

# 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.

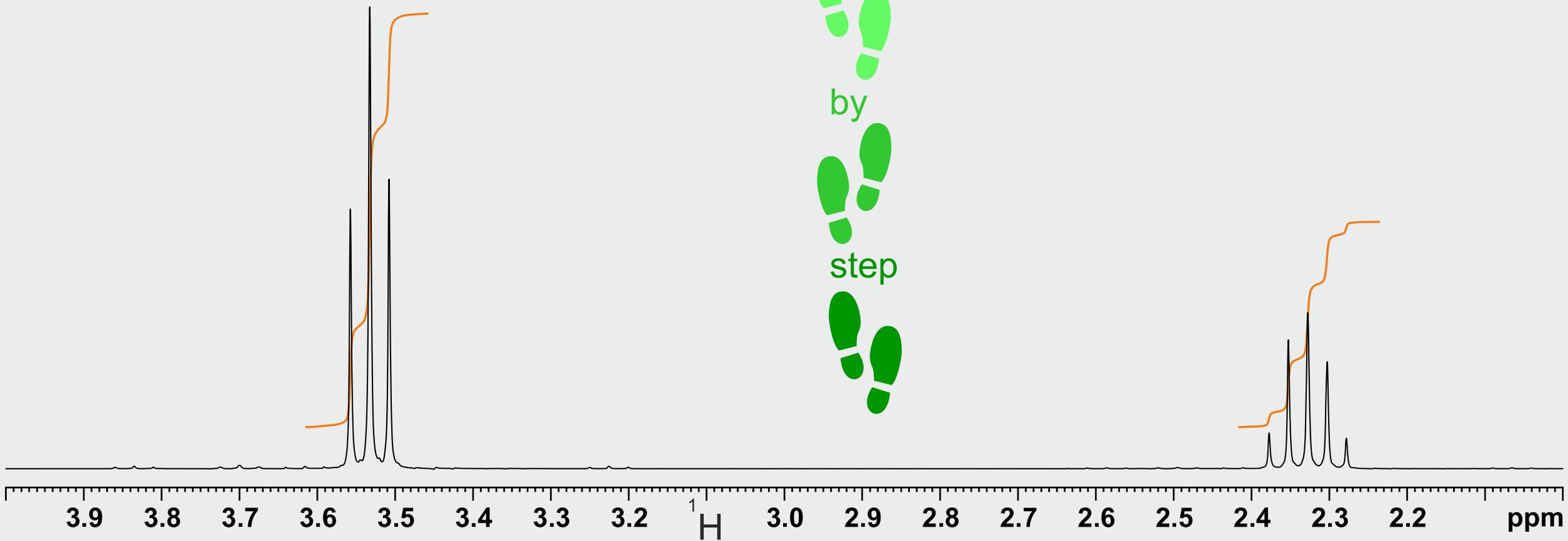
Hz  
889.86  
883.63  
877.44

step

by

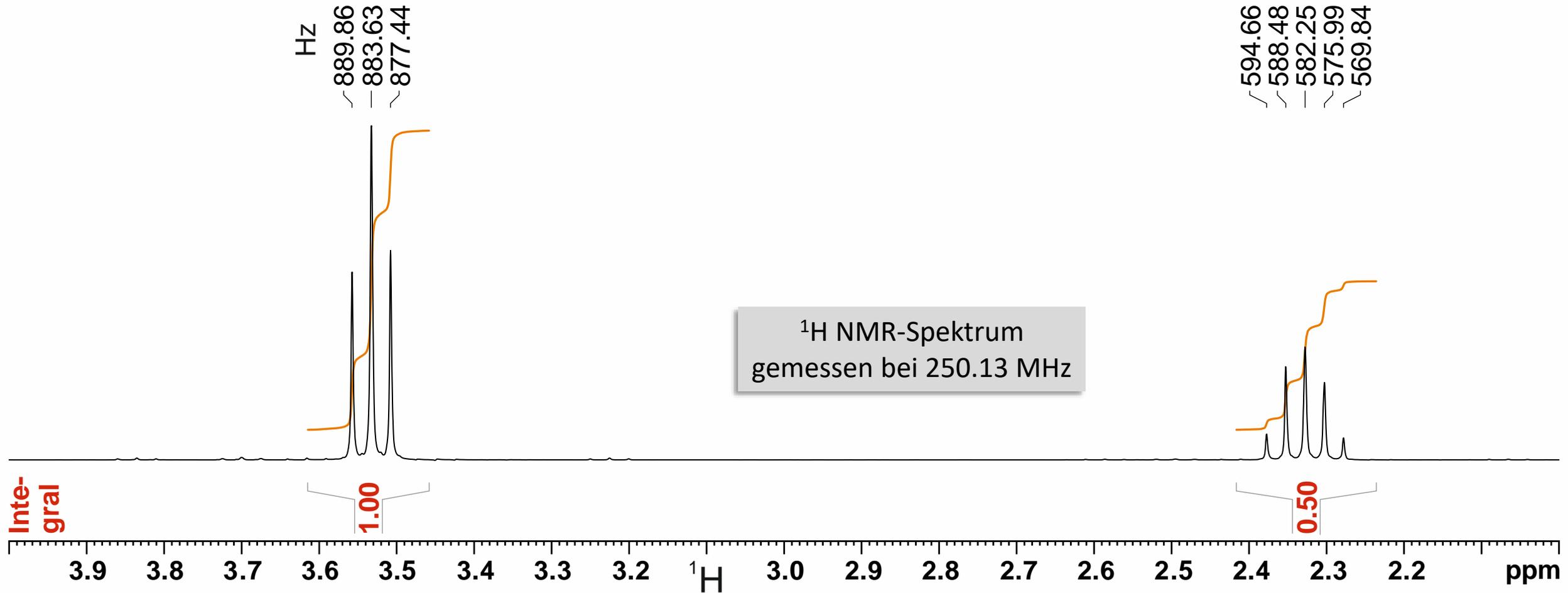
