

Strukturaufklärung Organischer Verbindungen

Vorlesung im SS 2022

1. Einführung

- 1.1 Literatur
- 1.2 Bedeutung für die Organische Chemie
- 1.3 Summenformel: Verbrennungsanalyse
- 1.4 Summenformel: Molmasse

2. Massenspektrometrie, Teil 1

- 2.1 Molekülionenpeak
 - 2.1.1 Molmasse
 - 2.1.2 Isotopenpeaks
 - 2.1.3 Hochauflösung und exakte Masse
 - 2.1.4 Doppelbindungsäquivalente
 - 2.1.5 Stickstoffgehalt

3. Infrarotspektren Organischer Verbindungen

- 3.1 Theorie
- 3.2 C-H und X-H-Schwingungen
- 3.3 Dreifachbindungen
- 3.4 Doppelbindungen
- 3.5 Fingerprintbereich

4. Kernresonanzspektroskopie

- 4.1 Kernspin
- 4.2 Spektrometer
- 4.3 Protonenresonanzspektroskopie
 - 4.3.1 Chemische Verschiebung aliphatischer Verbindungen: Methyl-, Methylen- und Methin-Protonen, Inkrementsystem
 - 4.3.2 Anisotropieeffekte bei chemischen Verschiebungen: Alkene, Alkine, Aromaten, Carbonylverbindungen, Inkrementsysteme für Alkene und Benzol-Derivate
 - 4.3.3 Spinsysteme erster Ordnung: AX-, AX₃-, AX₆-, A₂X₃-, AMX-, AMPX₂ System
 - 4.3.4 Spinsysteme höherer Ordnung: AB-, AB₂-, ABX-, AA'XX'-, AA'BB'-, AA'MM'X-, AA'BB'C-System
 - 4.3.5 Topizität: Homotopie, Enantiotopie, Diastereotopie, Karplus-Kurve, ²J-, ³J- und ⁴J-Kopplungskonstanten
- 4.4 ¹³C-Resonanz
 - 4.4.1 ¹³C-Satelliten im Protonenspektrum, Kopplungen im ¹³C-NMR, ¹J(¹H, ¹³C), ²J(¹H, ¹³C), ³J(¹H, ¹³C),
 - 4.4.2 Protonen-Entkopplung, NOE-Effekt, Doppelresonanzexperimente: DEPT, APT.
 - 4.4.3 ¹³C-Inkrementsystem für Olefine

- 4.4.4 ^{13}C -Inkrementensystem für Benzolderivate
- 4.4.5 ^{13}C -Inkrementensystem für aliphatische Verbindungen
- 4.5 NOE-Spektroskopie
- 4.6 2D-NMR-Spektroskopie
- 5. Massenspektrometrie, Teil II**
- 5.1 Massenspektrometer
 - 5.1.1 Elektronenstoß-Ionisation
 - 5.1.2 Chemische Ionisation
 - 5.1.3 Elektrospray-Ionisation
 - 5.1.4 Quadrupol-Analysator
 - 5.1.5 MALDI-TOF-MS
- 5.2 Kopplungstechniken
 - 5.2.1 GC-MS-Kopplung
 - 5.2.2 LC-MS-Kopplung
 - 5.2.3 DC-MS-Kopplung
- 5.3 Tandem-Massenspektrometrie
- 5.4 Fragmentierungen und Konstitutionsaufklärung