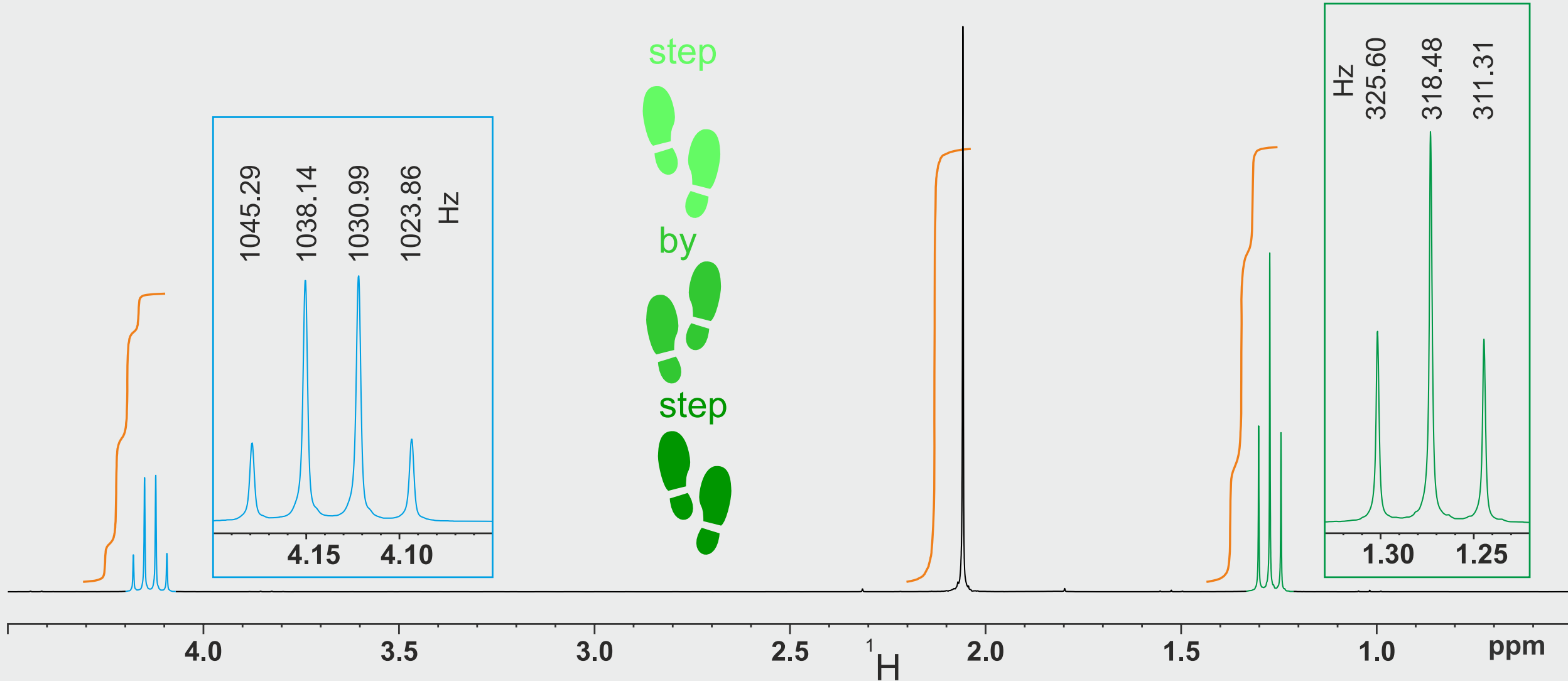


Übung plus Lösung – Schnellüberblick

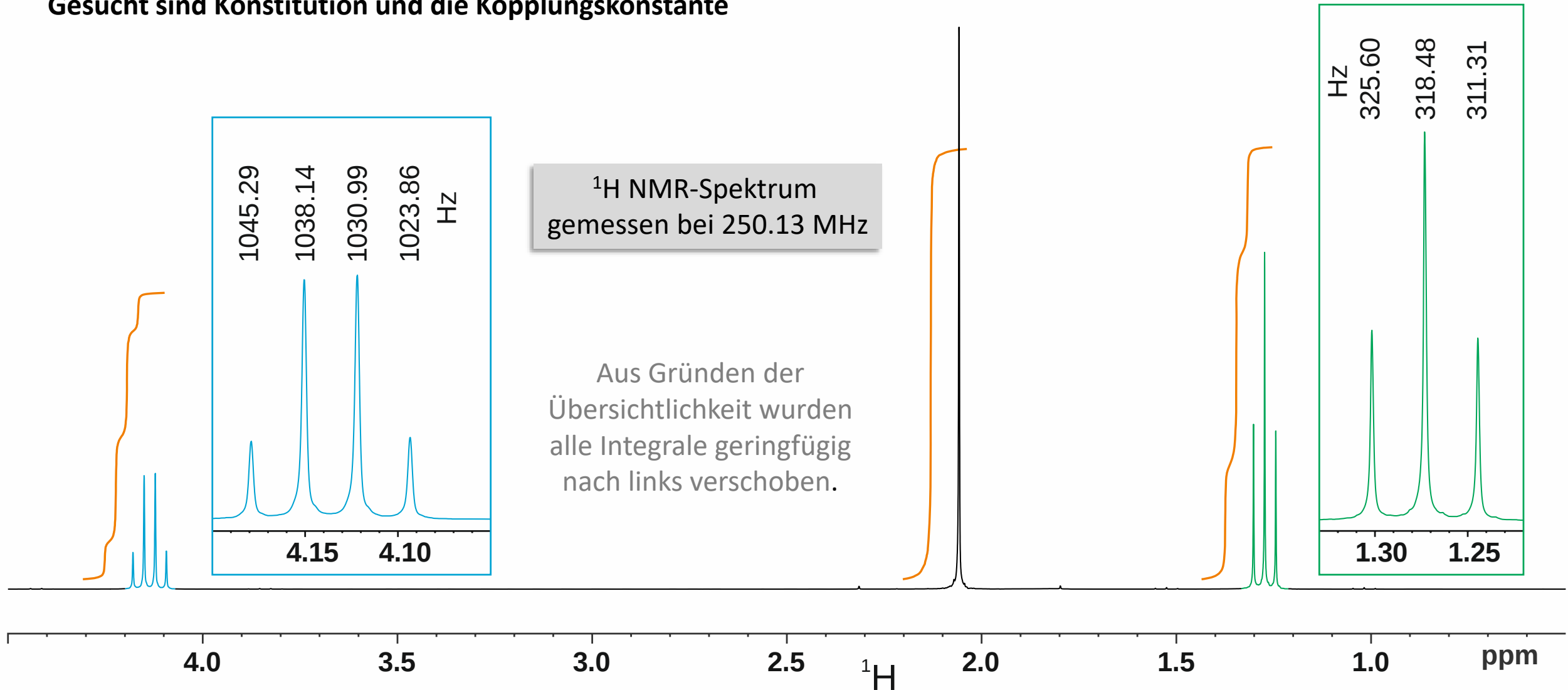
Diese Version soll nur dem schnellen Überblick über die Fragestellung dienen. Sämtliche PowerPoint-Animationen fehlen, in einigen Fällen könnte die Umsetzung von PowerPoint auf PDF merkwürdig aussehen.