step

594.66  
588.48  
582.25  
575.99  
569.84



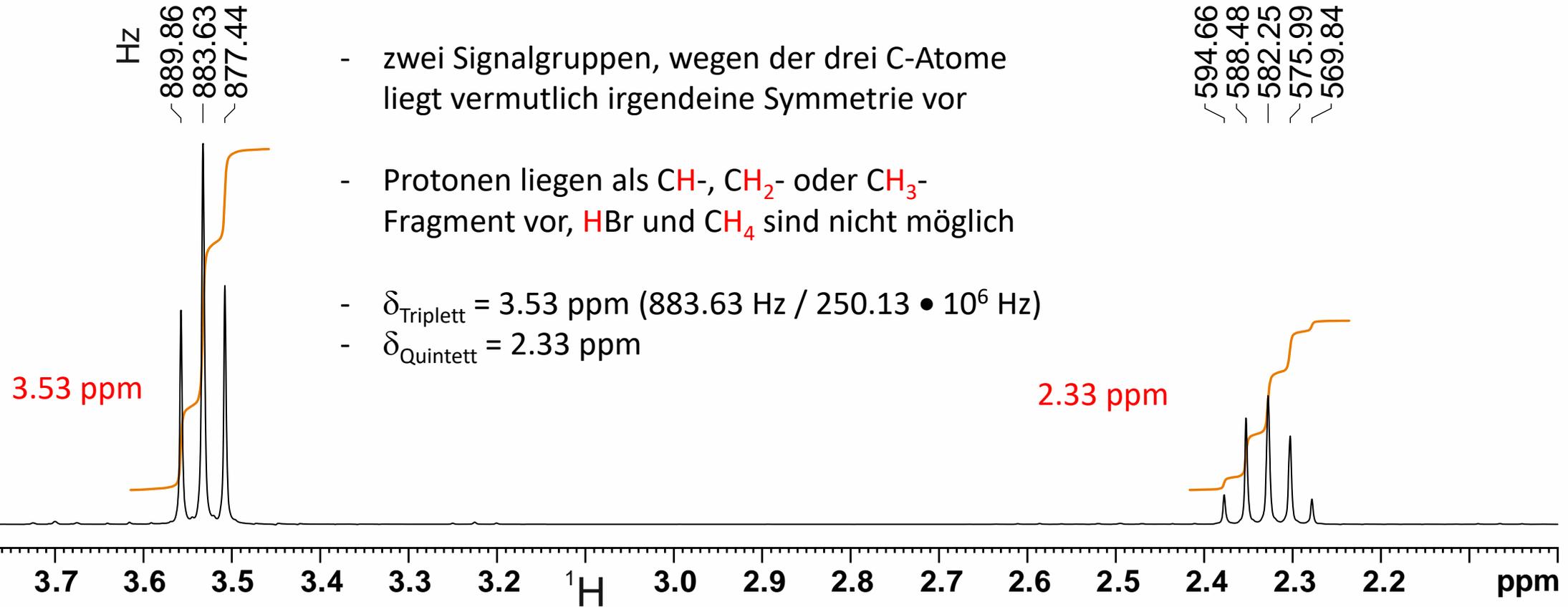
# $C_3H_6Br_2$ gelöst in $CDCl_3$

Ermitteln Sie die Konstitution!



