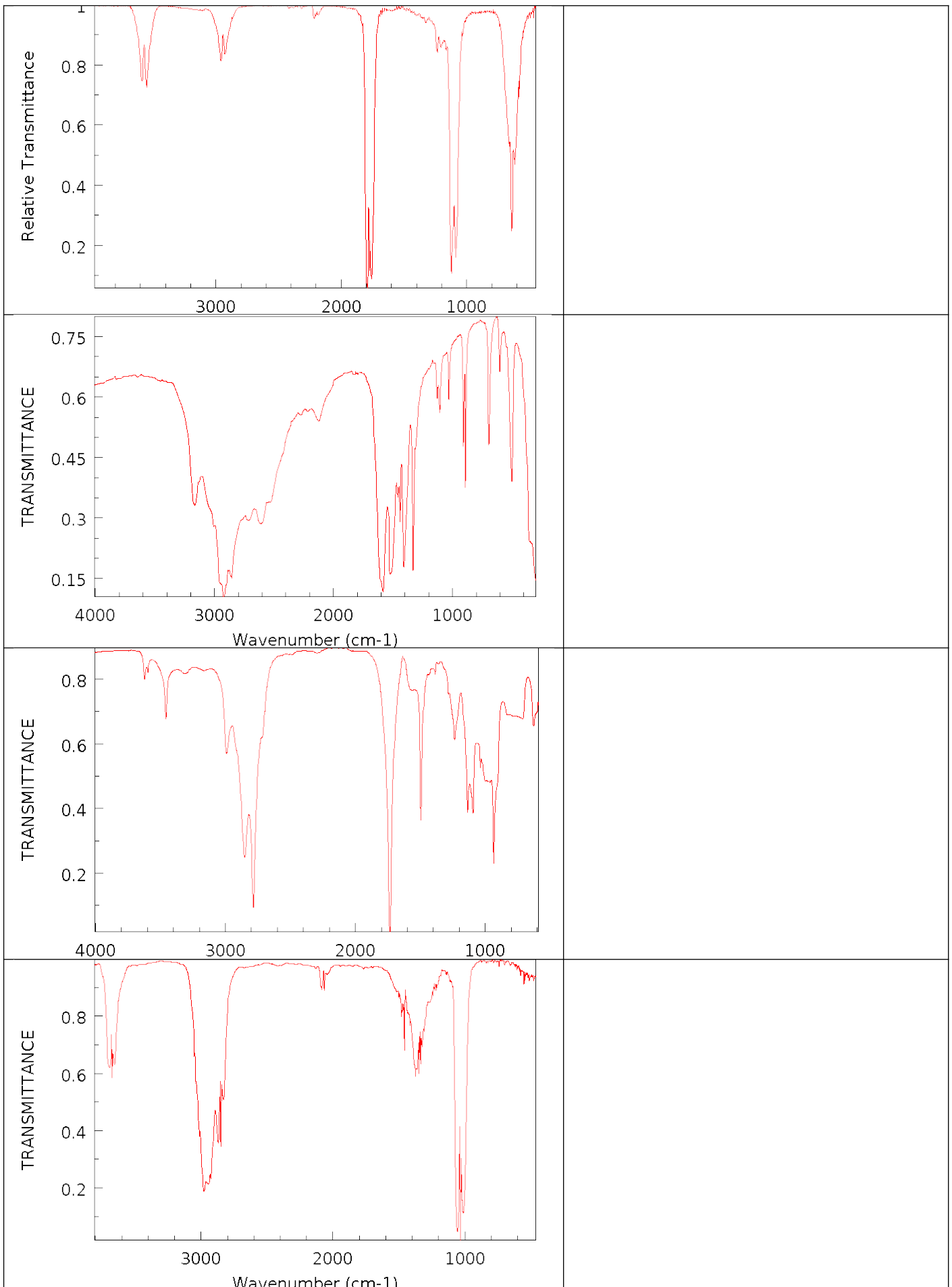
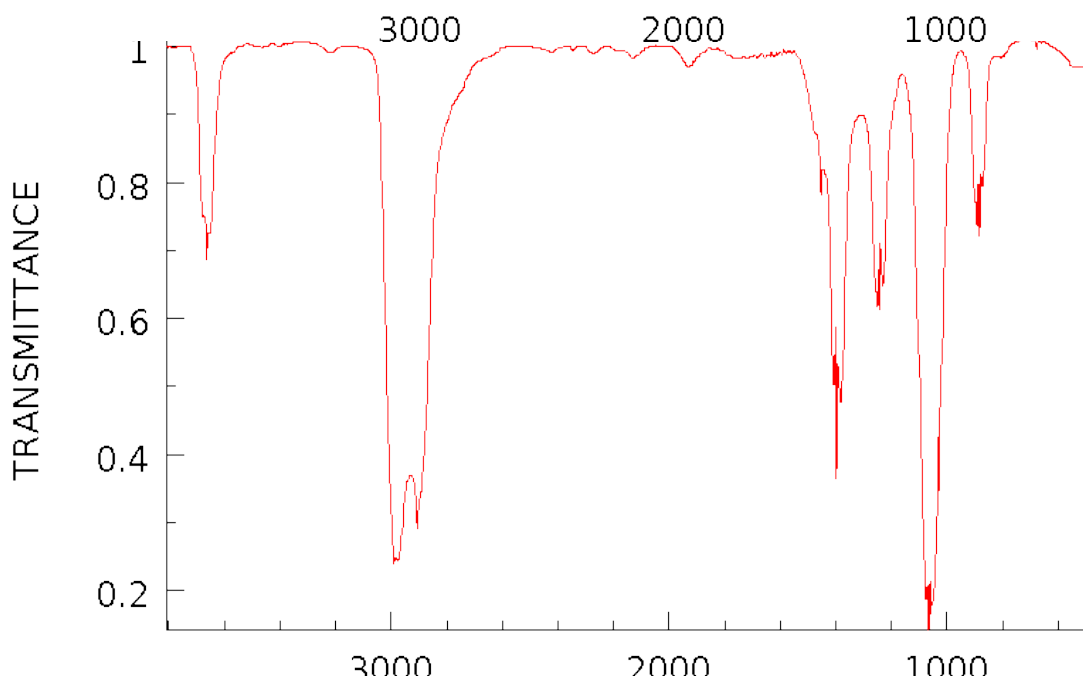
