

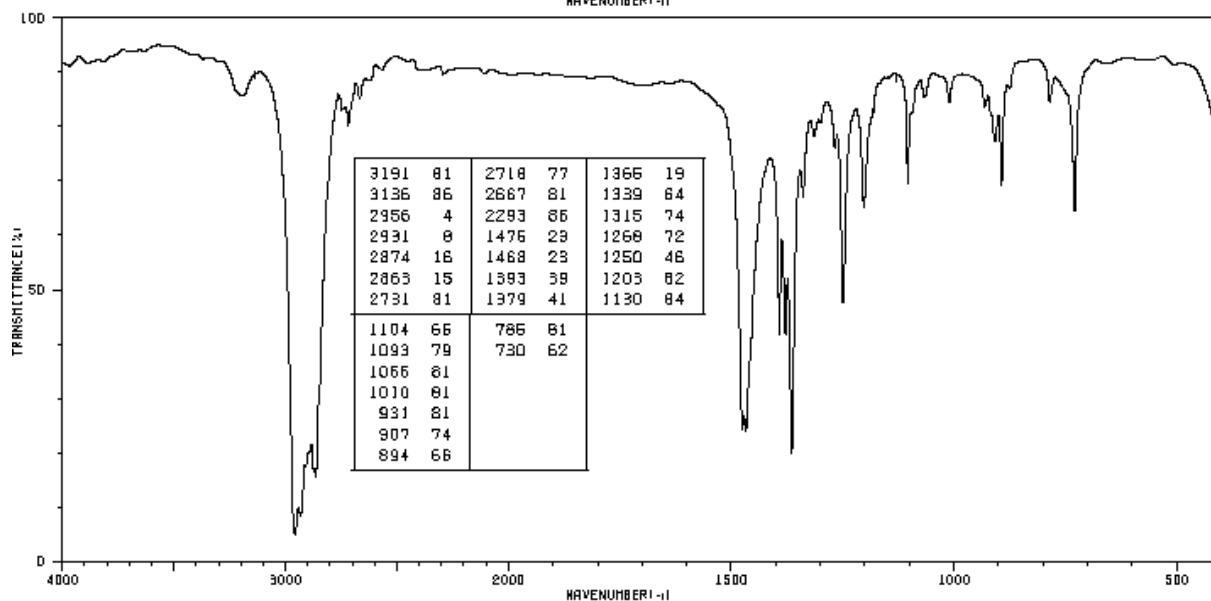
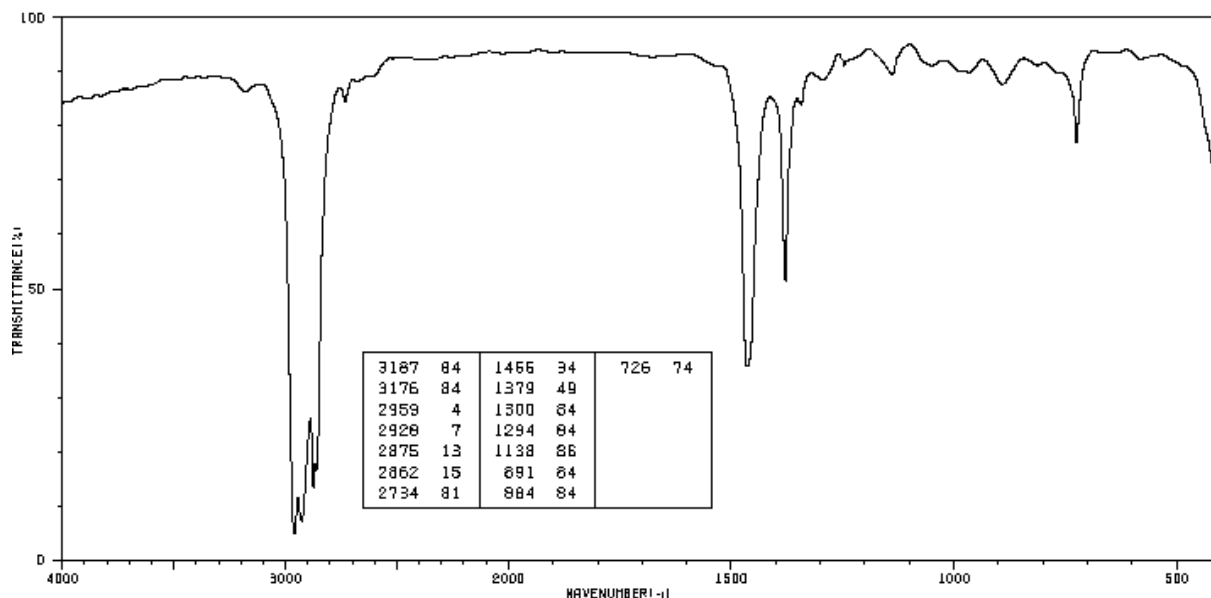
# Übungen zur IR-Spektroskopie (WS2008/WS2013)

Vorbemerkung:

Diese Übungen können Sie sinnvoll nur unter Zuhilfenahme eines Spektroskoplehrbuchs bearbeiten. Das Lehrbuch brauchen sie, um die IR-spektroskopischen Eigenschaften der jeweils betrachteten funktionellen Gruppen so genau wie möglich zu recherchieren. Wenn Sie die Spektren „nur so über den Daumen“ interpretieren, wird das Ergebnis oberflächlich und unvollständig bleiben. Insbesondere wird durch das IR-Skript nur die Methode erläutert, nicht aber auch die Auswertungshilfe für diese Übungen geliefert.

## Aufgabe 1:

Ermitteln Sie, welches der beiden nachfolgenden Spektren zu einem geradkettigen und welches zu einem verzweigten gesättigten Kohlenwasserstoff gehört! Hinweise, welche Banden zu der Beurteilung maßgebend sind, finden Sie im Skript zur IR-Spektroskopie.