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

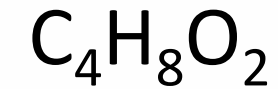


$\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ gelöst in CDCl_3

Gesucht sind Konstitution und die Kopplungskonstante



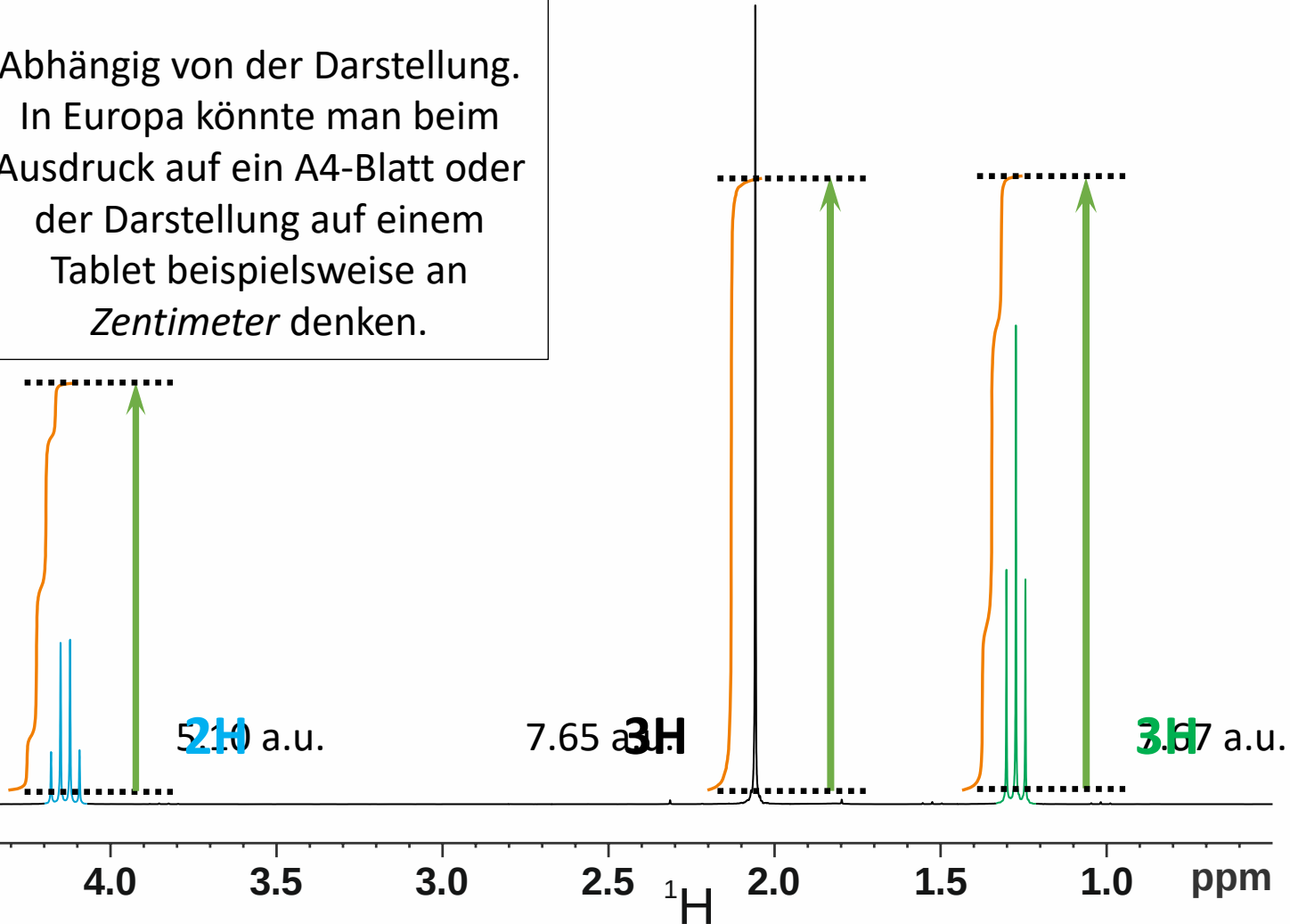
Lösung



a.u. ???

