

Übung P17

IR:

~ 3000 cm⁻¹ CH st.

2200-2100 cm⁻¹ 2 (oder 3?) Banden
Zuordnung ??
(X≡Y oder X=Y=Z würden zu einer scharfen Bande führen,
ν(Si-H) wäre eine intensive, rel. breite Bande)

1460 cm⁻¹ C-H-Biegeschwingungen

Kein NH, OH, C=O, C=C, arom. Ring

MS:

M⁺ **124** Isotopenmuster von Br

124-109 = 15 (CH₃)

124 (mit Br) - 45 (ohne Br) = 79 (Verlust von Br)

Ausser Br noch Masse 45 (max. 3 C)

Übung P17

^{13}C -NMR:

35.4 ppm CH_2

25.6 ppm C (gleich viele Signale in breitband- und off-res.-entk. Spektr.)
Kopplungen mit Heteroelement ? \rightarrow 5 Linien

12.7 ppm CH_3

$\geq 3\text{C}$ $\geq 5\text{H}$

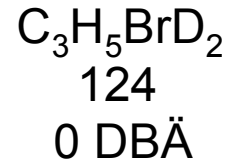
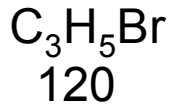
^1H -NMR:

	Int.	Mult.	
3.3 ppm	2	S	CH_2
1.0 ppm	3	S	CH_3

$\geq 5\text{H}$

Übung P17

Summenformel:

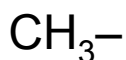


$$124 - 120 = 4 \quad (2x \text{ Deuterium})$$

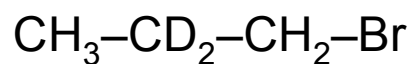
Deuterium hat eine Kernspinqantenzahl von 1

Die C-D-Kopplungen erklären das 5-Linien-System im ^{13}C -NMR

Fragmente:



Struktur:



CH_3 und CH_2 dürfen nicht benachbart sein, da ansonsten Triplet- und Quadruplett-Aufspaltungen sichtbar wären.

H,D-Kopplungskonstanten sind wesentlich kleiner als H,H-Kopplungskonstanten (hier nicht aufgelöst).

Erklärung IR:

2200 cm^{-1} antisymmetrische CD_2 -Streckschwingung

2100 cm^{-1} symmetrische CD_2 -Streckschwingung

Übung P17

Erklärung ^{13}C -NMR:

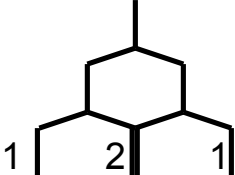
5-Linien-System wegen Kopplung von C mit 2 D-Kernen?

Vergleich: Kopplung von C mit 2 H in off-resonance-Spektrum

H hat einen Kernspin von $I = 1/2$

Multiplizität: $M = 2I + 1 = 2$ (Dublett)

Also: Kopplung mit einem H führt zu Dublett mit Intensität 1:1

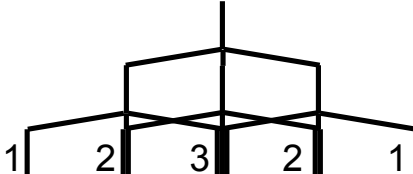
Kopplung mit zwei Kernen:  Triplet 1:2:1

Kopplung C,D:

D hat einen Kernspin von $I = 1$

Multiplizität: $M = 2I + 1 = 3$

Kopplung mit einem D führt zu einem Triplet mit Intensität 1:1:1

Kopplung mit zwei Kernen: 

Gute Übereinstimmung des 1:2:3:2:1-Verhältnisses mit dem 5-Linien-System im Spektrum