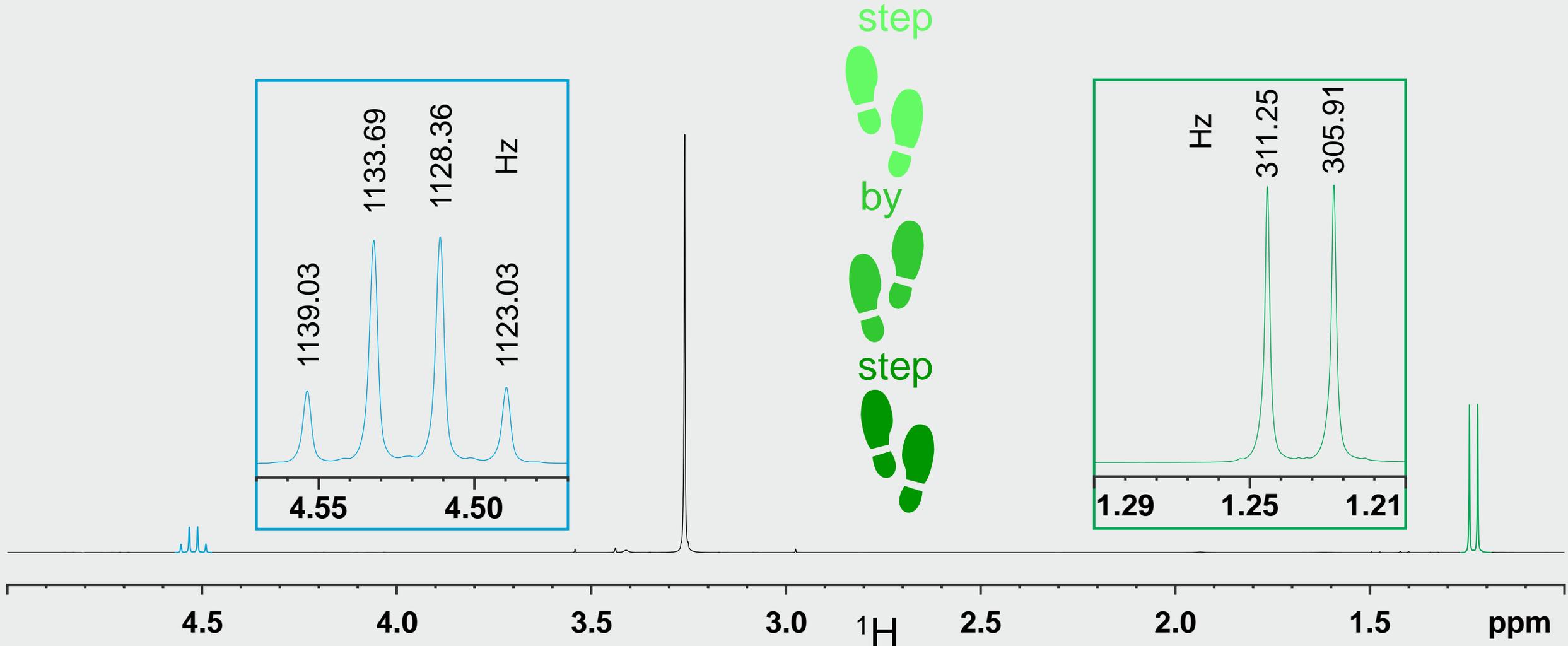


Übung plus Lösung – Schnellüberblick

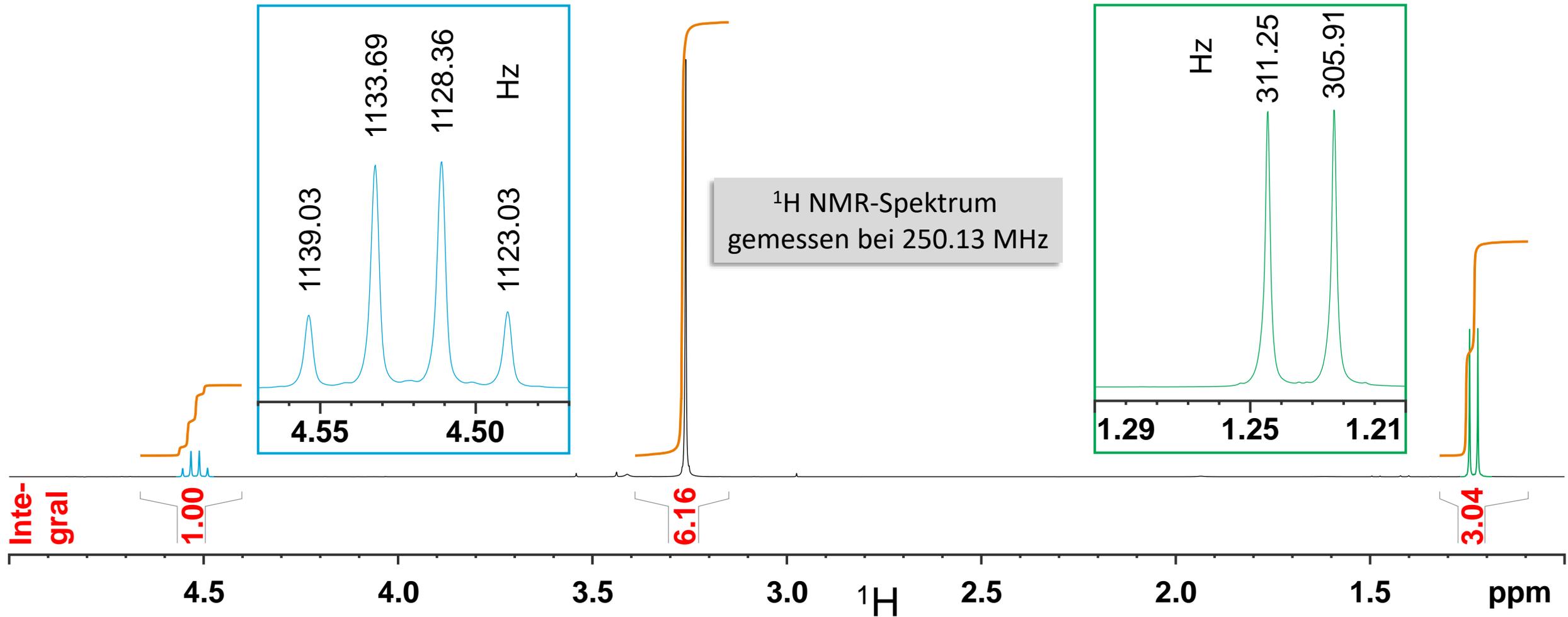
Diese Version soll nur dem schnellen Überblick über die Fragestellung dienen. Sämtliche PowerPoint-Animationen fehlen, in einigen Fällen könnte die Umsetzung von PowerPoint auf PDF merkwürdig aussehen.

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



C₄H₁₀O₂ gelöst in CDCl₃

Ermitteln Sie die Struktur!

