

**Einführungspraktikum**  
zu den  
**Arbeitsmethoden in der Organischen Chemie**  
**Versuche und Übungen**

**Kapitel 13: Molekülspektroskopie**

- UV/Vis-Spektroskopie (Übung 13.1)
- IR-Spektroskopie (Übung 13.2)
- $^1\text{H}$ -NMR-Spektroskopie (Übung 13.3)

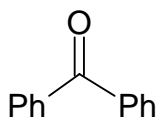
Vor der Aufnahme und Auswertung der Spektren ist das entsprechende Kapitel in den „Arbeitsmethoden“ oder ein Lehrbuch der Spektroskopie durcharbeiten.

## Übung 13.1 UV/Vis-Spektroskopie

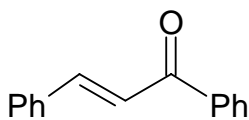
Die Studierenden werden zunächst in die Bedienung des UV/VIS-Spektrometers und die Darstellung der Messlösungen eingewiesen..

Im Praktikum stehen „farbige“ Verbindungen auf, deren UV/VIS-Spektren aufzunehmen sind, die Absorptionsmaxima und die molaren Extinktionen sind zu bestimmen. Die Lösungsmittel sind bei den Substanzen in Klammern angegeben.

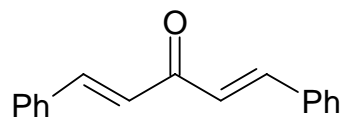
Jeweils zwei Studierende arbeiten an der Aufnahme eines Spektrums zusammen.



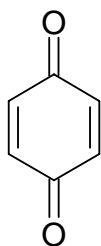
Benzophenon (EtOH)



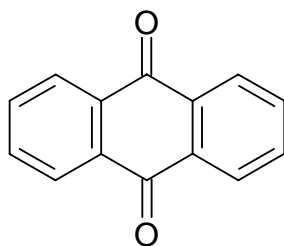
Benzalacetone (EtOH)



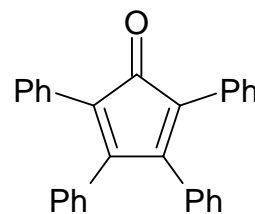
Dibenzalacetone (EtOH)



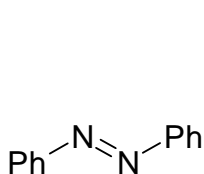
*p*-Benzochinon  
(EtOH, Cyclohexan)



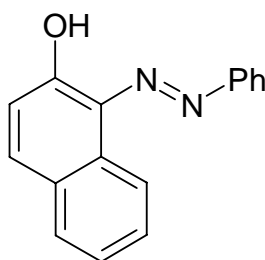
Anthrachinon (MeOH)



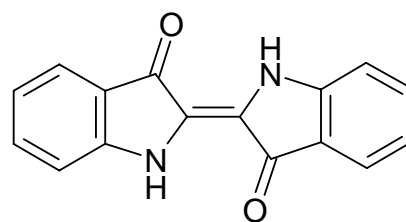
Tetraphenylcyclopentadienon  
(EtOH oder Dioxan)



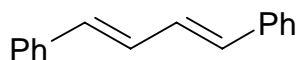
*trans*-Azobenzol (EtOH)



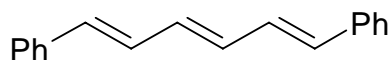
Sudan I (EtOH)



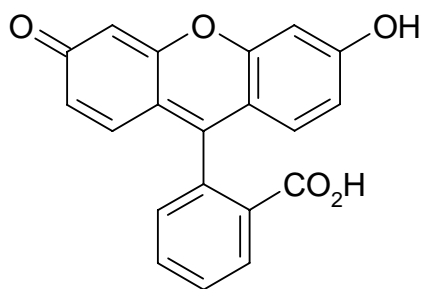
Indigo (CHCl<sub>3</sub>)



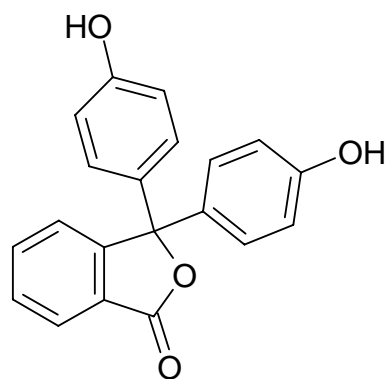
1,4-Diphenylbutadien  
(EtOH)



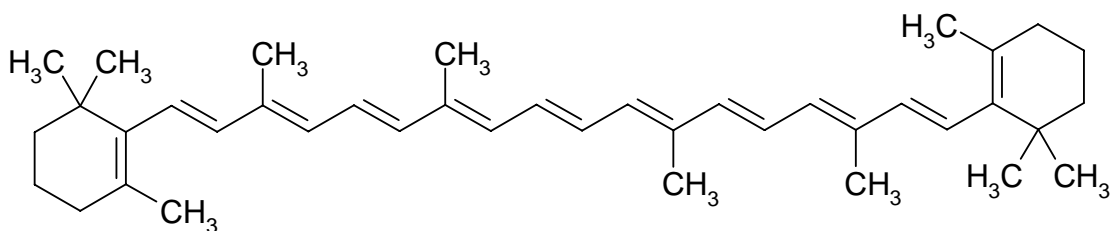
1,6-Diphenylhexatrien  
(EtOH)



Fluoreszein (Wasser)