Englisch: *arbitrary units*

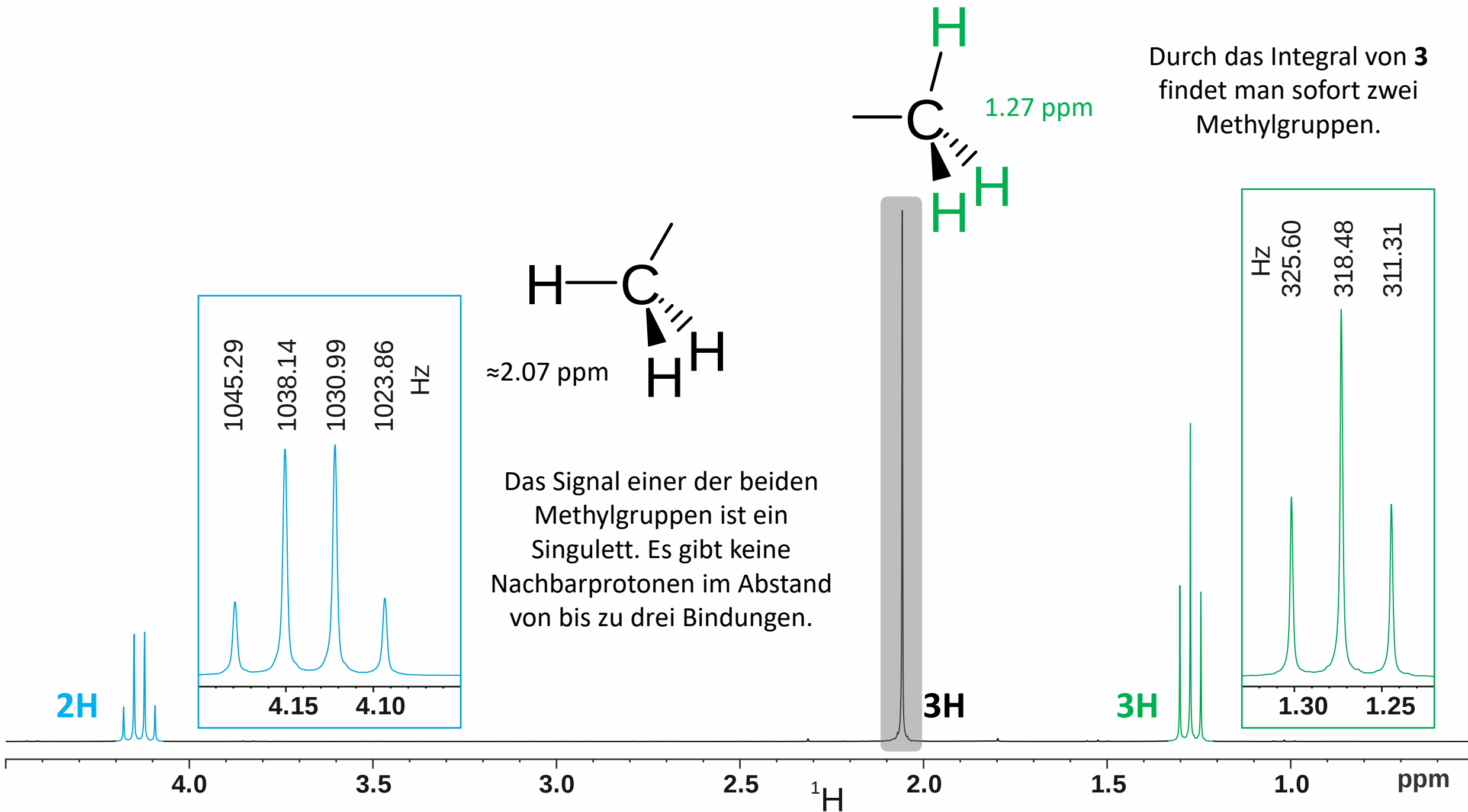
Abhängig von der Darstellung.
In Europa könnte man beim
Ausdruck auf ein A4-Blatt oder
der Darstellung auf einem
Tablet beispielsweise an
Zentimeter denken.



- ein Doppelbindungsäquivalent
- drei Signalgruppen
- Integration:

Tieffeldmultiplett	-	5.10 a.u.
Singulett bei 2.1 ppm	-	7.65 a.u.
Hochfeldmultiplett	-	7.67 a.u.
Alle 8 Protonen	-	20.42 a.u.
1 proton	$\triangleq$	2.55 a.u.

