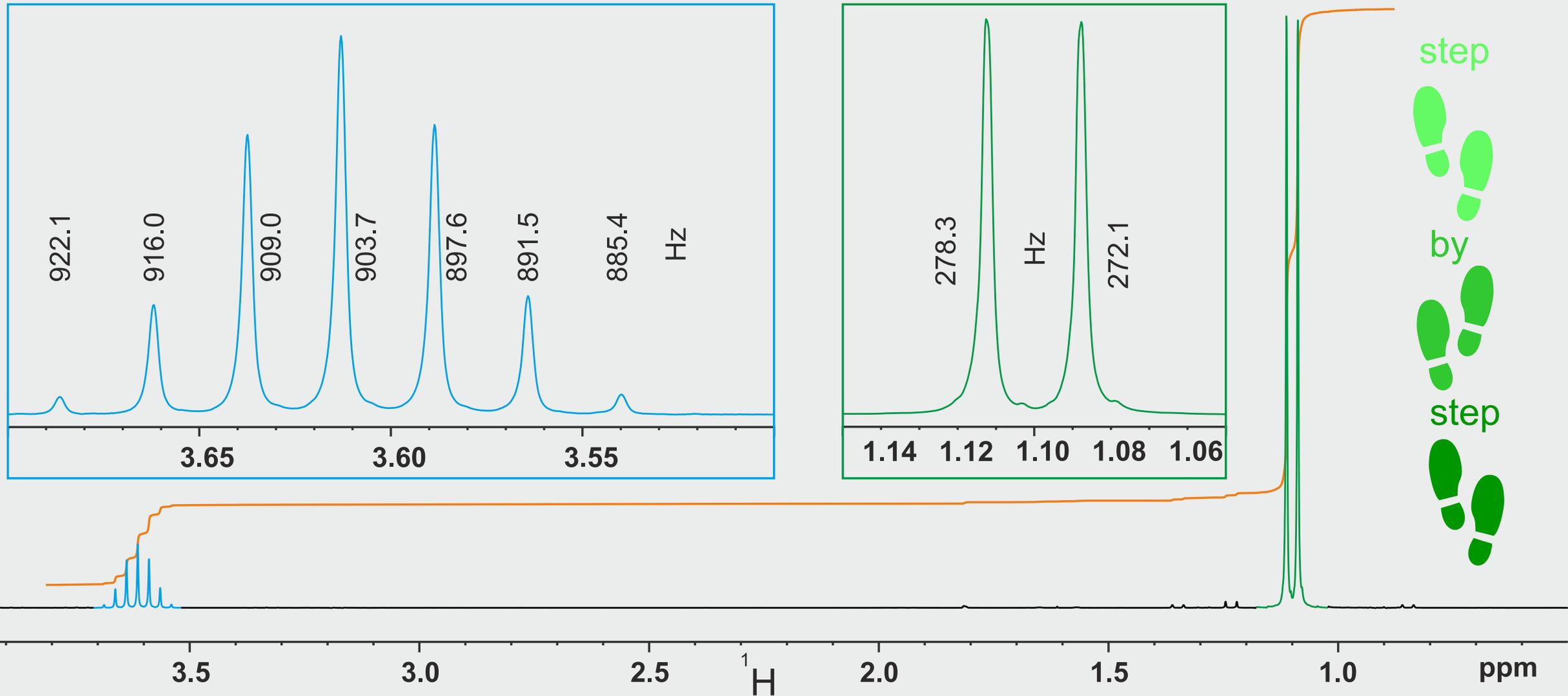


Übung plus Lösung – PDF-Schnellüberblick

Diese PDF-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.

