

# Inhaltsverzeichnis

|          |                                                                                                                       |          |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                                                                                     | <b>1</b> |
| 1.1      | Inhalt und Aufbau                                                                                                     | 1        |
| 1.2      | Abkürzungen und Symbole                                                                                               | 3        |
| <b>2</b> | <b>Übersichtstabellen</b>                                                                                             | <b>5</b> |
| 2.1      | Allgemeine Tabellen                                                                                                   | 5        |
| 2.1.1    | Berechnung der Anzahl Doppelbindungsäquivalente aus der Molekülformel                                                 | 5        |
| 2.1.2    | Eigenschaften ausgewählter Atomkerne                                                                                  | 6        |
| 2.1.3    | Volumenssuszeptibilitäten und Korrekturen bei externen Referenzen in der NMR Spektroskopie                            | 7        |
| 2.1.4    | Literatur                                                                                                             | 8        |
| 2.2      | $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektroskopie                                                                                    | 9        |
| 2.3      | $^1\text{H}$ -NMR-Spektroskopie                                                                                       | 12       |
| 2.4      | IR-Spektroskopie                                                                                                      | 15       |
| 2.5      | Massenspektrometrie                                                                                                   | 20       |
| 2.5.1    | Mittlere Massen der natürlich vorkommenden Elemente mit den Massen und typischen relativen Häufigkeiten ihrer Isotope | 20       |
| 2.5.2    | Bereiche natürlicher Isotopenhäufigkeiten für ausgewählte Elemente                                                    | 27       |
| 2.5.3    | Isotopenverteilungsmuster von natürlich vorkommenden Elementen                                                        | 28       |
| 2.5.4    | Berechnung der Isotopenverteilungsmuster                                                                              | 29       |
| 2.5.5    | Isotopenhäufigkeiten verschiedener Kombinationen von Chlor, Brom, Schwefel und Silicium                               | 31       |
| 2.5.6    | Isotopenmuster einiger Kombinationen von Cl und Br                                                                    | 33       |
| 2.5.7    | Indikatoren für Heteroatome                                                                                           | 34       |
| 2.5.8    | Regeln zur Bestimmung der relativen Molmasse ( $M_r$ )                                                                | 36       |
| 2.5.9    | Homologe Massensequenzen als Hinweise auf den Strukturtyp                                                             | 37       |
| 2.5.10   | Massenkorrelationstabelle                                                                                             | 39       |
| 2.5.11   | Häufige Abspaltungen von $[\text{M}+\text{H}]^+$ in ESI- und API-MS/MS-Spektren                                       | 48       |
| 2.5.12   | Literatur                                                                                                             | 51       |
| 2.6      | UV/Vis-Spektroskopie                                                                                                  | 52       |

---

|                                                       |     |
|-------------------------------------------------------|-----|
| <b>3 Kombinationstabellen</b>                         | 55  |
| 3.1 Alkane, Cycloalkane                               | 55  |
| 3.2 Alkene, Cycloalkene                               | 56  |
| 3.3 Alkine                                            | 57  |
| 3.4 Aromatische Kohlenwasserstoffe                    | 58  |
| 3.5 Heteroaromatische Verbindungen                    | 59  |
| 3.6 Halogenverbindungen                               | 60  |
| 3.7 Sauerstoffverbindungen                            | 62  |
| 3.7.1 Alkohole und Phenole                            | 62  |
| 3.7.2 Ether                                           | 63  |
| 3.8 Stickstoffverbindungen                            | 65  |
| 3.8.1 Amine                                           | 65  |
| 3.8.2 Nitroverbindungen                               | 66  |
| 3.9 Thiole und Sulfide                                | 67  |
| 3.10 Carbonylverbindungen                             | 68  |
| 3.10.1 Aldehyde                                       | 68  |
| 3.10.2 Ketone                                         | 69  |
| 3.10.3 Carbonsäuren                                   | 70  |
| 3.10.4 Ester und Lactone                              | 71  |
| 3.10.5 Amide und Lactame                              | 73  |
| <b>4 <math>^{13}\text{C}</math>-NMR-Spektroskopie</b> | 75  |
| 4.1 Alkane                                            | 75  |
| 4.1.1 Chemische Verschiebungen                        | 75  |
| 4.1.2 Kopplungskonstanten                             | 84  |
| 4.1.3 Literatur                                       | 85  |
| 4.2 Alkene                                            | 86  |
| 4.2.1 Chemische Verschiebungen                        | 86  |
| 4.2.2 Kopplungskonstanten                             | 90  |
| 4.2.3 Literatur                                       | 90  |
| 4.3 Alkine                                            | 91  |
| 4.3.1 Chemische Verschiebungen                        | 91  |
| 4.3.2 Kopplungskonstanten                             | 92  |
| 4.3.3 Literatur                                       | 92  |
| 4.4 Alicyclen                                         | 93  |
| 4.4.1 Chemische Verschiebungen                        | 93  |
| 4.4.2 Kopplungskonstanten                             | 98  |
| 4.5 Aromatische Kohlenwasserstoffe                    | 99  |
| 4.5.1 Chemische Verschiebungen                        | 99  |
| 4.5.2 Kopplungskonstanten                             | 106 |
| 4.5.3 Literatur                                       | 106 |