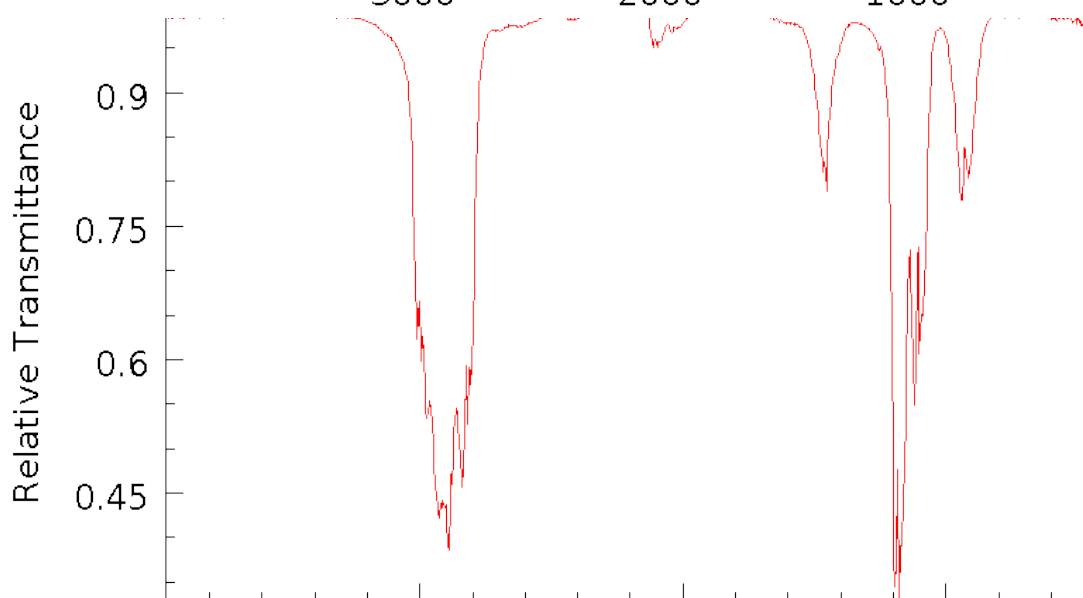
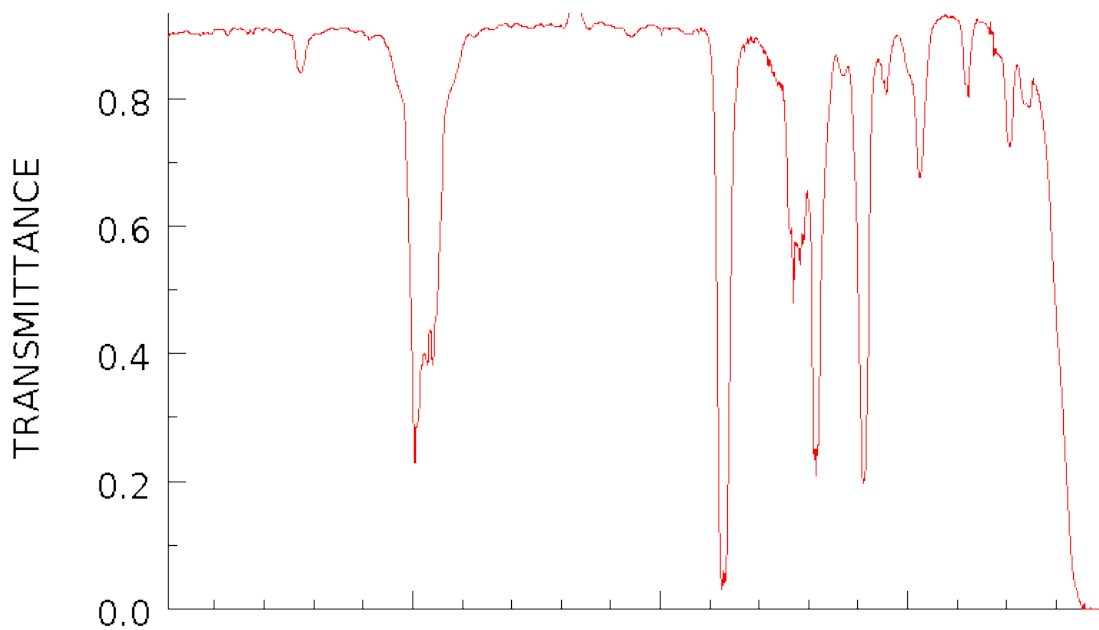