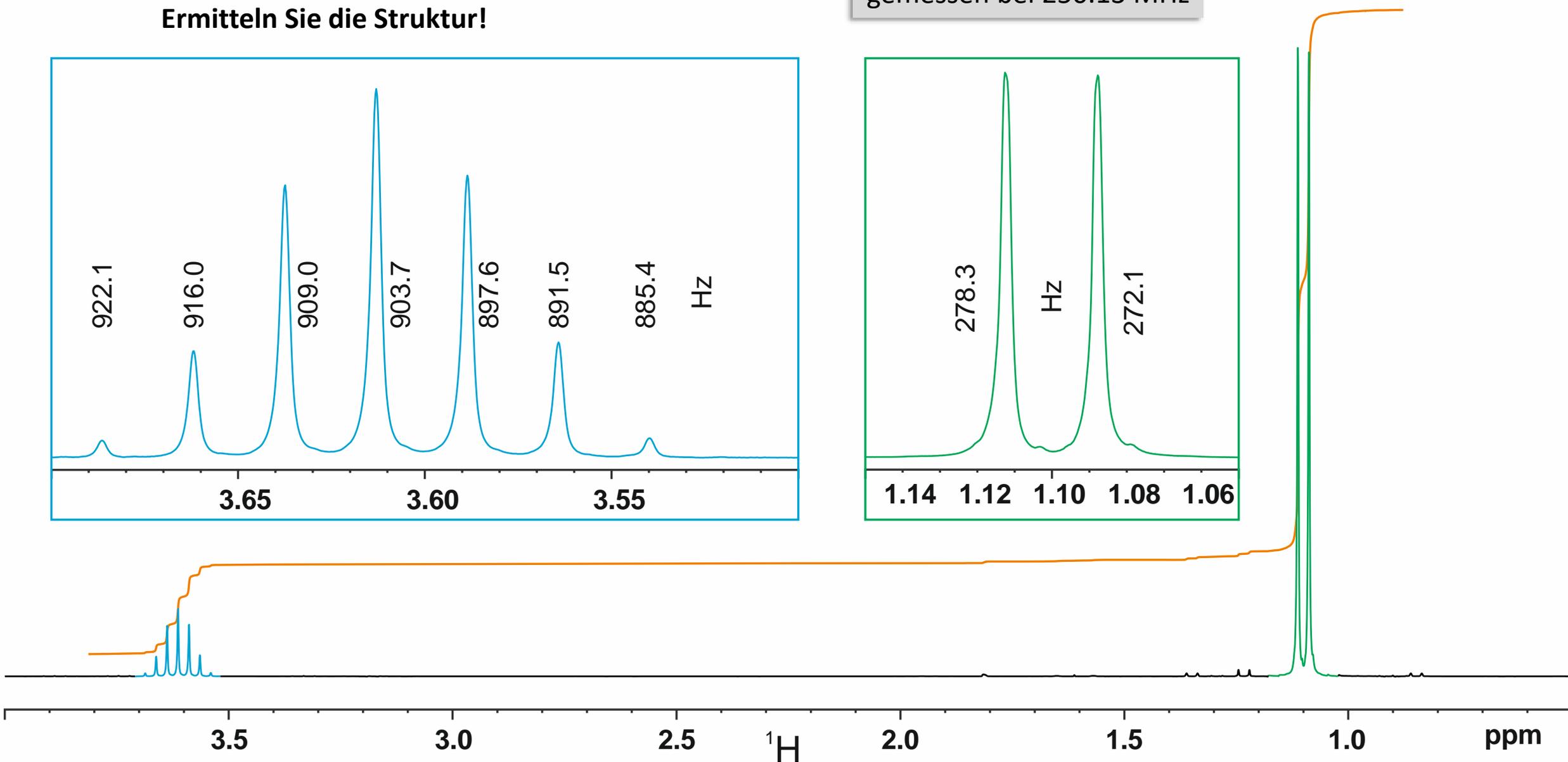
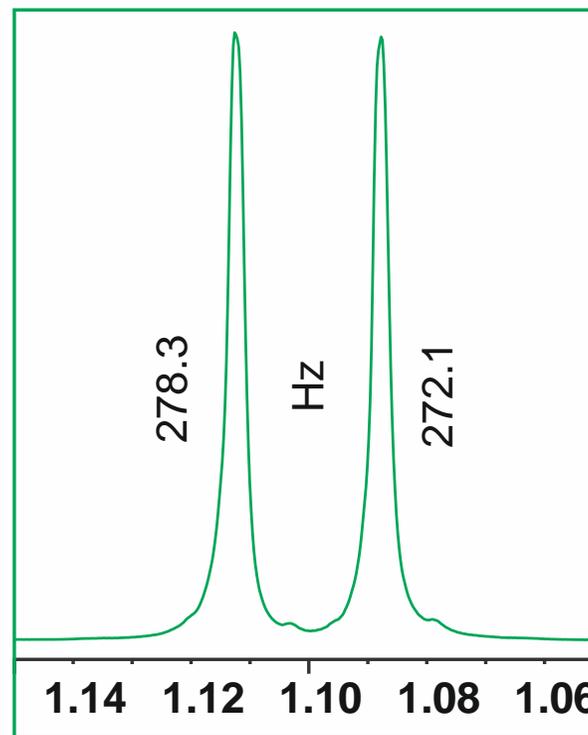
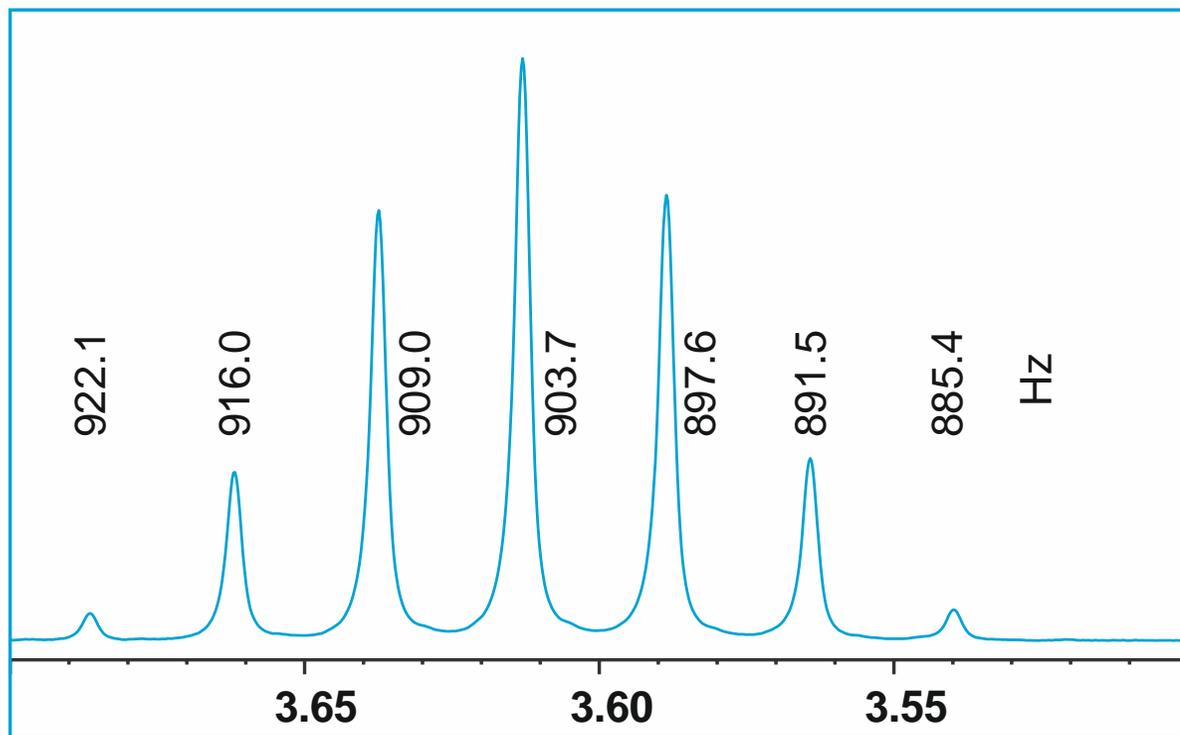
Die qualitativ hochwertigen PowerPoint-Originale stehen jederzeit zum freien Download zur Verfügung.