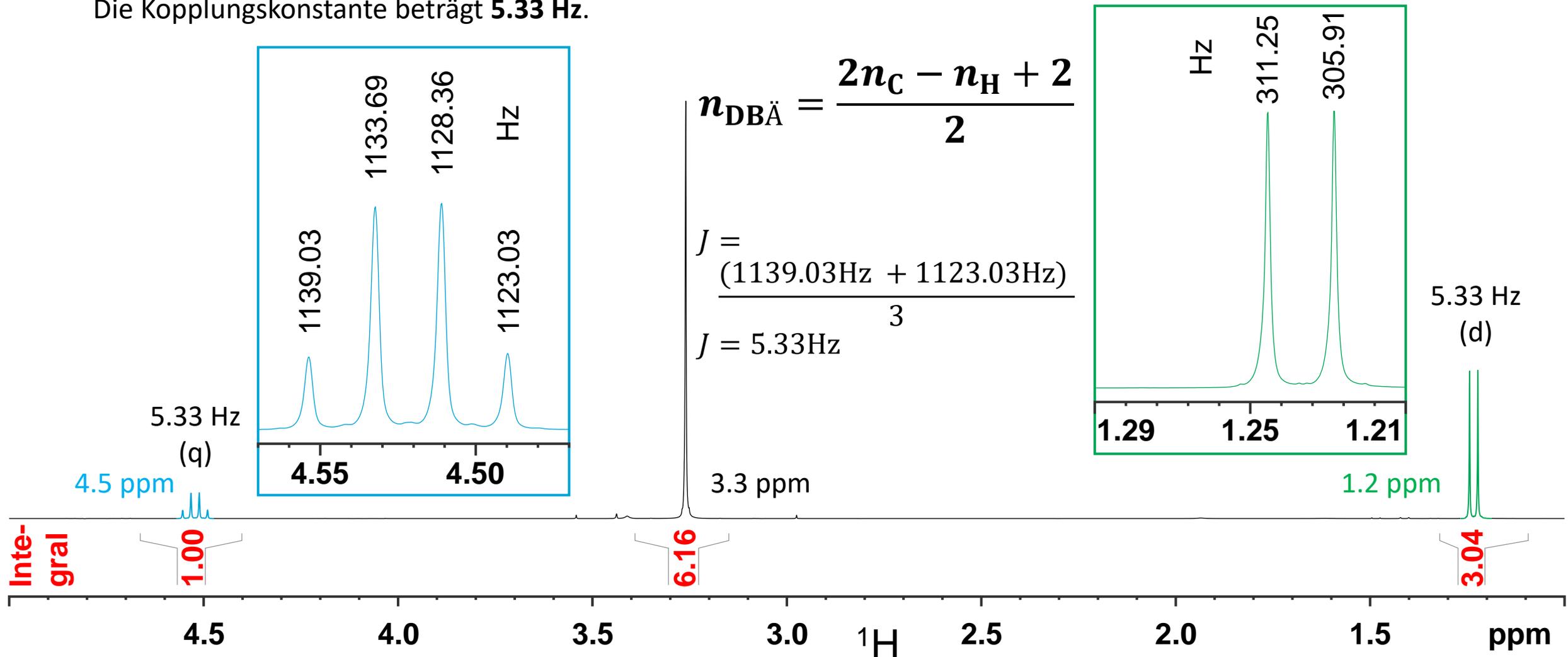


Die Verbindung beinhaltet **kein Doppelbindungsäquivalent**.

$C_4H_{10}O_2$ gelöst in $CDCl_3$
Schritt-für-Schritt-Lösung

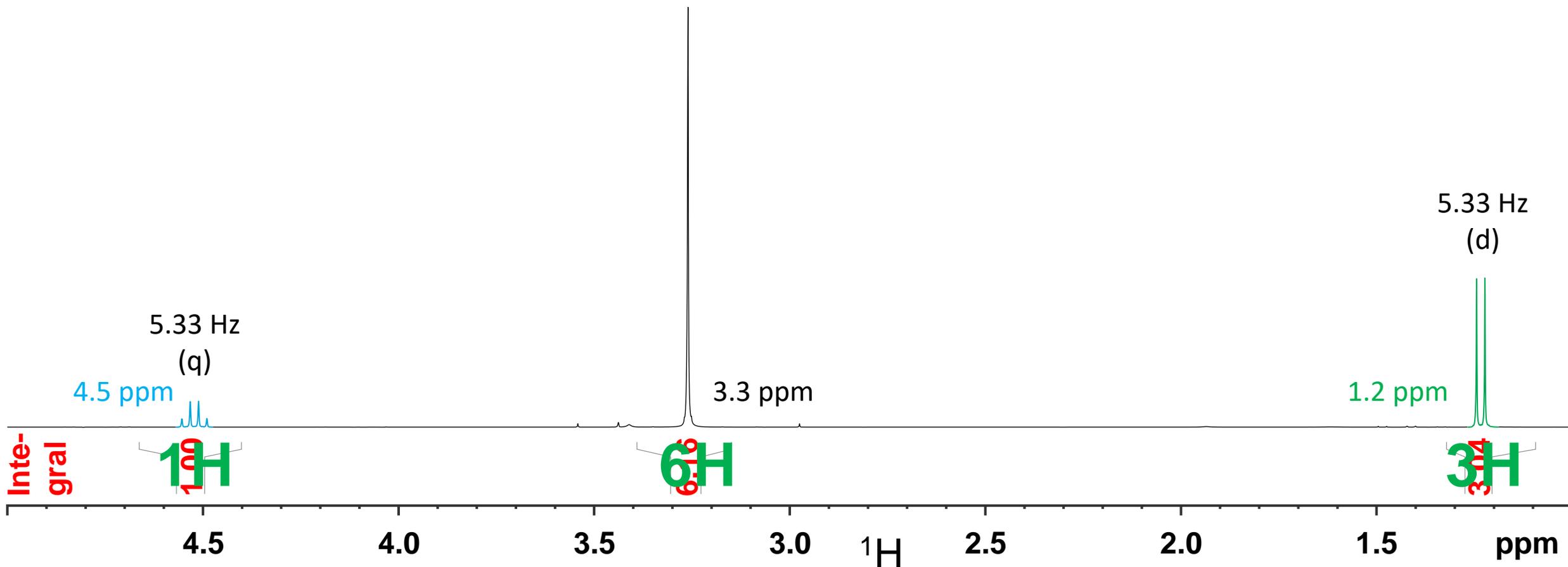
Die chemischen Verschiebungen sind in diesem Beispiel nicht
Es gibt nur zwei Multipletts, d.h. es kann sich nur um „reine“
sonderlich wichtig. Eine Abschätzung genügt.
Multipletts – hier ein **Dublett** und ein **Quartett** – handeln.