# Lösung

## Teil 1 - Basisüberlegungen



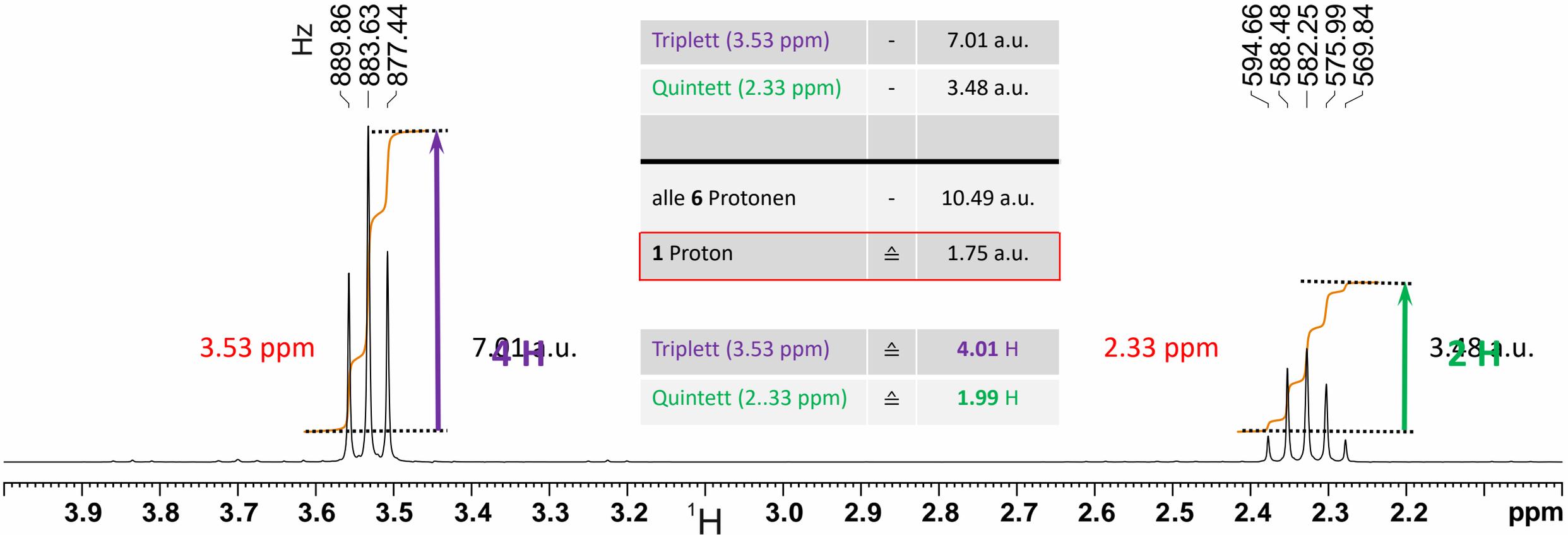
- keine Doppelbindungsäquivalente
- zwei Signalgruppen, wegen der drei C-Atome liegt vermutlich irgendeine Symmetrie vor
- Protonen liegen als  $\text{CH-}$ ,  $\text{CH}_2\text{-}$  oder  $\text{CH}_3\text{-}$  Fragment vor,  $\text{HBr}$  und  $\text{CH}_4$  sind nicht möglich
- $\delta_{\text{Triplett}} = 3.53 \text{ ppm}$  ( $883.63 \text{ Hz} / 250.13 \cdot 10^6 \text{ Hz}$ )
- $\delta_{\text{Quintett}} = 2.33 \text{ ppm}$

# Lösung

## Teil 2 - 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.



# Lösung

## Teil 3 - Strukturfragmente

Die Verbindung enthält keine Doppelbindungsäquivalente und besteht nur aus C, H und Br.

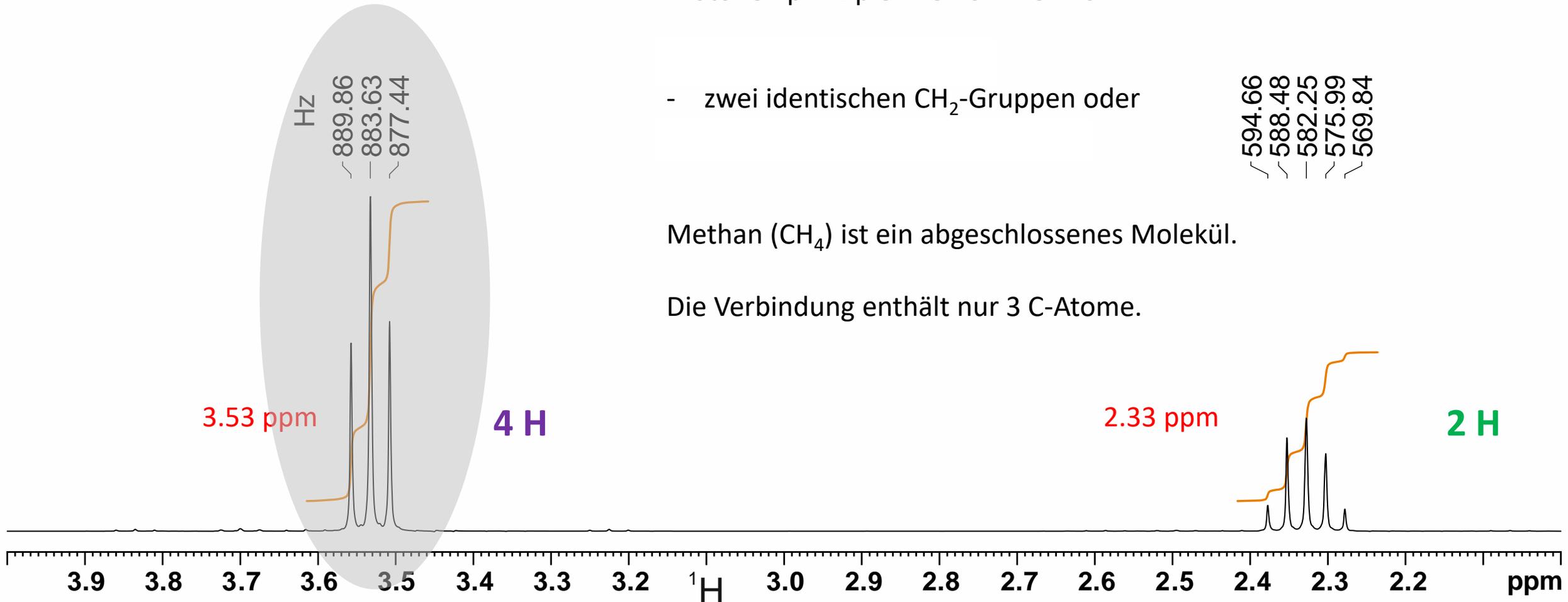
Mit diesen Bausteinen kann ein Multiplett mit 4 Protonen prinzipiell herkommen von

- zwei identischen CH<sub>2</sub>-Gruppen oder

594.66  
588.48  
582.25  
575.99  
569.84

Methan (CH<sub>4</sub>) ist ein abgeschlossenes Molekül.