$C_6H_{14}O$ gelöst in $CDCl_3$

Ermitteln Sie die Struktur!

1H NMR-Spektrum
gemessen bei 250.13 MHz



Lösung

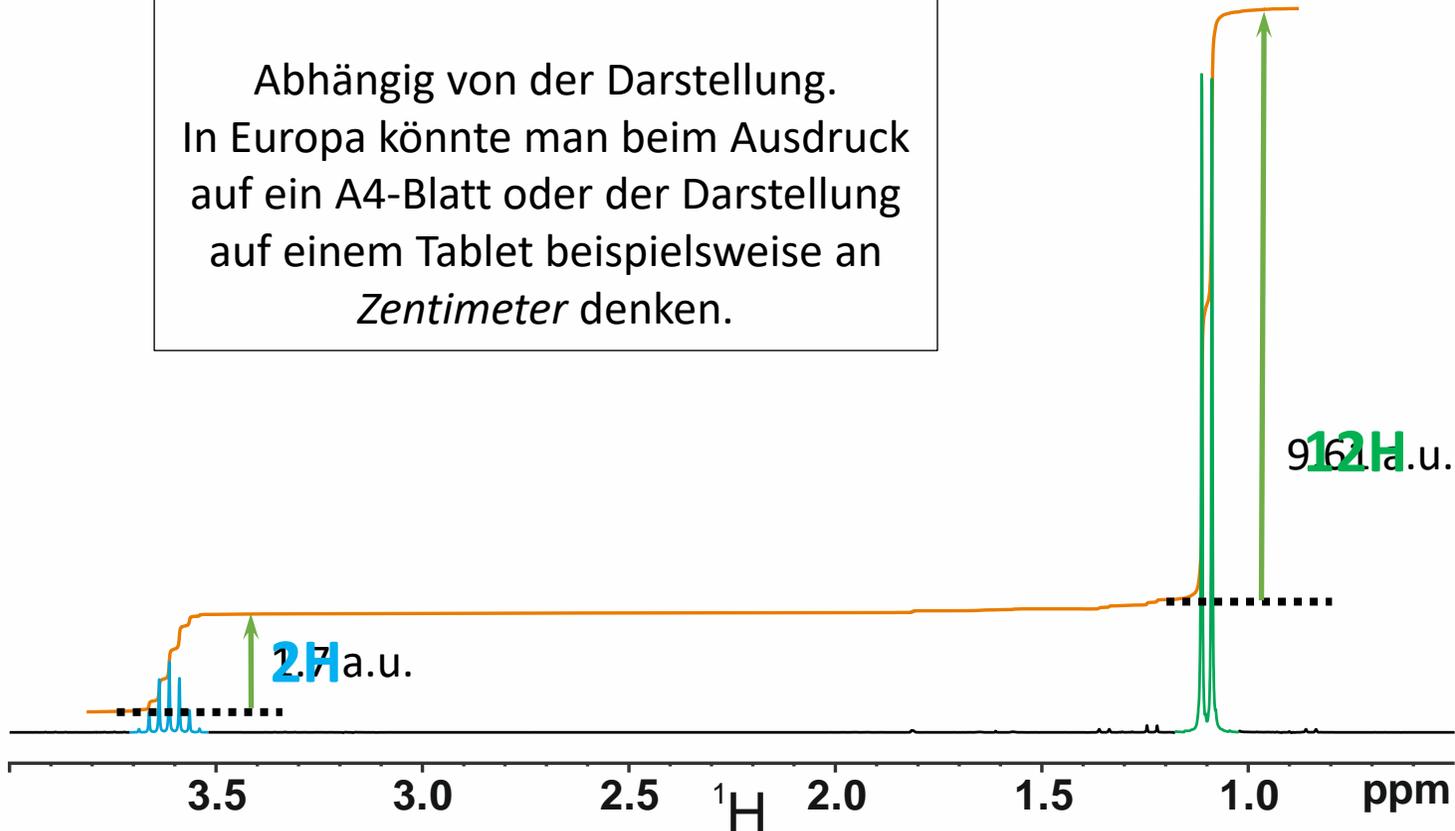


- kein Doppelbindungsäquivalent
- Es gibt 14 Protonen aber nur zwei Signalgruppen. Da muss irgendeine Symmetrie vorliegen.
- Integration:

a.u. ???

