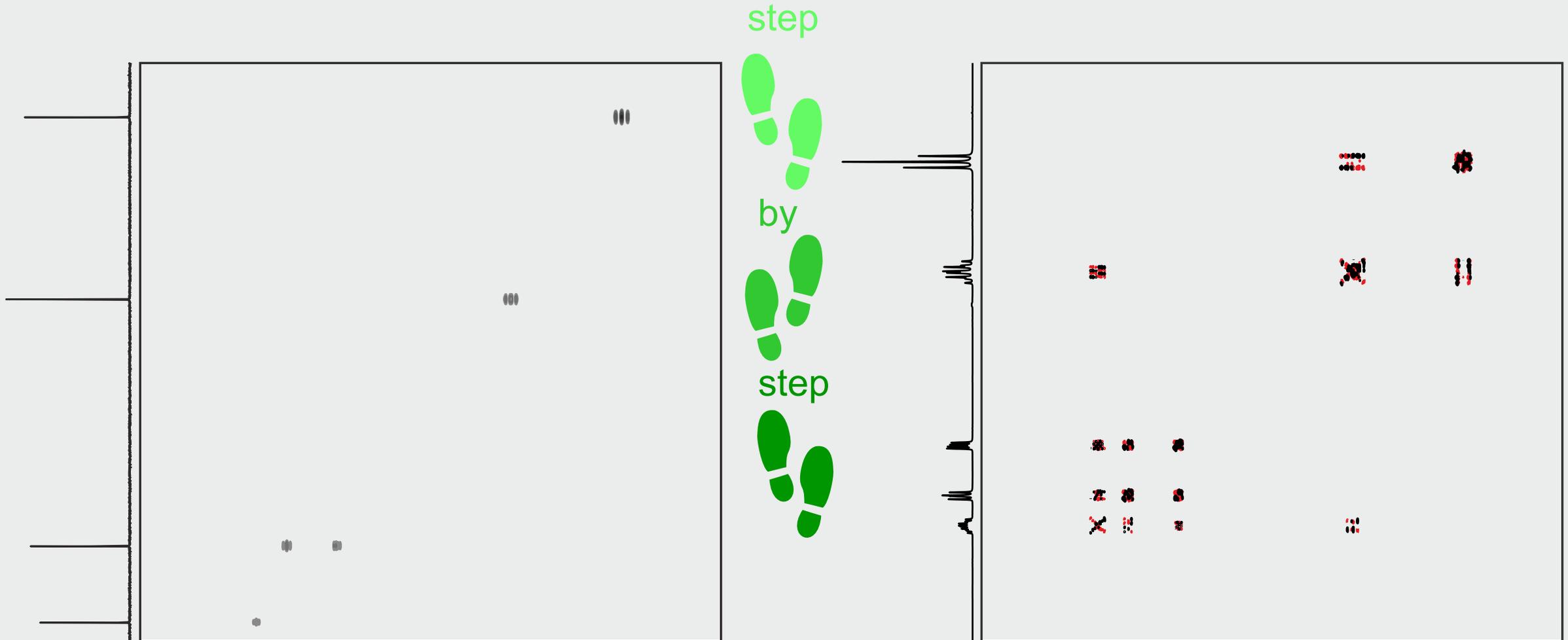


# Übung plus Lösung – Schnellüberblick

Diese Version soll nur dem schnellen Überblick über die Fragestellung dienen. Sämtliche PowerPoint-Animationen fehlen, in einigen Fällen könnte die Umsetzung von PowerPoint auf PDF merkwürdig aussehen.

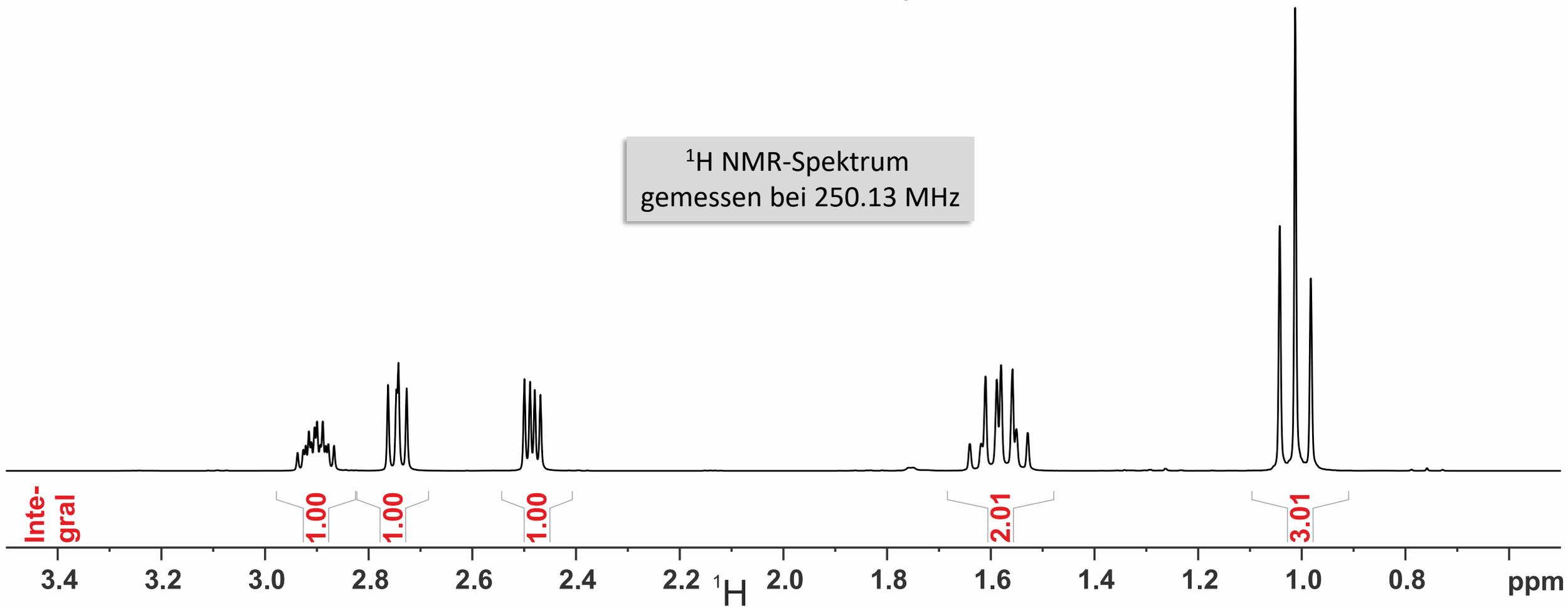
Die qualitativ hochwertigen PowerPoint-Originale stehen jederzeit zum freien Download zur Verfügung.



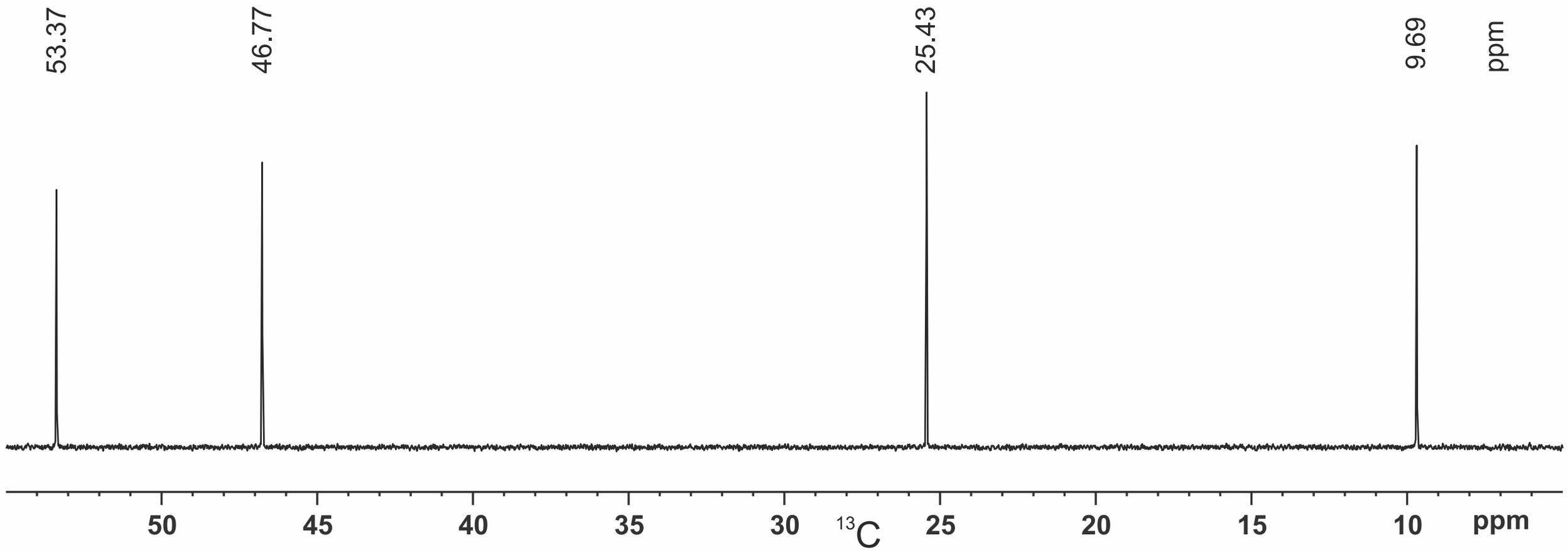
# $C_4H_8O$ gelöst in $CDCl_3$

Ermitteln Sie die Konstitution ohne  
Verwendung der Kopplungsmuster im  
Protonenspektrum!

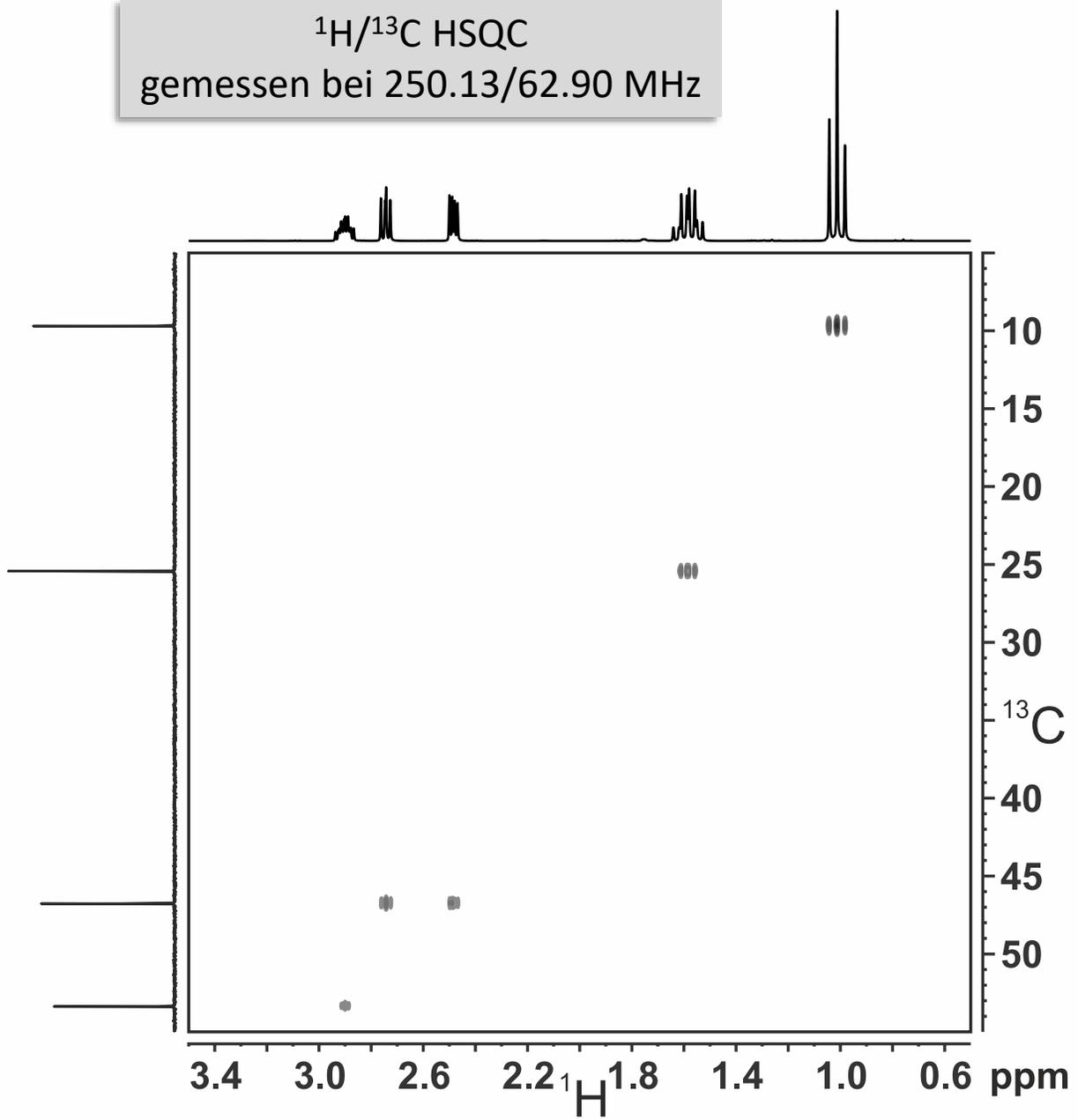
$^1H$  NMR-Spektrum  
gemessen bei 250.13 MHz