Die Verbindung enthält nur 3 C-Atome.



# Lösung

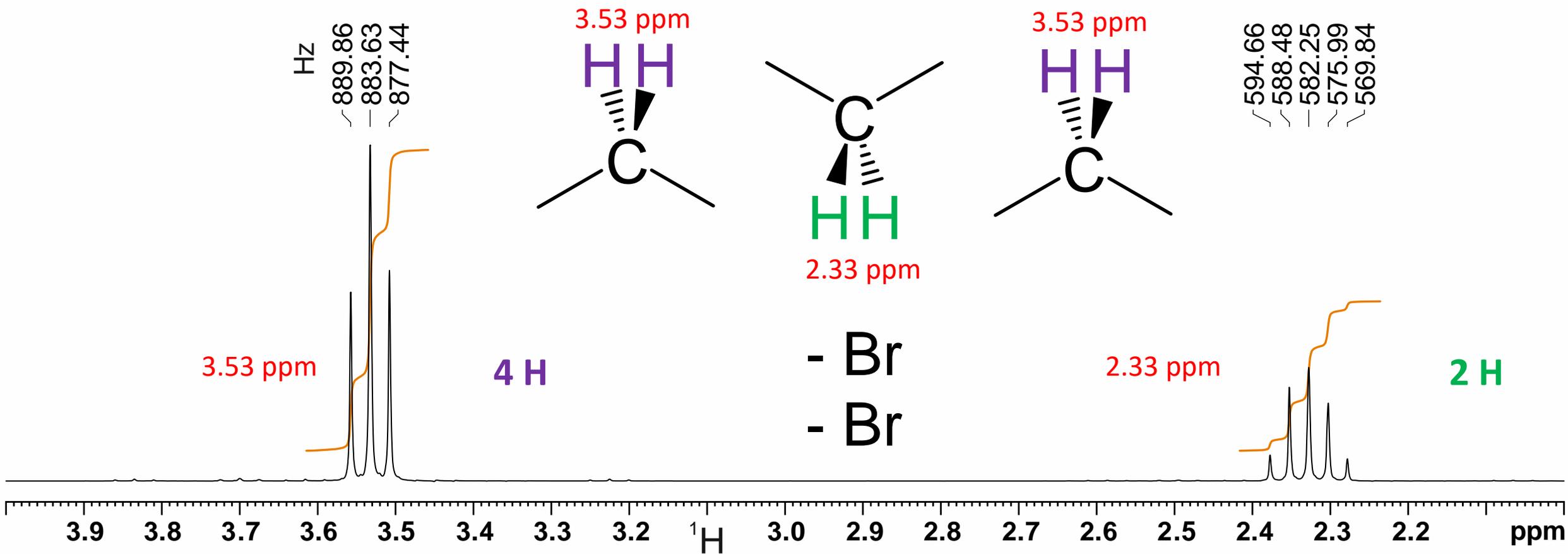
## Teil 3 - Strukturfragmente

Summenformel -  $C_3H_6Br_2$

bisher gefunden -  $C_2H_4$

noch zuzuordnen -  $CH_2Br_2$

HBr – als abgeschlossenes Molekül – ist nicht möglich



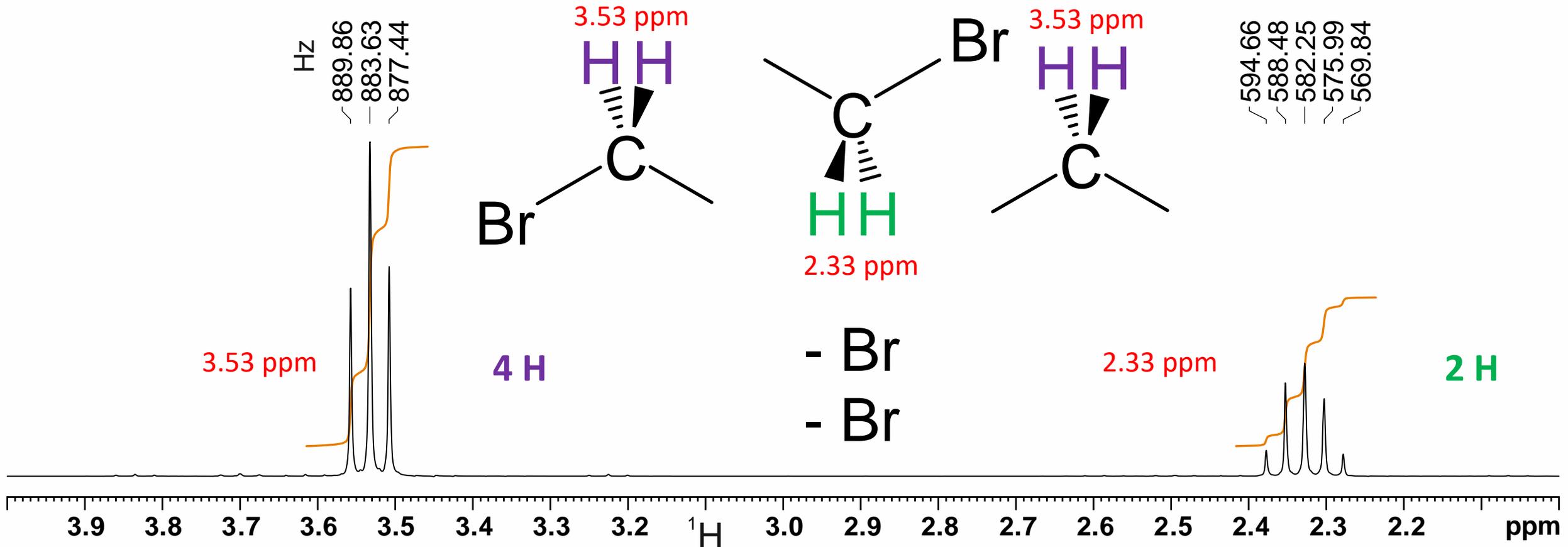
# Lösung

## Teil 4 – Wo ist Br gebunden?

Beide Br an einem C-Atom ergäbe die fertige Verbindung  $\text{CH}_2\text{Br}_2$

In dieser Version sind die zwei Fragmente mit den Protonensignalen bei **3.53 ppm** nicht mehr symmetrisch.