---

|        |                                                            |     |
|--------|------------------------------------------------------------|-----|
| 4.6    | Heteroaromatische Verbindungen . . . . .                   | 107 |
| 4.6.1  | Chemische Verschiebungen . . . . .                         | 107 |
| 4.6.2  | Kopplungskonstanten . . . . .                              | 114 |
| 4.7    | Halogenverbindungen . . . . .                              | 115 |
| 4.7.1  | Fluorverbindungen . . . . .                                | 115 |
| 4.7.2  | Chlorverbindungen . . . . .                                | 117 |
| 4.7.3  | Bromverbindungen . . . . .                                 | 118 |
| 4.7.4  | Iodverbindungen . . . . .                                  | 119 |
| 4.7.5  | Literatur . . . . .                                        | 119 |
| 4.8    | Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen . . . . .       | 120 |
| 4.8.1  | Alkohole . . . . .                                         | 120 |
| 4.8.2  | Ether . . . . .                                            | 121 |
| 4.9    | Stickstoffverbindungen . . . . .                           | 123 |
| 4.9.1  | Amine . . . . .                                            | 123 |
| 4.9.2  | Nitro- und Nitrosoverbindungen . . . . .                   | 125 |
| 4.9.3  | Nitrite und Nitrate . . . . .                              | 126 |
| 4.9.4  | Nitrosamine und Nitramine . . . . .                        | 126 |
| 4.9.5  | Azo- und Azoxyverbindungen . . . . .                       | 126 |
| 4.9.6  | Imine und Oxime . . . . .                                  | 127 |
| 4.9.7  | Hydrazine, Hydrazone und Carbodiimide . . . . .            | 128 |
| 4.9.8  | Nitrile und Isonitrile . . . . .                           | 129 |
| 4.9.9  | Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate . . . . .       | 129 |
| 4.10   | Schwefelverbindungen . . . . .                             | 130 |
| 4.10.1 | Thiole . . . . .                                           | 130 |
| 4.10.2 | Sulfide . . . . .                                          | 130 |
| 4.10.3 | Disulfide und Sulfoniumsalze . . . . .                     | 131 |
| 4.10.4 | Sulfoxide und Sulfone . . . . .                            | 132 |
| 4.10.5 | Sulfon- und Sulfinsäuren und Derivate . . . . .            | 133 |
| 4.10.6 | Derivate der schwefligen Säure und Schwefelsäure . . . . . | 133 |
| 4.10.7 | Schwefelhaltige Carbonylderivate . . . . .                 | 134 |
| 4.11   | Carbonylverbindungen . . . . .                             | 135 |
| 4.11.1 | Aldehyde . . . . .                                         | 135 |
| 4.11.2 | Ketone . . . . .                                           | 136 |
| 4.11.3 | Carbonsäuren und Carboxylate . . . . .                     | 138 |
| 4.11.4 | Ester und Lactone . . . . .                                | 140 |
| 4.11.5 | Amide and Lactame . . . . .                                | 142 |
| 4.11.6 | Verschiedene Carbonylderivate . . . . .                    | 144 |
| 4.12   | Verschiedene Verbindungen . . . . .                        | 146 |
| 4.12.1 | Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV . . . . .         | 146 |
| 4.12.2 | Phosphorverbindungen . . . . .                             | 147 |
| 4.12.3 | Verschiedene metallorganische Verbindungen . . . . .       | 149 |