Aufgaben zur Identifizierung von Verbindungen mittels IR-Spektroskopie

1. Von verschiedenen organischen Molekülen mit einem C-Atom (Summenformeln $C_1H_xO_x$, $x = 0, 1, 2 \dots$) und von der Aminoethansäure wurden IR-Spektren aufgenommen. Welches Spektrum passt zu welcher Verbindung? Hinweis: Die Energie ist überall in Form von Wellenzahlen [cm^{-1}] aufgetragen.

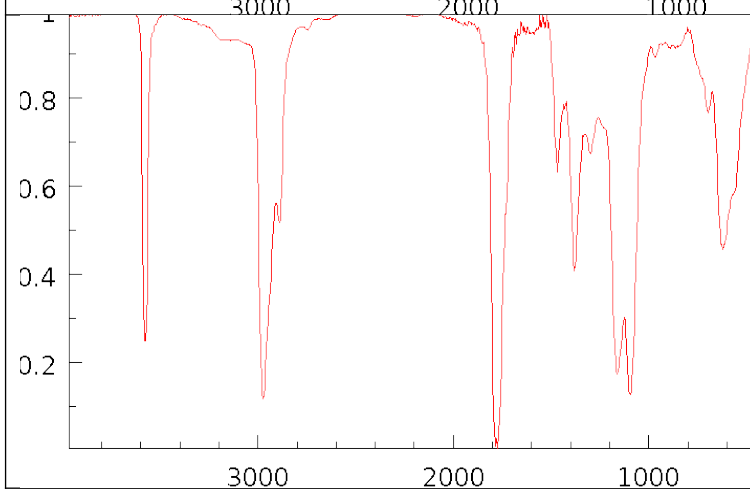
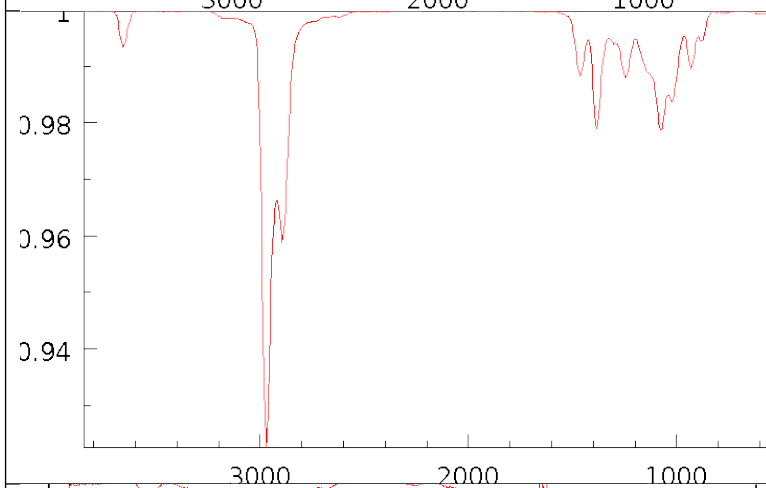
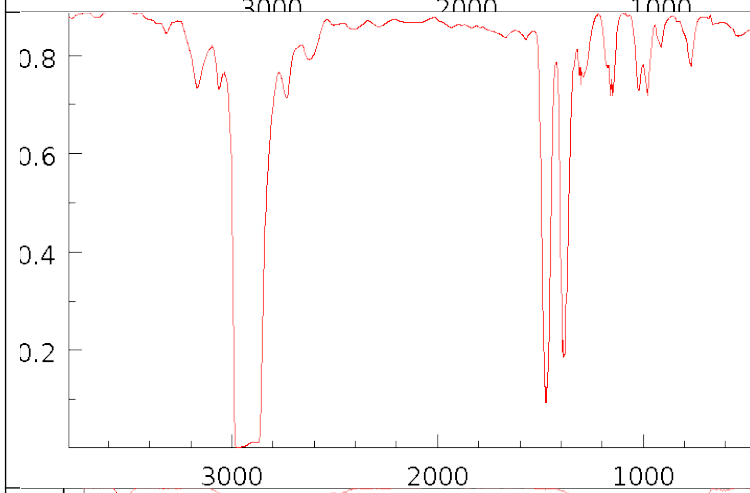
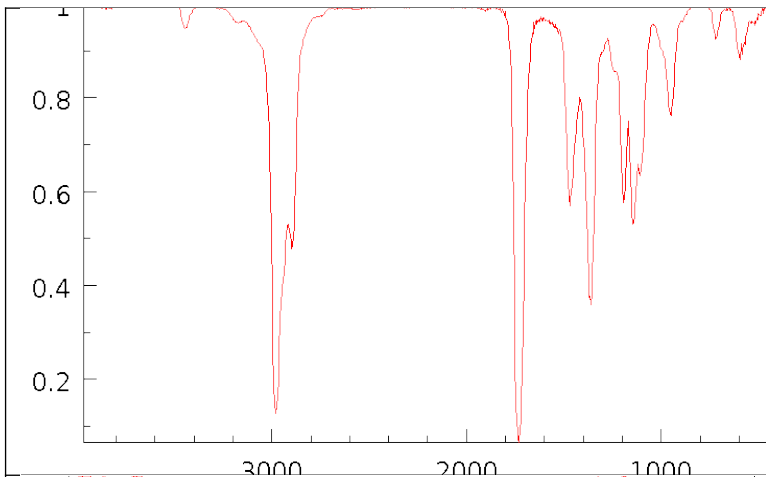