Es bleibt eine Möglichkeit ...

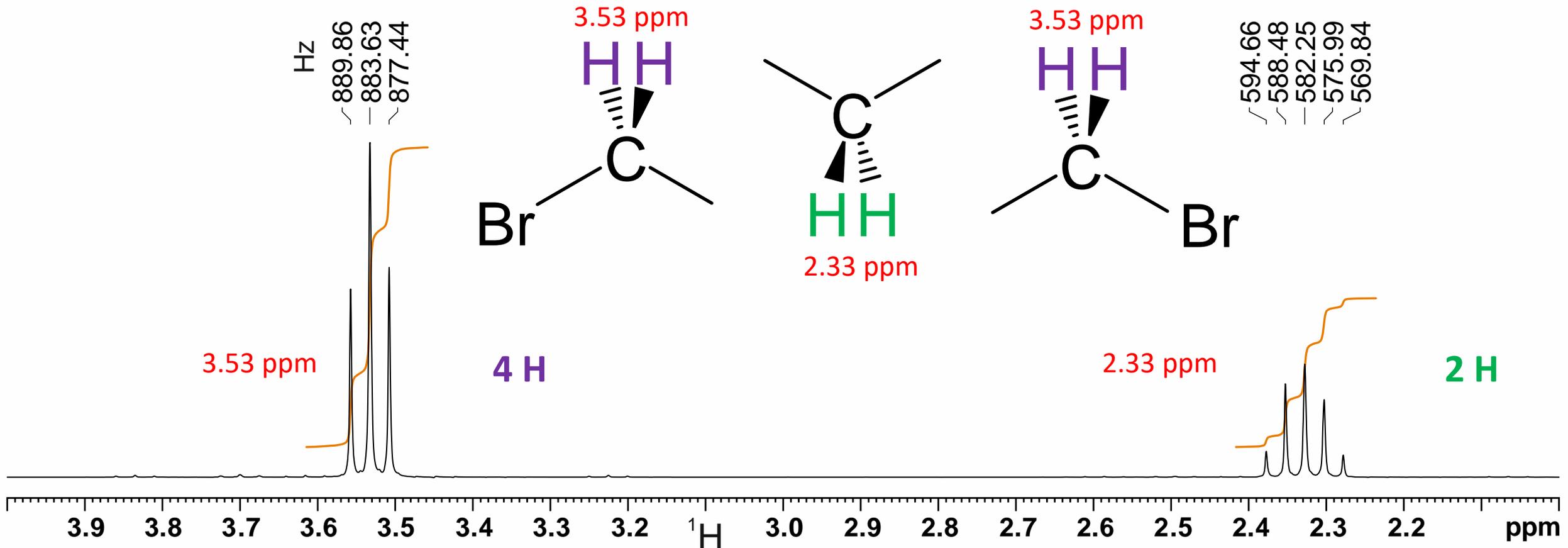


# Lösung

## Teil 4 – Wo ist Br gebunden?

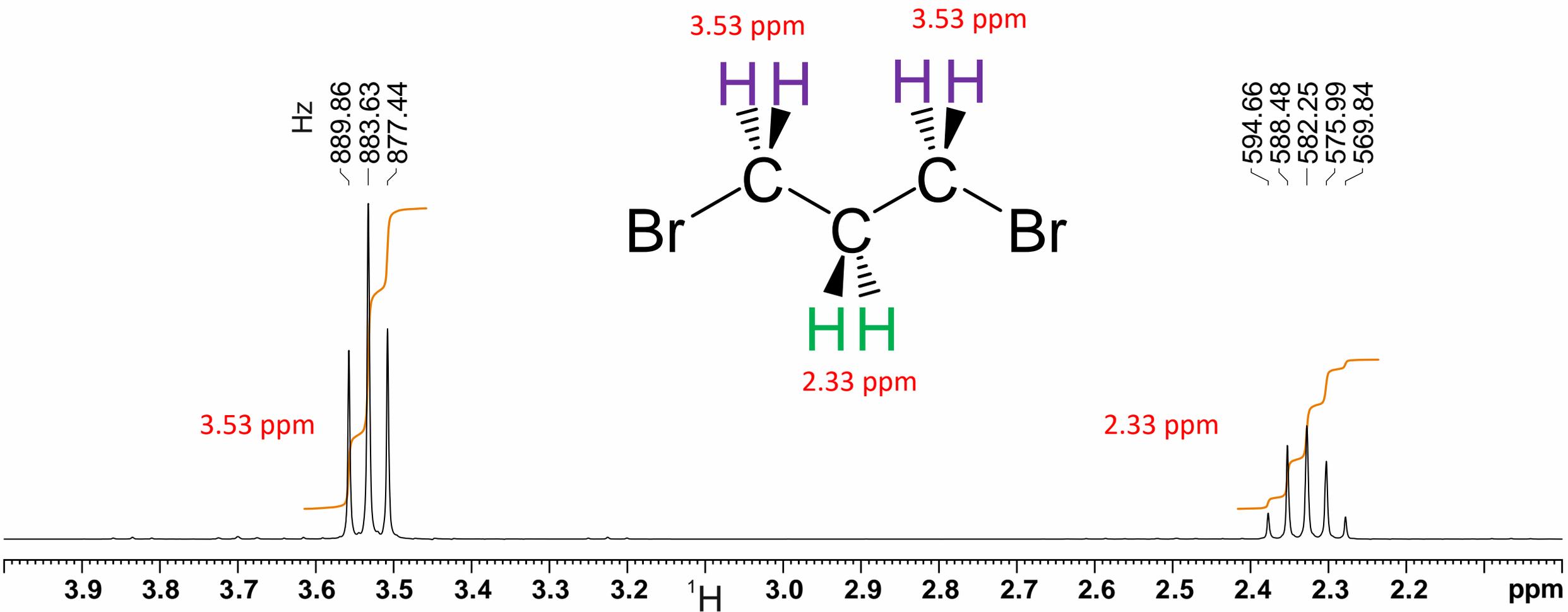
Jetzt sind die beiden CH<sub>2</sub>-Gruppen mit Signalen bei 3.53 ppm wieder symmetrisch.