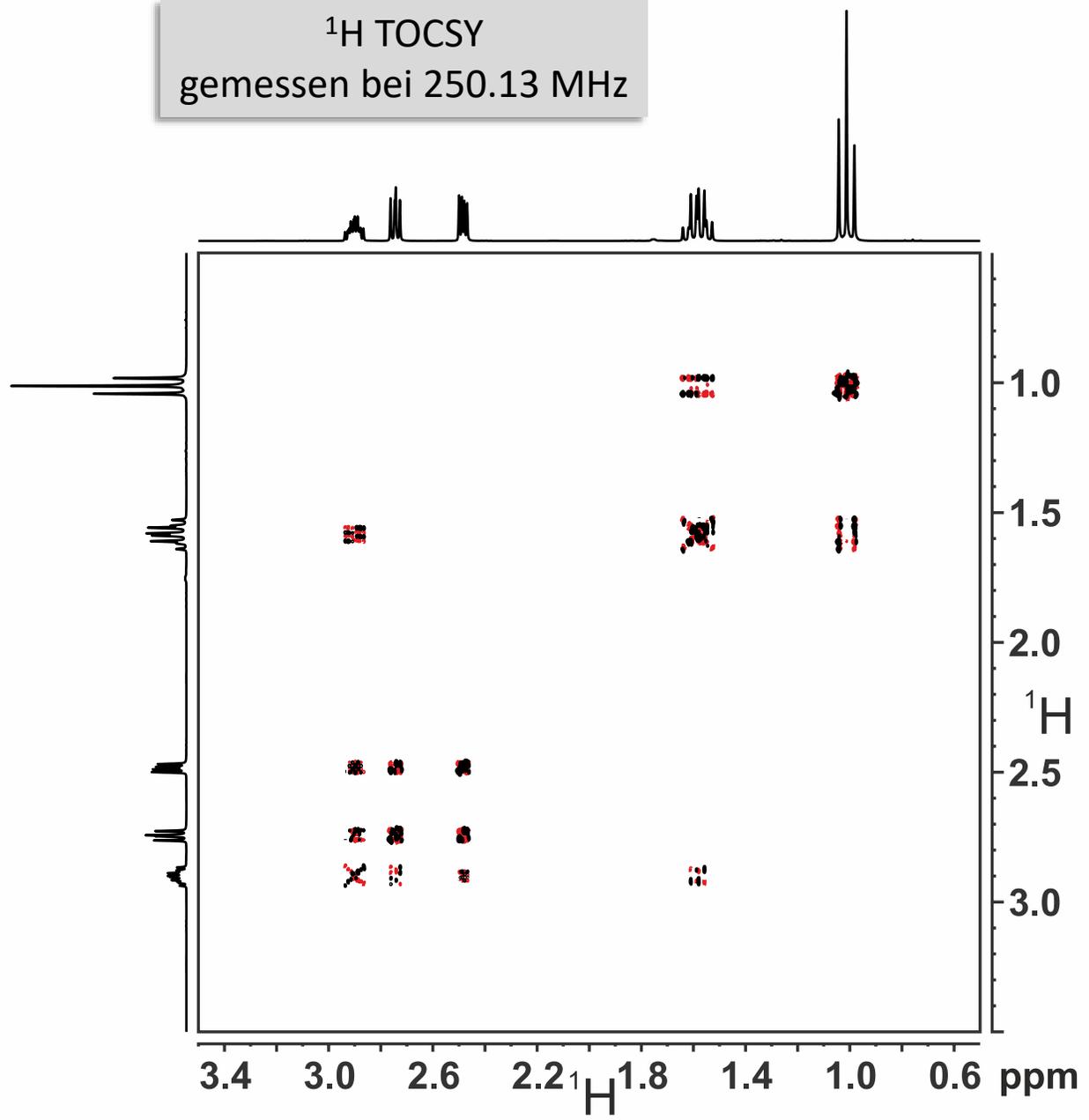
$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$  NMR-Spektrum  
gemessen bei 62.90{250.13} MHz



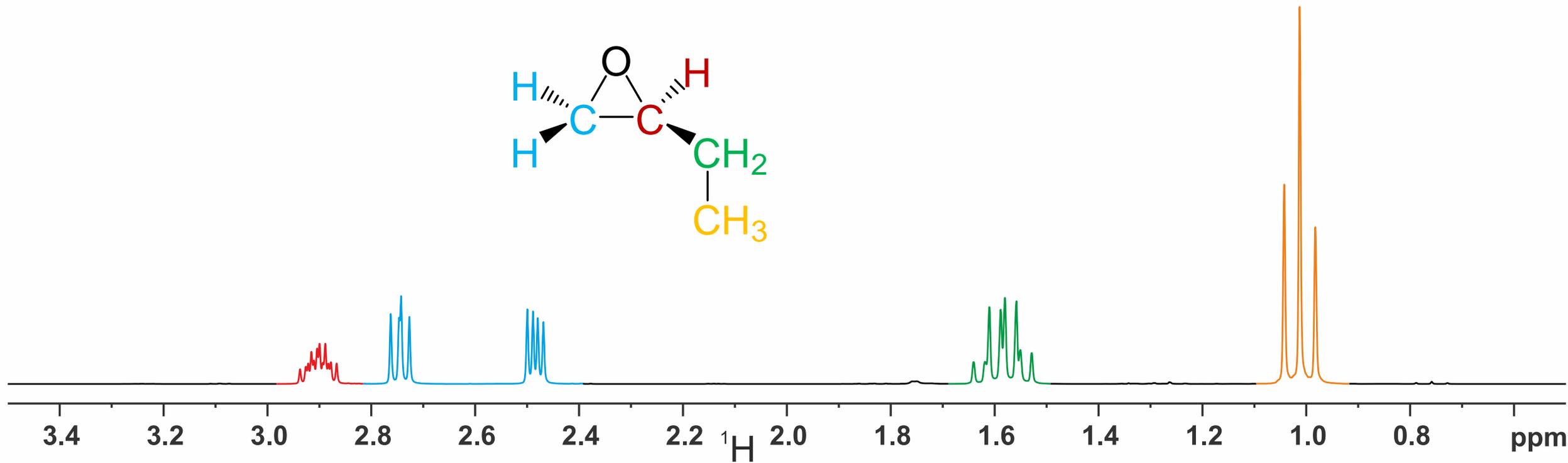
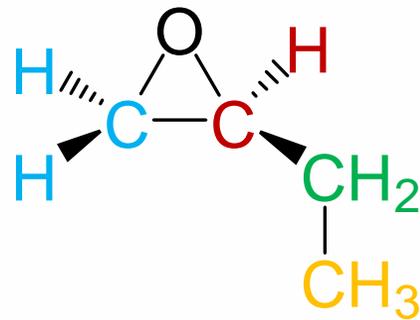
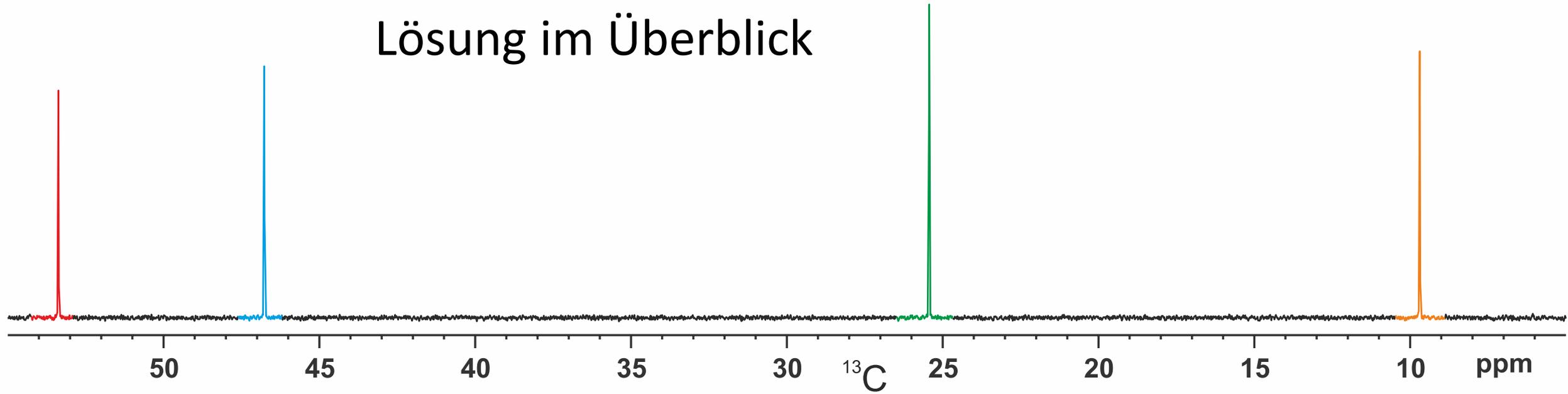
$^1\text{H}/^{13}\text{C}$  HSQC  
gemessen bei 250.13/62.90 MHz