SDBSWeb : <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/>

(National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, 2008)

### Aufgabe 2:

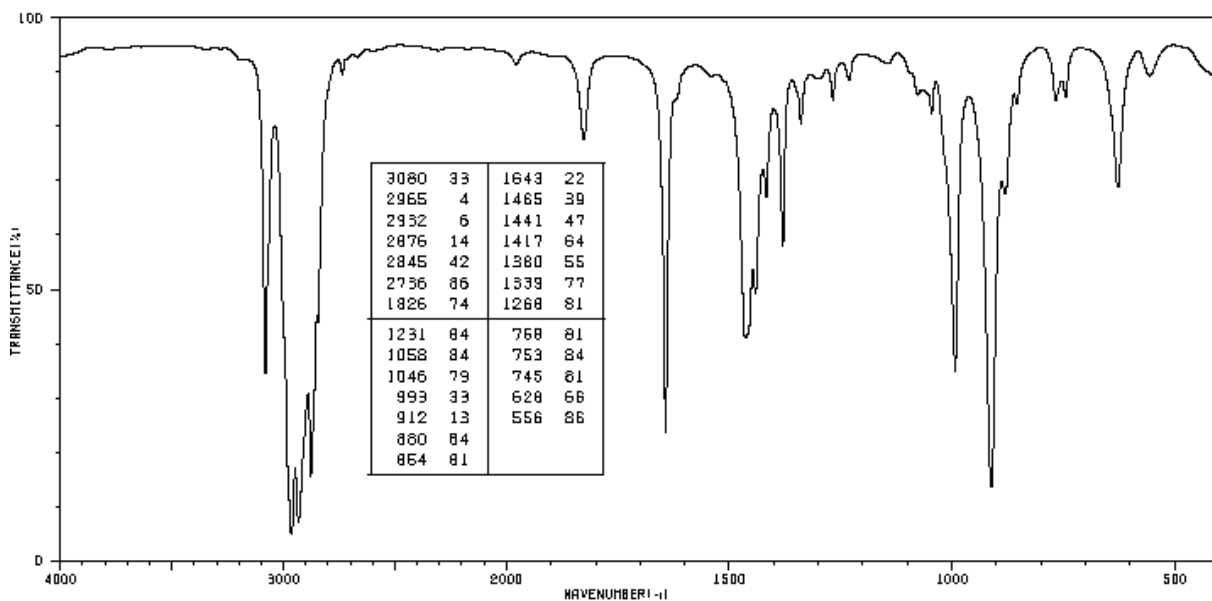
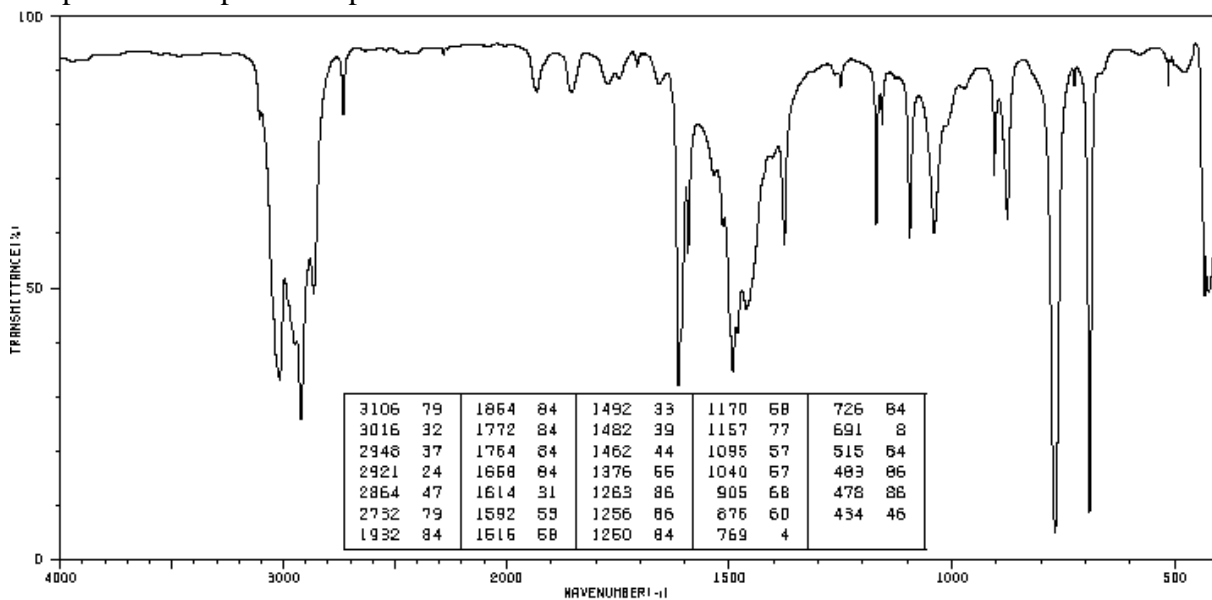
Ermitteln Sie welches der beiden nachfolgenden Spektren zu einem aromatischen und welches zu einem olefinischen Kohlenwasserstoff gehört! Versuchen Sie bei der olefinischen Verbindung eine Bestimmung der Konfiguration (z.B. cis/trans) und bei der aromatischen Verbindung eine Bestimmung des Substitutionsgrades!