Die Kopplungskonstante beträgt **5.33 Hz**.



Die Verbindung beinhaltet **kein Doppelbindungsäquivalent**.

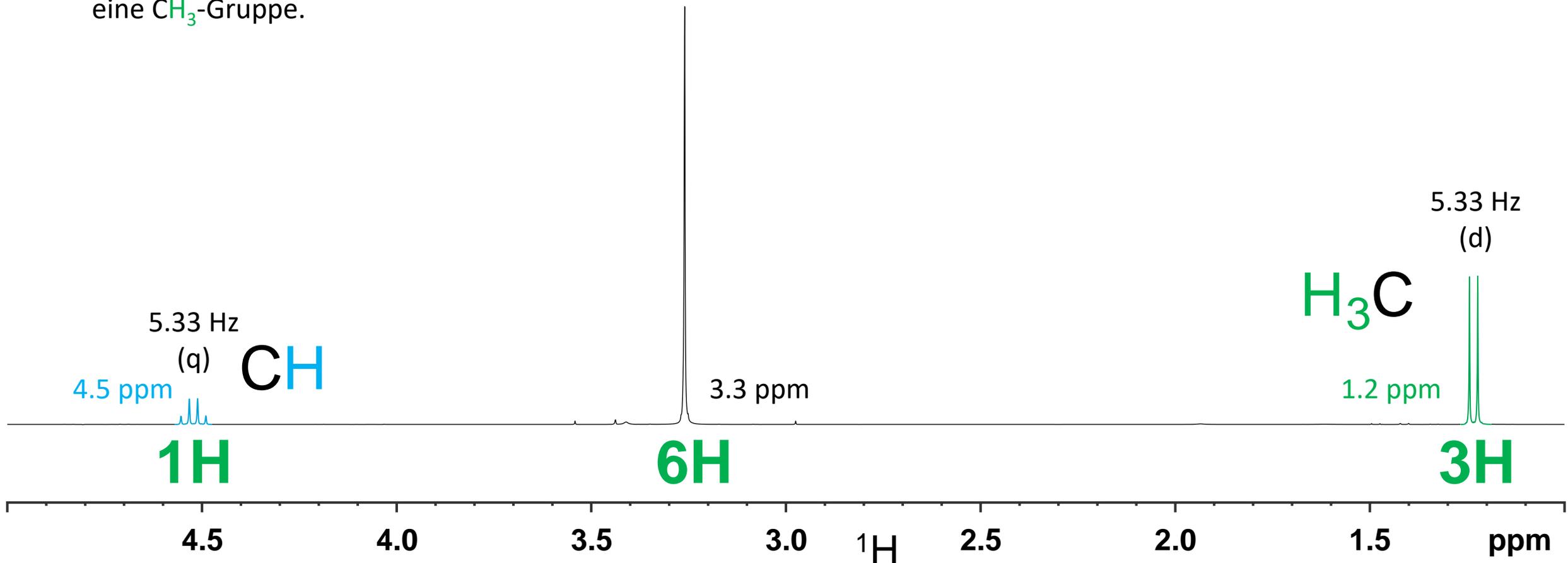
Die Integration ist einfach, der Proportionalitätsfaktor zwischen dem gemessenen Integral (in willkürlichen Einheiten) und der Protonenzahl ist gerade 1.

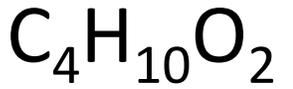


Die Verbindung beinhaltet **kein Doppelbindungsäquivalent**.

Gehen wir zunächst von der Vermutung aus, alle drei Signalgruppen stammen von CH_n -Fragmenten. Die Begründung, warum OH nicht in Frage kommt, folgt in wenigen Schritten.

Dann hätten wir bei 4.5 ppm eine CH- und bei 1.2 ppm eine CH_3 -Gruppe.