$^1\text{H}$  TOCSY  
gemessen bei 250.13 MHz



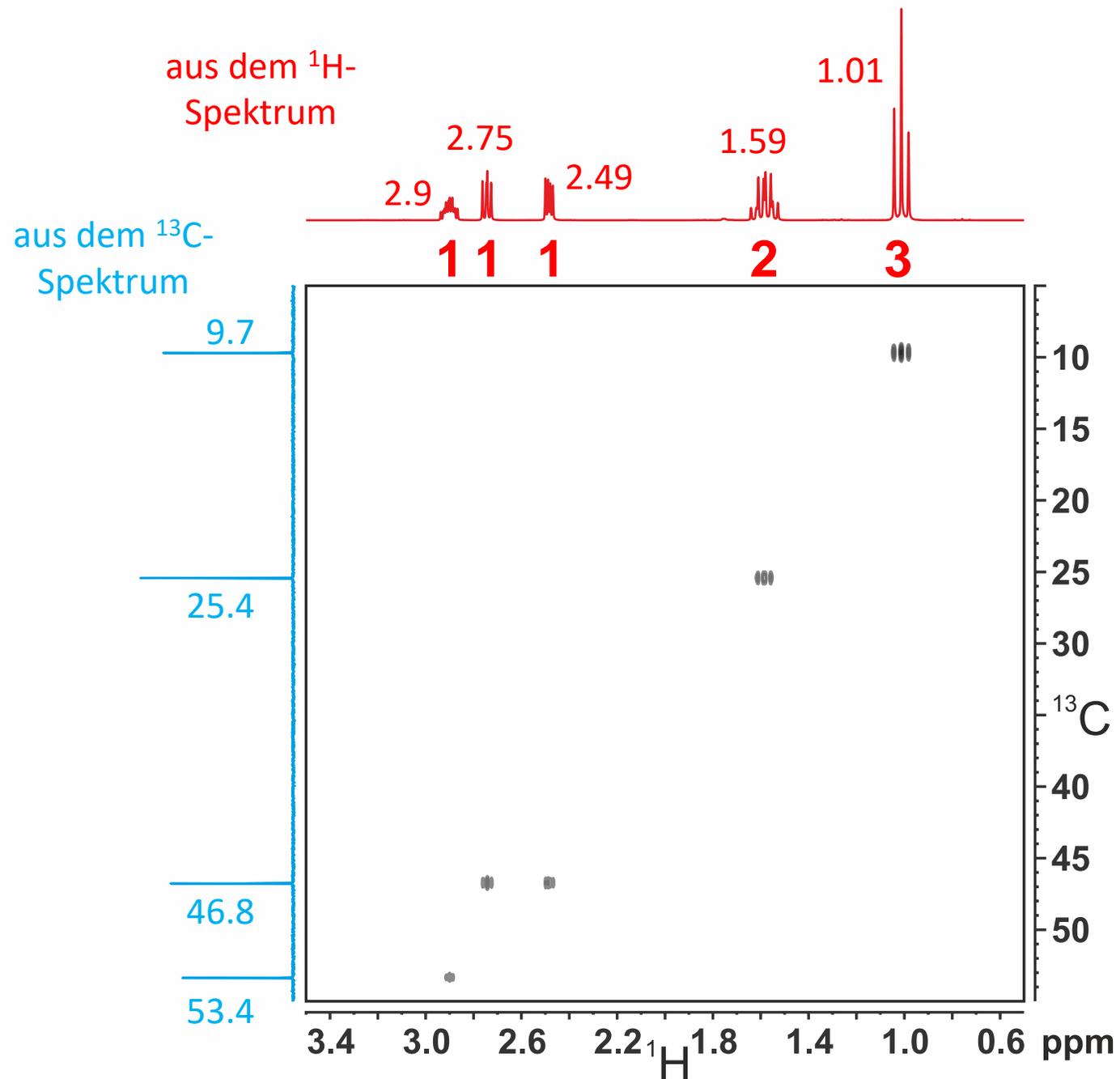
# Lösung im Überblick



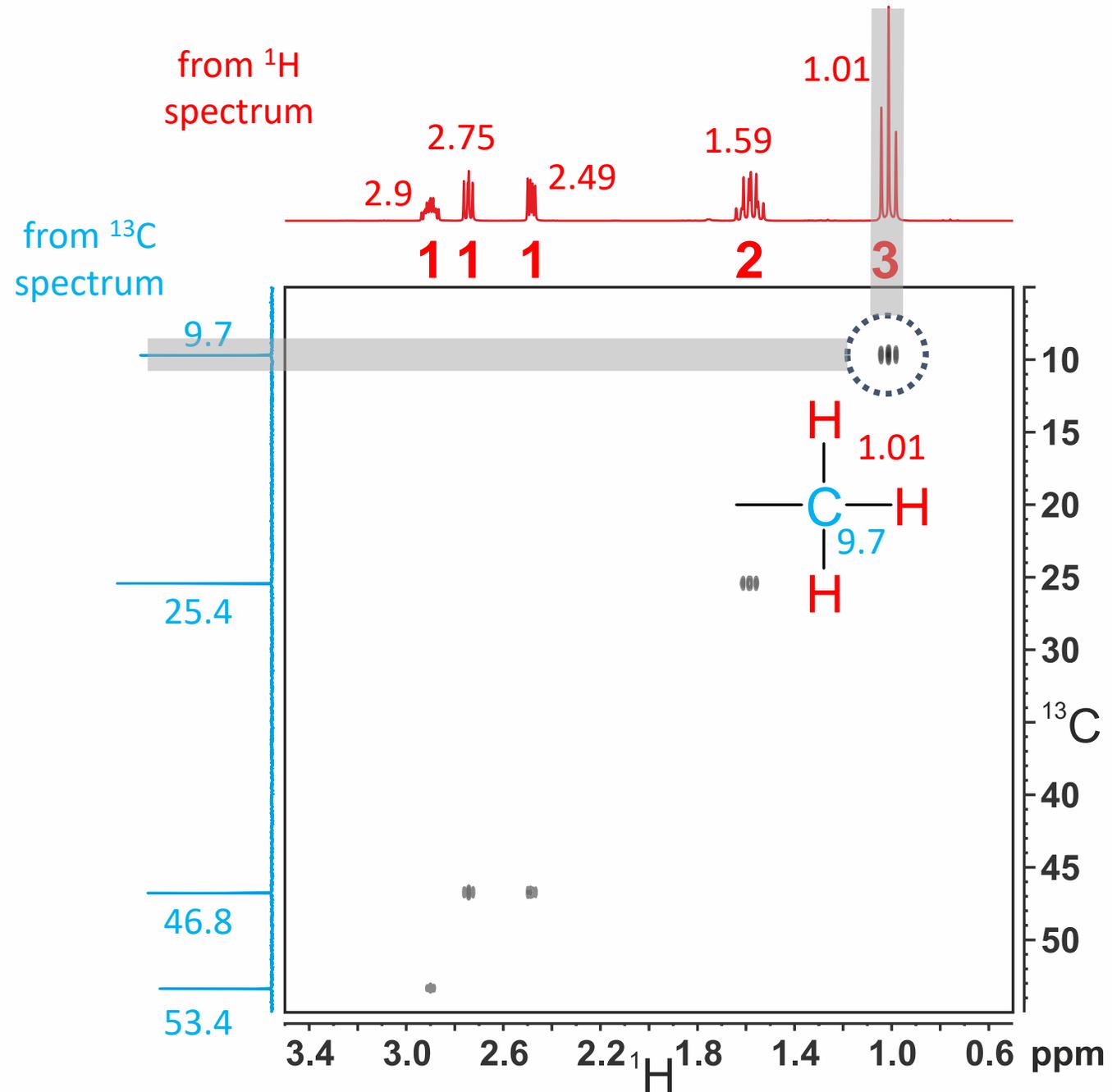
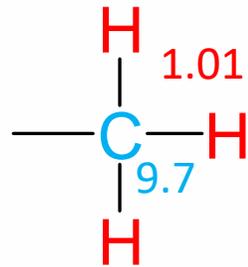
# Schritt für Schritt

Wenn verfügbar, ist ein HSQC immer ein toller Startpunkt zur Strukturaufklärung.

Als ersten Schritt überträgt man chemische Verschiebungen und Integrale aus den eindimensionalen Spektren.

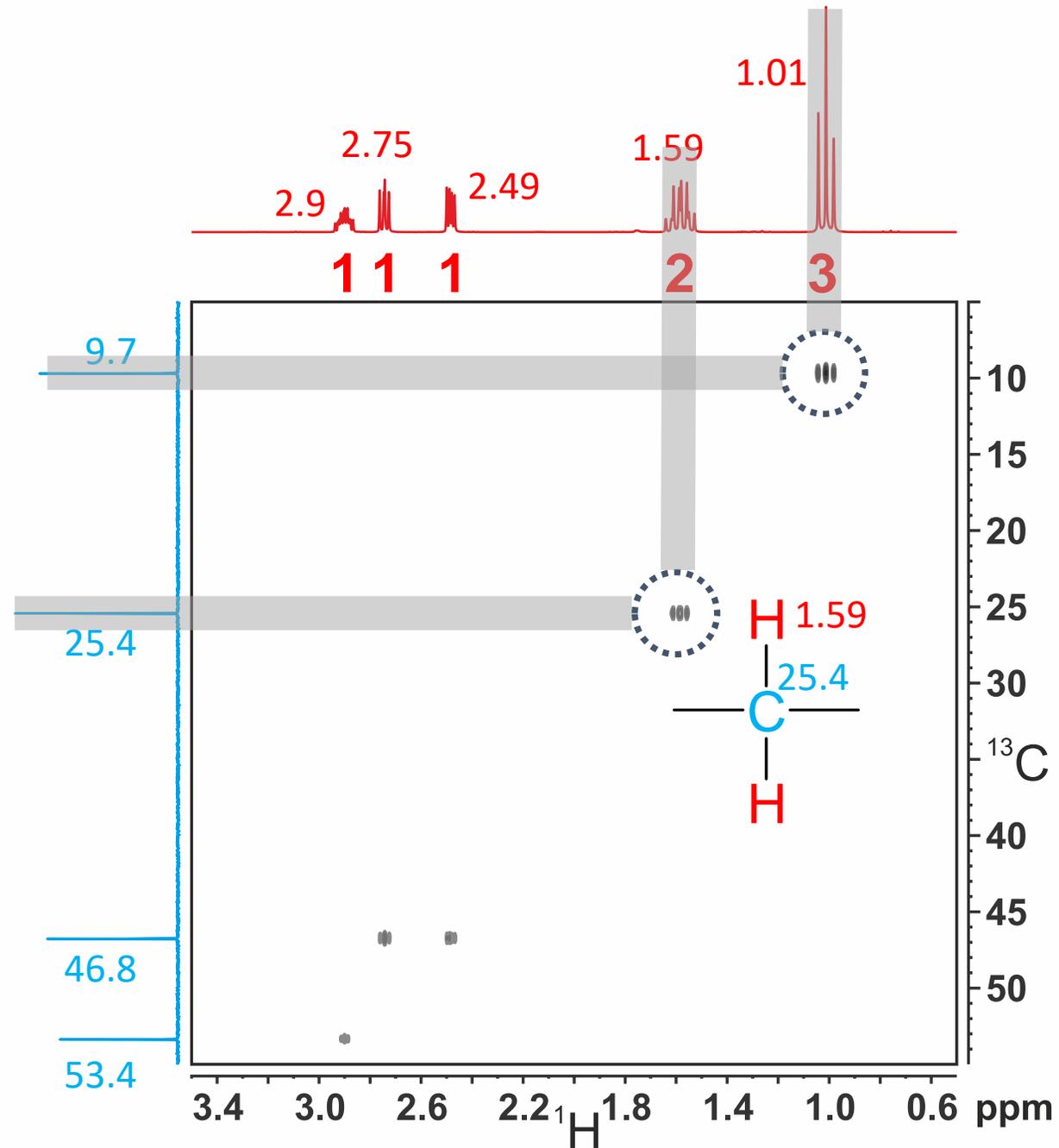
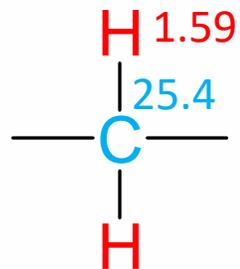
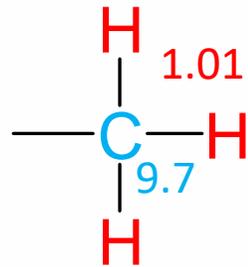


Jetzt kann man aus den Kreuzpeaks und den Integralen sukzessive die  $\text{CH}_n$ -Fragmente extrahieren.