Phenolphthalein (EtOH)



$\beta$ -Carotin (*n*-Hexan)

### UV/VIS-Spektren

### $\lambda_{\max}$ (log $\epsilon$ ) Solvens

Benzophenon	252 nm (4.30), 330 (2.26) (EtOH)
Benzalacetophenon	230 nm (3.95), 312 (4.43) (EtOH)
Dibenzalacetophenon	325 (4.20) (EtOH)
<i>p</i> -Benzochinon	242 nm (4.22), 281 (2.80) (EtOH)
	242 nm (4.20), 275,s (3.03), 433 (1.31) (Cyclohexan)
Anthrachinon	250 nm (4.98), 270,s (4.50), 325 (4.02) (MeOH)
Tetraphenylcyclopentadienon) (Tetracyclon)	262 nm (4.40), 345 (3.80) (EtOH)
<i>trans</i> -Azobenzol	260 nm (4.50), 336 (3.84), 510 (3.14) (Dioxan)
Sudangelb I	325 nm (4.20), 450 (2.50) (EtOH)
	260 nm, s (4.00), 304 (3.90), 470 (4.20) (EtOH)
Indigo	246 nm (4.20), 285 (4.63), 330,s (4.00), 445 (3.00), 610 (4.24) (CHCl <sub>3</sub> )
$\alpha,\omega$ -Diphenylbutadien	328 nm (4.61), 350 (4.54) (EtOH)
$\alpha,\omega$ -Diphenylhexatrien	349 nm (4.83) (EtOH)
Phenolphthalein	374 nm (3.80), 552 (4.42) (EtOH)
Fluoreszein	490 nm (4.50) (H <sub>2</sub> O)
$\beta$ -Carotin	450 nm (5.04), 478 (5.13) ( <i>n</i> -Hexan)

## Übung 13.2 IR-Spektroskopie

Die Studierenden werden in die Bedienung eines IR-Spektrometers und in die Probenbereitung (Film zwischen Kochsalzplatten, Nujol-Technik, KBr-Presslinge, Lösungsspektren) eingeführt.

Im Praktikum stehen nicht bezeichnete, nummerierte Proben von Alkoholen, Aldehyden, Ketonen, Carbonsäuren und Phenolen aus.

Es arbeiten jeweils zwei Studierende zusammen:

- Aufnahme des IR-Spektrums einer ausstehenden Verbindung
- Auswertung des Spektrums (unter Zuhilfenahme der Tabellen)

Welche funktionellen Gruppen lassen sich identifizieren?  
Welche weiteren Aussagen erlaubt das Spektrum?

Empfehlung für die ausstehenden Verbindungen:

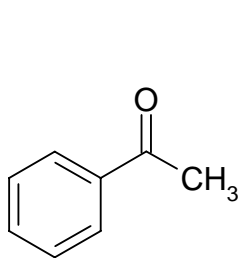
Benzaldehyd	Cyclohexanol	Benzoessäure
Salizylaldehyd	Benzylalkohol	Zimtsäure
Acetophenon	Zimtalkohol	Adipinsäure
Benzophenon	Cholesterol	Malonsäure
Cyclohexanon	Resorcin	Maleinsäure
		Fumarsäure
Malondinitril	Phenylacetylen	Salicylsäure
Benzonitril	Tolan	Acetylsalicylsäure

## Übung 13.3 NMR-Spektroskopie

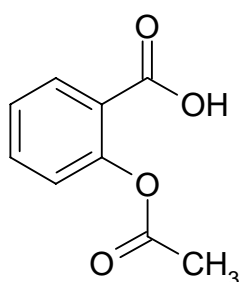
Den Studierenden wird die Probenvorbereitung und Aufnahme von  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren am Gerät vorgeführt.

Von den nachstehend aufgeführten Verbindungen, die alle  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren 1. Ordnung liefern, liegen nicht gekennzeichnete  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren aus.

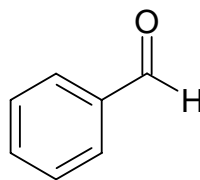
Bearbeiten Sie ein Spektrum ( $\delta$ -Werte, siehe Tabelle in den Arbeitsmethoden,  $^1\text{H}/^1\text{H}$ -Kopplungen) und versuchen Sie eine Zuordnung zu einer der abgebildeten Verbindungen. Diskutieren Sie anschließend in der Gruppe die Spektren aller Verbindungen.



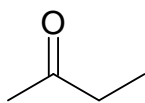
Acetophenon



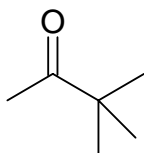
Acetylsalicylsäure



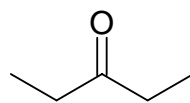
Benzaldehyd



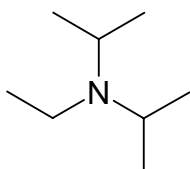
2-Butanon



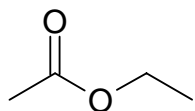
3,3-Dimethyl-2-butanon



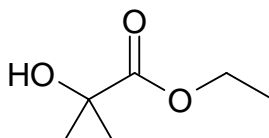
3-Pentanon



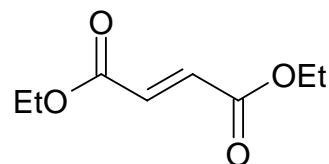
N-Ethyl-N,N-diisopropylamin



Essigsäureethylester



2-Hydroxyisobuttersäureethylester



Fumarsäurediethylester