2. Ordnen Sie diese Gasphasen-IR-Spektren den Verbindungen 2-Butanon (Methylethylketon), Ethanol und Dimethylether zu. Begründen Sie stichwortartig ihre Zuordnung.



3.

Ordnen Sie den Verbindungen Methylbutan, 2-Methylbutansäure, 3-Methyl-2-Butanon und 3-Methyl-2-Butanol folgende IR-Spektren zu. Begründen Sie jeweils mit dem Vorhandensein/Fehlen von charakteristischen Banden.

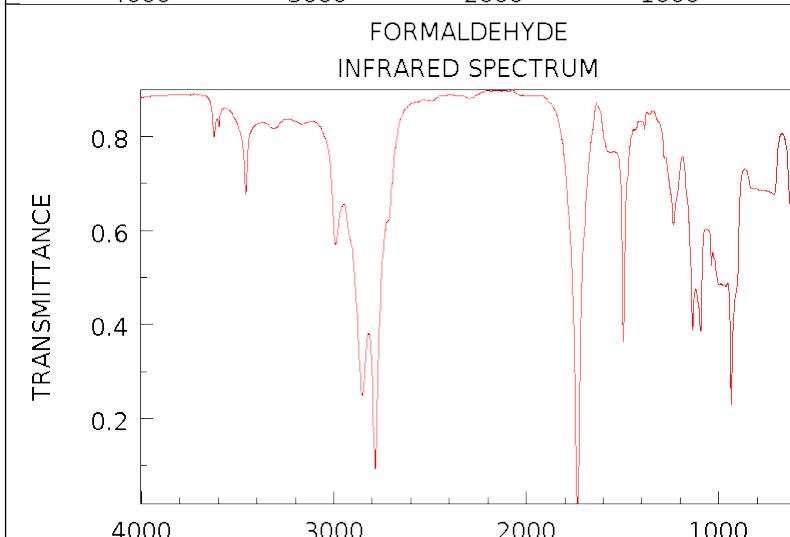
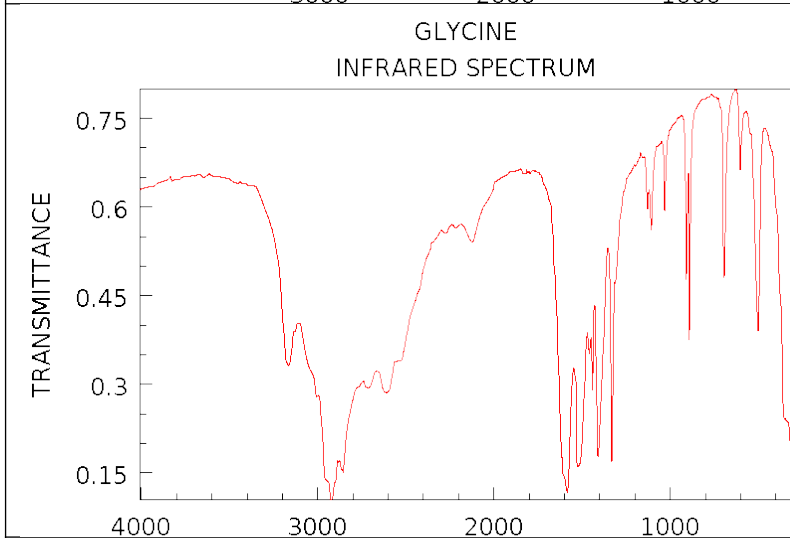
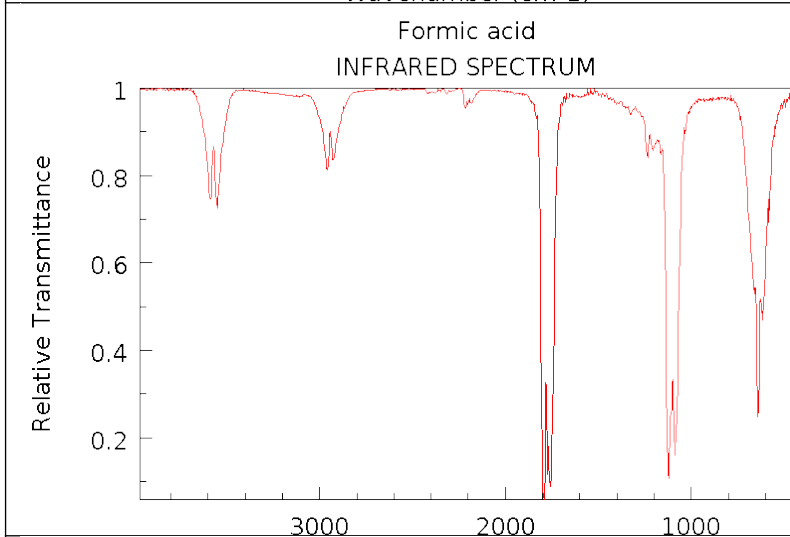
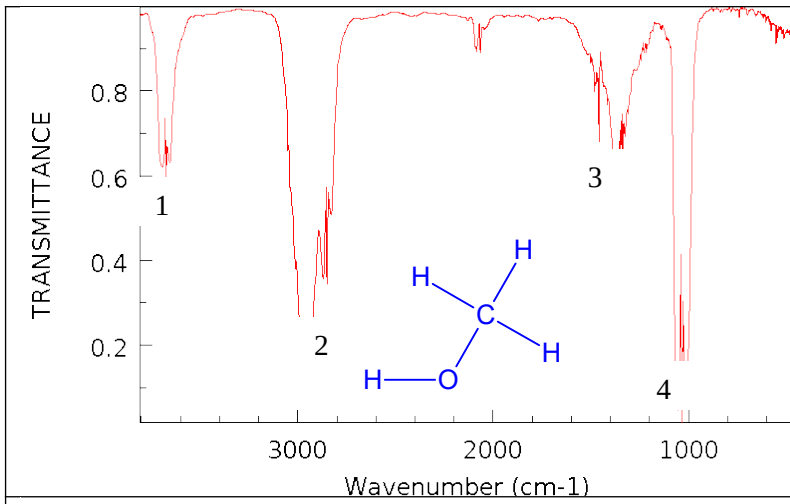