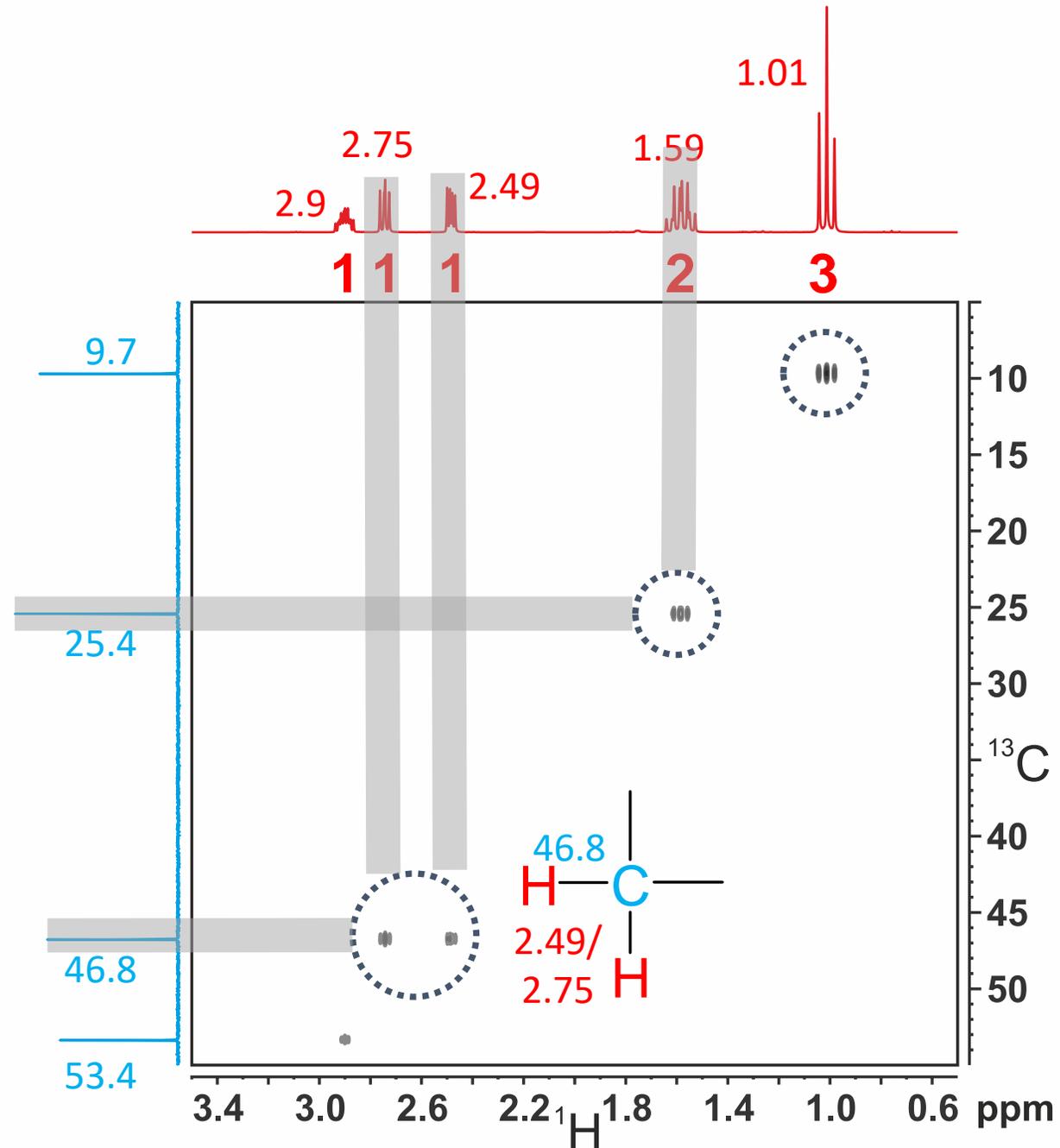
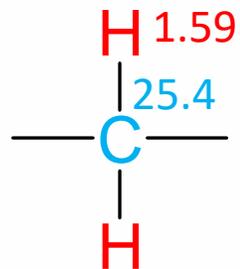
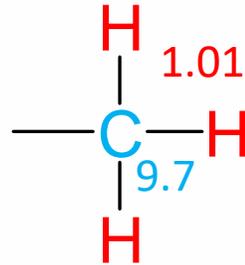
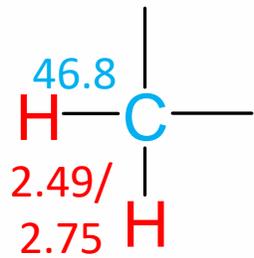
Jetzt kann man aus den Kreuzpeaks und den Integralen sukzessive die  $\text{CH}_n$ -Fragmente extrahieren.

Auf den ersten Blick erhält man einen ungeordneten Bausteinhaufen.



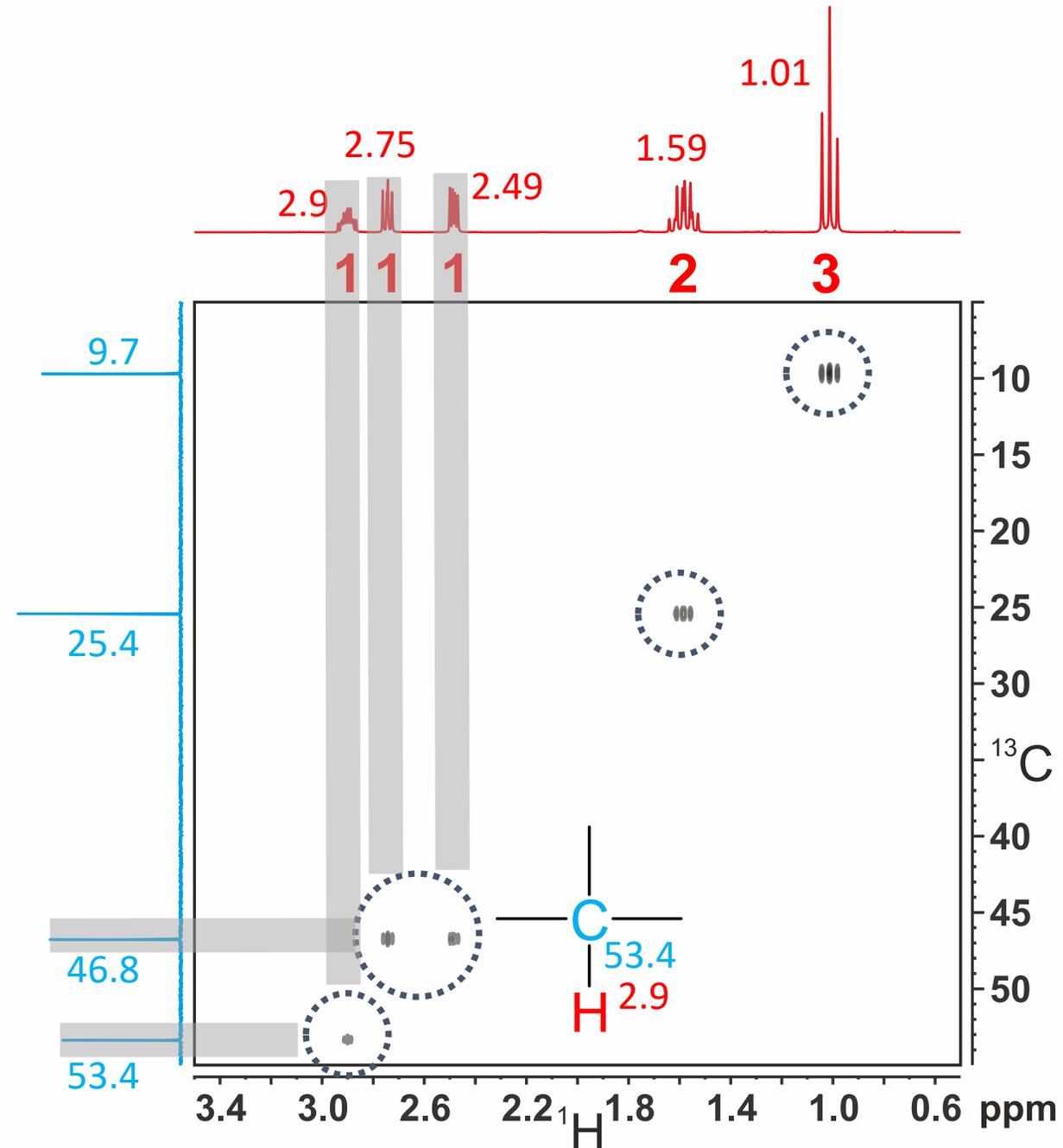
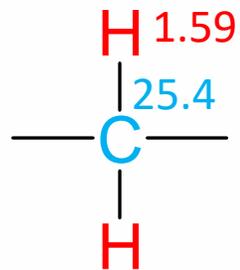
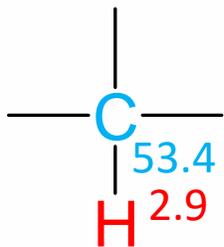
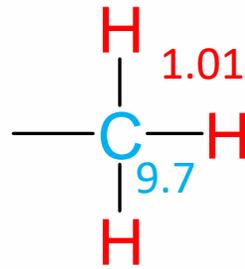
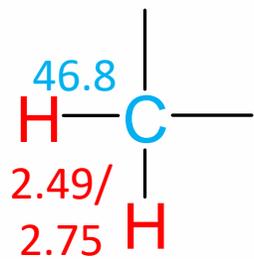
Jetzt kann man aus den Kreuzpeaks und den Integralen sukzessive die  $\text{CH}_n$ -Fragmente extrahieren.

Auf den ersten Blick erhält man einen ungeordneten Bausteinhaufen.



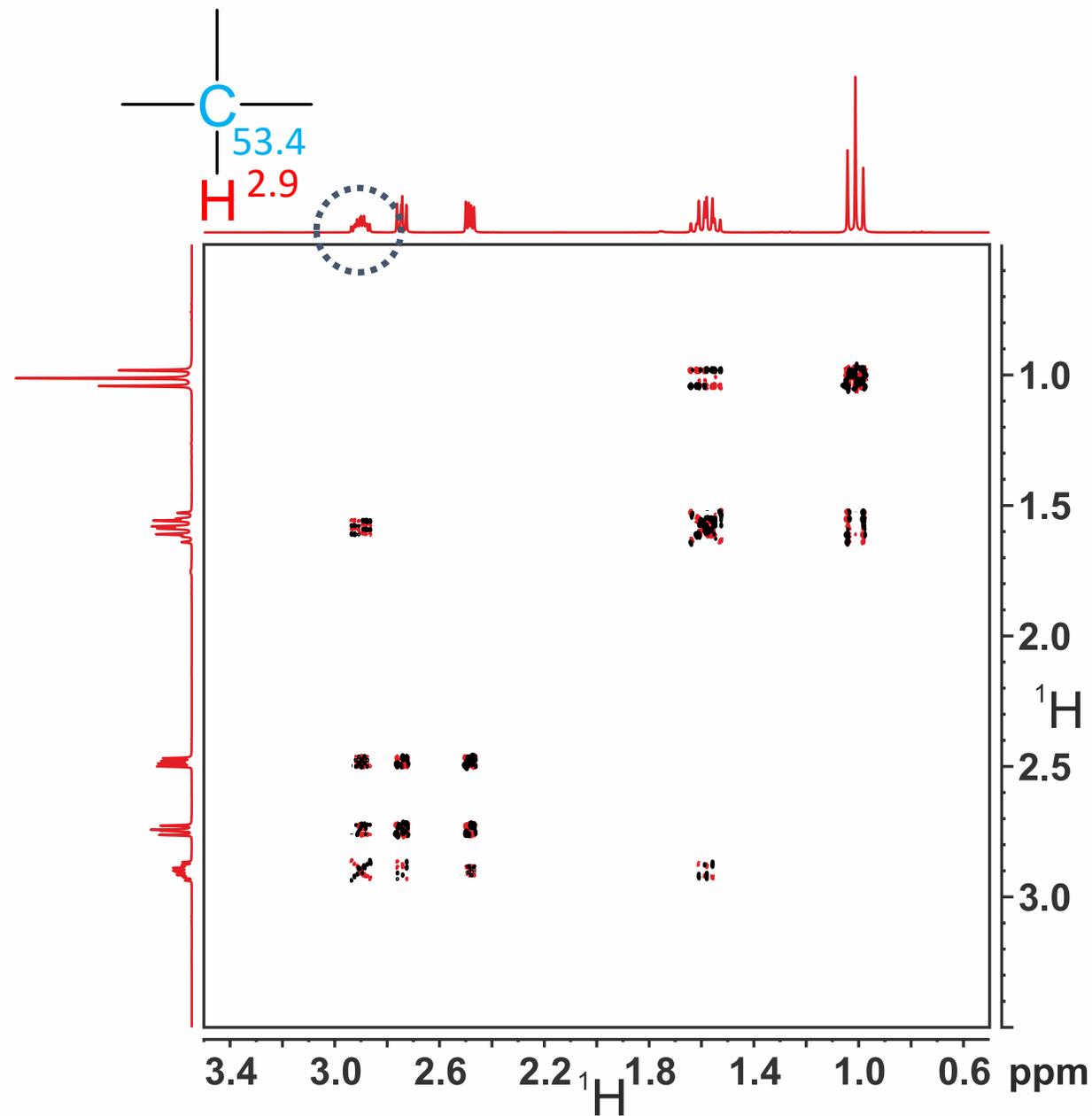
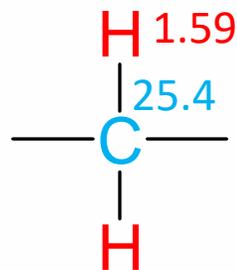
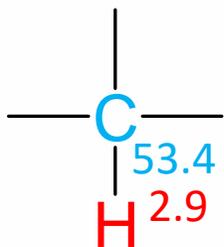
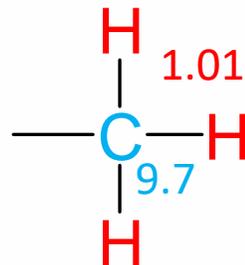
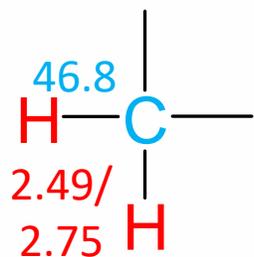
Jetzt kann man aus den Kreuzpeaks und den Integralen sukzessive die  $\text{CH}_n$ -Fragmente extrahieren.