Für die Kombination aller gefundenen Fragmente besteht eine einzige Möglichkeit.



# Lösung

Teil 4 – Wo ist Br gebunden?

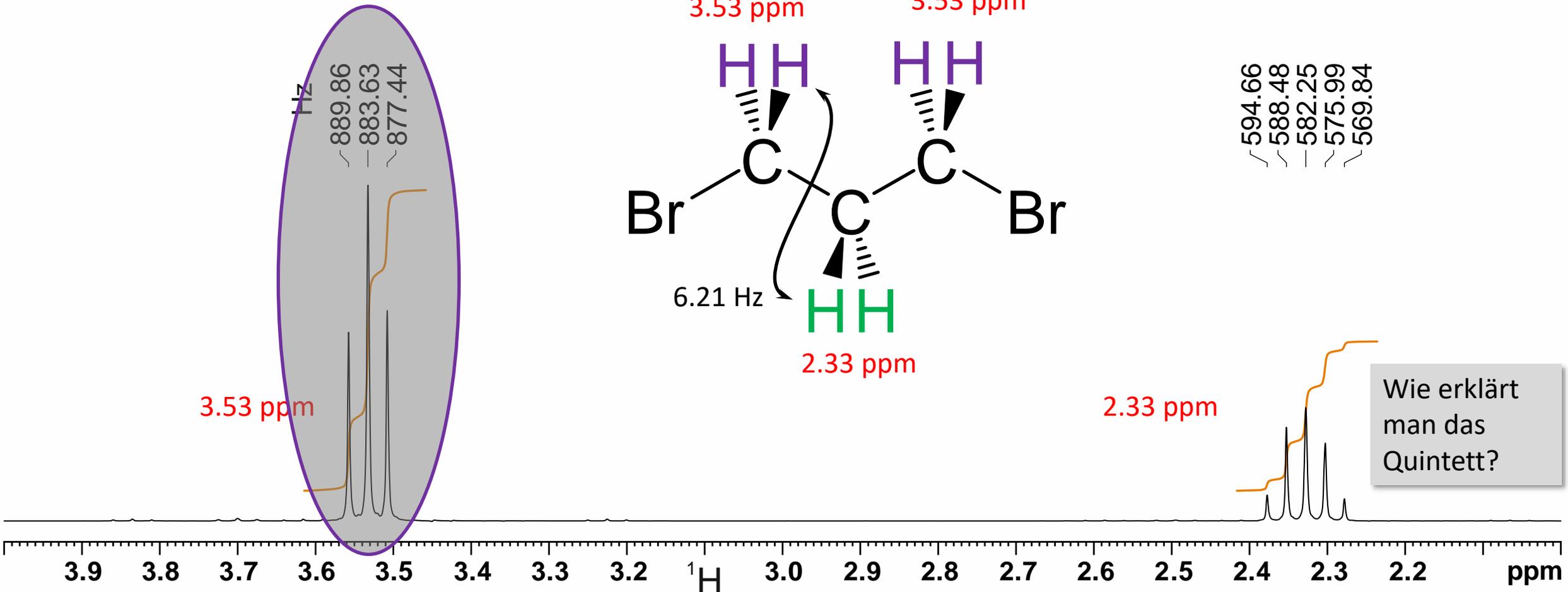


# Lösung

## Teil 5 – Multipletts und Kopplungskonstanten

Das **Triplet** bei **3.53 ppm** ist leicht durch die beiden **äquivalenten Nachbarprotonen** erklärt. Die Nachbarschaft gilt für die Protonen in 1- und in 3-Stellung in gleicher Weise.