|          |                                                                                           |            |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 4.13     | Naturstoffe                                                                               | 151        |
| 4.13.1   | Aminosäuren                                                                               | 151        |
| 4.13.2   | Kohlenhydrate                                                                             | 155        |
| 4.13.3   | Nucleotide und Nucleoside                                                                 | 157        |
| 4.13.4   | Steroide                                                                                  | 159        |
| 4.14     | Spektren von Lösungsmitteln und Referenzverbindungen                                      | 160        |
| 4.14.1   | $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektren von deuterierten Lösungsmitteln                             | 160        |
| 4.14.2   | $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen                         | 164        |
| 4.14.3   | $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher<br>nichtdeuterierter Lösungsmittel | 165        |
| <b>5</b> | <b><math>^1\text{H}</math>-NMR-Spektroskopie</b>                                          | <b>167</b> |
| 5.1      | Alkane                                                                                    | 167        |
| 5.1.1    | Chemische Verschiebungen                                                                  | 167        |
| 5.1.2    | Kopplungskonstanten                                                                       | 172        |
| 5.2      | Alkene                                                                                    | 174        |
| 5.2.1    | Ethylene                                                                                  | 174        |
| 5.2.2    | Konjugierte Diene                                                                         | 180        |
| 5.2.3    | Allene                                                                                    | 181        |
| 5.3      | Alkine                                                                                    | 182        |
| 5.4      | Alicyclen                                                                                 | 183        |
| 5.5      | Aromatische Kohlenwasserstoffe                                                            | 187        |
| 5.6      | Heteroaromatische Verbindungen                                                            | 194        |
| 5.6.1    | Nichtkondensierte heteroaromatische Ringe                                                 | 194        |
| 5.6.2    | Kondensierte heteroaromatische Ringe                                                      | 201        |
| 5.7      | Halogenverbindungen                                                                       | 206        |
| 5.7.1    | Fluorverbindungen                                                                         | 206        |
| 5.7.2    | Chlorverbindungen                                                                         | 208        |
| 5.7.3    | Bromverbindungen                                                                          | 209        |
| 5.7.4    | Iodverbindungen                                                                           | 210        |
| 5.7.5    | Literatur                                                                                 | 210        |
| 5.8      | Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen                                                | 211        |
| 5.8.1    | Alkohole                                                                                  | 211        |
| 5.8.2    | Ether                                                                                     | 213        |
| 5.9      | Stickstoffverbindungen                                                                    | 216        |
| 5.9.1    | Amine                                                                                     | 216        |
| 5.9.2    | Nitro- und Nitrosoverbindungen                                                            | 218        |
| 5.9.3    | Nitrite und Nitrate                                                                       | 219        |
| 5.9.4    | Nitrosamine, Azo- und Azoxyverbindungen                                                   | 219        |
| 5.9.5    | Imine, Oxime, Hydrazine, Hydrazone und Azine                                              | 220        |
| 5.9.6    | Nitrile und Isonitrile                                                                    | 221        |
| 5.9.7    | Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate                                       | 222        |