Auf den ersten Blick erhält man einen ungeordneten Bausteinhaufen.



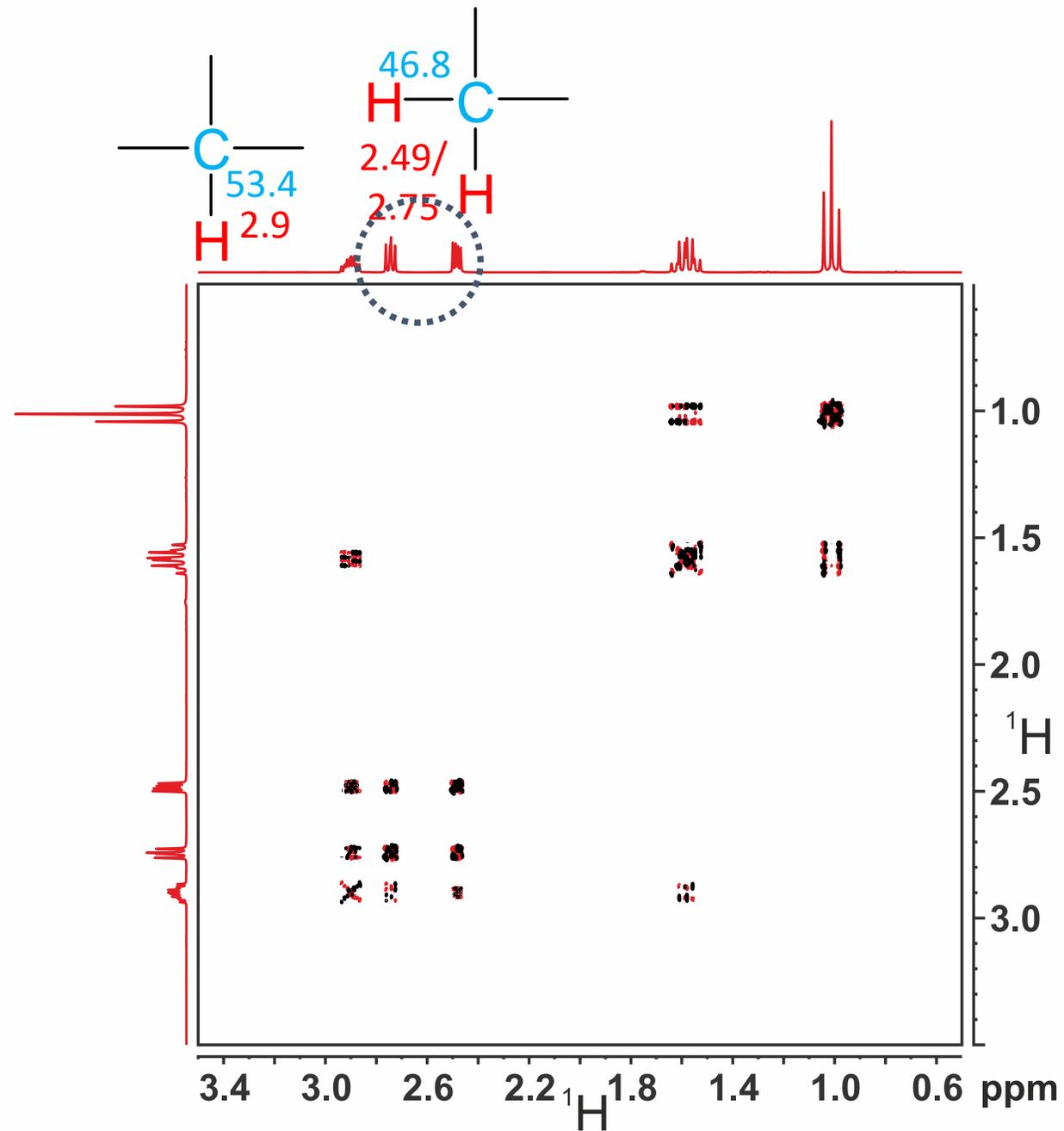
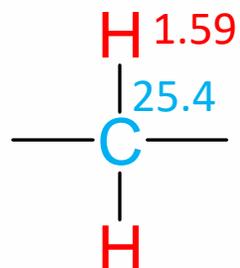
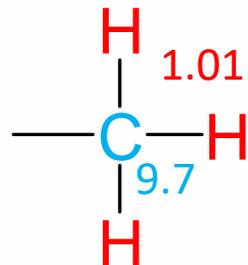
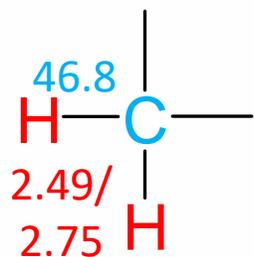
Mit Hilfe des COSY kann man jetzt anhand der Protonensignale der Bausteine die Reihenfolge der Bausteine ermitteln.

Das erfordert zunächst eine Neuordnung der Bausteine entsprechend der  $^1\text{H}$ -Signale. Anschaulich wird alles, wenn man die Bausteine neben die zugehörigen Protonensignale in der Projektion platziert.



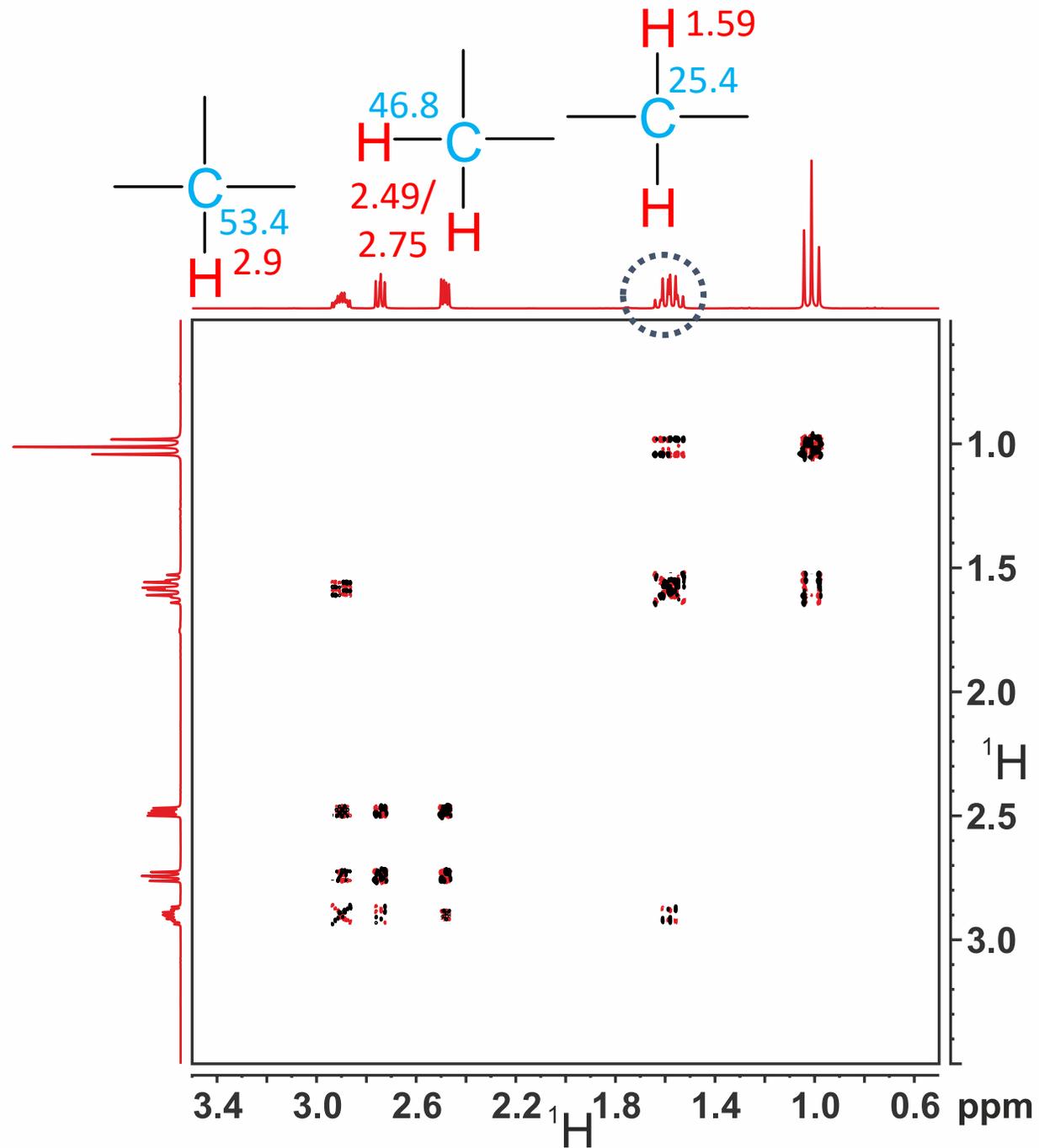
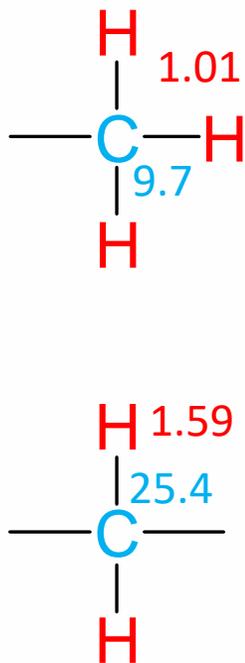
Mit Hilfe des COSY kann man jetzt anhand der Protonensignale der Bausteine die Reihenfolge der Bausteine ermitteln..

Das erfordert zunächst eine Neuordnung der Bausteine entsprechend der  $^1\text{H}$ -Signale. Anschaulich wird alles, wenn man die Bausteine neben die zugehörigen Protonensignale in der Projektion platziert.