Tieffeldmultiplett	$\triangleq$	2.00 H
Singulett bei 2.1 ppm	$\triangleq$	2.99 H
Hochfeldmultiplett	$\triangleq$	3.01 H

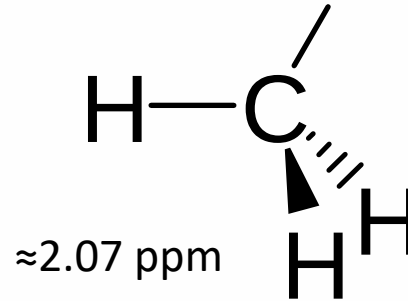
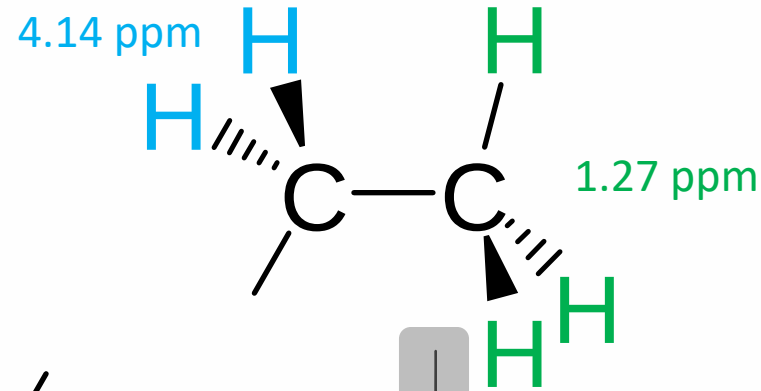


Durch das Integral von **3** findet man sofort zwei Methylgruppen.

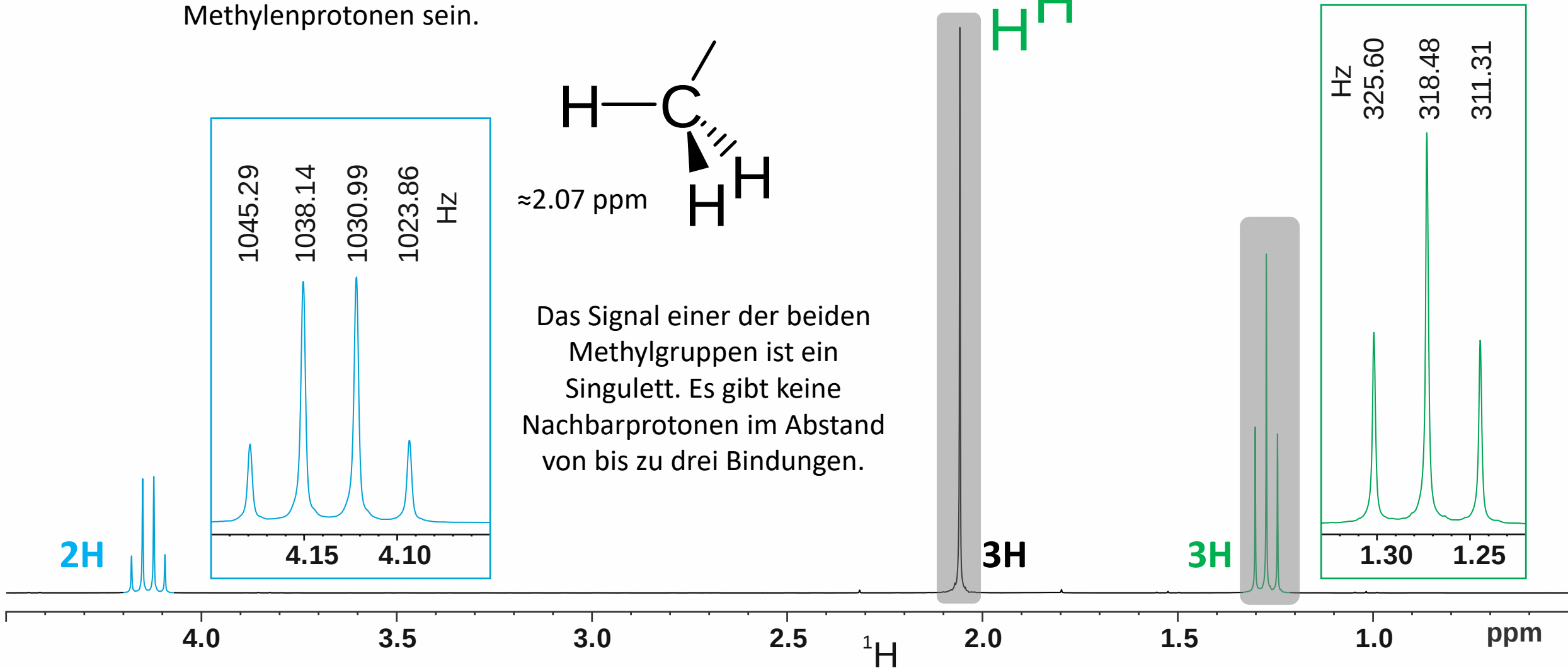
Das Signal einer der beiden Methylgruppen ist ein Singulett. Es gibt keine Nachbarprotonen im Abstand von bis zu drei Bindungen.

Gemäß der (n-1)-Regel befinden sich zwei äquivalente Protonen maximal drei Bindungen entfernt von dieser **Methylgruppe**.

Weil es nur eine freie Valenz gibt, müssen dies Methylenprotonen sein.