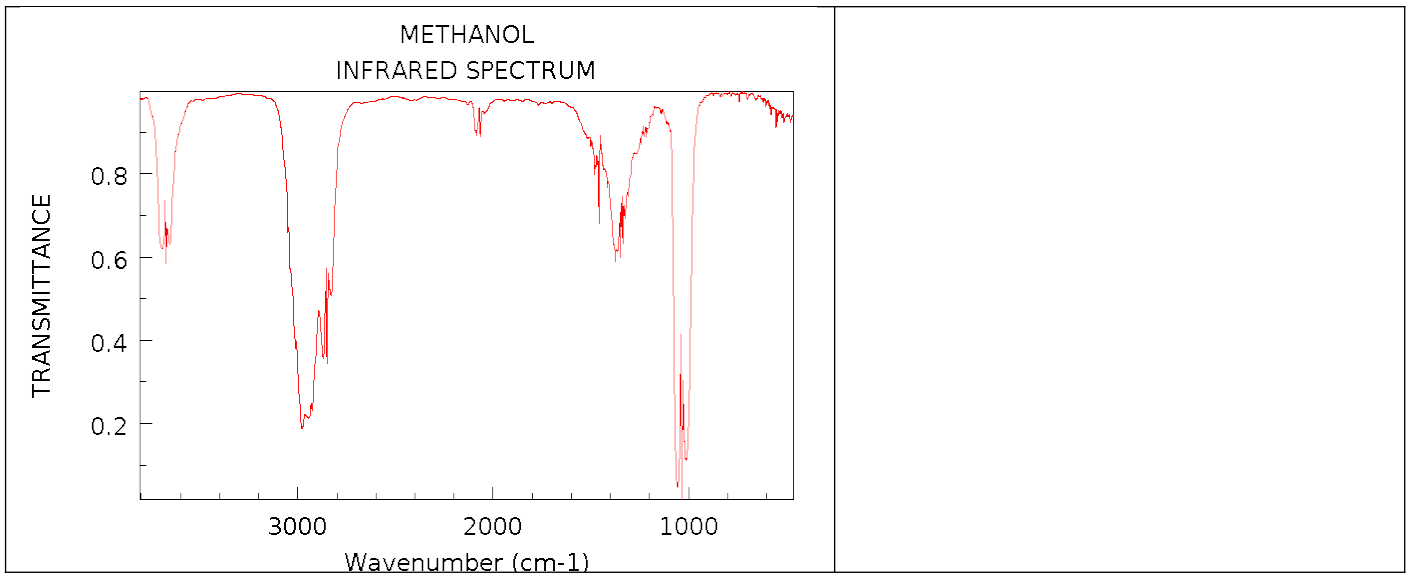
4. Geben Sie 4 Möglichkeiten zur Präparation eines Feststoffs für die Aufnahme eines IR-Spektrums an.
5. Erklären Sie kurz die wesentlichen Vorteile der FOURIER-Transformations-IR gegenüber dem konventionellen IR.
6. Erklären Sie den Begriff Wellenzahl. Formulieren Sie die mathematischen Zusammenhänge zwischen...
 - a) Energie und Wellenlänge
 - b) Energie und Wellenzahl
 - c) Frequenz und Wellenzahl