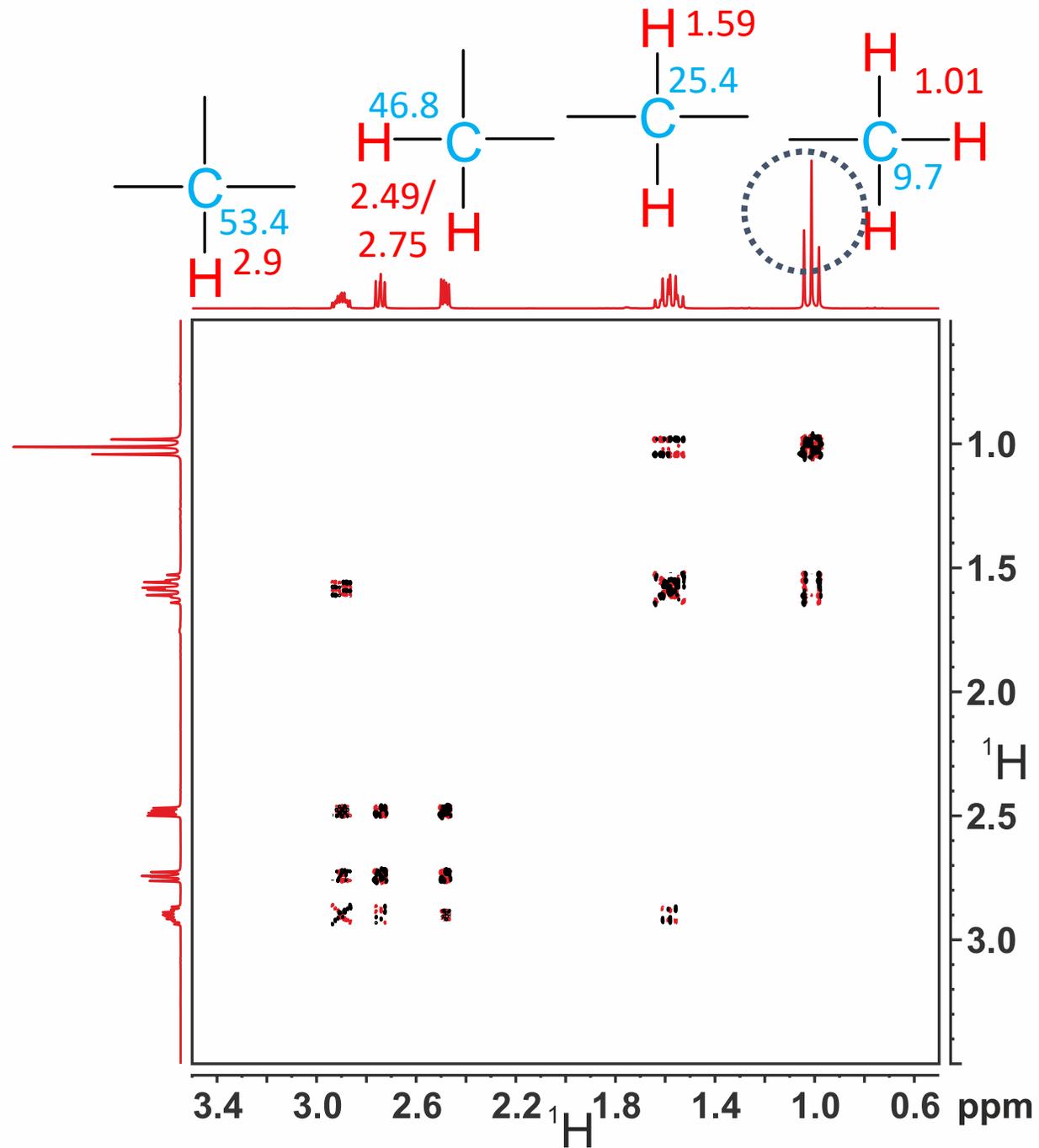
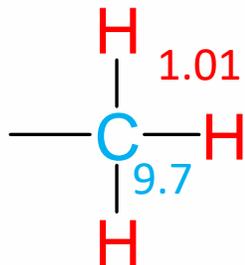
Mit Hilfe des COSY kann man jetzt anhand der Protonensignale der Bausteine die Reihenfolge der Bausteine ermitteln..

Das erfordert zunächst eine Neuordnung der Bausteine entsprechend der  $^1\text{H}$ -Signale. Anschaulich wird alles, wenn man die Bausteine neben die zugehörigen Protonensignale in der Projektion platziert.



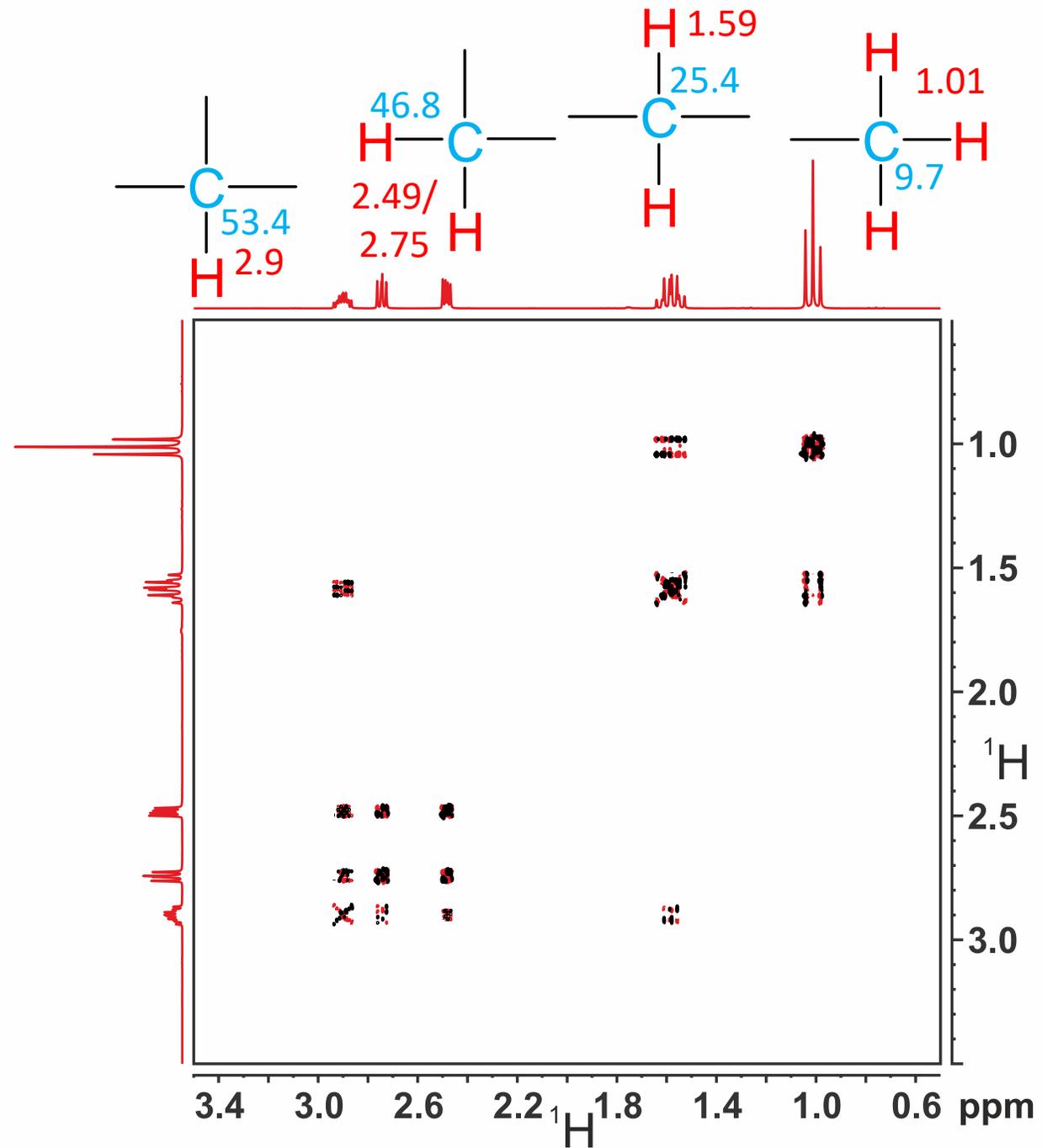
Mit Hilfe des COSY kann man jetzt anhand der Protonensignale der Bausteine die Reihenfolge der Bausteine ermitteln..

Das erfordert zunächst eine Neuordnung der Bausteine entsprechend der  $^1\text{H}$ -Signale. Anschaulich wird alles, wenn man die Bausteine neben die zugehörigen Protonensignale in der Projektion platziert.



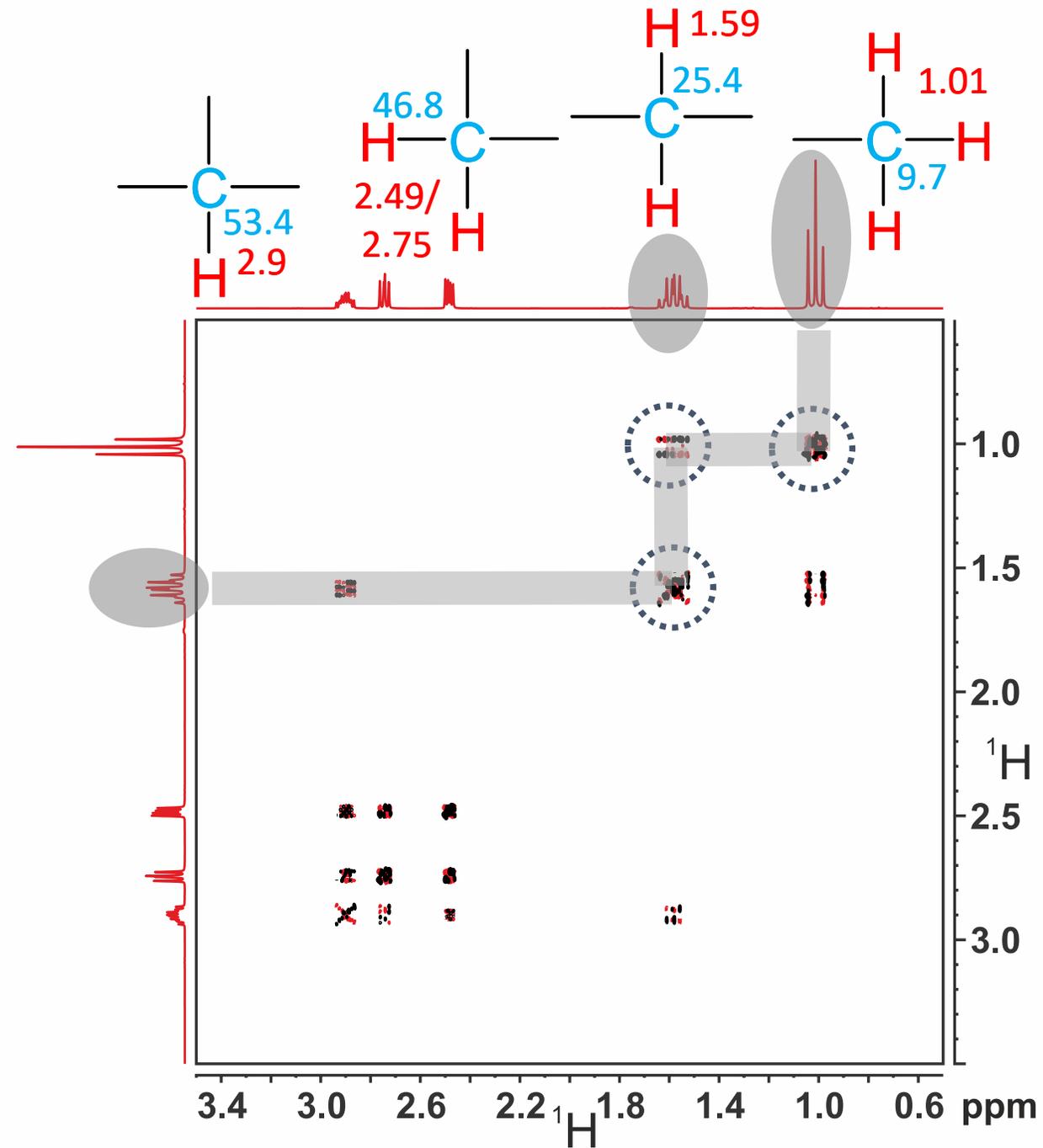
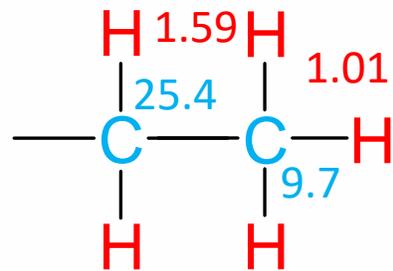
Mit Hilfe des COSY kann man jetzt anhand der Protonensignale der Bausteine die Reihenfolge der Bausteine ermitteln..