### Bestimmung von Substitutionsgrad und Konfiguration bei olefinischen Doppelbindungen

Alle Banden gehören zu senkrecht zur Molekülebene erfolgenden Beugeschwingungen (out-of-plane-Schwingungen; sie heißen auch „wagging-Schwingungen“)

$-\text{CH}=\text{CH}_2$	$-\text{CH}=\text{CH}-$ (cis)	$-\text{CH}=\text{CH}-$ (trans)	$=\text{C}=\text{CH}_2$	$=\text{C}=\text{CH}-$
905 - 915 (ss) 990 (s) 1800 (w) (Oberton)	730 - 665 (ss)	960 - 980 (ss)	885 - 895 (ss) 1780 (Oberton)	790 - 850 (m-s)

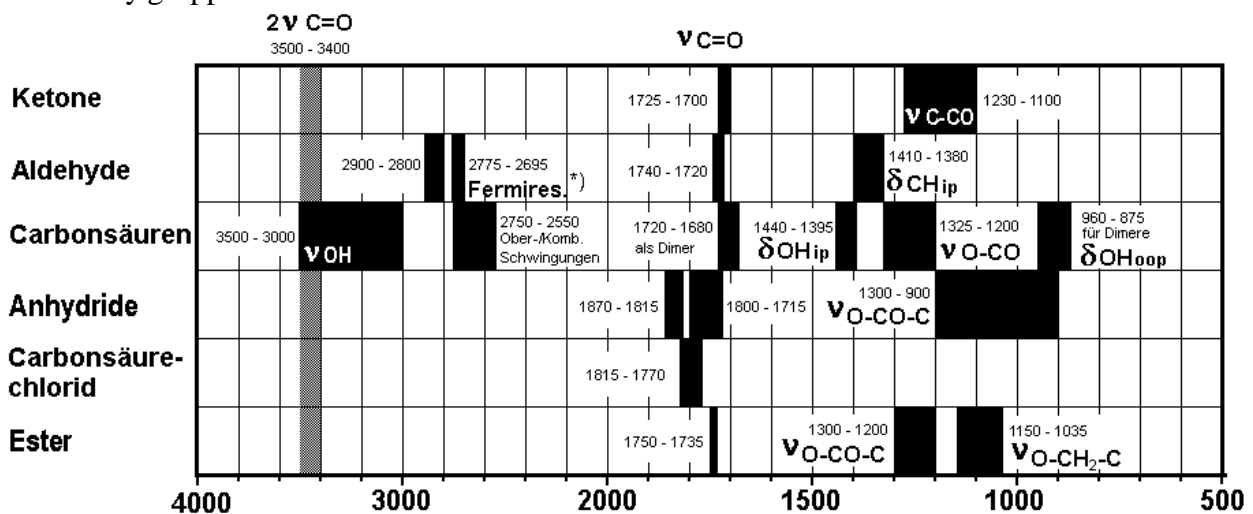
Die übrigen zur Auswertung notwendigen Informationen zu den Bandenlagen finden Sie in der Skripte zur IR-Spektroskopie.