Lösungen ohne Gewähr

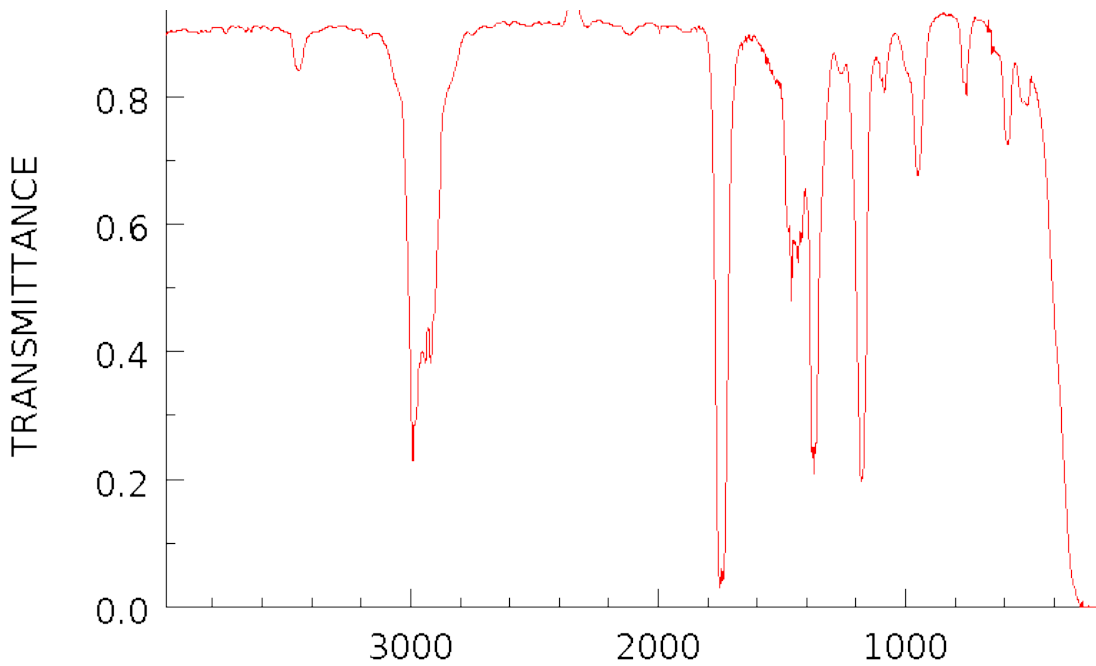
1. Lösungsschritt: Aufstellen der in Frage kommenden Strukturformeln. **2. Lösungsschritt:** Durchnummerieren der ausgeprägten Banden und Herausschreiben der Lage. **3. Lösungsschritt:** Abgleich mit einer Korrelationstabelle (z.B. möglichst nicht mithilfe des blauen Tabellenbuch) und Herausschreiben der in Fragen kommenden Zuordnungen.

	<p>1: ca. 3600 cm⁻¹: OH-VS 2: ca. 2900 cm⁻¹: CH-VS (☹ wenige CH-Gruppen, da Bande schwach) 3: ca. 1780 cm⁻¹: C=O-VS 4: ca. 1100 cm⁻¹ 5: ca. 650 cm⁻¹</p> <p>Alle Banden lassen sich widerspruchsfrei mit Methansäure erklären. Diese Verbindung besitzt OH-Gruppe, C=O-Gruppe und nur eine C-H-Gruppe.</p>
	<p>1: ca. 2800 cm⁻¹: CH-VS (☹ mehrere CH-Gruppen, da Bande stark); die Schulter bei ca. 3050 cm⁻¹ deutet auf die -NH₃⁺-Gruppe einer Aminosäure hindeuten (Info aus einem ausführlicheren Korrelationsdiagramm, nicht aus blauem Tabellenbuch) 2: ca. 1600 – 1800 cm⁻¹: C=O-Gruppe der Aminosäure oder eines Alkanals OH-Gruppen können ausgeschlossen werden. ☹ Methanal oder -Aminoethansäure kommen in betracht, weil beide keine OH-Gruppe besitzen. Aminoethansäure liegt im Feststoff in der Zwitterionenform vor! ☹ Aminoethansäure</p>
	<p>1: ca. 3450 cm⁻¹: OH-VS (NH-VS in diesem Bereich erwarten man nur bei Aminen, Fehler im Tabellenbuch) 2: ca. 2850 cm⁻¹: CH-VS (☹ mehrere CH-Gruppen, da Bande stark) 3: ca. 1750 cm⁻¹, C=O-VS 4: ca. 1500 cm⁻¹ 5: ca. 1050 cm⁻¹: CO-VS Schließt man Carbonsäure aus (aufgrund eindeutiger Zuordnung im 1. Spektrum, so schließt man eine NH₃⁺-Gruppe aus (siehe Spektrum darüber), so kommt nur Methanal in Frage.</p>