Das erfordert zunächst eine Neuordnung der Bausteine entsprechend der  $^1\text{H}$ -Signale. Anschaulich wird alles, wenn man die Bausteine neben die zugehörigen Protonensignale in der Projektion platziert.



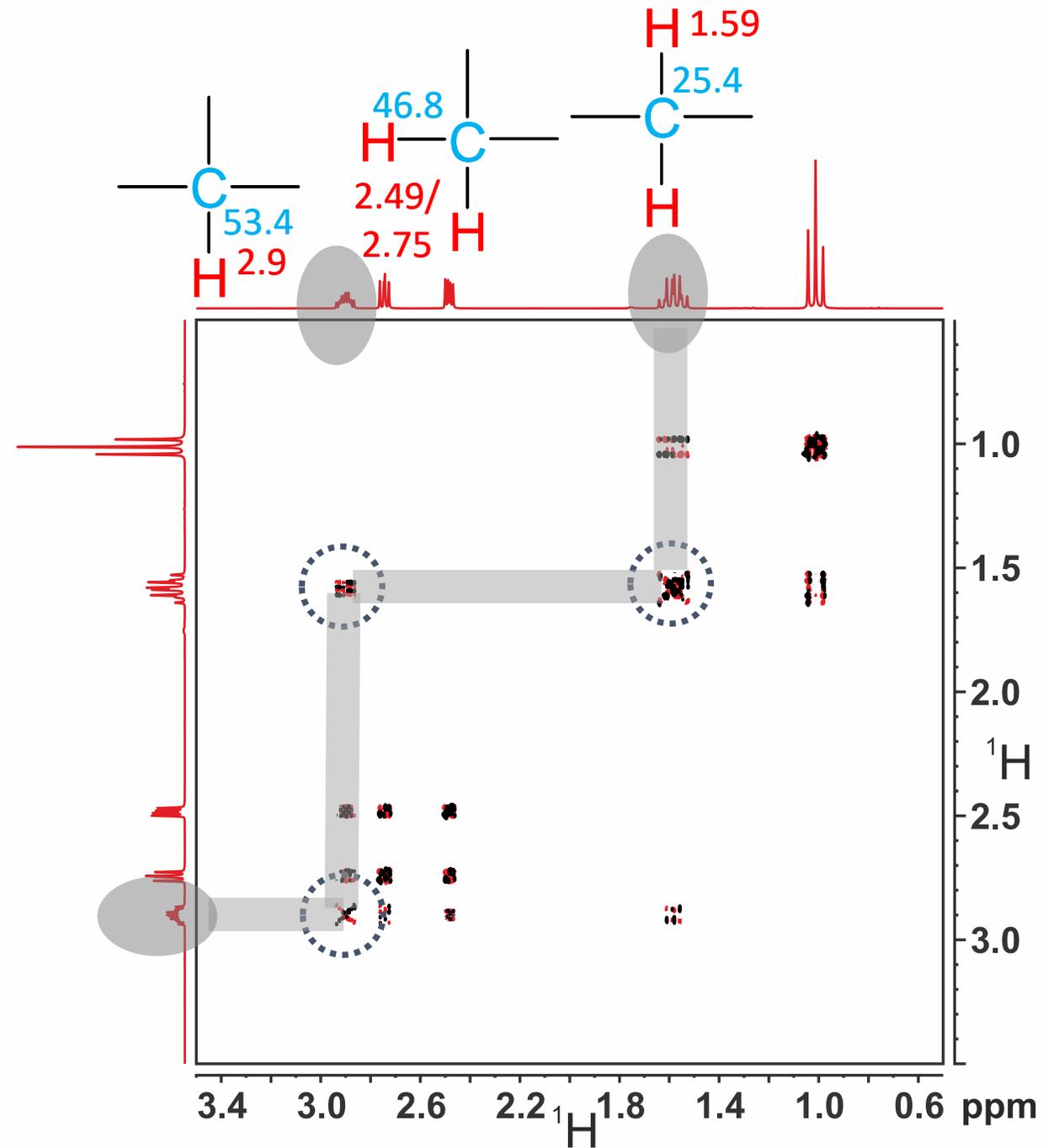
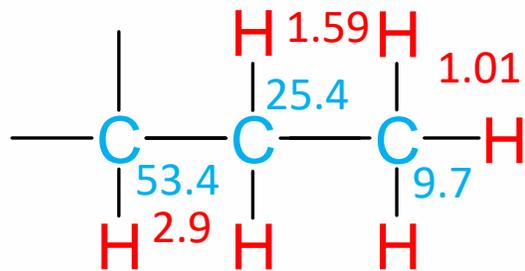
Im COSY kann man jetzt die Reihenfolge der  $\text{CH}_n$ -Gruppen anhand der  $^1\text{H}$ -Signale ermitteln.

Logischerweise befindet sich die Methylgruppe am Ende (oder dem Anfang) des Moleküls. Mit der Methylgruppe kann man die eindeutige Sequenzierung beginnen.



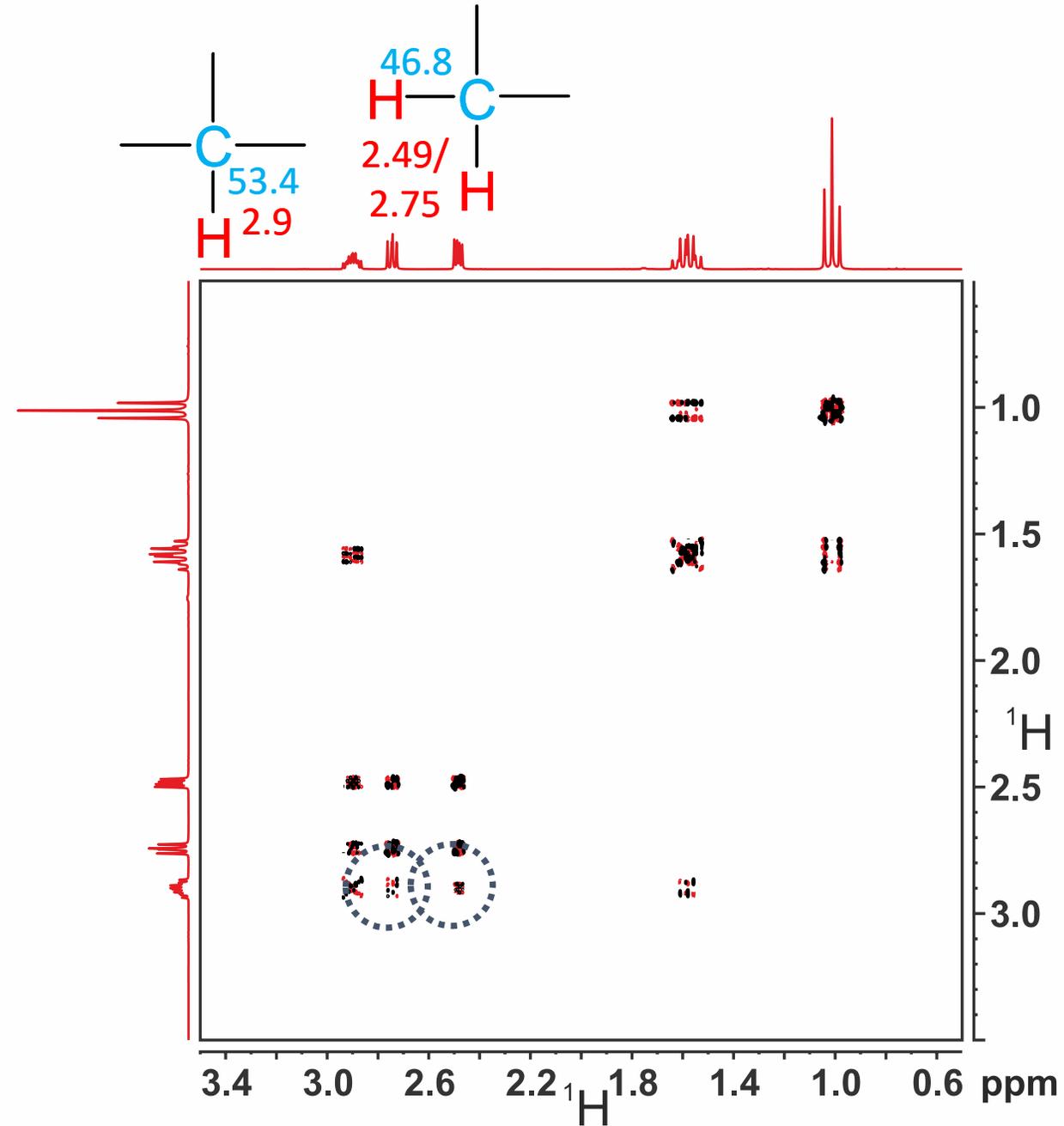
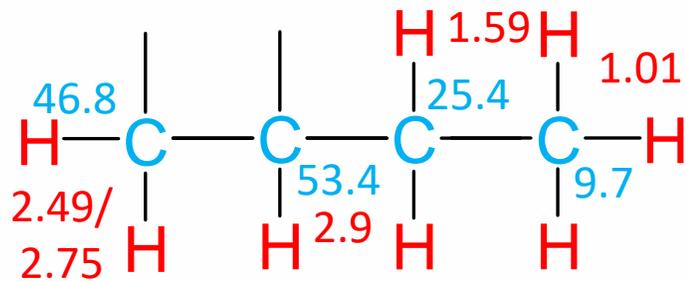
Im COSY kann man jetzt die Reihenfolge der  $\text{CH}_n$ -Gruppen anhand der  $^1\text{H}$ -Signale ermitteln.

Eine Ethylgruppe ist jetzt schon bekannt, das nächste Fragment muss dort anschließen.