### Aufgabe 3

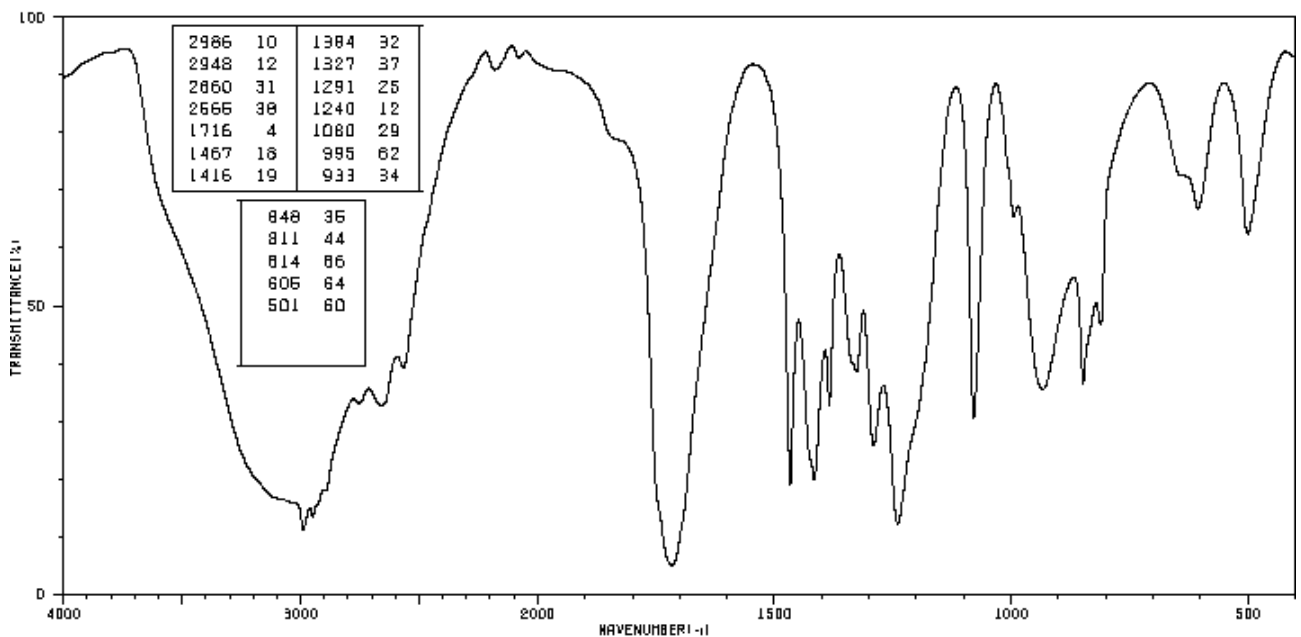
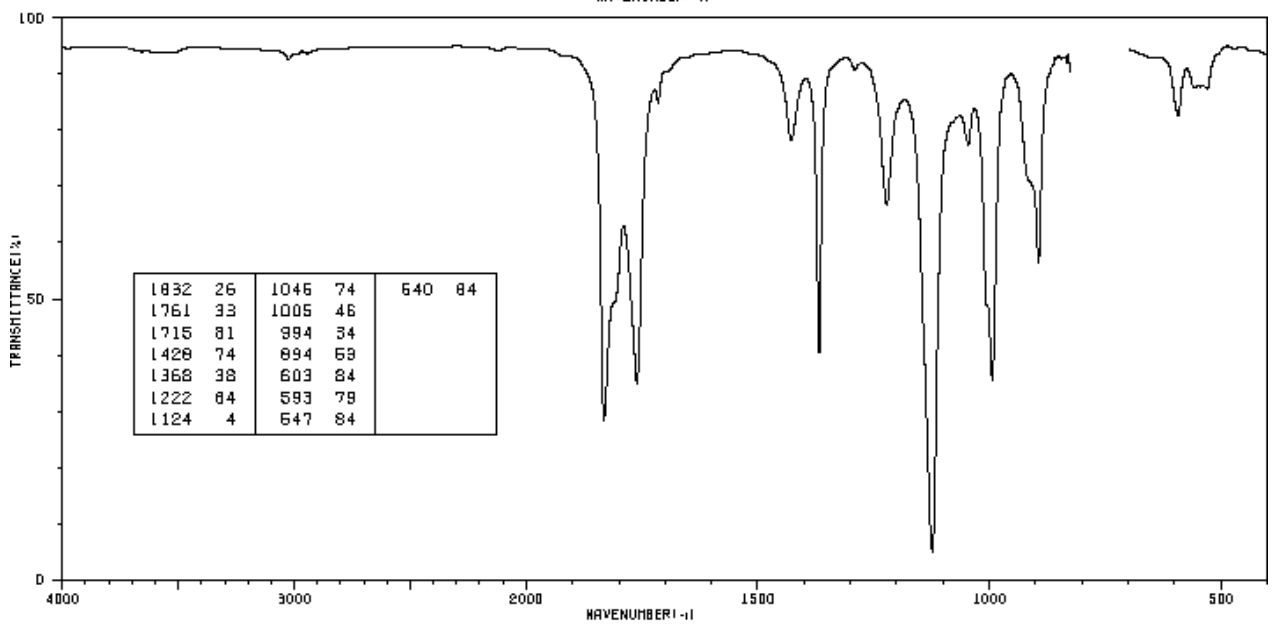
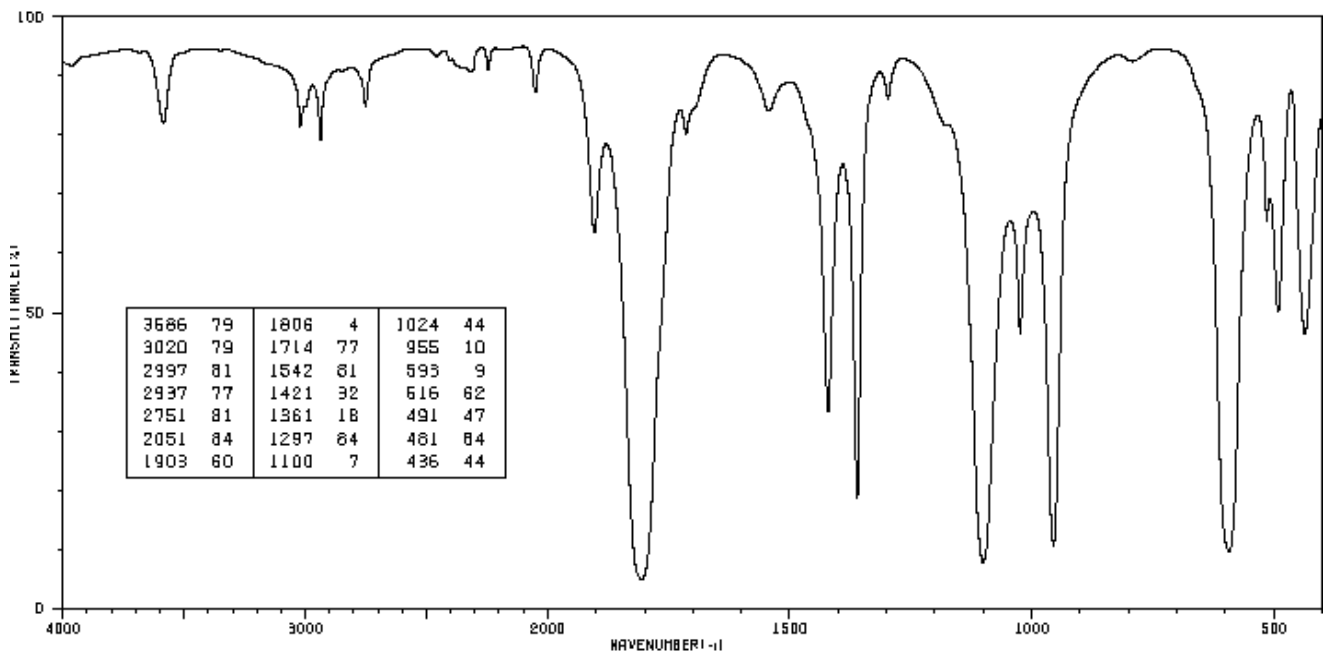
Nachfolgende Grafik gibt die zu erwartenden Banden verschiedener Carbonylverbindungen an. Beachten Sie folgende Dinge:

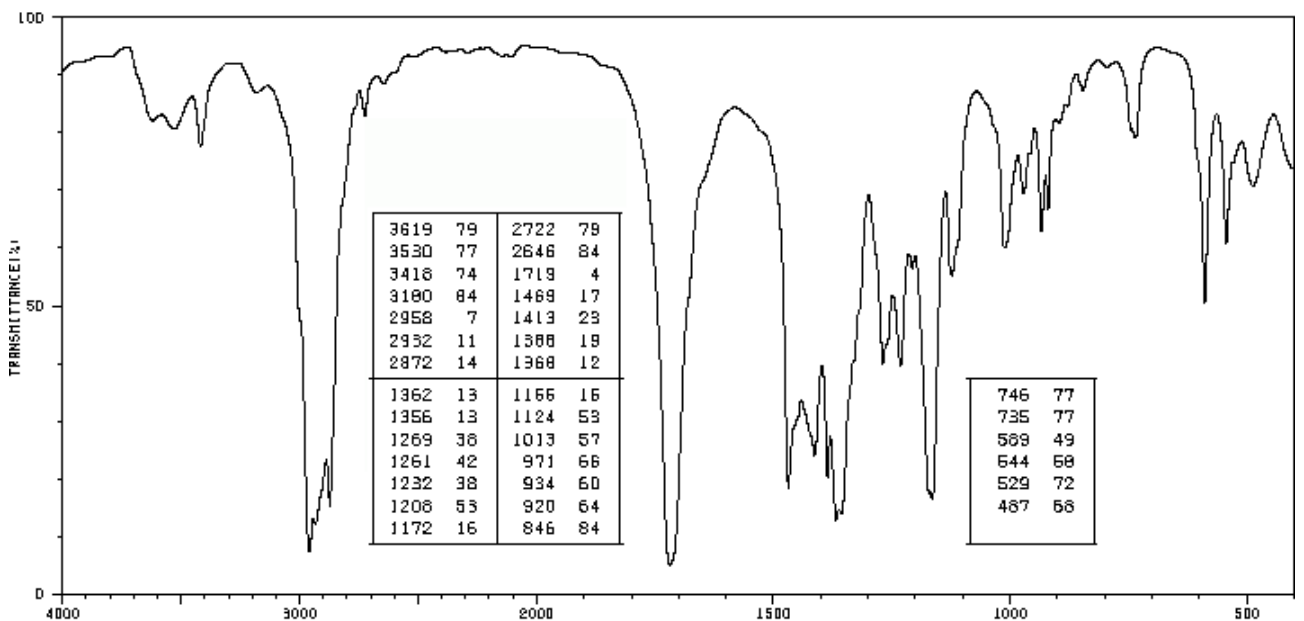
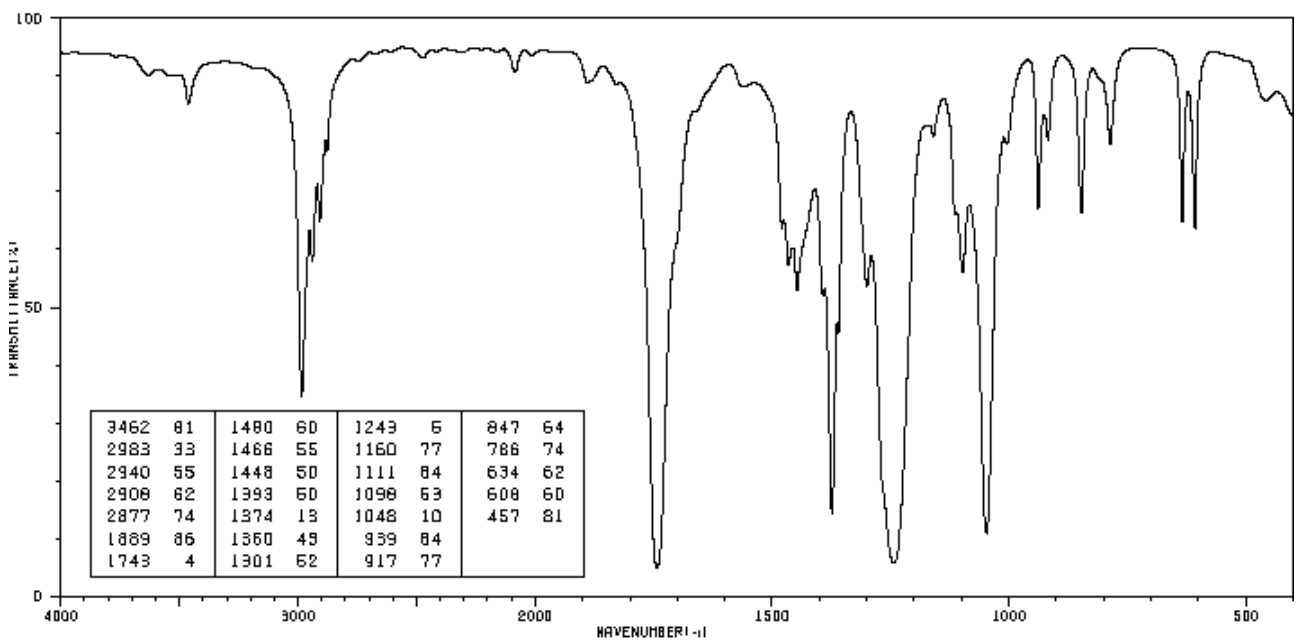
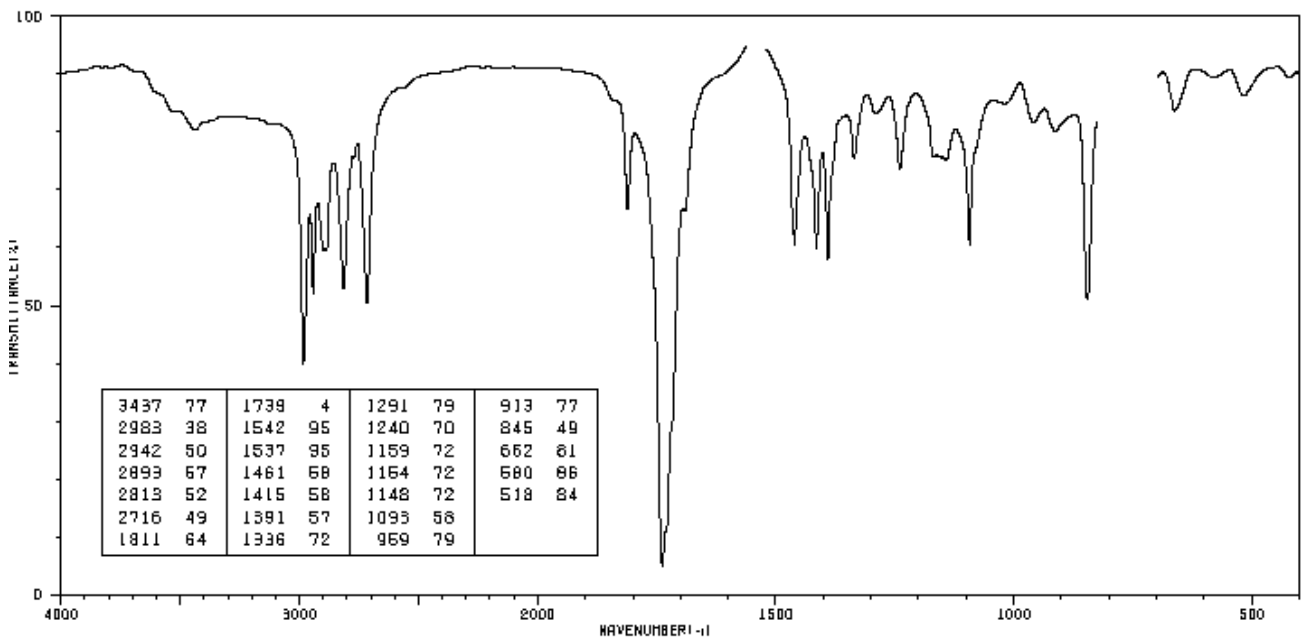
- Die Valenzschwingung der Carbonylgruppe hat eine jeweils typische Lage.
- Neben der Carbonylgruppe sind weitere Banden diagnostisch wichtig, um die Art der Carbonylverbindung zu ermitteln!
- Die angegebenen Bandenlagen gelten für ansonsten gesättigte Moleküle. Bei aromatischen Carbonylverbindungen ist z.B. die Carbonylvalenzschwingung langwellig verschoben.
- Es gibt folgende weitere Hinweise auf die Art der Carbonylverbindung:  
Benachbarte C-H-Bindungen werden durch die Carbonylgruppe polarisiert. Die Absorptionsbande wird dadurch intensiver, außerdem verschiebt sich das Bandenmaximum der Deformationsschwingung zu kleineren Wellenzahlen. Die symm. Beugeschwingung der Methylgruppe ist verschoben z.B. von  $1380\text{ cm}^{-1}$  auf  $1370 - 1350\text{ cm}^{-1}$ , wenn diese einer Carbonylgruppe benachbart ist.



