# 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 iH-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 $^{13}$C-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 nichtdeuterierter Lösungsmittel ... 160

**5 $^{1}$H-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 ^-NMR-Spektren von üblichen deuterierten Lösungsmitteln ... 240
5.14.2 JH-NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen 242
5.14.3 lH-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-5-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 oc,ß-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**