Englisch: *arbitrary units*

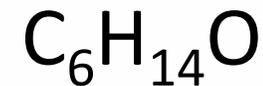
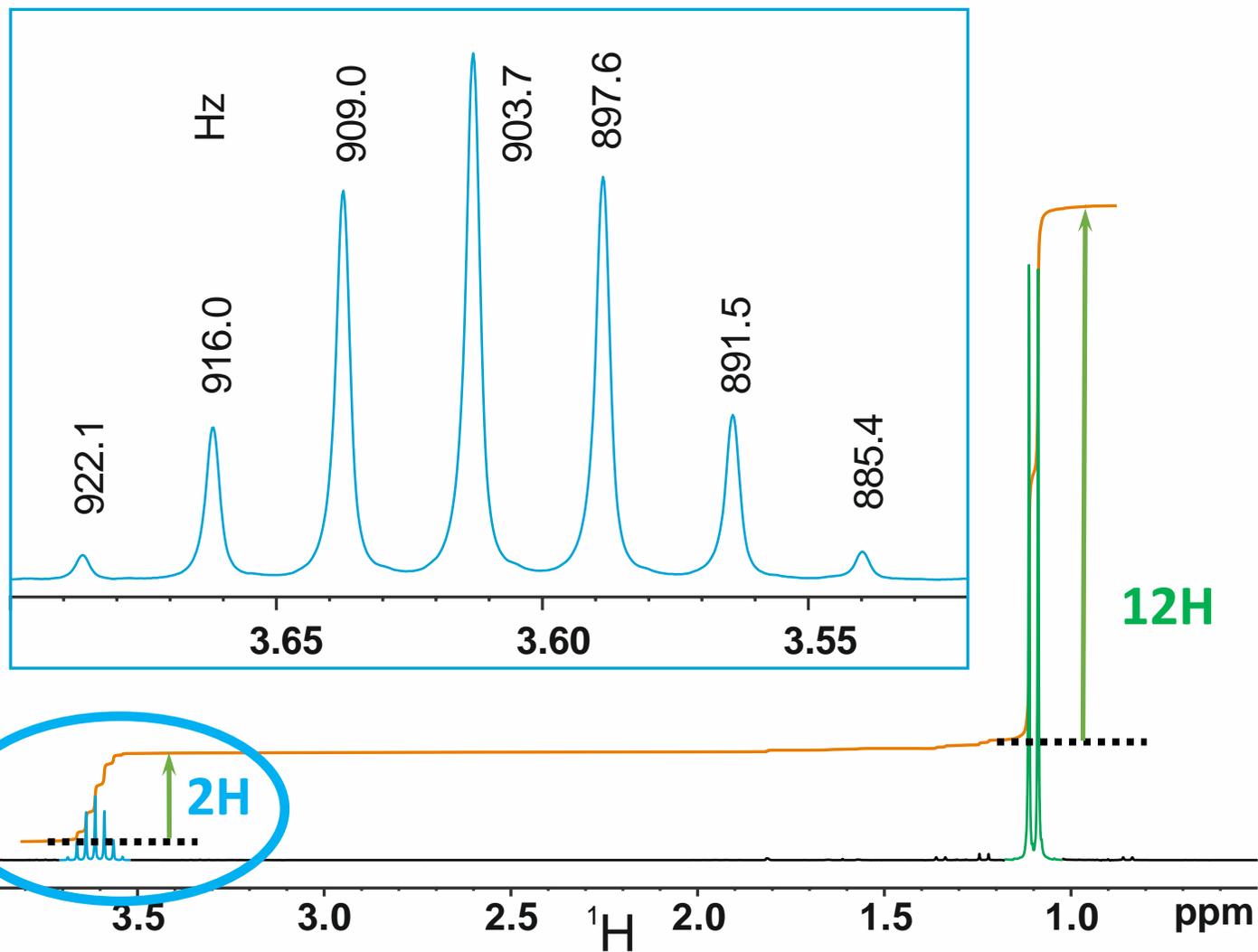
Abhängig von der Darstellung.
In Europa könnte man beim Ausdruck auf ein A4-Blatt oder der Darstellung auf einem Tablet beispielsweise an *Zentimeter* denken.



Tieffeldmultipllett	-	1.7 a.u.
Hochfeldmultipllett	-	9.61 a.u.
alle 14 Protonen	-	11.31 a.u.
1 Proton	≅	0.81 a.u.
Tieffeldmultipllett	≅	2.1 H
Hochfeldmultipllett	≅	11.9 H

Lösung

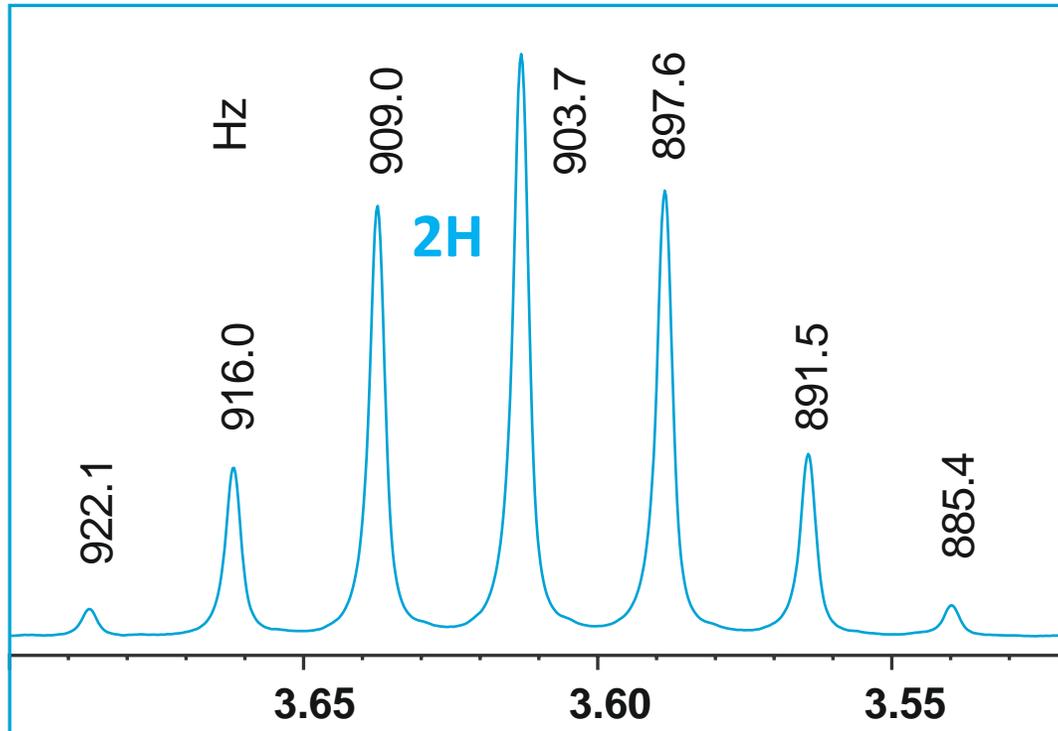
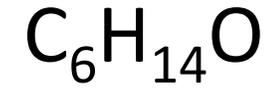
Fangen wir bei der Detailanalyse mit dem Septett an