|          |                                                                                                  |            |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 5.10     | Schwefelverbindungen . . . . .                                                                   | 223        |
| 5.10.1   | Thiole . . . . .                                                                                 | 223        |
| 5.10.2   | Sulfide . . . . .                                                                                | 224        |
| 5.10.3   | Disulfide und Sulfoniumsalze . . . . .                                                           | 225        |
| 5.10.4   | Sulfoxide und Sulfone . . . . .                                                                  | 225        |
| 5.10.5   | Sulfon- und Sulfinsäuren, schweflige Säure, Schwefelsäure<br>sowie Derivate . . . . .            | 226        |
| 5.10.6   | Thiocarboxylatderivate . . . . .                                                                 | 226        |
| 5.11     | Carbonylverbindungen . . . . .                                                                   | 227        |
| 5.11.1   | Aldehyde . . . . .                                                                               | 227        |
| 5.11.2   | Ketone . . . . .                                                                                 | 228        |
| 5.11.3   | Carbonsäuren und Carboxylate . . . . .                                                           | 229        |
| 5.11.4   | Ester und Lactone . . . . .                                                                      | 230        |
| 5.11.5   | Amide und Lactame . . . . .                                                                      | 231        |
| 5.11.6   | Verschiedene Carbonylderivate . . . . .                                                          | 235        |
| 5.12     | Verschiedene Verbindungen . . . . .                                                              | 237        |
| 5.12.1   | Verbindungen mit Elementen der Gruppe IV . . . . .                                               | 237        |
| 5.12.2   | Phosphorverbindungen . . . . .                                                                   | 238        |
| 5.12.3   | Verschiedene Verbindungen . . . . .                                                              | 241        |
| 5.12.4   | Literatur . . . . .                                                                              | 242        |
| 5.13     | Naturstoffe . . . . .                                                                            | 243        |
| 5.13.1   | Aminosäuren . . . . .                                                                            | 243        |
| 5.13.2   | Kohlenhydrate . . . . .                                                                          | 247        |
| 5.13.3   | Nucleotide und Nucleoside . . . . .                                                              | 249        |
| 5.13.2   | Literatur . . . . .                                                                              | 250        |
| 5.14     | Spektren von Lösungsmitteln und Referenzverbindungen . . . . .                                   | 251        |
| 5.14.1   | $^1\text{H}$ -NMR-Spektren von üblichen deuterierten Lösungsmitteln . . . . .                    | 251        |
| 5.14.2   | $^1\text{H}$ -NMR-Spektren von sekundären Referenzverbindungen . . . . .                         | 253        |
| 5.14.3   | $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum eines Gemisches üblicher<br>nichtdeuterierter Lösungsmittel . . . . . | 254        |
| <b>6</b> | <b>Heteronukleare NMR-Spektroskopie . . . . .</b>                                                | <b>255</b> |
| 6.1      | $^{15}\text{N}$ -NMR-Spektroskopie . . . . .                                                     | 255        |
| 6.1.1    | Heteroaromatische Verbindungen . . . . .                                                         | 255        |
| 6.1.2    | Amine und Ammoniumsalze . . . . .                                                                | 259        |
| 6.1.3    | Carbonyl und Thiocarbonylderivate . . . . .                                                      | 261        |
| 6.1.4    | Weitere Aminderivate . . . . .                                                                   | 263        |
| 6.1.5    | Verbindungen mit $\text{C}=\text{N}$ Bindungen . . . . .                                         | 265        |
| 6.1.6    | Verbindungen mit $\text{N}=\text{O}$ Bindungen . . . . .                                         | 267        |
| 6.1.7    | Verbindungen mit $\text{N}-\text{N}$ Mehrfachbindungen . . . . .                                 | 268        |
| 6.1.8    | Nitrile, Isonitrile, Cyanate, Isocyanate und Thioderivate . . . . .                              | 269        |
| 6.1.9    | Naturstoffe . . . . .                                                                            | 270        |