\*) Unter einer Fermi-Resonanz versteht man das quantenmechanisch zu begründende Phänomen, dass Banden aufspalten, wenn es zu einer zufälligen Überlagerung kommt. Die Fermiresonanz der Aldehyde entsteht durch Energiegleichheit der Streckschwingung des Aldehydwasserstoffs mit dem Oberton der Beugeschwingung (ip).

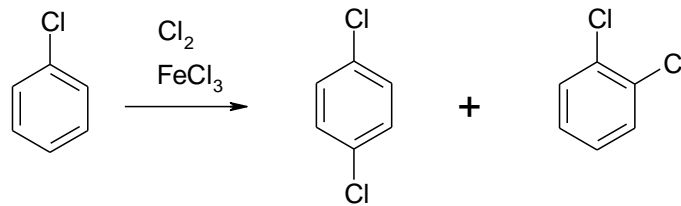
Entscheiden Sie bei den nachfolgenden Spektren, um welche Carbonylverbindung es sich jeweils handelt!



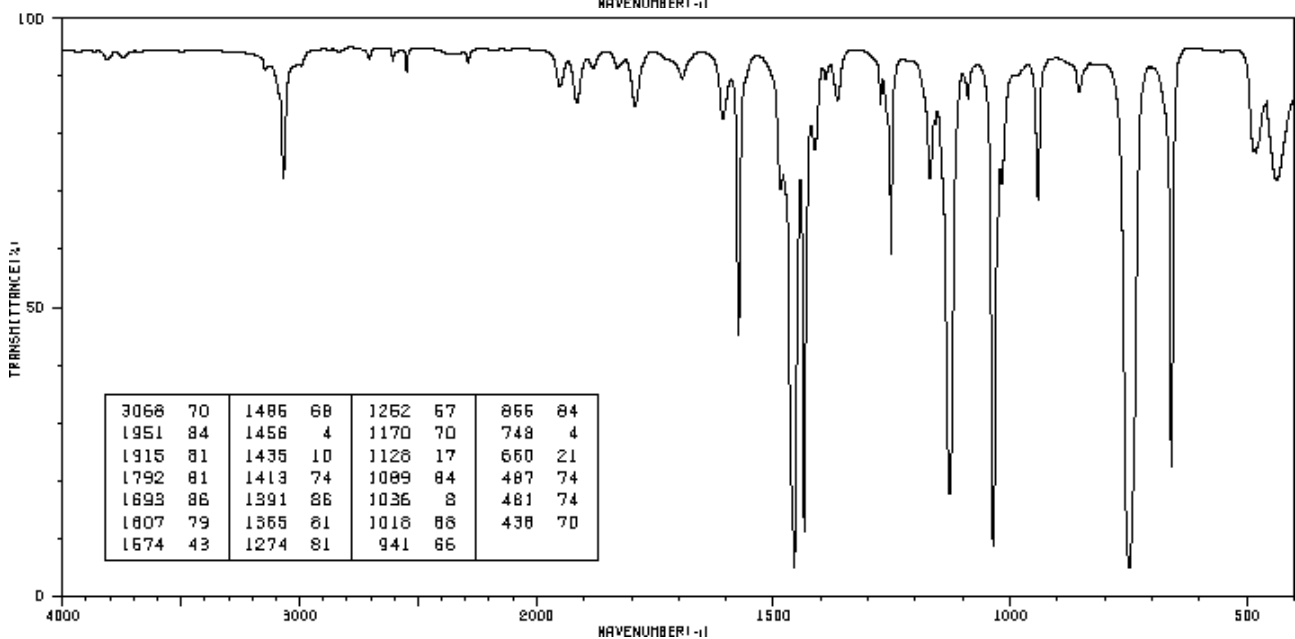
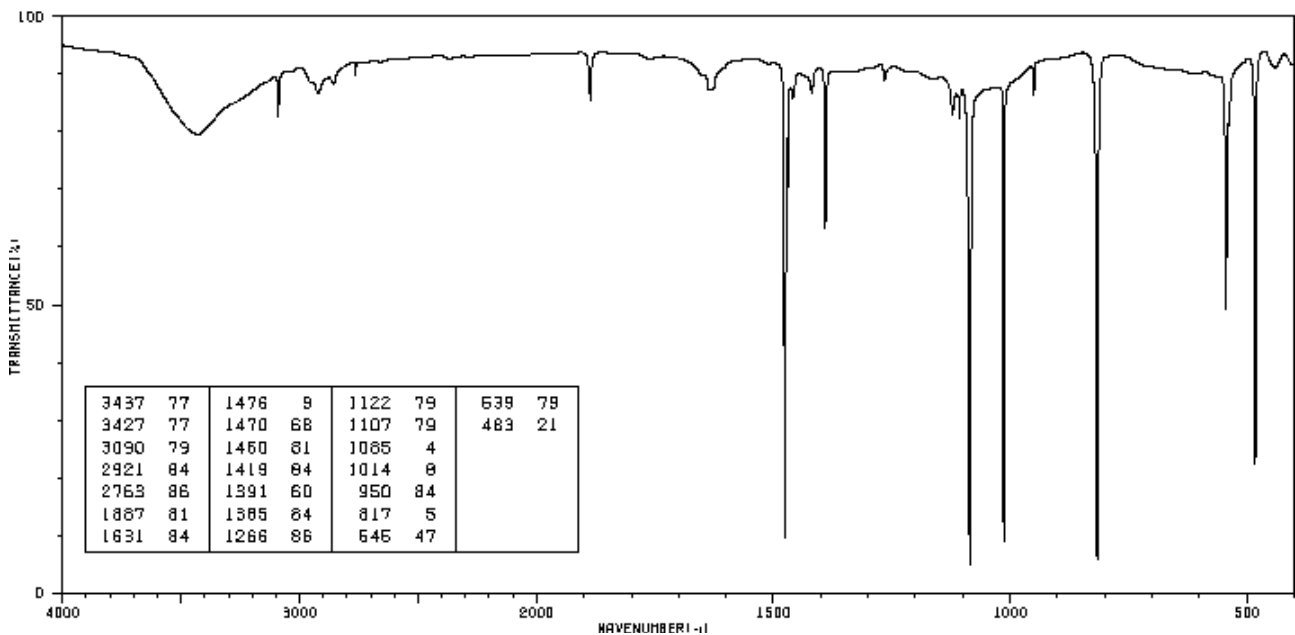