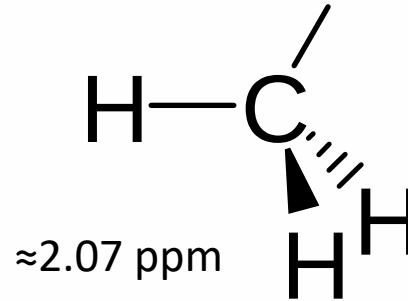
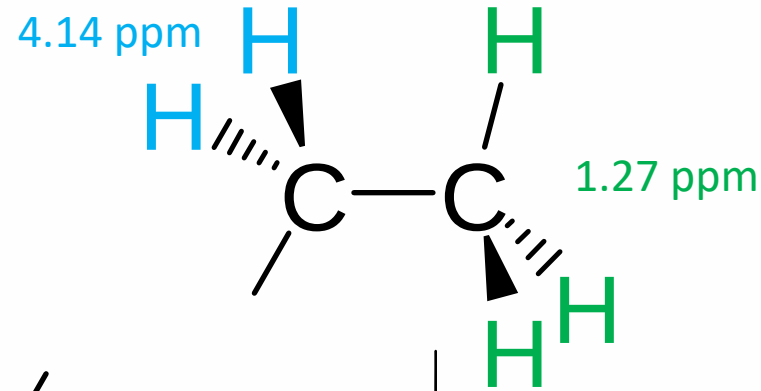


Das Signal einer der beiden Methylgruppen ist ein Singulett. Es gibt keine Nachbarprotonen im Abstand von bis zu drei Bindungen.