|        |                                                                                                                                               |     |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.1.10 | Referenzen . . . . .                                                                                                                          | 274 |
| 6.1.11 | Literatur . . . . .                                                                                                                           | 275 |
| 6.2    | <sup>19</sup> F-NMR-Spektroskopie . . . . .                                                                                                   | 277 |
| 6.2.1  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Fluoralkanen . . . . .                                                                           | 277 |
| 6.2.2  | Abschätzung der <sup>19</sup> F-chemischen Verschiebungen von<br>Fluorethylenen . . . . .                                                     | 281 |
| 6.2.3  | Kopplungskonstanten in Alkanen und Alkenen . . . . .                                                                                          | 282 |
| 6.2.4  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Allenen und Alkinen . . . . .                                                                    | 283 |
| 6.2.5  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten<br>von Alicyclen . . . . .                                                   | 284 |
| 6.2.6  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen und Kopplungskonstanten<br>von Aromaten und Heteroaromaten . . . . .                                 | 285 |
| 6.2.7  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Alkoholen und Ethern . . . . .                                                                   | 288 |
| 6.2.8  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Aminen, Iminen und<br>Hydroxylaminderivaten . . . . .                                            | 289 |
| 6.2.9  | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Schwefelverbindungen . . . . .                                                                   | 290 |
| 6.2.10 | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Carbonyl- und<br>Thiocarbonylverbindungen . . . . .                                              | 291 |
| 6.2.11 | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Bor-, Phosphor- und<br>Siliciumverbindungen . . . . .                                            | 292 |
| 6.2.12 | <sup>19</sup> F-Chemische Verschiebungen von Naturstoffderivaten . . . . .                                                                    | 293 |
| 6.2.13 | Literatur . . . . .                                                                                                                           | 294 |
| 6.3    | <sup>29</sup> Si-NMR-Spektroskopie . . . . .                                                                                                  | 295 |
| 6.3.1  | Kohlenstoffverbindungen von Silicium . . . . .                                                                                                | 295 |
| 6.3.2  | Halogenverbindungen von Silicium . . . . .                                                                                                    | 296 |
| 6.3.3  | Sauerstoff-, Stickstoff- und Schwefelverbindungen von Silicium . . . . .                                                                      | 297 |
| 6.3.4  | Organische Di- und Oligosiliciumverbindungen . . . . .                                                                                        | 297 |
| 6.3.5  | Organische Phosphorverbindungen von Silicium . . . . .                                                                                        | 298 |
| 6.3.6  | Literatur . . . . .                                                                                                                           | 298 |
| 6.4    | <sup>31</sup> P-NMR-Spektroskopie . . . . .                                                                                                   | 299 |
| 6.4.1  | <sup>31</sup> P-Chemische Verschiebungen von trikoordiniertem<br>Phosphor PR <sup>1</sup> R <sup>2</sup> R <sup>3</sup> . . . . .             | 299 |
| 6.4.2  | <sup>31</sup> P-Chemische Verschiebungen von tetrakoordinierten<br>Phosphoniumverbindungen . . . . .                                          | 300 |
| 6.4.3  | <sup>31</sup> P-Chemische Verschiebungen von Verbindungen mit einer<br>P=C- oder P=N-Bindung . . . . .                                        | 301 |
| 6.4.4  | <sup>31</sup> P-Chemische Verschiebungen von tetrakoordinierten<br>P(=O)- und P(=S)-Verbindungen . . . . .                                    | 302 |
| 6.4.5  | <sup>31</sup> P-Chemische Verschiebungen von penta- und<br>hexakoordinierten Phosphorverbindungen . . . . .                                   | 304 |
| 6.4.6  | <sup>31</sup> P-Chemische Verschiebungen von phosphorhaltigen<br>Naturstoffen (δ in ppm relativ zu H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> ) . . . . . | 305 |