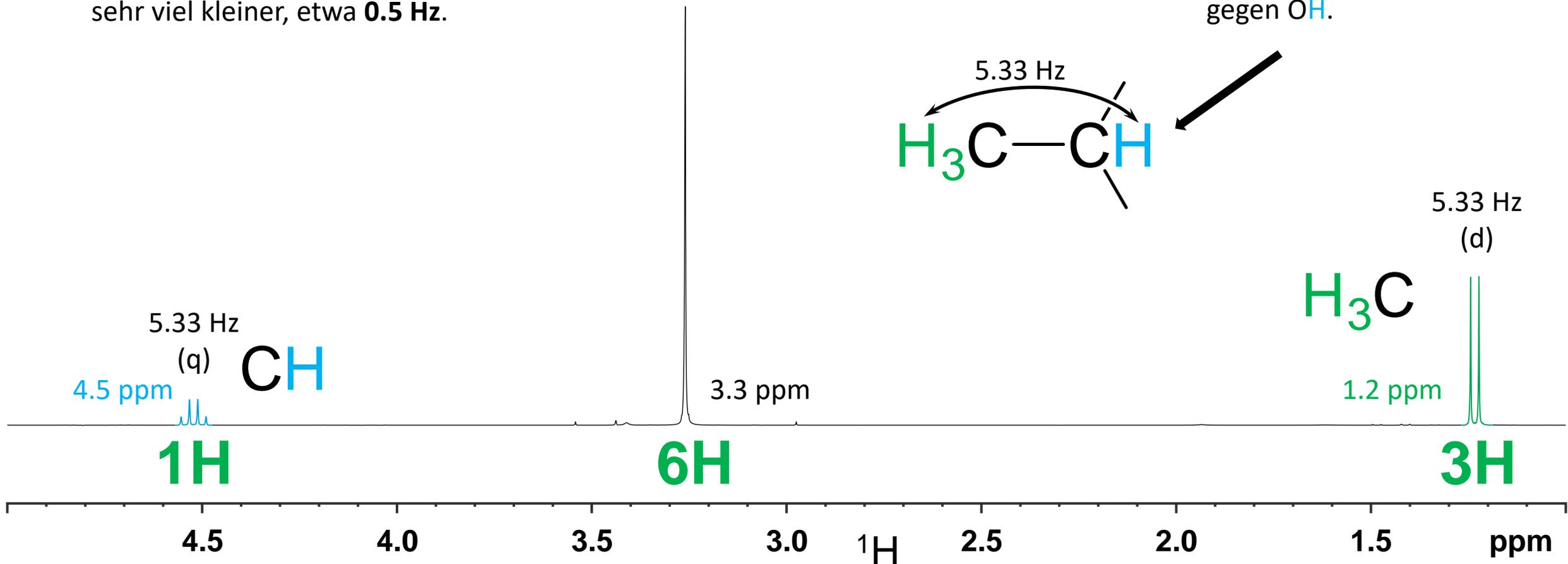
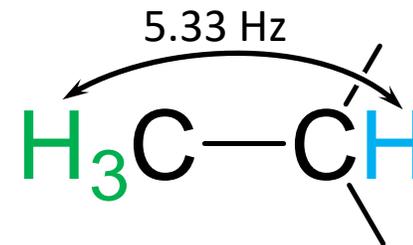


Verbindet man die Kohlenstoffatome der beiden Fragmente miteinander, können die Kopplungsmuster beider Multipletts gut erklärt werden.

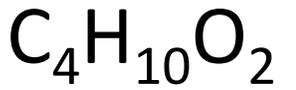
Beim CH fehlen natürlich zwei freie Valenzen.

Eine Kopplungskonstante von **5.33 Hz** ist für eine vicinale Kopplung etwas klein. **7 Hz** wären ideal. Andererseits wäre eine Weitbereichskopplung über vier Einfachbindungen sehr viel kleiner, etwa **0.5 Hz**.