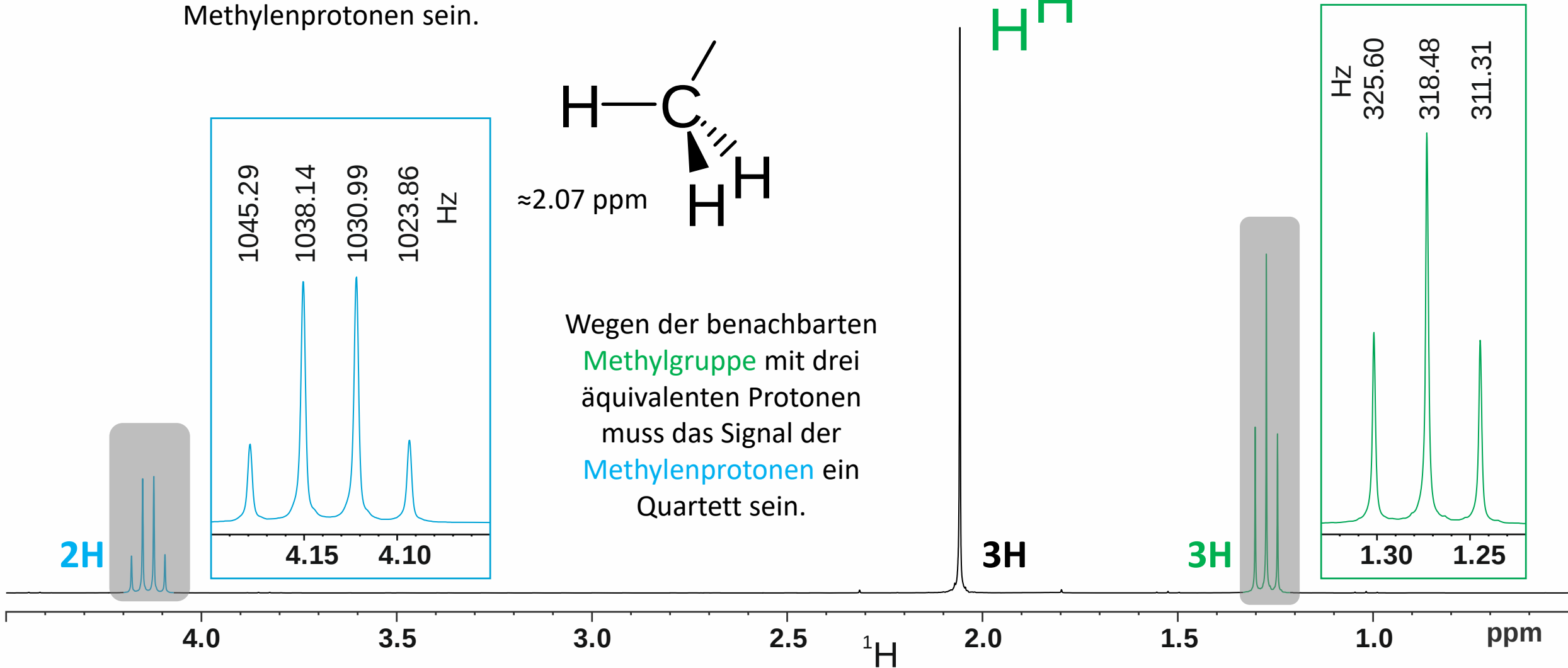


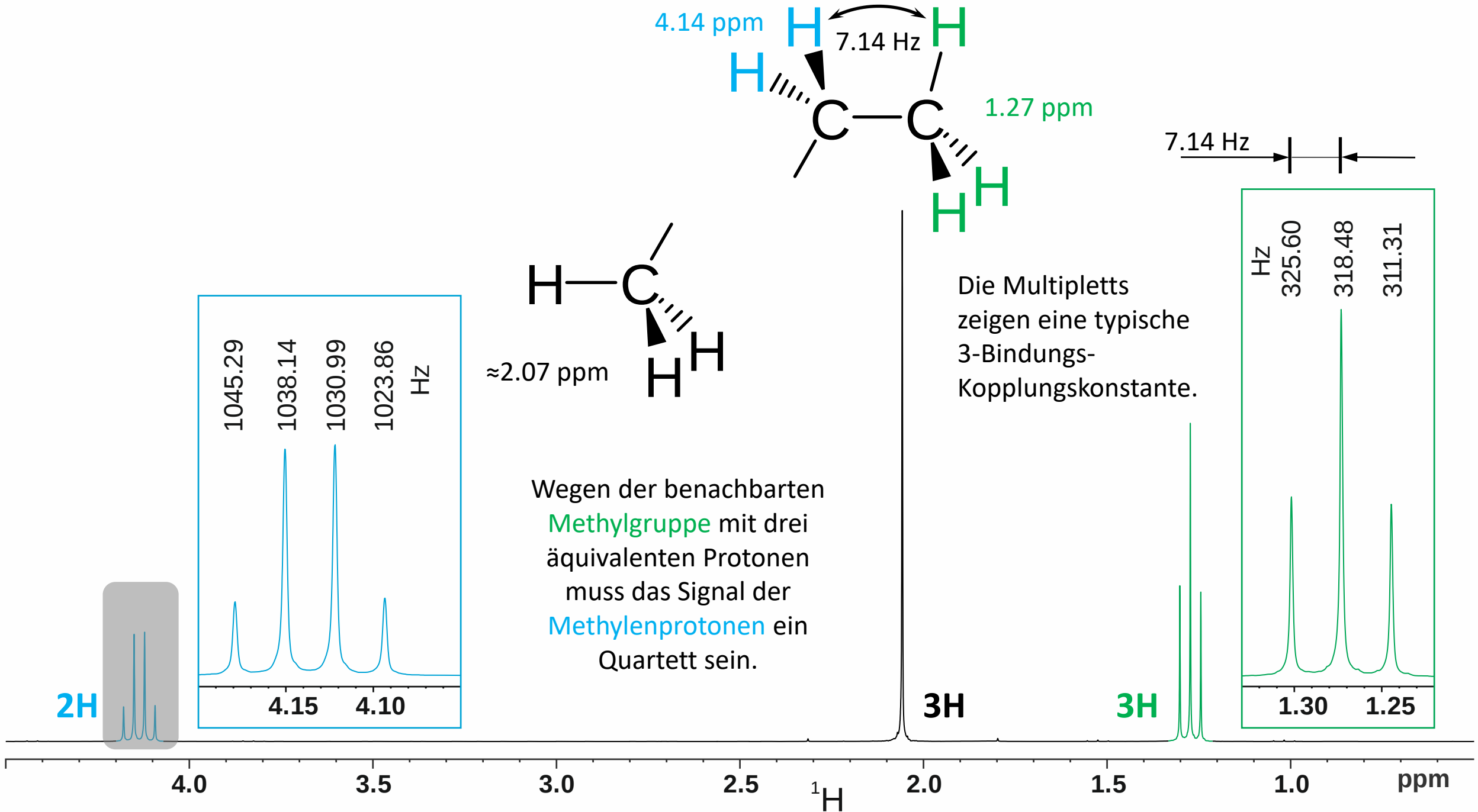
Gemäß der (n-1)-Regel befinden sich zwei äquivalente Protonen maximal drei Bindungen entfernt von dieser **Methylgruppe**.

Weil es nur eine freie Valenz gibt, müssen dies Methylenprotonen sein.

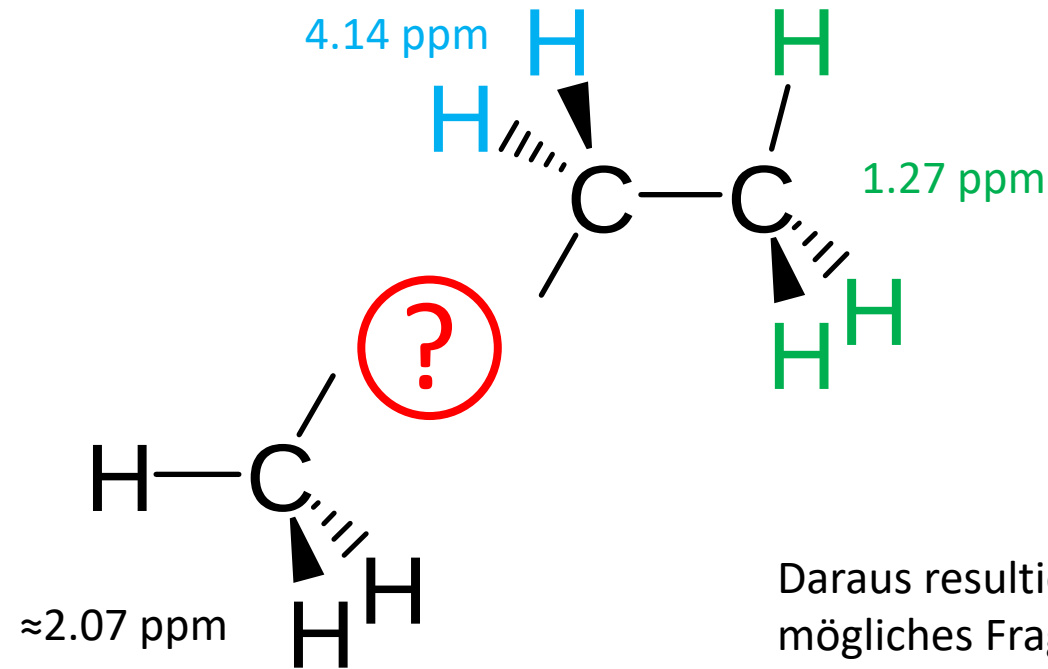


Wegen der benachbarten **Methylgruppe** mit drei äquivalenten Protonen muss das Signal der **Methylenprotonen** ein Quartett sein.