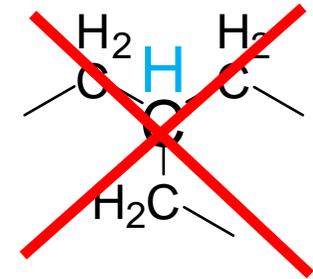
- kein Doppelbindungsäquivalent
- Es gibt 14 Protonen aber nur zwei Signalgruppen. Da muss irgendeine Symmetrie vorliegen.
- Integration:

Tieffeldmultipllett	-	1.7 a.u.
Hochfeldmultipllett	-	9.61 a.u.
alle 14 Protonen	-	11.31 a.u.
1 Proton	\cong	0.81 a.u.
Tieffeldmultipllett	\cong	2.1 H
Hochfeldmultipllett	\cong	11.9 H

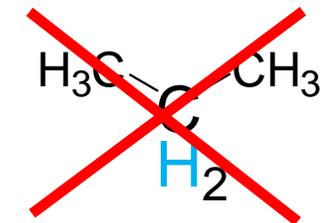
Um ein Septett zu beobachten, müssen gemäß der *(n-1)*-Regel 6 äquivalente Nachbarprotonen existieren.



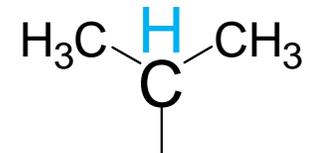
Wegen des Integrals von **2** müsste dieses Fragment zweimal existieren und damit mindestens 8 C-Atome.



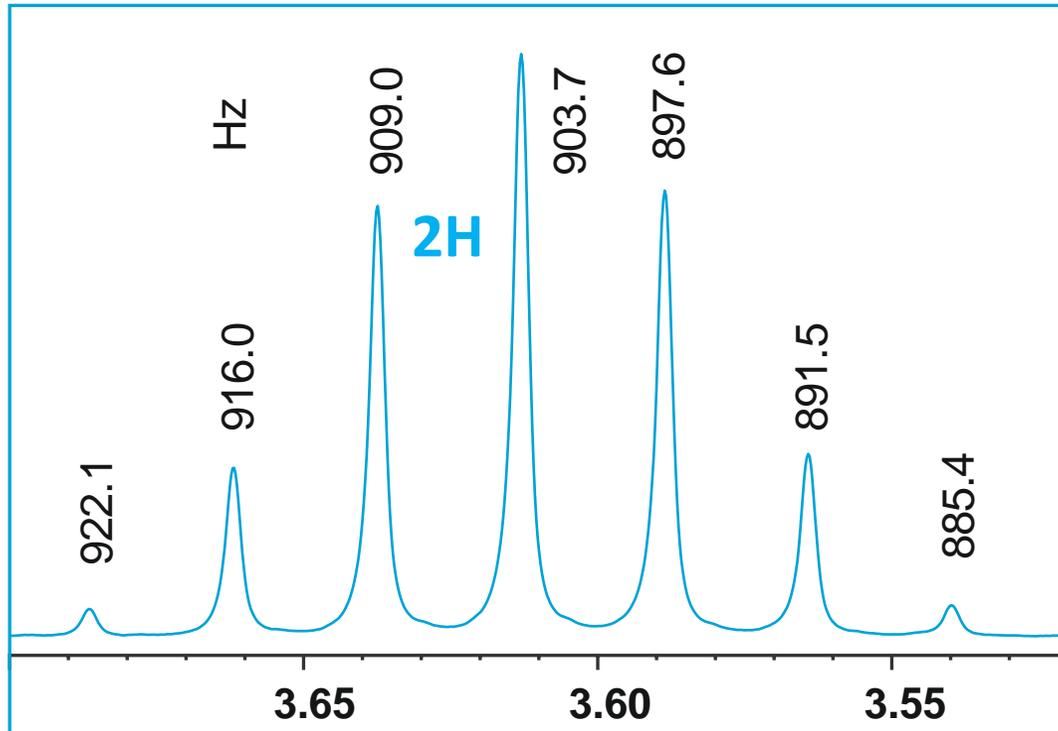
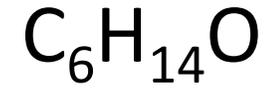
Wo sollte der verbleibende Teil $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ gebunden sein?



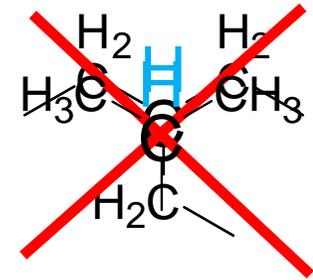
3. Möglichkeit



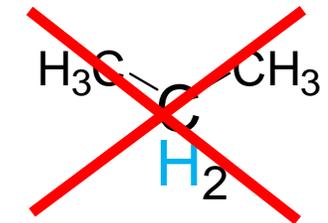
Um ein Septett zu beobachten, müssen gemäß der (n+1) Regel 6 äquivalente Nachbarprotonen existieren.