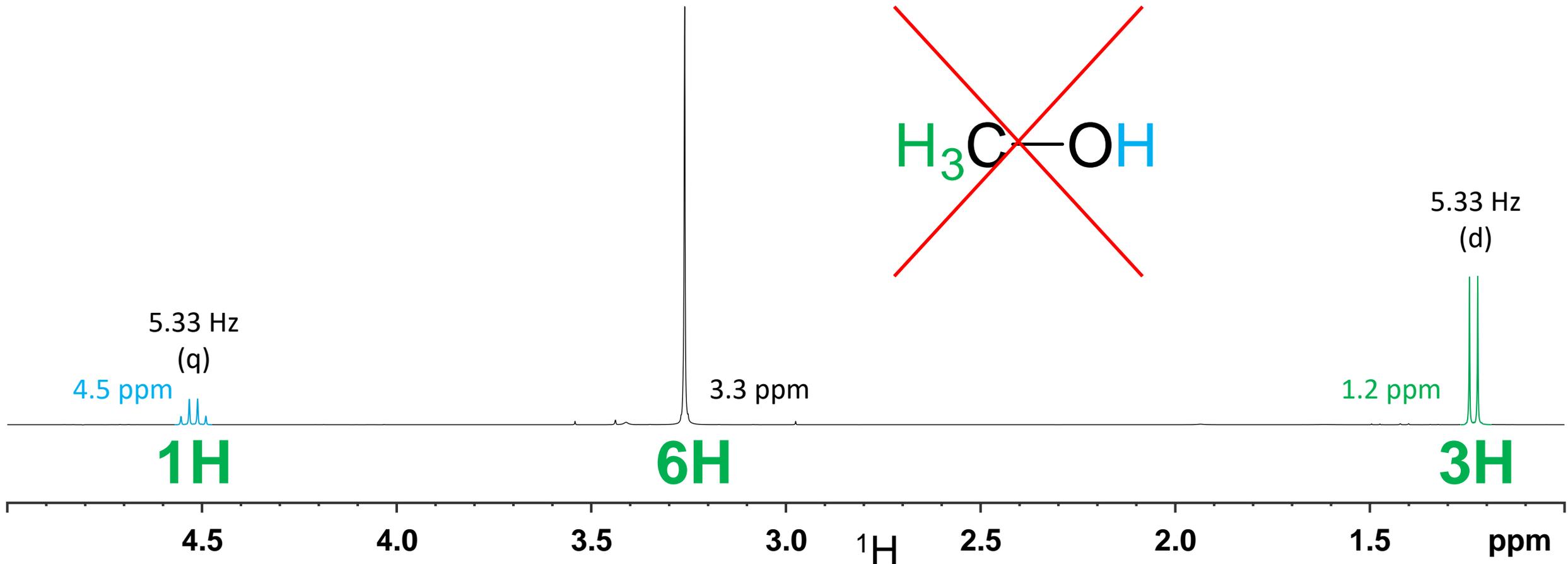
Ersetzen wir jetzt versuchsweise einmal CH gegen OH.

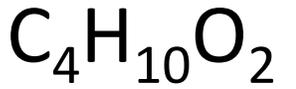


Damit hätten wir Methanol vorliegen. Weitere Verknüpfungen sind nicht möglich, es ist aber noch das Singulett bei ca **3.3 ppm** irgendwie zuzuordnen.



Kehren wir zurück zu $\text{CH}_3\text{-CH}$.