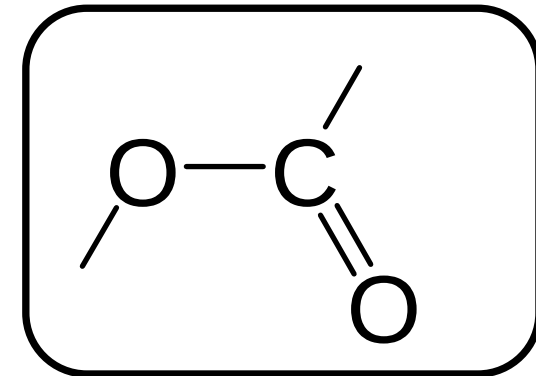




Es verbleiben ein Kohlenstoff- und zwei Sauerstoffatome sowie ein Doppelbindungsäquivalent, anzuordnen zwischen den zwei freien Valenzen.



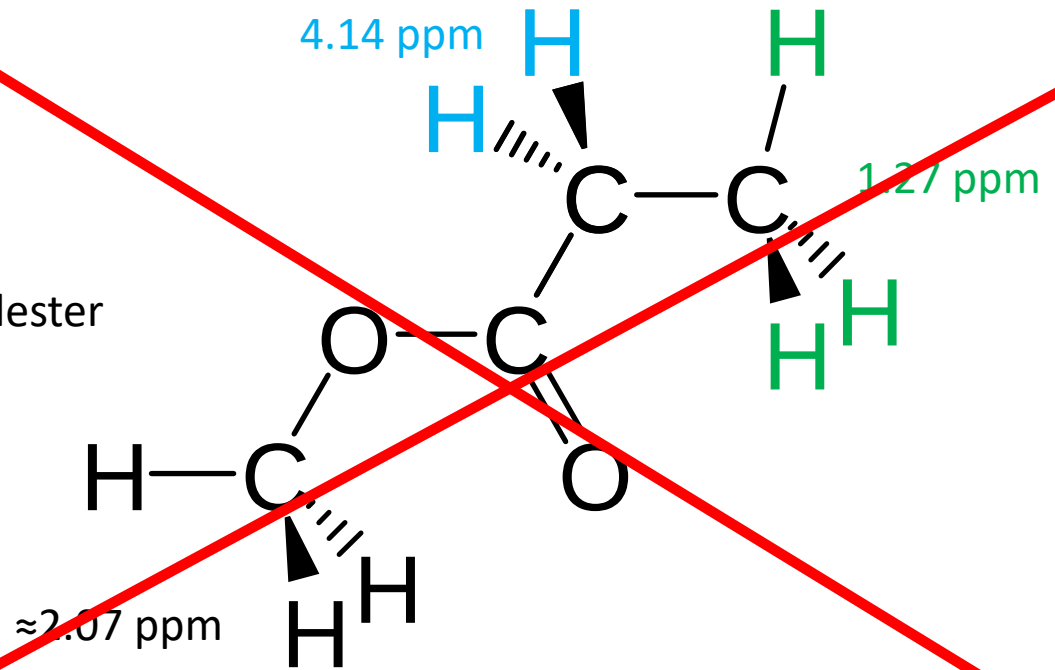
Daraus resultiert ein einziges mögliches Fragment:



Es gibt nur zwei Möglichkeiten.

Aber welche der beiden möglichen Anordnungen ist richtig?

