

### Hinweise zu Materialien für den Unterricht:

Zur Einführung in das Thema und zur Unterstützung im Unterricht bieten sich folgende Medien an.

Video-Film                      VCI                                      Spektroskopische Methoden

Folienserie                      Salle Verlag                              Spektroskopie

Computerprogramme:

Trinity	Introduction to Spektroskopie
Trinity	Spectral Interpretation
AK-Computer	Spektren
Seraphim	RACCOON
AK-Computer	LAOCOON

zum Teil:	AK-Computer	13C-Spektroskopie
	AK-Computer	1HNMR-Spektroskopie

evtl. als Textbuch:              Salle Verlag                              Funktionelle Gruppen

Zum (sehr intensiven persönlichen ) Einarbeiten in das sehr komplexe Thema (mit Hintergründen) ist das "Gebetbuch" des NMR - Spektroskopikers:

H Günther, NMR - Spektroskopie aus dem G.Thieme Verlag

M.Hesse, H.Meier und B.Zeeh, Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie, Georg Thieme Verlag geeignet.

### Hinweise zu den kombinierten Aufgaben:

Sie finden im Anschluß an die Musterlösungen fast 200 ausgewählte Probleme aus der Spektroskopie abgedruckt. Sie enthalten auf einer DIN A4 Seite:

1. Qualitative Analyse
2. Quantitative C- und H- Analyse
3. Massenspektrum
4. IR-Spektrum
5. <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum (60 MHz mit Integration)
6. <sup>13</sup>C-NMR-Spektrum (Strichspektrum - rauschentkoppelt mit Zusatzinformation aus dem off-resonanz-entkoppelten Spektrum)

### Hinweise zur Herkunft und Bearbeitung des Materials:

Die meisten Spektren wurden elektronisch eingescannt und mit Hilfe eines eigens für diesen Zweck geschriebenen Graphikerkennungs- bzw. Umwandlungsprogramms in entsprechende Dateien überführt. Diese wurden evtl. nach Umrechnung der Skalierung erneut auf den Bildschirm gezeichnet und ausgedruckt. Waren gespreizte NMR-Spektren vorhanden, so wurden sie unter der gleichen Problemnummer (mit angehängtem "A") separat ausgedruckt. Sonstige Besonderheiten, wie Spektren von mit D<sub>2</sub>O etc. behandelten Proben., wurden mit einem angehängten "B" versehen.

Ein Teil der Daten wurde aus elektronischen Datenbanken übernommen und für diesen Materialienband modifiziert

Alle Daten dienen als Basis für das Computerprogramm **Spektren**, mit denen der Lehrer im Klassenraum die entsprechende Strukturermittlung in der Demonstration vorführen kann.

### Literatur- und Quellenhinweise:

Teile der Abbildungen, Spektren und Tabellen der theoretischen Einführung einschließlich der Übungsaufgaben sowie der kombinierten Aufgaben wurden aus folgenden Quellen entnommen und überarbeitet:

- 1) H. Günther, NMR - Spektroskopie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1973
- 2) Autorenkollektiv, Analytikum, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig 1981
- 3) K. Risch, H. Seitz, Organische Chemie, Schroedel Verlag Hannover 1987
- 4) H.R. Christen Grundlagen der organischen Chemie, Salle Verlag, Frankfurt/Main, Sauerländer Verlag, Aarau 1982
- 5) D.H. Williams u. I. Fleming Strukturaufklärung in der organischen Chemie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1973
- 6) E. Fahr, M. Mitschke Spektren und Strukturen organischer Verbindungen, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1973
- 7) M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh, Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1973
- 8) H. Friebolin, NMR - Spektroskopie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1973
- 9) P. Hallap, H. Schütz ,Anwendung der  $^1\text{H}$  - NMR - Spektroskopie, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 1973
- 10) W. Simon, T. Clerk, Strukturaufklärung organischer Verbindungen mit spektroskopischen Methoden, Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt 1967
- 11) Programmpaket: Spectral Interpretation, Trinity - Software, Campton NH, 1990
- 12) AK-Computer , Programm LAOCOON, Münster 1985
- 13) elektronische Datenbank: Massenspektren
- 14)  $^{13}\text{C}$ -Spektren auf Mikrofiche, Verlag Chemie, Weinheim
- 15) Spektrensammlungen von Aldrich: The Aldrich Library of Infrared Spectra und The Aldrich Library of NMR- Spectra, EGA-Chemie, 7924 Steinheim
- 16) Spektrensammlungen von Sadtler: The Sadtler Handbook of IR Spectra und The Sadtler Handbook of NMR- Spectra und The Sadtler Handbook of UV-Spektren, Heyden & Son, 4400 Rheine
- 17) R.Mecke, F. Langenbacher, Infrarotspektren ausgewählter Verbindungen, Heydn + Son, London 1965
- 18) W. Bremser et al., Carbon  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spectra (Living Microfiche), VCH Verlagsanstalt, Weinheim, 1987
- 19) VARIAN, NMR Spectra Katalog, 1962
- 20) B. Schrader, Raman/Infrared Atlas of Organic Compounds, 2nd Edition, VCH Verlagsgesellschaft 1989
- 21) Vom Verfasser selbst aufgenommene Spektren