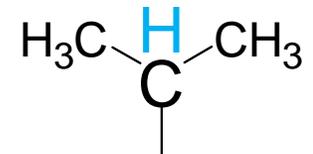
Wegen des Integrals von **2** müsste dieses Fragment zweimal existieren und damit mindestens 8 C-Atome.

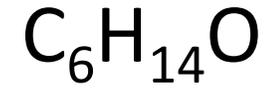


Wo sollte der verbleibende Teil $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ gebunden sein?

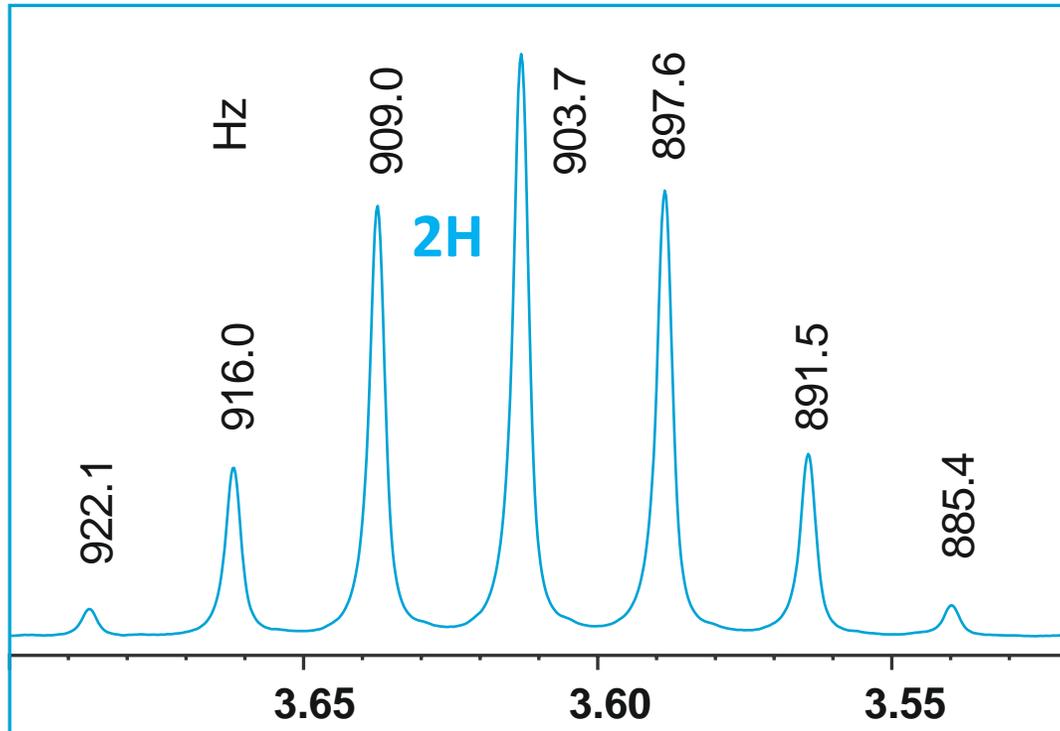


3. Möglichkeit

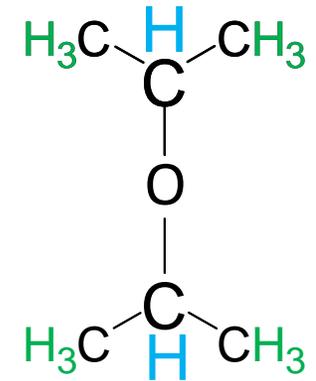




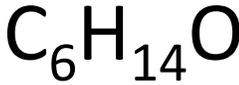
Und woher kommt jetzt das Integral von **2**?