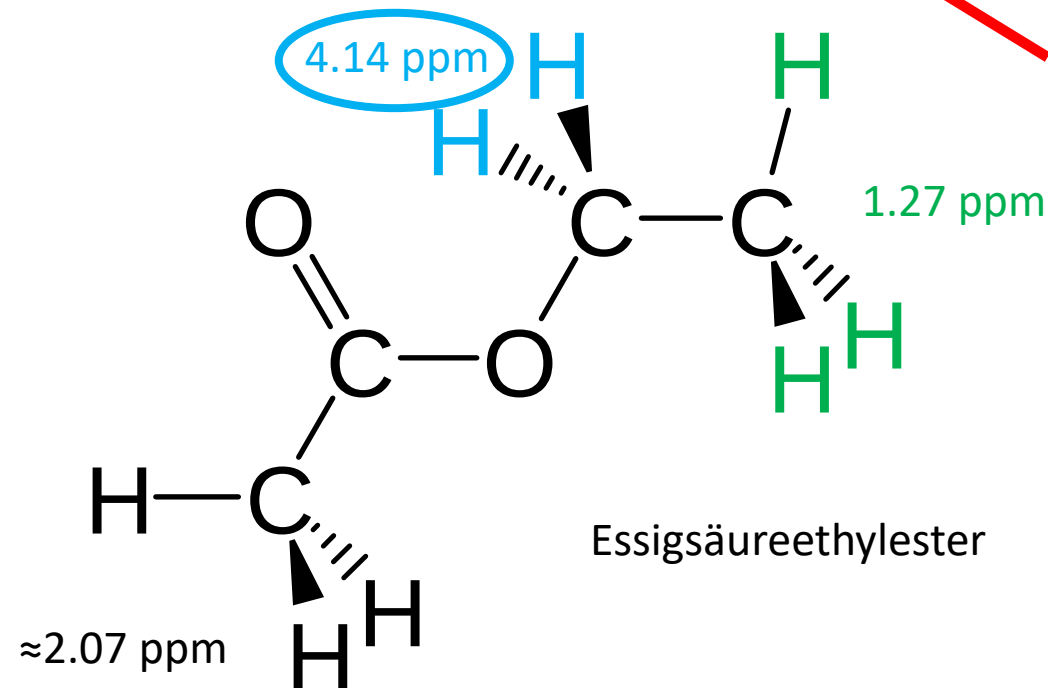
Propionsäuremethylester



oder

Basis	0,23
-CH ₃	0,47
-COOR	1,55

Summe 2,25



Essigsäureethylester

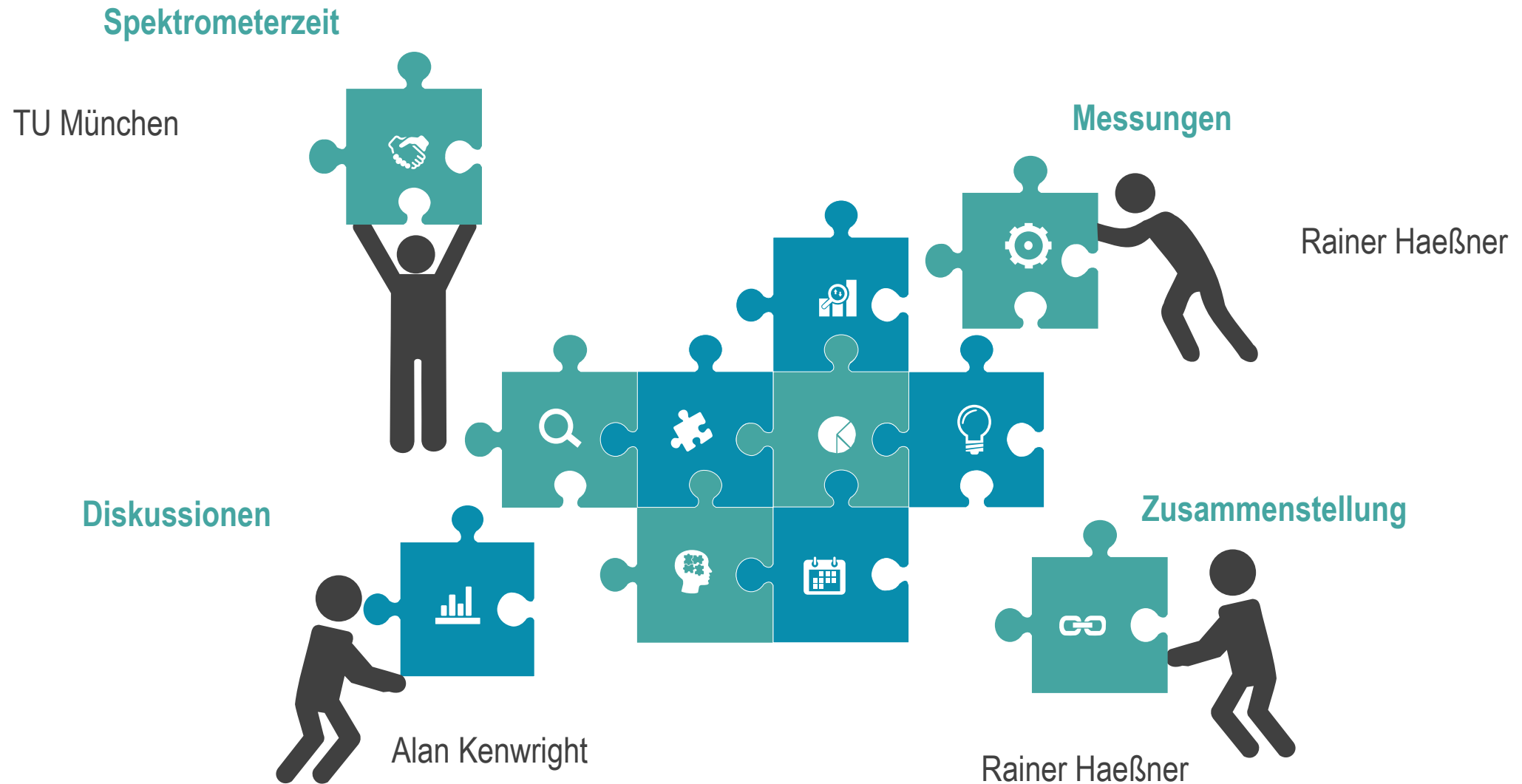
Basis	0,23
-CH ₃	0,47
-OCOR	3,13

Summe 3,83

Die Schoolery-Regeln zur Abschätzung der chemischen Verschiebung von Methylenprotonen sind einen Versuch wert.

<https://de.wikipedia.org/wiki/Schoolery-Regel>

Beiträge



[Weitere Beispiele ...](#)