Aus dem Triplet lässt sich leicht die Kopplungskonstante ermitteln  
(  $889.86 \text{ Hz} - 877.44 \text{ Hz} / 2$  )

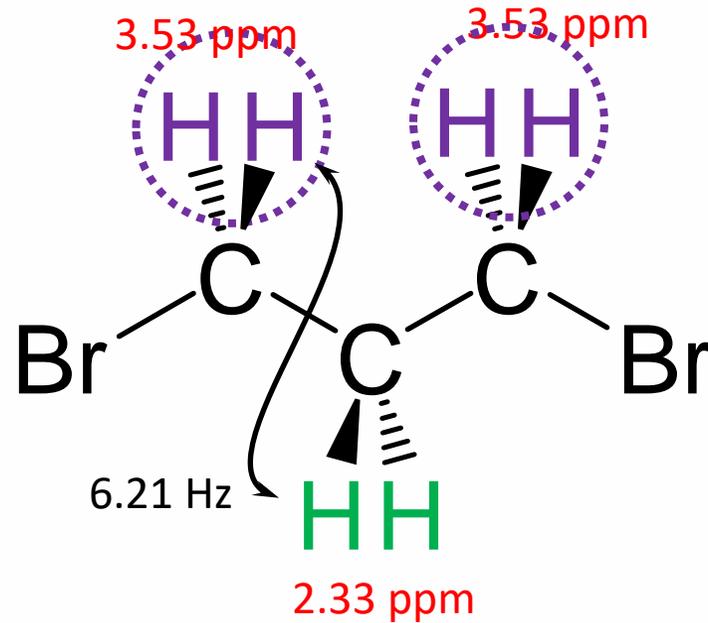


# Lösung

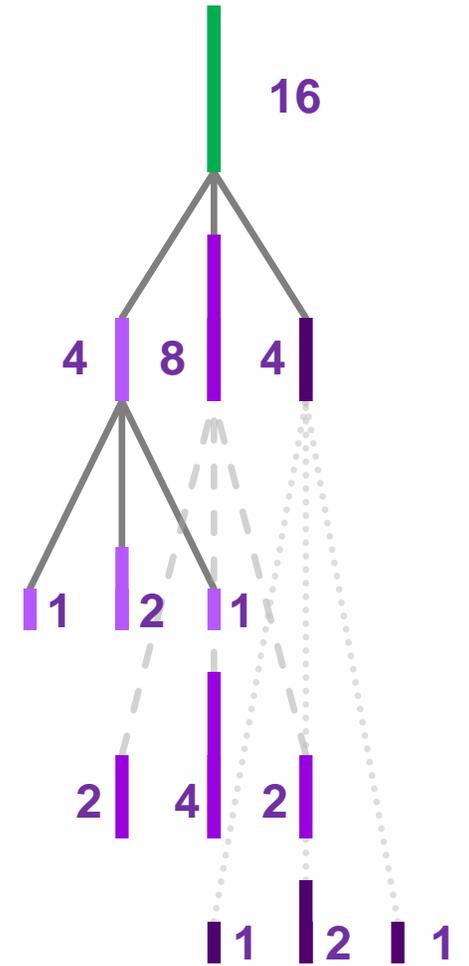
## Teil 5 – Multipletts und Kopplungskonstanten

Die Protonen bei 2.33 ppm verfügen über vier äquivalente Nachbarprotonen. Daraus resultiert ein Quintett. Die Nachbarprotonen müssen nicht notwendigerweise am gleichen Kohlenstoffatom gebunden sein.

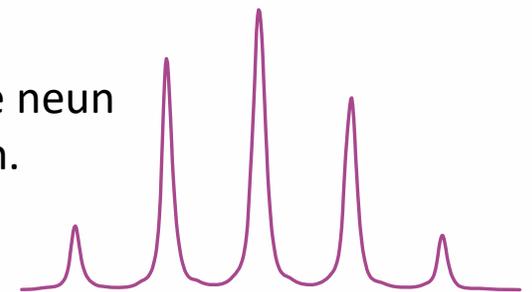
Falls diese Sichtweise zunächst Schwierigkeiten bereitet, kann man sich das Multiplett auch als Triplet von Triplets mit gleichen Kopplungskonstanten vorstellen. Beginnen wir mit der Wechselwirkung mit den linken Nachbarprotonen.



Durch die rechten Nachbarprotonen entsteht aus jeder der drei Linien ein neues Triplet.



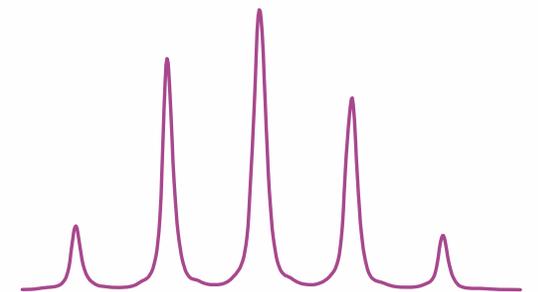
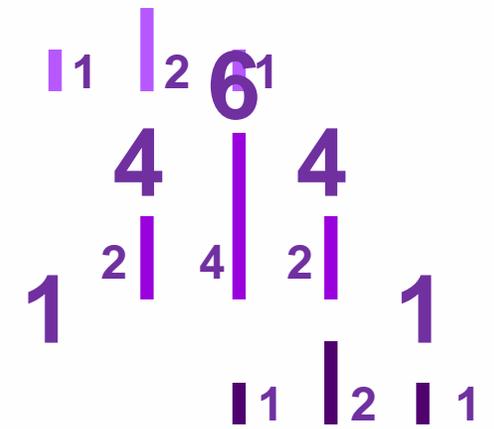
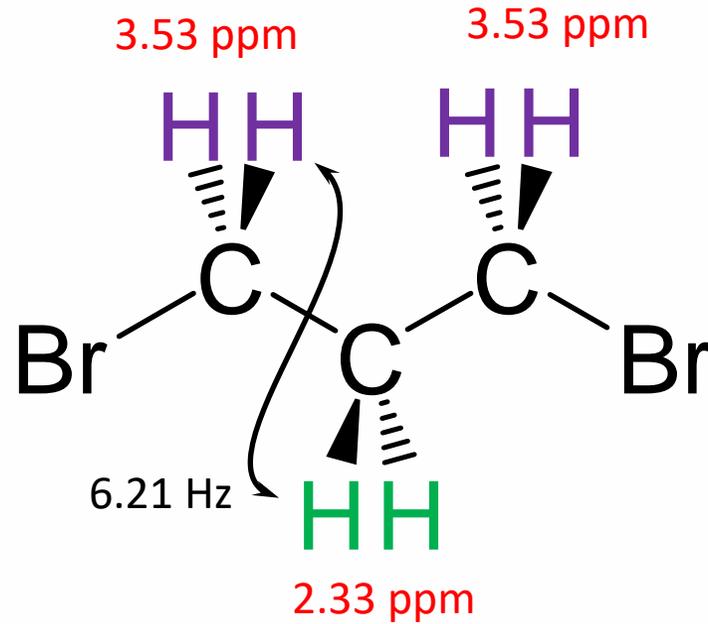
Und jetzt müssen wir die neun Linien nur noch addieren.