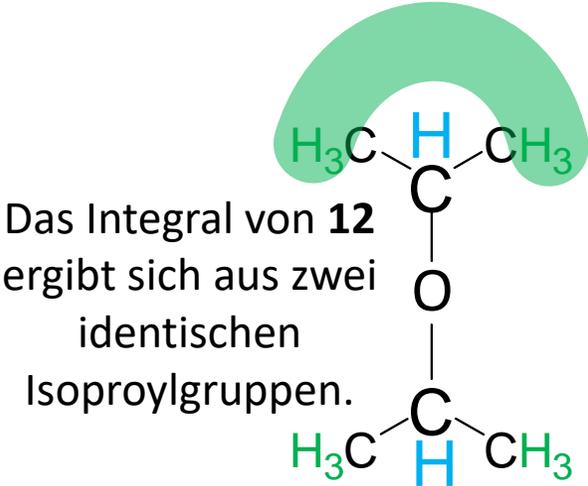
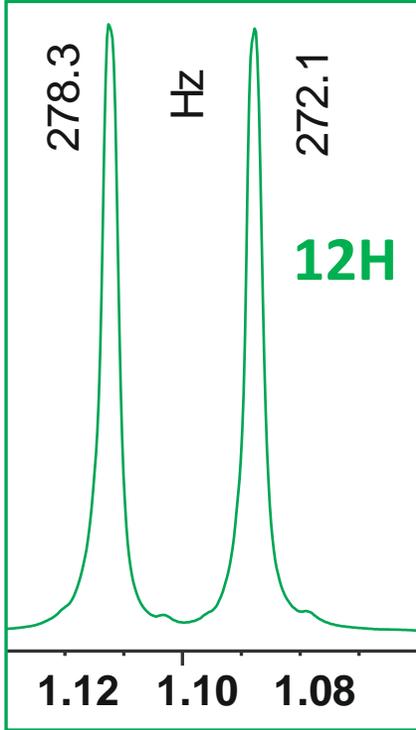
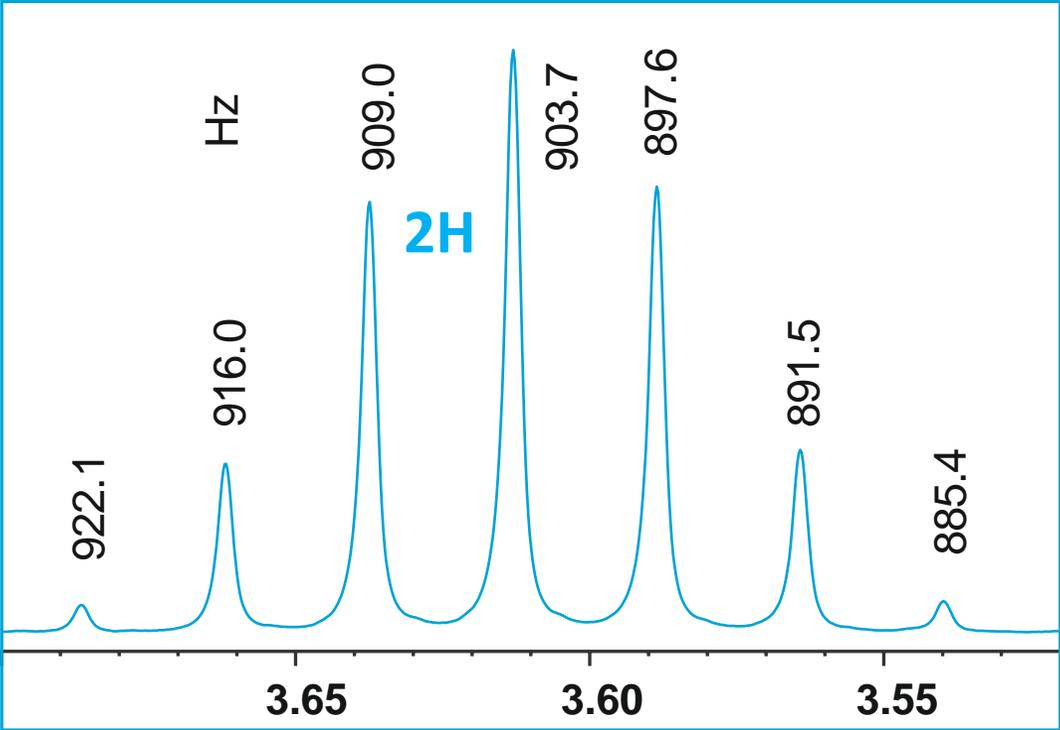
Jetzt fehlt nur noch ein O-Atom, um die Summenformel zu erreichen. Der Sauerstoff passt zwischen die zwei Isopropylfragmente.



Das Integral von **2** erhält man mit einem zweiten identischen Isopropylfragment.



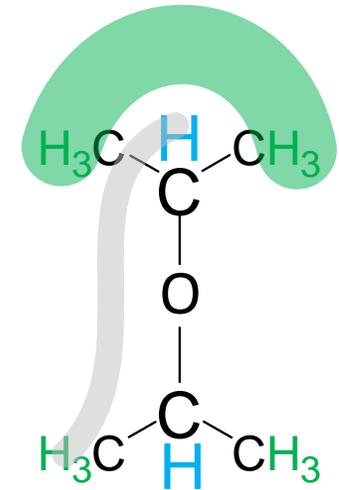
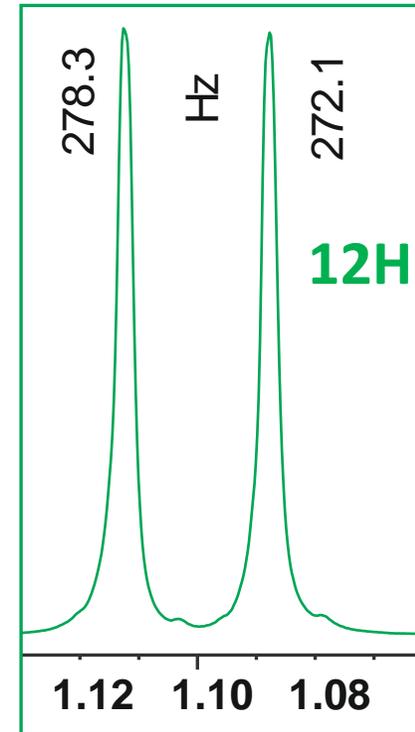
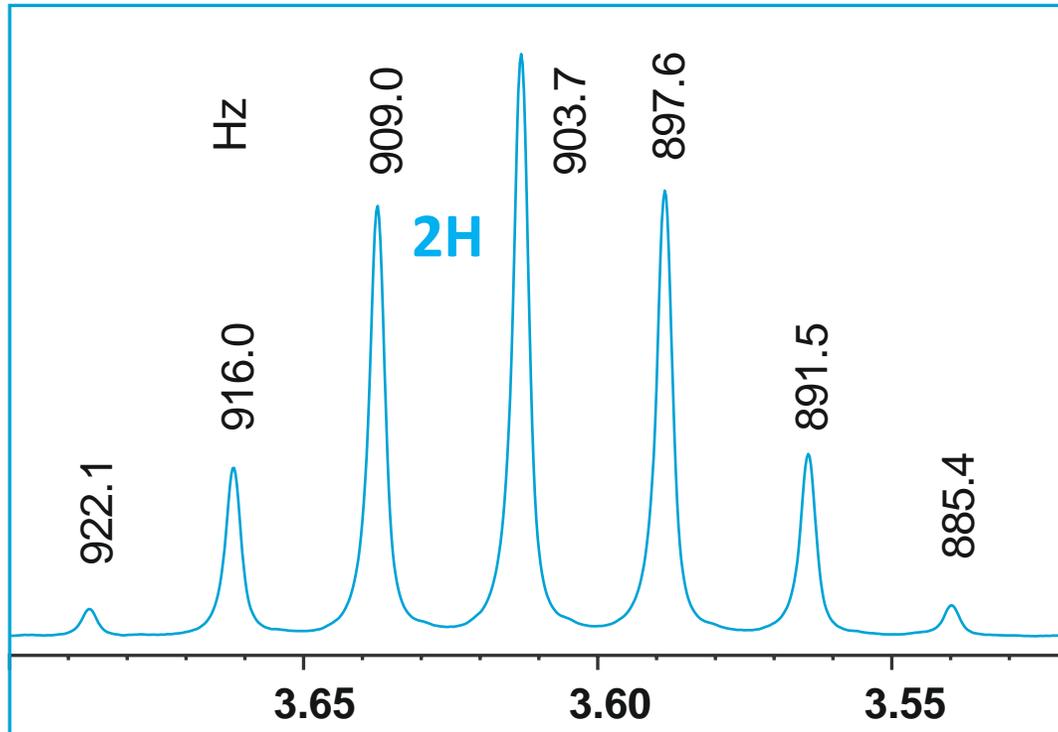
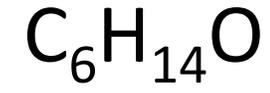
Und was ist mit den Methylgruppen?