### Aufgabe 4

Bei der Herstellung des Mottengifts *p*-Dichlorbenzol gemäß nachfolgender Gleichung entsteht auch das *o*-Isomer.

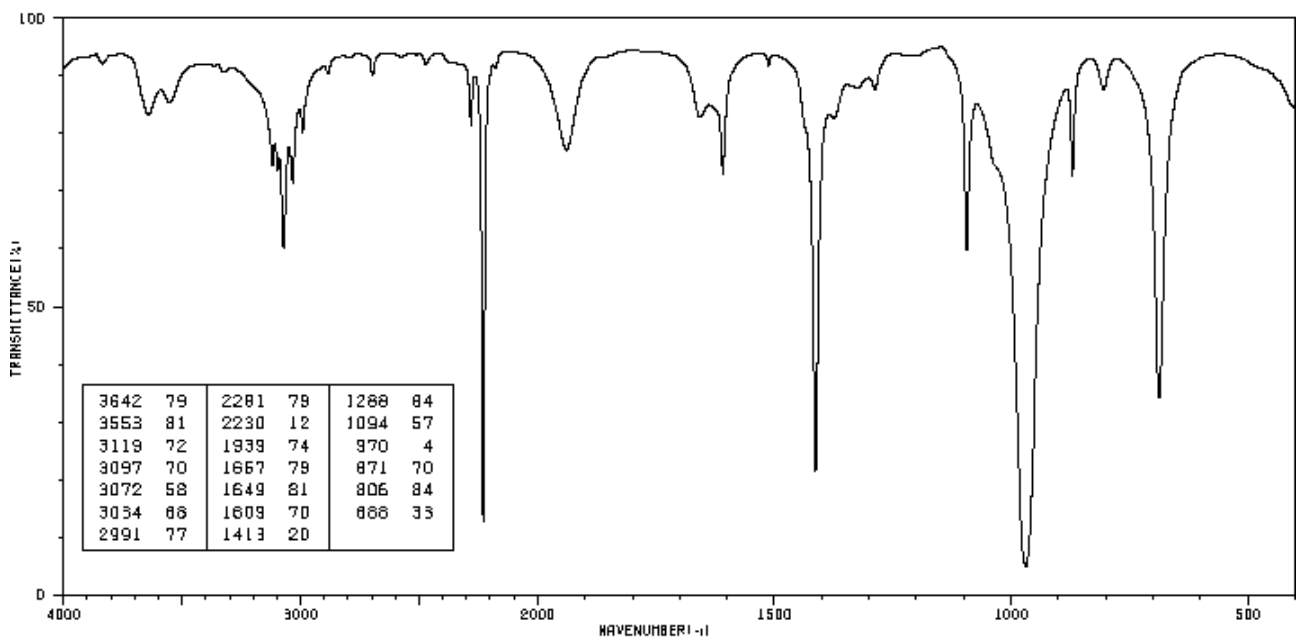
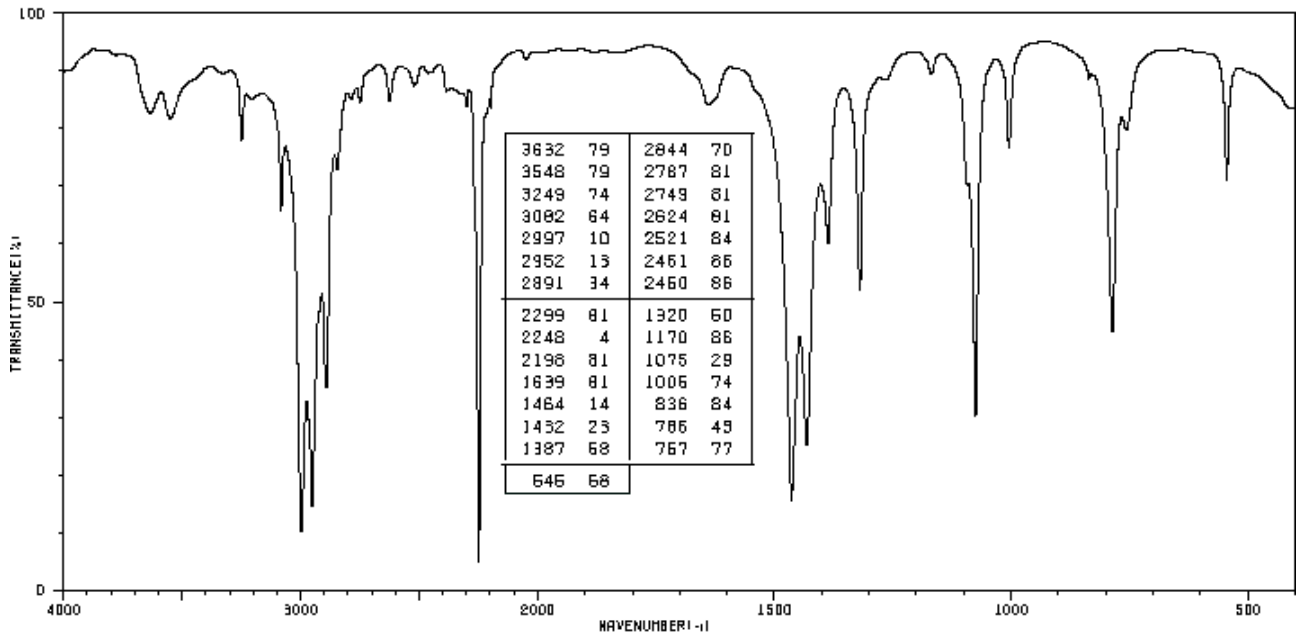


