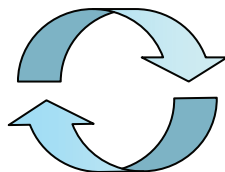


Beispiel für eine Spektren - Interpretation

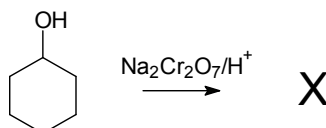
Betrieb[Ausbildungsrahmenplan Nr. 14](#)**Berufsschule**[Rahmenlehrplan Lernfeld 9](#)

1. Aufgabe

Mit Hilfe spektroskopischer Verfahren soll ein Reaktionsprodukt X identifiziert werden.

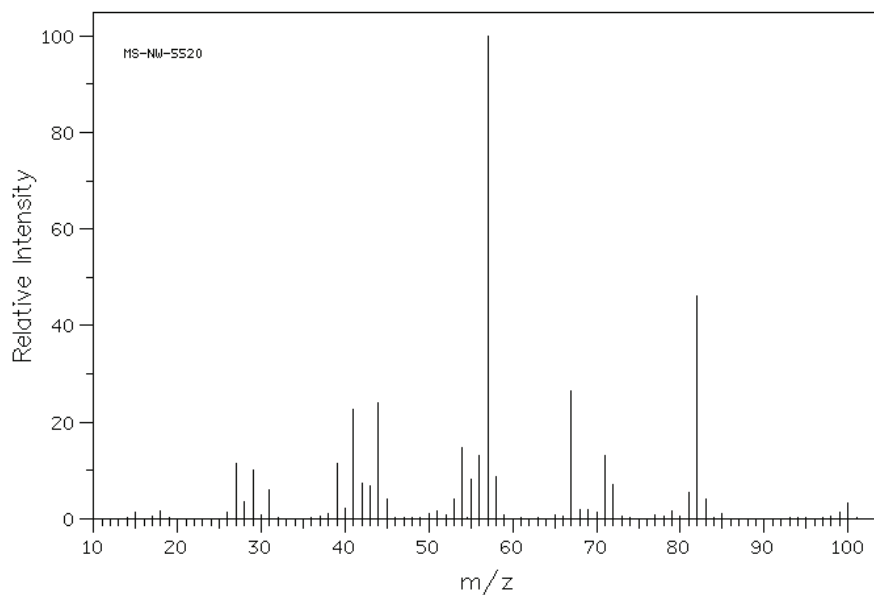
1.1. Reaktion

Cyclohexanol wurde in einem Kolben mit Schwefelsäure und Natriumdichromat verkocht. Das entstandene Reaktionsprodukt wurde mit Ether extrahiert. Nach der Extraktion mit Ether wurden die etherischen Auszüge mit Na_2HCO_3 neutralisiert und danach mit Wasser gewaschen. Nach dem Trocknen mit Natriumsulfat wird der Rest des Ethers verdampft und das Produkt rektifiziert.