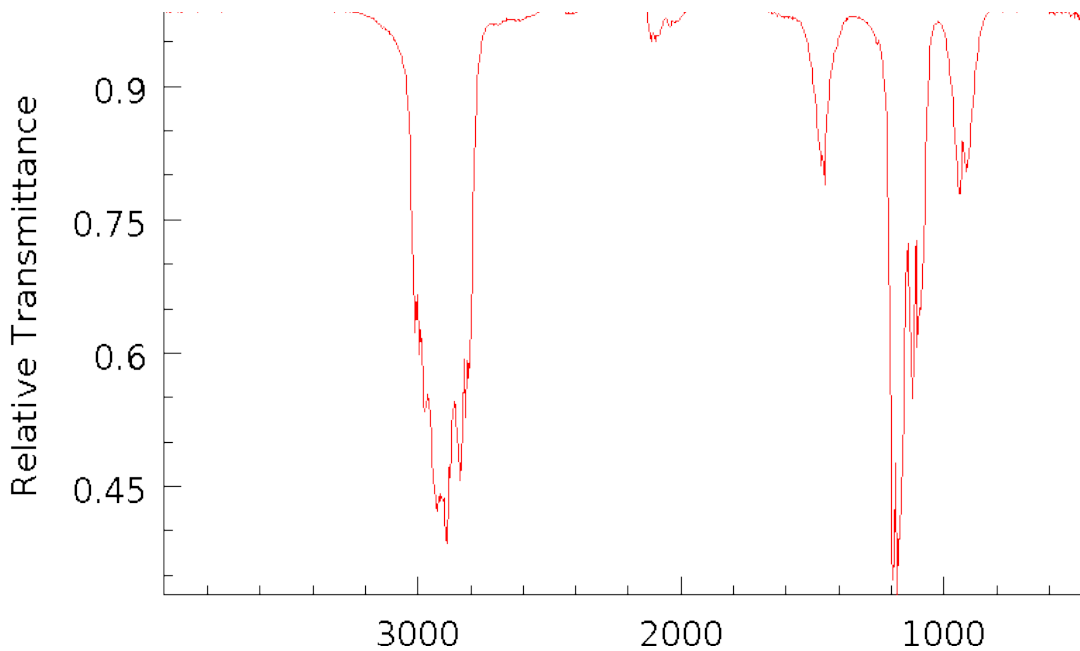




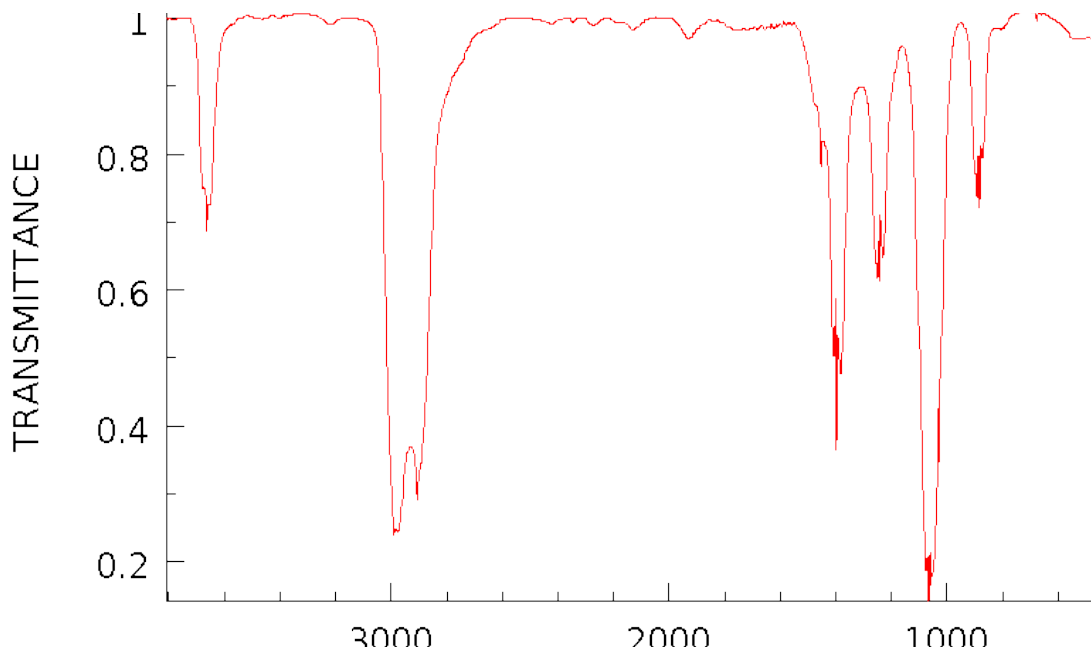
Nr. 2



C=O-
Valenzschwingung
bei ca. 1780 cm^{-1} ,
die in en anderen
Spektren fehlt.
☛ Es muss sich
um 2-Butanon
handeln, da
dieses Molekül als
einziges über eine
solche C=O-DoBi
verfügt.