---

|                                                      |     |
|------------------------------------------------------|-----|
| <b>7 IR-Spektroskopie</b> .....                      | 307 |
| 7.1 Alkane. ....                                     | 307 |
| 7.2 Alkene. ....                                     | 310 |
| 7.2.1 Monoene .....                                  | 310 |
| 7.2.2 Allene .....                                   | 313 |
| 7.3 Alkine .....                                     | 314 |
| 7.4 Alicyclen .....                                  | 315 |
| 7.5 Aromatische Kohlenwasserstoffe .....             | 317 |
| 7.6 Heteroaromatische Verbindungen .....             | 320 |
| 7.7 Halogenverbindungen .....                        | 322 |
| 7.7.1 Fluorverbindungen .....                        | 322 |
| 7.7.2 Chlorverbindungen .....                        | 323 |
| 7.7.3 Bromverbindungen .....                         | 324 |
| 7.7.4 Iodverbindungen .....                          | 324 |
| 7.8 Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen ..... | 325 |
| 7.8.1 Alkohole und Phenole .....                     | 325 |
| 7.8.2 Ether, Acetale, Ketale .....                   | 326 |
| 7.8.3 Epoxide .....                                  | 328 |
| 7.8.4 Peroxide und Hydroperoxide .....               | 329 |
| 7.9 Stickstoffverbindungen .....                     | 330 |
| 7.9.1 Amine und verwandte Verbindungen .....         | 330 |
| 7.9.2 Nitro- und Nitrosoverbindungen .....           | 332 |
| 7.9.3 Imine und Oxime .....                          | 334 |
| 7.9.4 Azo-, Azoxy- und Azothioverbindungen .....     | 336 |
| 7.9.5 Nitrile und Isonitrile .....                   | 337 |
| 7.9.6 Diazoverbindungen .....                        | 338 |
| 7.9.7 Cyanate und Isocyanate .....                   | 339 |
| 7.9.8 Thiocyanate und Isothiocyanate .....           | 340 |
| 7.10 Schwefelverbindungen .....                      | 342 |
| 7.10.1 Thiole und Sulfide .....                      | 342 |
| 7.10.2 Sulfoxide und Sulfone .....                   | 343 |
| 7.10.3 Thiocarbonylderivate .....                    | 345 |
| 7.10.4 Thiokohlensäurederivate .....                 | 345 |
| 7.11 Carbonylverbindungen .....                      | 348 |
| 7.11.1 Aldehyde .....                                | 348 |
| 7.11.2 Ketone .....                                  | 349 |
| 7.11.3 Carbonsäuren .....                            | 352 |
| 7.11.4 Ester und Lactone .....                       | 354 |
| 7.11.5 Amide und Lactame .....                       | 357 |
| 7.11.6 Säureanhydride .....                          | 360 |
| 7.11.7 Säurehalogenide .....                         | 361 |

|          |                                                               |            |
|----------|---------------------------------------------------------------|------------|
| 7.11.8   | Kohlensäurederivate . . . . .                                 | 362        |
| 7.12     | Verschiedene Verbindungen . . . . .                           | 365        |
| 7.12.1   | Siliciumverbindungen . . . . .                                | 365        |
| 7.12.2   | Phosphorverbindungen . . . . .                                | 366        |
| 7.12.3   | Borverbindungen . . . . .                                     | 369        |
| 7.13     | Aminosäuren . . . . .                                         | 370        |
| 7.14     | Lösungsmittel, Suspensionsmittel und Interferenzen . . . . .  | 371        |
| 7.14.1   | Infrarotspektren üblicher Lösungsmittel . . . . .             | 371        |
| 7.14.2   | Infrarotspektren von Suspensionsmitteln . . . . .             | 372        |
| 7.14.3   | Interferenzen in Infrarotspektren . . . . .                   | 373        |
| <b>8</b> | <b>Massenspektrometrie . . . . .</b>                          | <b>375</b> |
| 8.1      | Alkane . . . . .                                              | 375        |
| 8.2      | Alkene . . . . .                                              | 377        |
| 8.3      | Alkine . . . . .                                              | 379        |
| 8.4      | Alicyclische Kohlenwasserstoffe . . . . .                     | 380        |
| 8.5      | Aromatische Kohlenwasserstoffe . . . . .                      | 383        |
| 8.6      | Heteroaromatische Verbindungen . . . . .                      | 385        |
| 8.7      | Halogenverbindungen . . . . .                                 | 390        |
| 8.8      | Alkohole, Ether und verwandte Verbindungen . . . . .          | 392        |
| 8.8.1    | Alkohole und Phenole . . . . .                                | 392        |
| 8.8.2    | Hydroperoxide . . . . .                                       | 394        |
| 8.8.3    | Ether . . . . .                                               | 395        |
| 8.8.4    | Aliphatische Epoxide . . . . .                                | 398        |
| 8.8.5    | Aliphatische Peroxide . . . . .                               | 399        |
| 8.9      | Stickstoffverbindungen . . . . .                              | 401        |
| 8.9.1    | Amine . . . . .                                               | 401        |
| 8.9.2    | Nitroverbindungen . . . . .                                   | 404        |
| 8.9.3    | Diazoverbindungen und Azobenzole . . . . .                    | 405        |
| 8.9.4    | Azide . . . . .                                               | 405        |
| 8.9.5    | Nitrile und Isonitrile . . . . .                              | 406        |
| 8.9.6    | Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate . . . . . | 407        |
| 8.9.7    | Literatur . . . . .                                           | 410        |
| 8.10     | Schwefelverbindungen . . . . .                                | 411        |
| 8.10.1   | Thiole . . . . .                                              | 411        |
| 8.10.2   | Sulfide und Disulfide . . . . .                               | 412        |
| 8.10.3   | Sulfoxide und Sulfone . . . . .                               | 414        |
| 8.10.4   | Sulfonsäuren, Sulfonsäureester und Sulfonamide . . . . .      | 417        |
| 8.10.5   | Thiocarbonsäure-S-ester . . . . .                             | 418        |
| 8.10.6   | Literatur . . . . .                                           | 419        |

