
4.2.2.	Bedingungen für die IR- und die Raman-Aktivität . . . . .	100
4.2.3.	Molekülsymmetrie . . . . .	101
4.2.4.	Eigenschwingungen . . . . .	102
4.2.5.	Das Konzept der charakteristischen Gruppenschwingungen für größere Moleküle . . . . .	104
4.2.6.	Strukturanalyse . . . . .	107
4.3.	Anwendungsgebiete und Grenzen . . . . .	109
4.4.	Aufnahmetechnik . . . . .	109
4.5.	Anwendungsbeispiele . . . . .	110
4.6.	Kontrollfragen und Aufgaben . . . . .	114
4.6.1.	Kontrollfragen . . . . .	114
4.6.2.	Aufgaben und Übungen . . . . .	115
<b>5.</b>	<b>Massenspektrometrie . . . . .</b>	<b>120</b>
5.1.	Meßprinzip und allgemeine Grundlagen . . . . .	120
5.1.1.	Meßprinzip . . . . .	120

5.1.2.	Die Bestimmung der Masse . . . . .	122
5.1.3.	Die Bildung der Ionen durch Elektronenstoß . . . . .	124
5.1.3.1.	Ionisierung von Atomen . . . . .	124
5.1.3.2.	Ionisierung von einfachen Molekülen . . . . .	125
5.1.3.3.	Ionisierung von großen Molekülen . . . . .	127
5.2.	Das Molekülion und die massenspektrometrische relative Molekülmasse . . . . .	128
5.2.1.	Isotopenpeaks . . . . .	130
5.2.2.	Stickstoffregel . . . . .	132
5.2.3.	Kriterien für den Molekülpeak . . . . .	132
5.3.	Bedingungen und Mechanismen der Fragmentierung . . . . .	135
5.3.1.	Die energetische Auswahlregel . . . . .	135
5.3.2.	Fragmentierungsregeln . . . . .	136
5.3.3.	Umlagerungen . . . . .	139
5.3.3.1.	Tropyliumspaltung . . . . .	139
5.3.3.2.	McLafferty-Umlagerung . . . . .	140
5.4.	Auswertung von Massenspektren . . . . .	141
5.5.	Anwendungsbeispiele . . . . .	142
5.6.	Kontrollfragen und Aufgaben . . . . .	147
5.6.1.	Kontrollfragen . . . . .	147
5.6.2.	Aufgaben und Übungen . . . . .	148
<b>6.</b>	<b>Stofftrennung und -reinigung durch Extraktion, Verteilung und Adsorption</b> . . . . .	<b>152</b>
6.1.	Möglichkeiten zur Stofftrennung . . . . .	153
6.1.1.	Verteilung . . . . .	153
6.1.2.	Adsorption . . . . .	156
6.1.3.	Ionenaustausch . . . . .	158
6.2.	Möglichkeiten der Erhöhung des Trenneffektes . . . . .	160
6.2.1.	Wiederholte Verteilung . . . . .	160
6.2.2.	Die multiplikative Verteilung . . . . .	161
6.3.	Chromatographie . . . . .	165
6.3.1.	Einführung . . . . .	165
6.3.2.	Gaschromatographie . . . . .	170
6.3.2.1.	Kenngrößen . . . . .	171
6.3.2.2.	Die Trennformel . . . . .	174
6.3.2.3.	Molekularsieb-Chromatographie . . . . .	175
6.3.3.	Flüssigkeitschromatographie . . . . .	175
6.3.3.1.	Gelchromatographie . . . . .	177
6.3.3.2.	Ionenaustauschchromatographie . . . . .	178
6.4.	Kontrollfragen und Aufgaben . . . . .	179
6.4.1.	Kontrollfragen . . . . .	179
6.4.2.	Aufgaben und Übungen . . . . .	181
<b>7.</b>	<b>Strukturaufklärung durch kombinierten Einsatz physikalisch-chemischer Methoden</b> . . . . .	<b>183</b>
7.1.	Zum Strukturbegriff . . . . .	183
7.1.1.	Qualitative Zusammensetzung der Verbindung . . . . .	185
7.1.2.	Quantitative Zusammensetzung der Verbindung . . . . .	186
7.1.3.	Bestimmung der relativen Molekülmasse . . . . .	188
7.1.4.	Ermittlung des Grundgerüsts . . . . .	189
7.1.5.	Nachweis von funktionellen Gruppen . . . . .	194
7.1.5.1.	Alkylgruppen . . . . .	194

7.1.5.2.	Alkenylgruppen . . . . .	195
7.1.5.3.	Alkinylgruppen . . . . .	196
7.1.5.4.	Halogene (F, Cl, Br, J). . . . .	197
7.1.5.5.	Ketogruppen . . . . .	198
7.1.5.6.	Aldehydgruppe . . . . .	199
7.1.5.7.	Säurederivate . . . . .	199
7.1.5.8.	NO <sub>2</sub> -Gruppe . . . . .	200
7.1.5.9.	OH-(OR-)Gruppe . . . . .	201
7.1.5.10.	SH-Gruppen . . . . .	202
7.1.5.11.	NH <sub>2</sub> -Gruppen (Amine) . . . . .	203
7.1.5.12.	Übersicht zum Nachweis funktioneller Gruppen . . . . .	204
7.1.6.	Bestimmung der sterischen Anordnung . . . . .	204
7.1.7.	Bemerkungen zur Bestimmung der Elektronendichteverteilung . . . . .	207
7.1.8.	Wechselwirkungsverhalten . . . . .	208
7.2.	Vorgehen bei der Strukturermittlung . . . . .	209
7.3.	Anwendungsbeispiele . . . . .	210
7.4.	Kontrollfragen und Aufgaben . . . . .	216
7.4.1.	Kontrollfragen . . . . .	216
7.4.2.	Aufgaben und Übungen . . . . .	217
	<b>Weiterführende Literatur</b> . . . . .	<b>220</b>
	<b>Sachverzeichnis</b> . . . . .	<b>221</b>
	<b>Quellennachweis</b> . . . . .	<b>224</b>