Alle sechs Methylprotonen der Isopropylgruppe sind chemisch äquivalent und drei Bindungen vom Nachbarmethinproton entfernt.

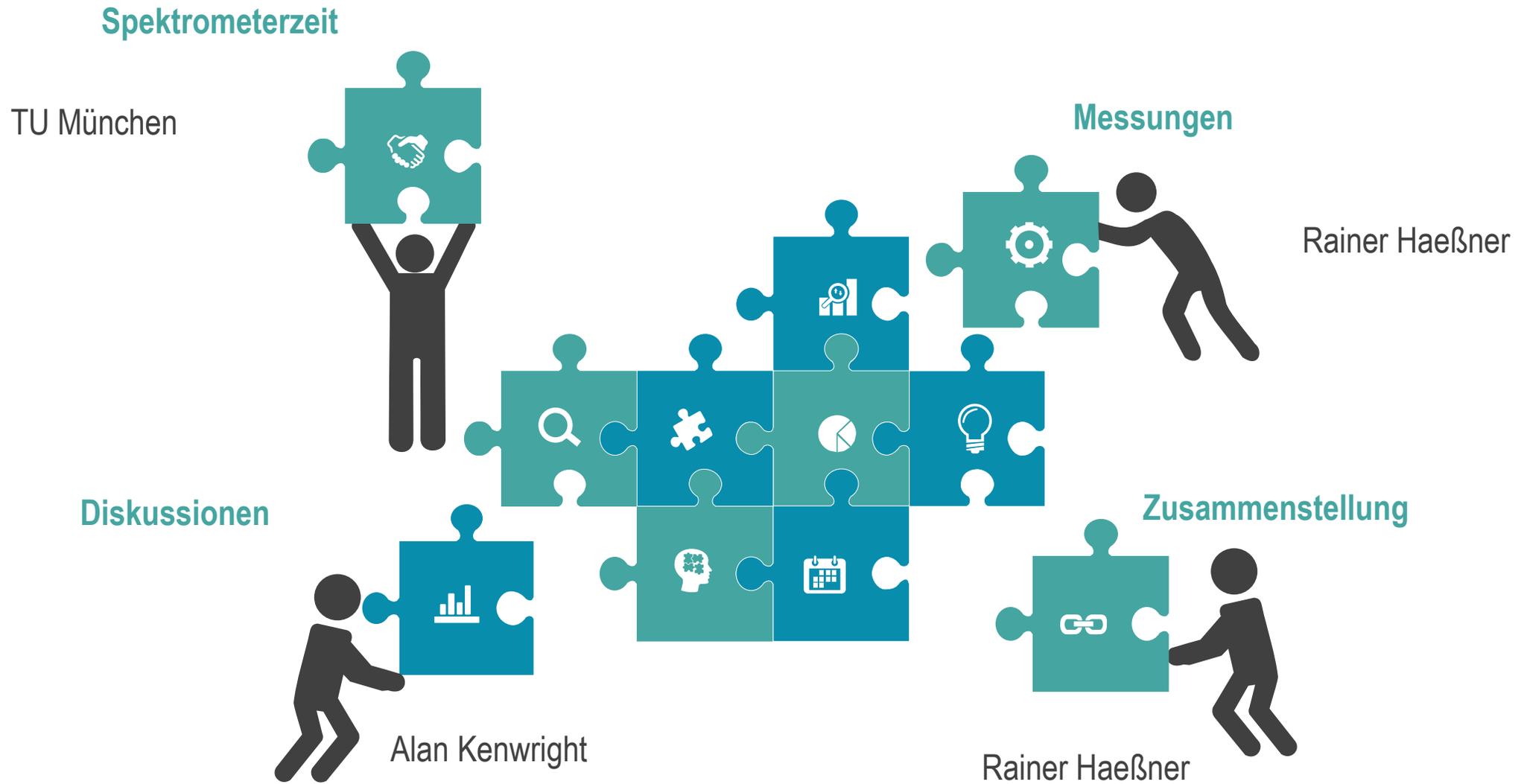
Daraus resultiert ein Dublett.

Für aufmerksame Augen.



Im Prinzip gibt es einen zweiten Kopplungsweg über 5 Bindungen. Normalerweise sieht man nur Kopplungen über bis zu drei Bindungen. Die 5-Bindungs-Kopplung ist hier nicht sichtbar.

Beiträge



[Weitere Beispiele ...](#)