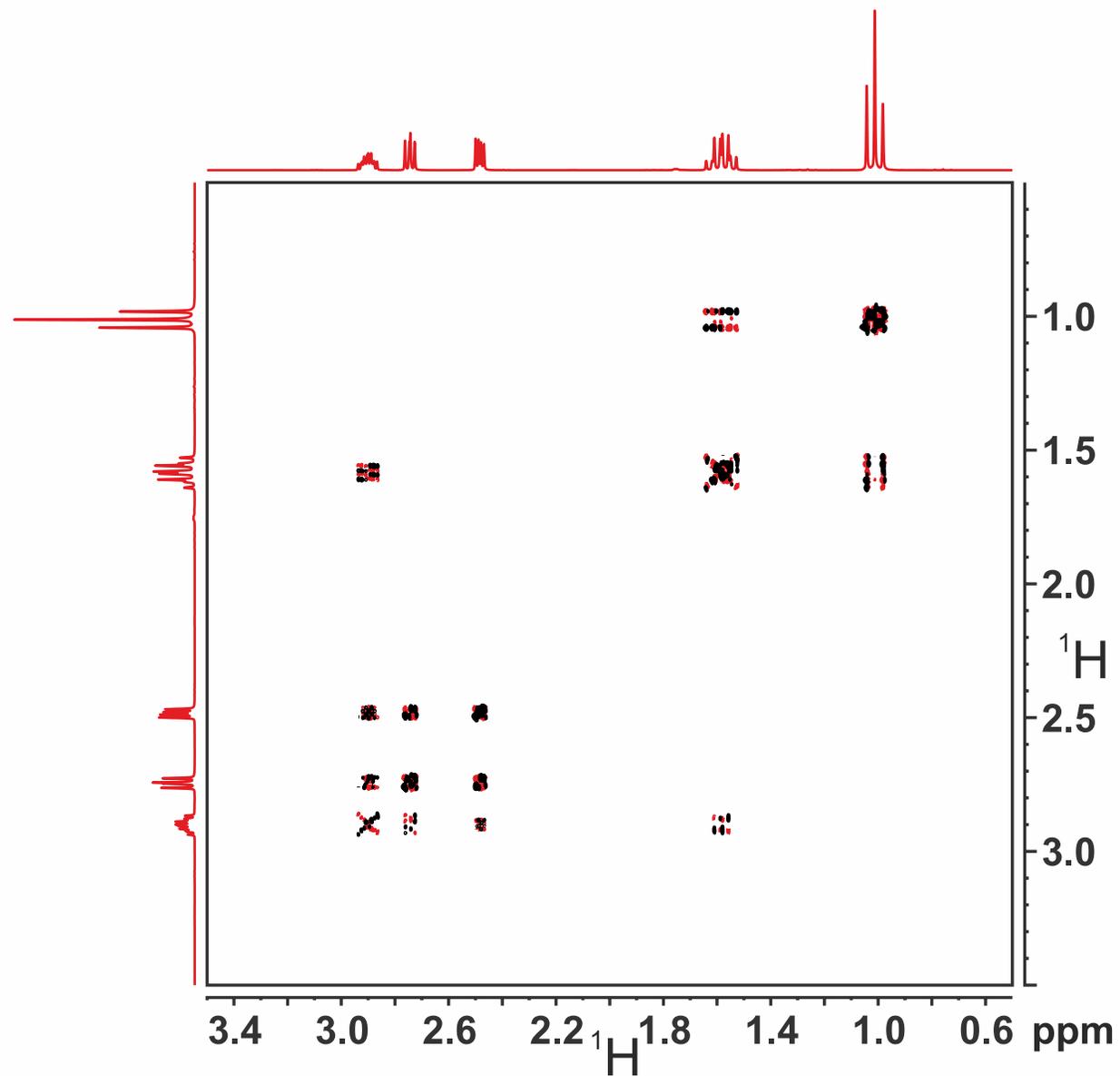
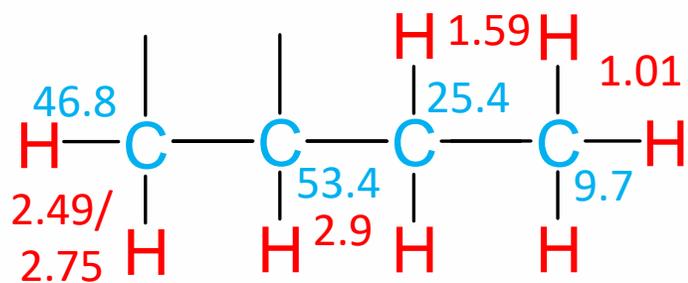


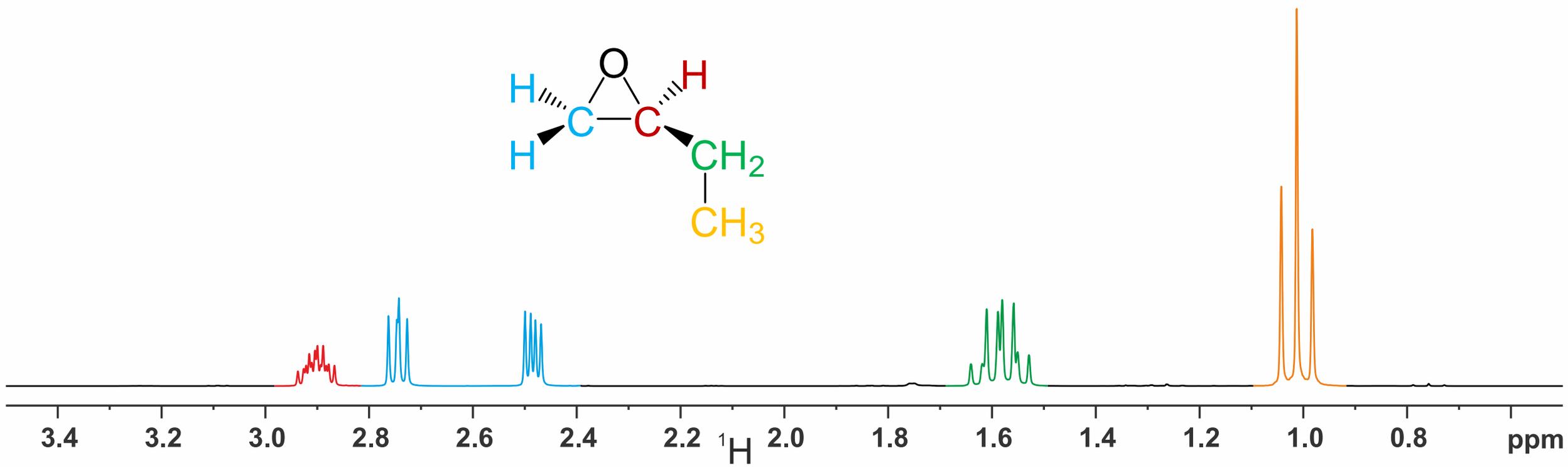
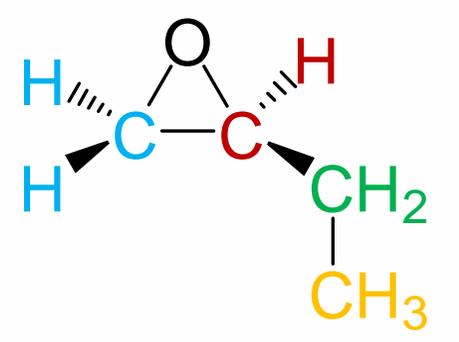
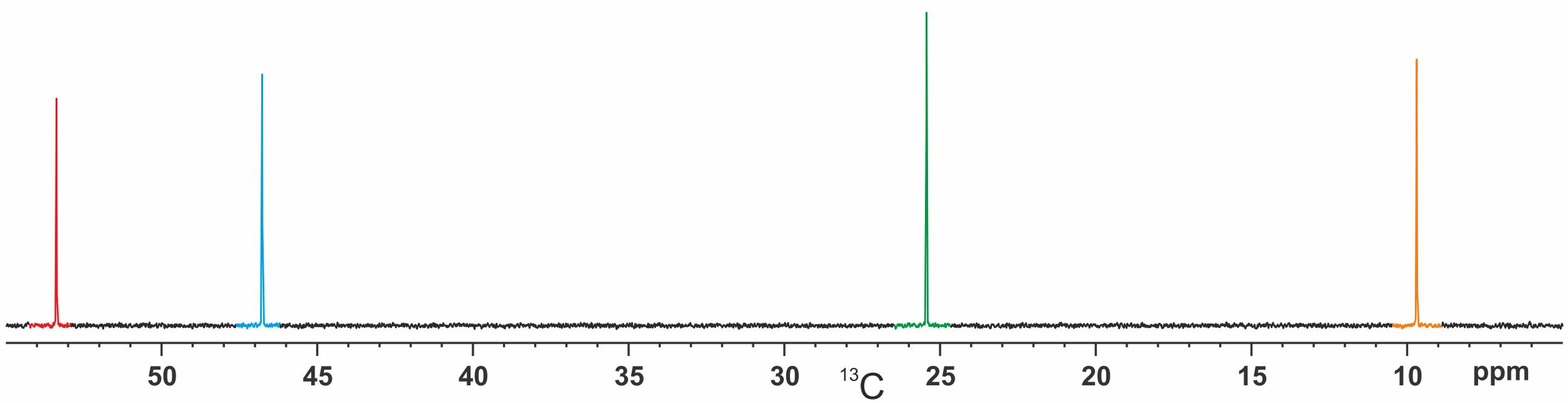
Im COSY kann man jetzt die Reihenfolge der  $\text{CH}_n$ -Gruppen anhand der  $^1\text{H}$ -Signale ermitteln.

Es ist nur eine Valenz verfügbar, um die verbleibende Methylengruppe anzuschließen. Die Protonen der Methylengruppe sind diastereotop, deshalb sieht man zwei Kreuzpeaks.

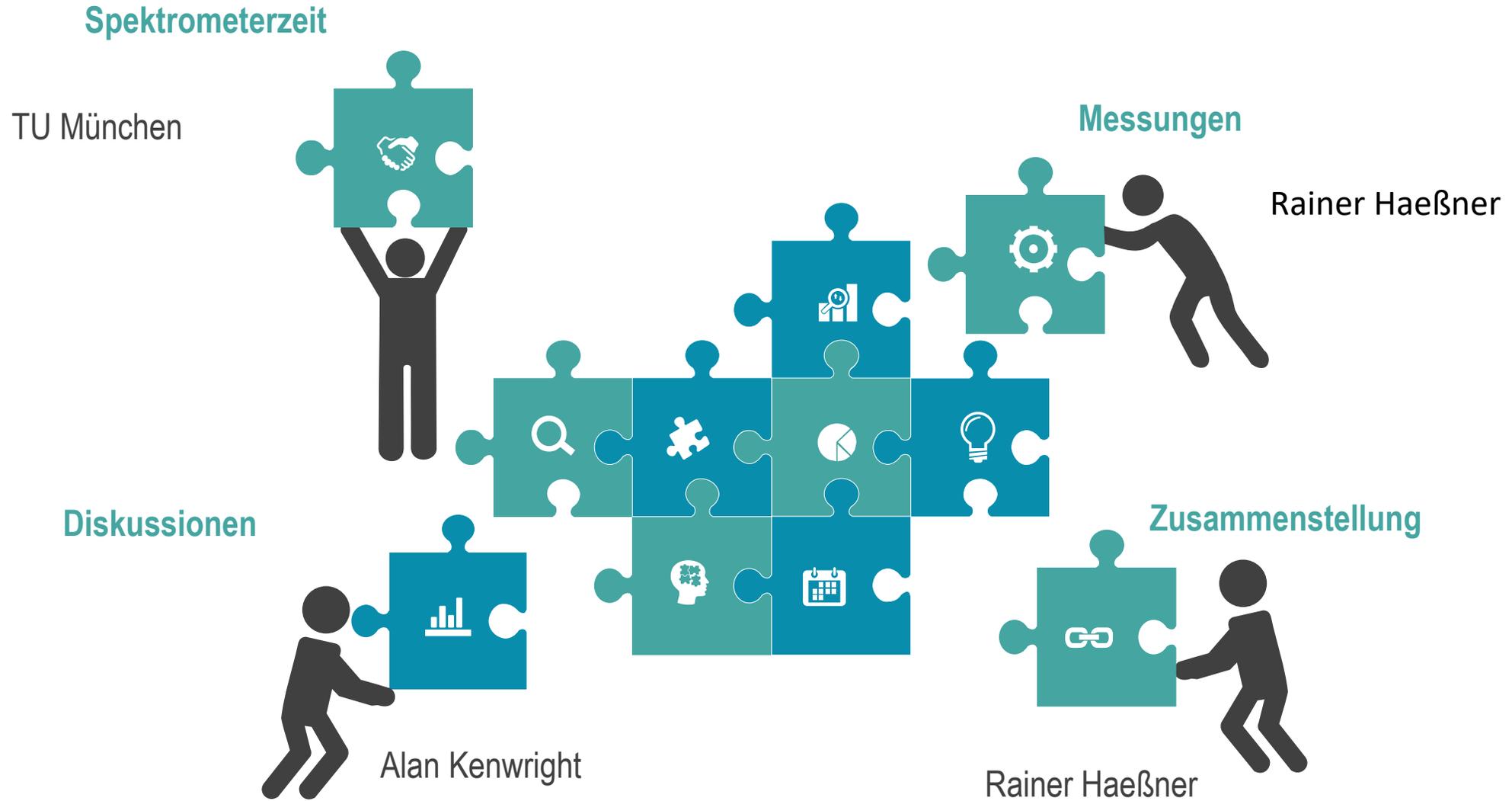


Der noch nicht zugeordnete Sauerstoff, zwei noch offene Valenzen und es gibt nur eine mögliche finale Struktur ...





# Beiträge



[Weitere Beispiele ...](#)