Bitte ordnen Sie die beiden folgenden Spektren den beiden Isomeren zu!



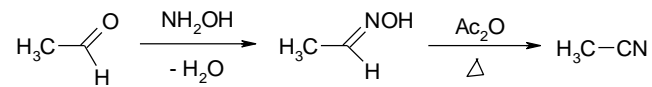
### Aufgabe 5

Nachfolgend sind die IR-Spektren des Acrylnitrils ( $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CN}$ ) und des Propionitrils ( $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CN}$ ) abgebildet. Bitte ordnen Sie die Spektren den beiden Substanzen zu! Begründen Sie Ihre Entscheidung! Richten Sie Ihr Augenmerk auf alle Änderungen, mit denen beim Vergleich der beiden Strukturen zu rechnen ist!

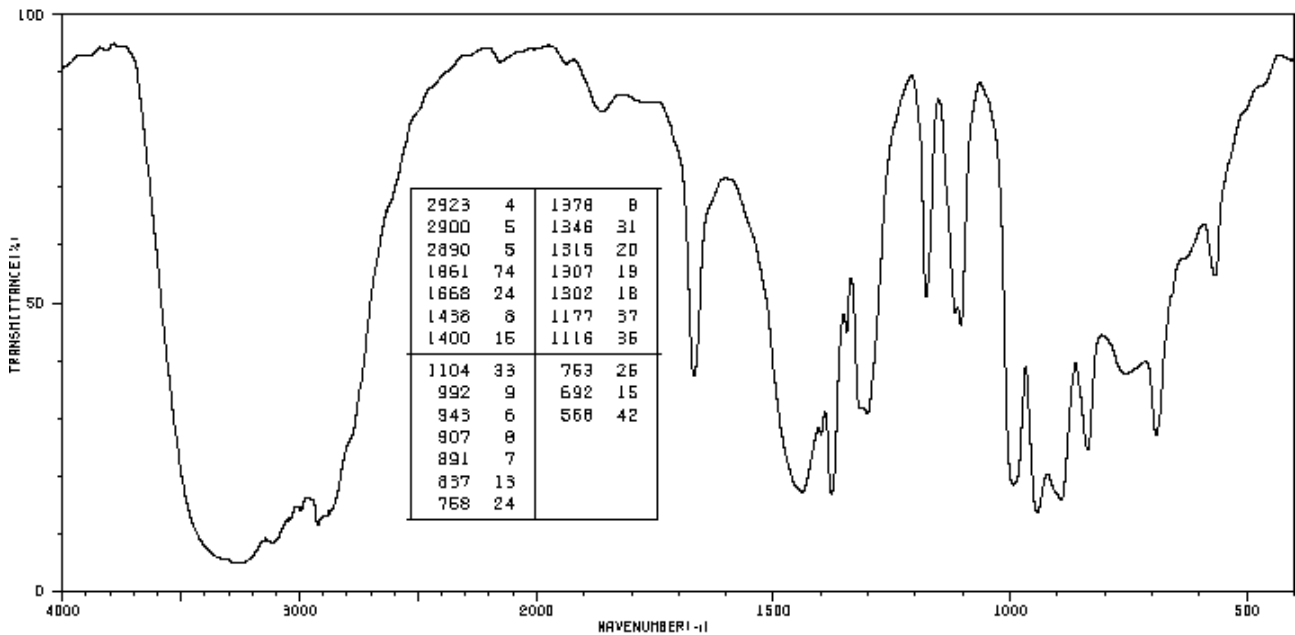


### Aufgabe 6

In einer Reaktionssequenz soll Acetaldehyd mit Hydroxylamin zum Oxim umgesetzt werden, welches durch Erhitzen in Essigsäureanhydrid zum Nitril dehydratisiert werden soll.



Das erhaltene Endprodukt wird spektroskopisch untersucht. Ist die richtige Verbindung entstanden?





### Aufgabe 7

Entsprechend dem HABERSchen Schema lässt sich Nitrobenzol mit Zinn/Salzsäure zu Anilin reduzieren. Bitte ordnen Sie die beiden IR-Spektren den Verbindungen zu!