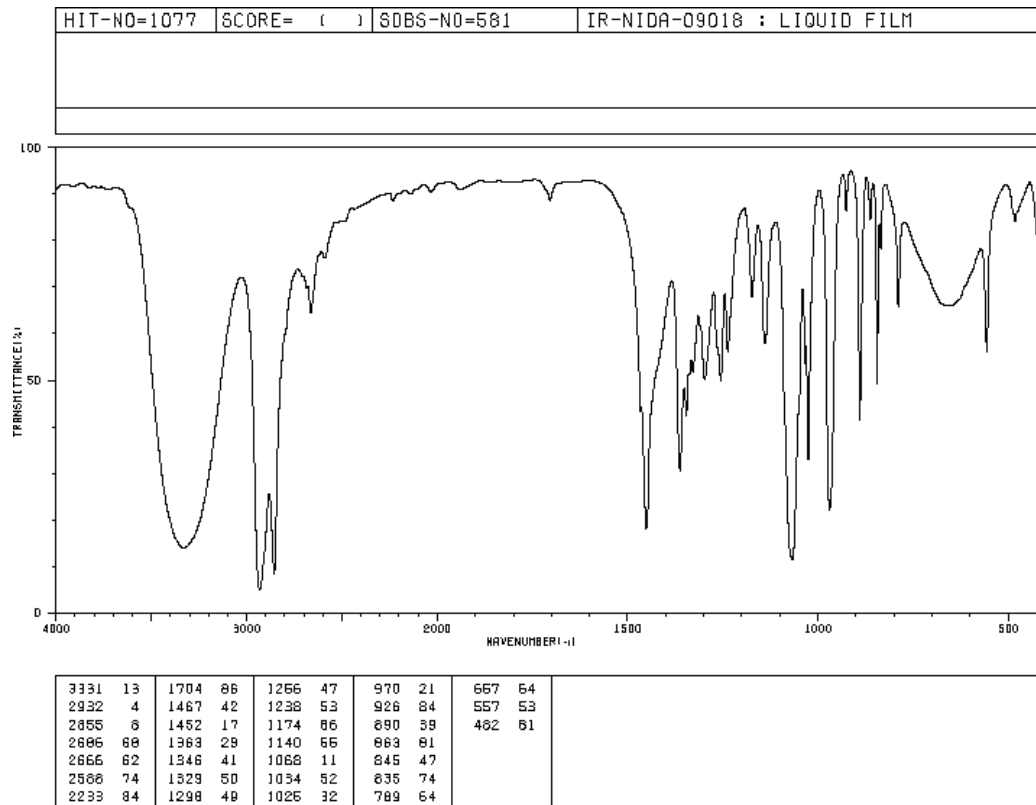


2. Spektrometrische Untersuchungen des Eduktes Cyclohexanol

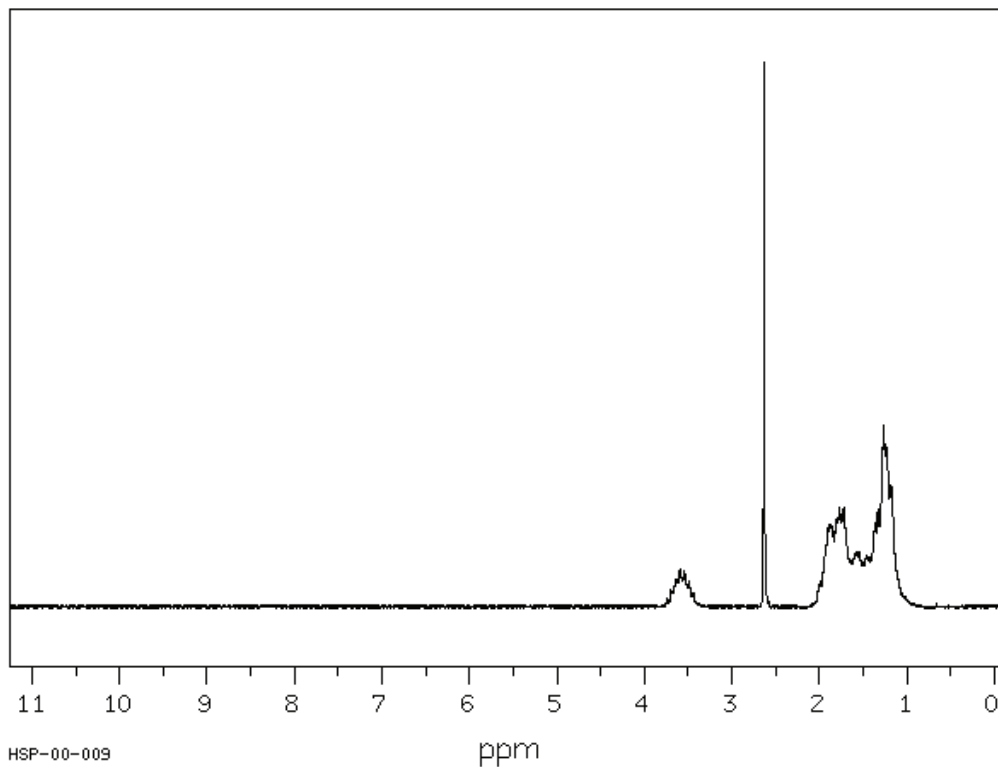
2.1. MS-Spektrum



2.2. IR-Spektrum

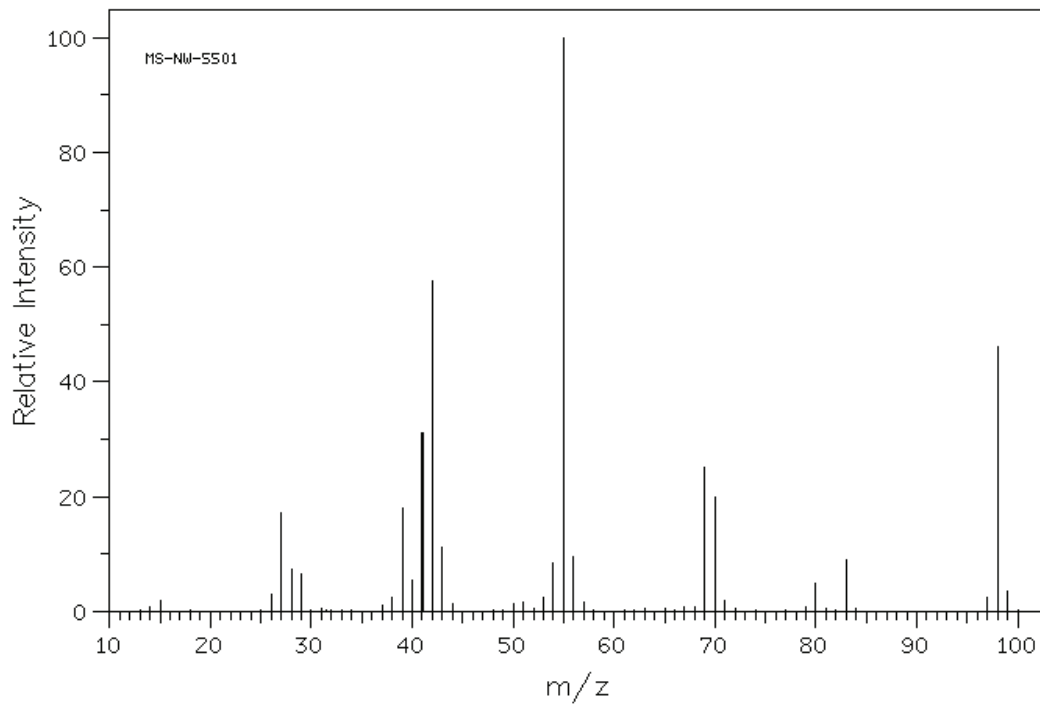


2.3. NMR-Spektrum von Cyclohexanol

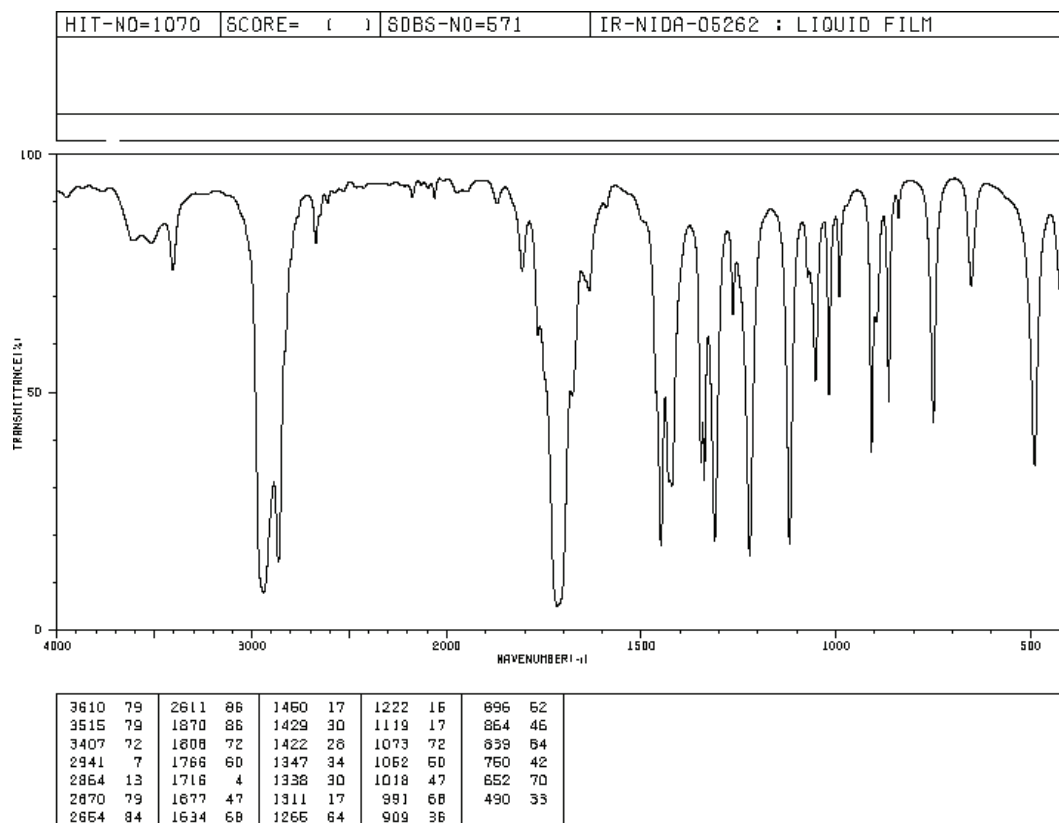


3. Spektrometrische Untersuchung des Produkts X

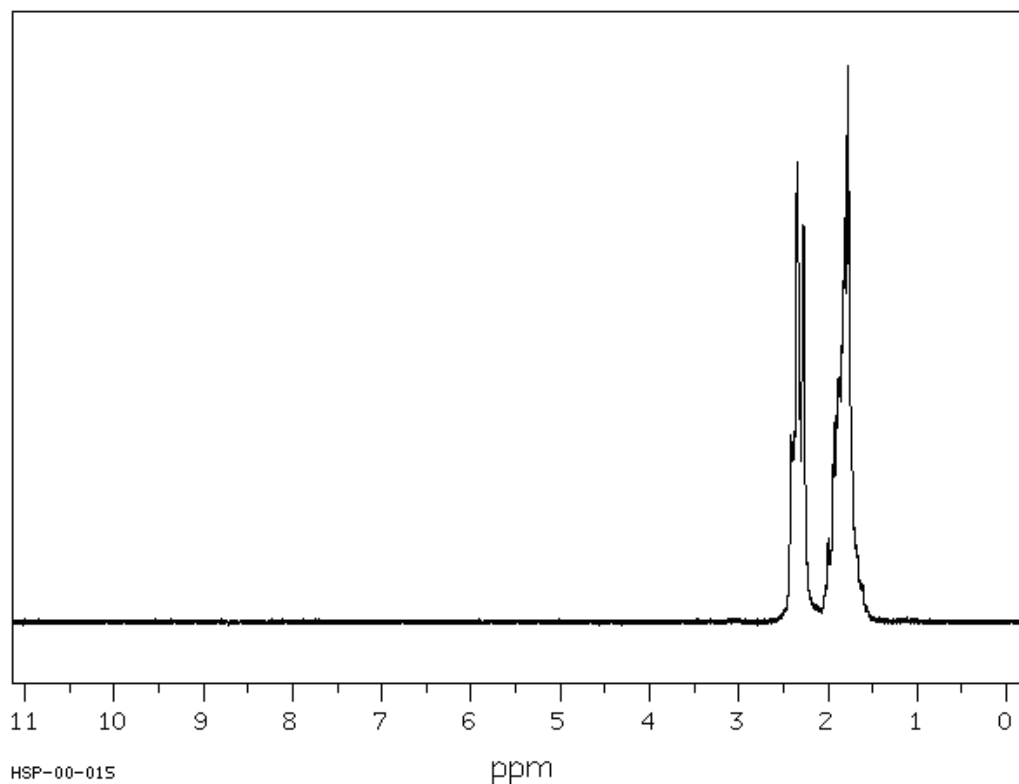
3.1. MS-Spektrum von X



3.2. IR-Spektrum von X



3.3. NMR-Spektrum von X



4. Interpretation der Spektren

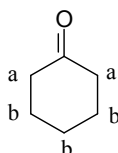
Um welche Substanz handelt es sich bei X?

Ergebnis

Eindeutig gelingt die Charakterisierung von **X** mit Hilfe der IR- und NMR-Spektren.