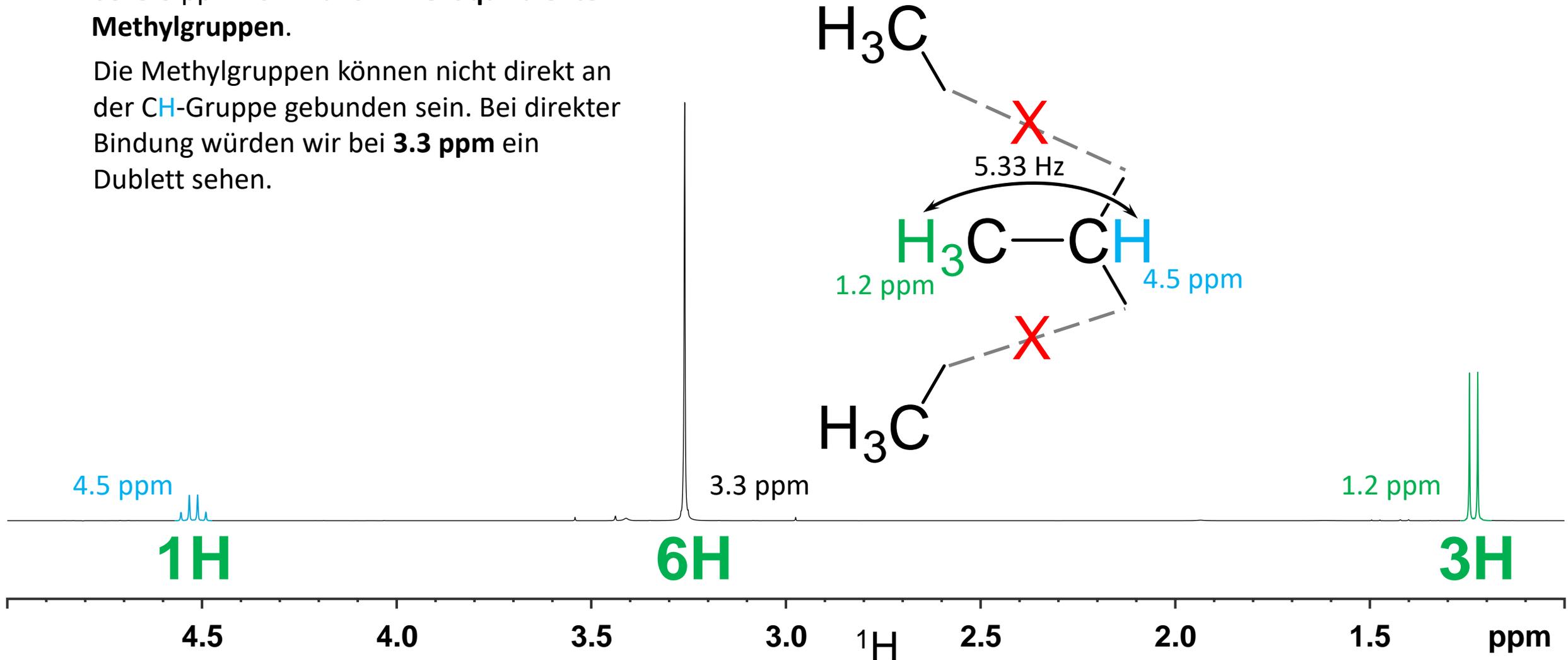




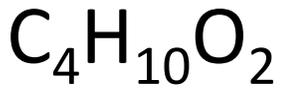
Eine Singulett mit 6 Protonen kann von zwei äquivalenten CH_3 - oder drei äquivalenten CH_2 -Gruppen stammen.

Von den vier C-Atomen der Summenformel haben wir zwei bereits Strukturfragmenten zugeordnet. Das Signal bei 3.3 ppm kommt von **zwei äquivalenten Methylgruppen**.