# Lösung

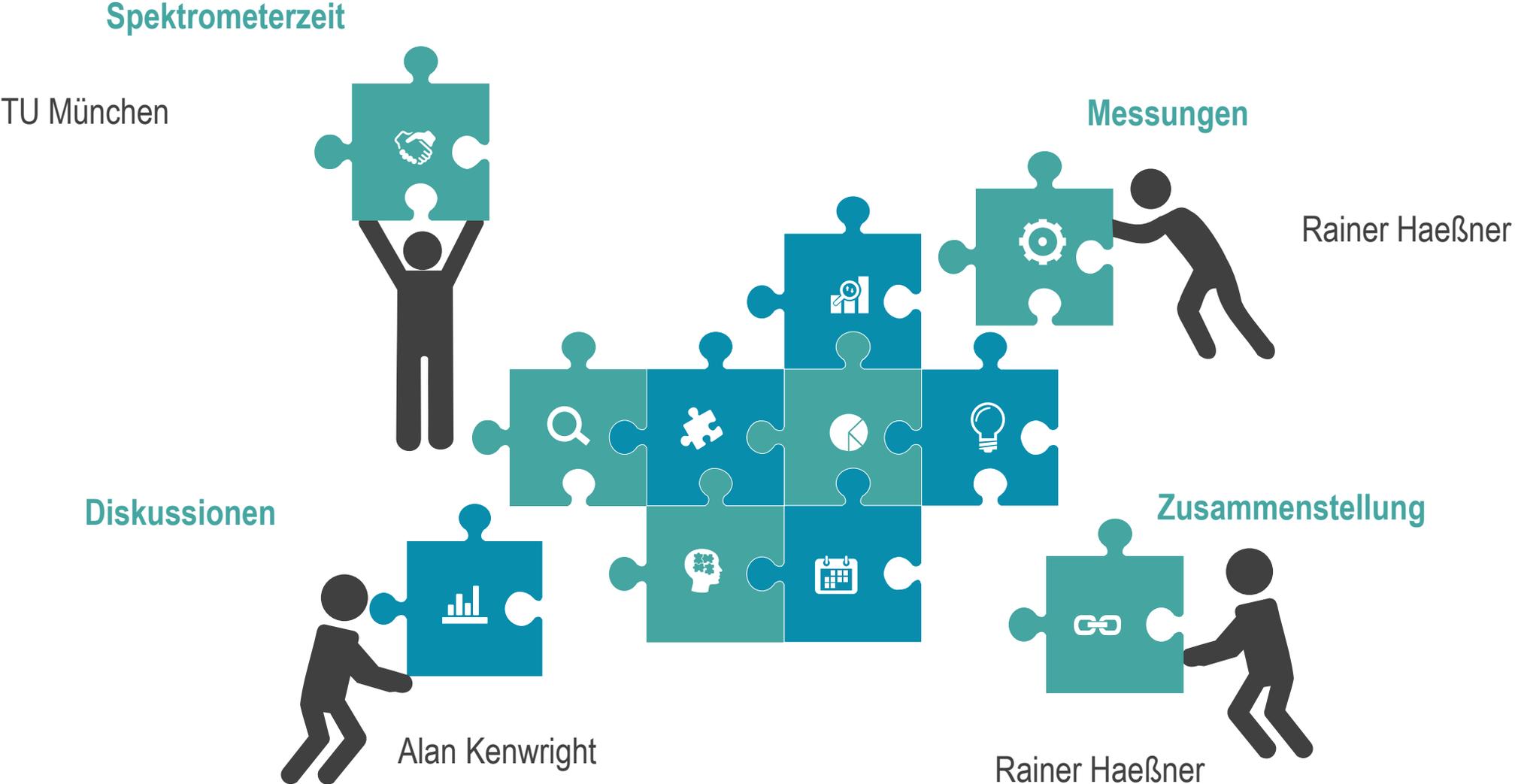
## Teil 5 – Multipletts und Kopplungskonstanten

16



Durch den Dacheffekt weist die Intensitätsverteilung der fünf Linien etwas von der idealen Binomialverteilung ab.

# Beiträge



[Weitere Beispiele ...](#)