Das IR-Spektrum von **X** zeigt bei ca. 1710 cm^{-1} eine intensive Bande, die im Spektrum von Cyclohexanol nicht vorhanden ist, während die OH-Bande im Cyclohexanol und die Streckschwingung der C-O-Bindung bei 1060 cm^{-1} im X-IR-Spektrum fehlen. Bei der intensiven Bande im **X**-Spektrum handelt es sich um eine typische C=O-Bande.

Der Vergleich der NMR-Spektren zeigt in die gleiche Richtung. Im NMR-Spektrum des Cyclohexanols erscheint bei $3,58\text{ ppm}$ ein Protonensignal mit der relativen Intensität von einem Proton, das wegen der charakteristischen Lage einer OH-Gruppe zuzuordnen ist. Im **X**-NMR-Spektrum ist das Signal verschwunden, dafür sind nur noch zwei unterschiedliche Protonensorten im Verhältnis 4 : 6 zu erkennen. Die Lage des Multipletts bei $2,1 - 2,5\text{ ppm}$ fällt in den typischen Bereich der chemischen Verschiebung für Methylengruppen neben einer Carbonylgruppe.



Daraus ergibt sich, dass aus der OH-Gruppe des Cyclohexanols durch den Oxidationsprozess eine C=O-Gruppe entstanden sein muss. Es handelt sich bei X um Cyclohexanon mit der molaren Masse 98,1 g/mol.

Ein Vergleich mit dem MS-Spektrum bestätigt die molare Masse (Molekularpeak).

5. Umsetzungsvorschlag für den Ausbildungsbetrieb

5.1. Herstellung der Probe

Es wird keine Probe benötigt. Für weitere Beispiele können kostenfrei IR-/MS- und NMR-Spektren aus folgender Datenbank entnommen werden:

http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/direct_frame_top.cgi?lang=eng

5.2. Zeitbedarf

Der durchschnittliche Zeitbedarf zur Durchführung der Aufgabe beträgt ca. 0,5 Stunden.

5.3. Bewertung

Eine Bewertung ist nicht vorgesehen.