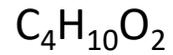
Die Methylgruppen können nicht direkt an der CH -Gruppe gebunden sein. Bei direkter Bindung würden wir bei **3.3 ppm** ein Dublett sehen.



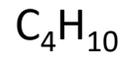
Zur vollständigen Strukturaufklärung genügt eine kleine Inventur.



Summenformel:



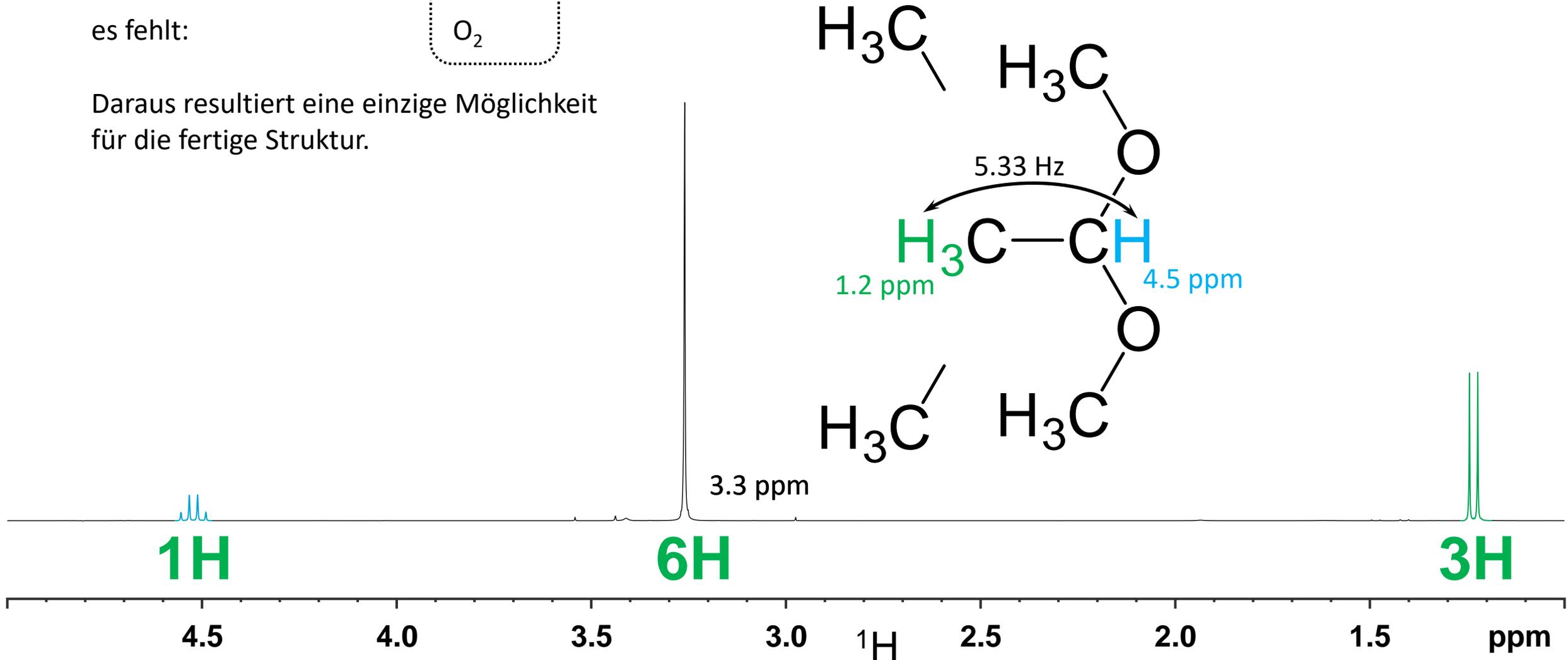
bekannte Fragmente:



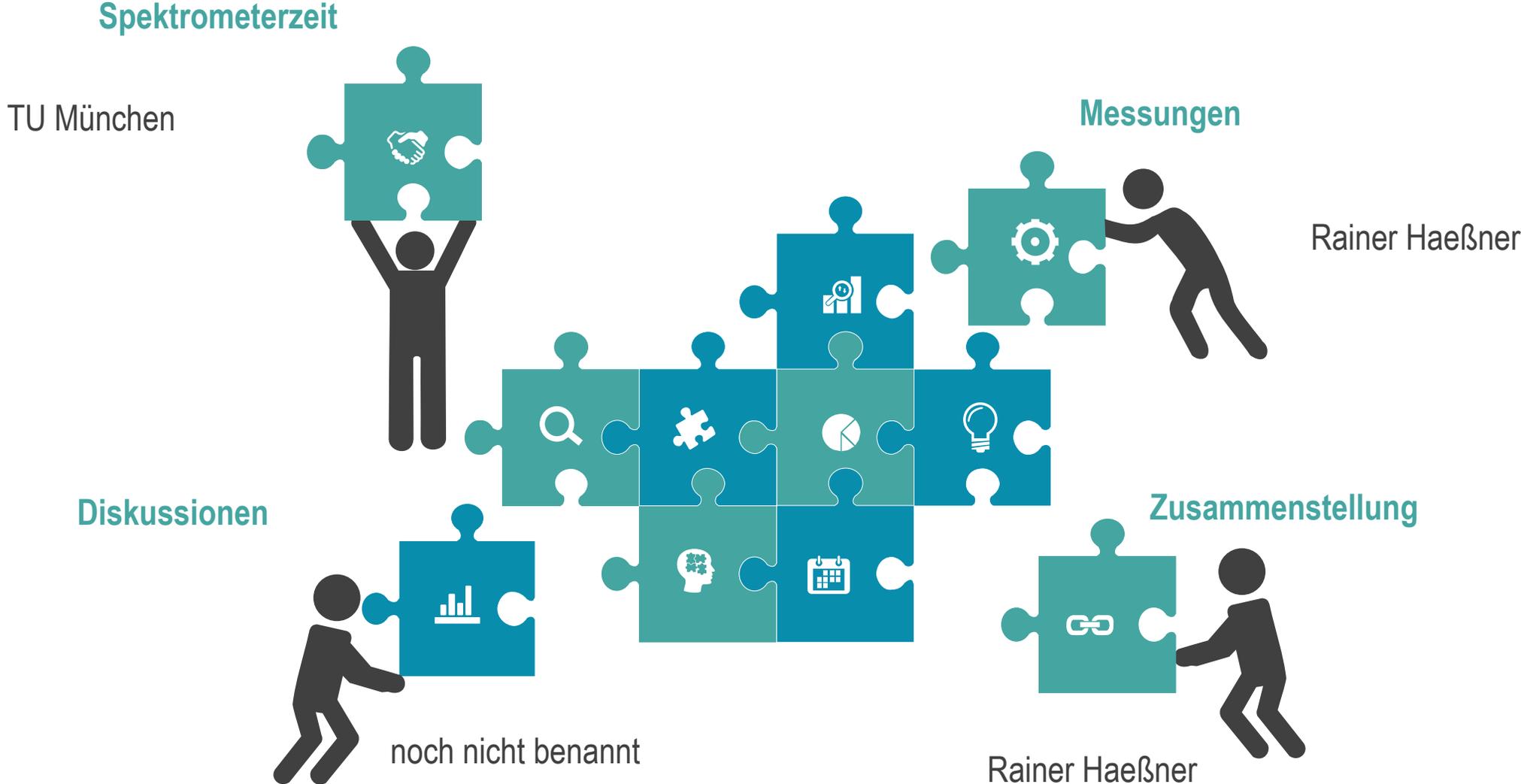
es fehlt:



Daraus resultiert eine einzige Möglichkeit für die fertige Struktur.



Beiträge



[Weitere Beispiele ...](#)