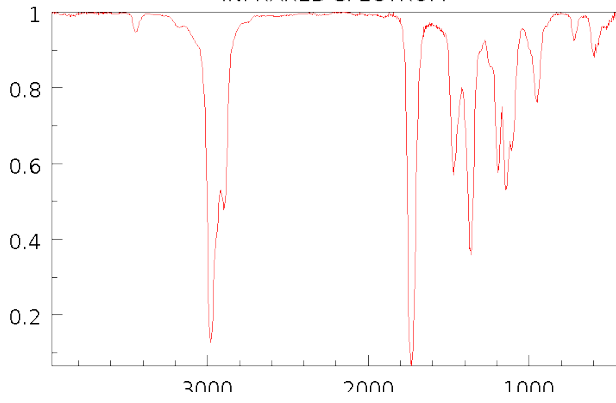


Dimethylether:
Intensive Bande
bei ca. 1100 cm^{-1} :
C-O-Valenz-
schwingung.
Weiterhin kann
das Spektrum
durch die
eindeutige Identi-
fizierung der
anderen beiden
Spektren
zugeordnet
werden.

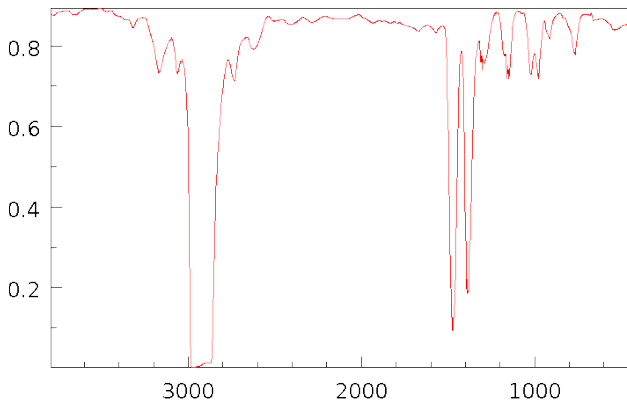


Bande bei ca. 3600 cm^{-1} : OH-Valenzschwingung:
☞ Ethanol kann eindeutig zugeordnet werden, weil es das einzige Molekül mit OH-Gruppe ist.

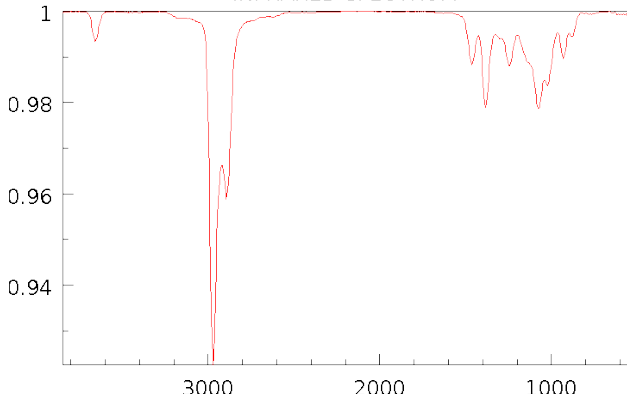
2-Butanone, 3-methyl-
INFRARED SPECTRUM



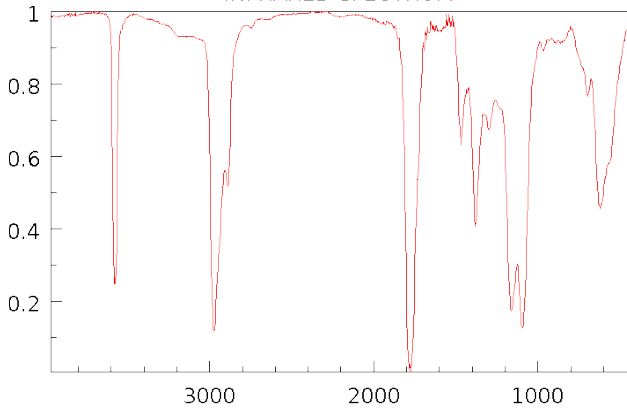
Butane, 2-methyl-
INFRARED SPECTRUM



3-Methyl-2-butanol
INFRARED SPECTRUM



Butanoic acid, 3-methyl-
INFRARED SPECTRUM



kein charakteristischer Peak bei