|          |                                                                                                       |            |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 8.11     | Carbonylverbindungen . . . . .                                                                        | 420        |
| 8.11.1   | Aldehyde . . . . .                                                                                    | 420        |
| 8.11.2   | Ketone. . . . .                                                                                       | 421        |
| 8.11.3   | Carbonsäuren . . . . .                                                                                | 423        |
| 8.11.4   | Carbonsäureanhydride . . . . .                                                                        | 424        |
| 8.11.5   | Ester und Lactone . . . . .                                                                           | 424        |
| 8.11.6   | Amide und Lactame . . . . .                                                                           | 426        |
| 8.11.7   | Imide. . . . .                                                                                        | 429        |
| 8.11.8   | Literatur. . . . .                                                                                    | 430        |
| 8.12     | Verschiedene Verbindungen . . . . .                                                                   | 431        |
| 8.12.1   | Trialkylsilylether . . . . .                                                                          | 431        |
| 8.12.2   | Phosphorverbindungen . . . . .                                                                        | 431        |
| 8.12.3   | Literatur. . . . .                                                                                    | 432        |
| 8.13     | Massenspektren üblicher Lösungsmittel und Matrixkomponenten . . . . .                                 | 433        |
| 8.13.1   | Elektronenstoß-Massenspektren üblicher Lösungsmittel . . . . .                                        | 433        |
| 8.13.2   | Spektren der üblichen FAB-MS-Matrix- und Kalibrations-<br>substanzen. . . . .                         | 436        |
| 8.13.3   | Spektren der üblichen MALDI-MS-Matrixsubstanzen . . . . .                                             | 441        |
| 8.13.4   | Literatur. . . . .                                                                                    | 443        |
| <b>9</b> | <b>UV/Vis-Spektroskopie . . . . .</b>                                                                 | <b>445</b> |
| 9.1      | Zusammenhang zwischen der Wellenlänge des absorbierten<br>Lichts und der beobachteten Farbe . . . . . | 445        |
| 9.2      | Einfache Chromophore . . . . .                                                                        | 445        |
| 9.3      | Konjugierte Alkene . . . . .                                                                          | 447        |
| 9.3.1    | Diene und Polyene . . . . .                                                                           | 447        |
| 9.3.2    | $\alpha,\beta$ -Ungesättigte Carbonylverbindungen . . . . .                                           | 448        |
| 9.4      | Aromatische Verbindungen . . . . .                                                                    | 450        |
| 9.4.1    | Monosubstituierte Benzole . . . . .                                                                   | 450        |
| 9.4.2    | Mehrfach substituierte Benzole. . . . .                                                               | 451        |
| 9.4.3    | Aromatische Carbonylverbindungen . . . . .                                                            | 452        |
| 9.5      | Referenzspektren. . . . .                                                                             | 453        |
| 9.5.1    | Alkene und Alkine . . . . .                                                                           | 453        |
| 9.5.2    | Aromatische Verbindungen . . . . .                                                                    | 454        |
| 9.5.3    | Heteroaromatische Verbindungen . . . . .                                                              | 459        |
| 9.5.4    | Verschiedene Verbindungen . . . . .                                                                   | 461        |
| 9.5.5    | Nucleotide . . . . .                                                                                  | 463        |
| 9.6      | Übliche Lösungsmittel . . . . .                                                                       | 464        |
|          | <b>Sachverzeichnis . . . . .</b>                                                                      | <b>465</b> |