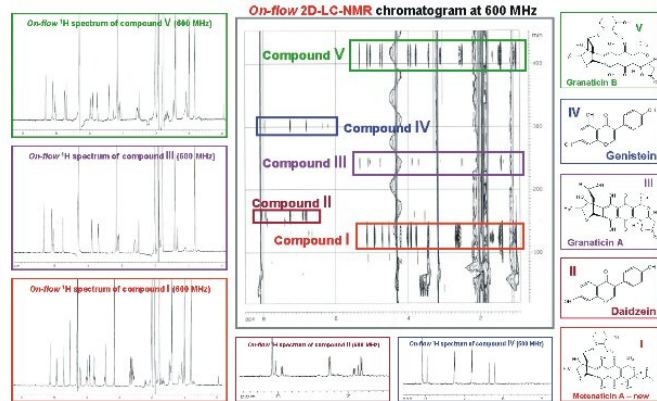
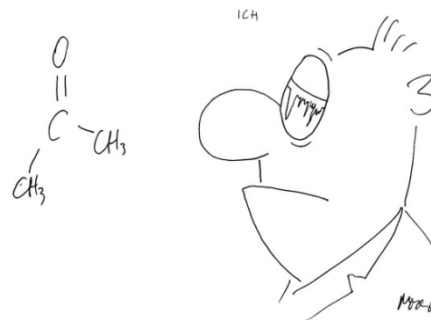
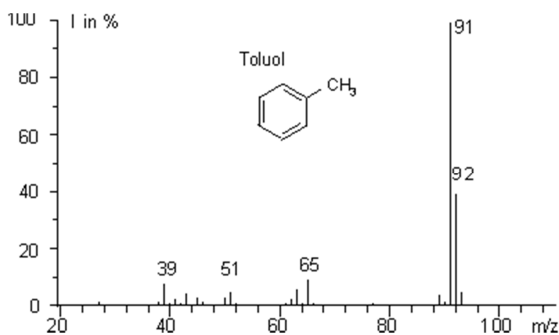
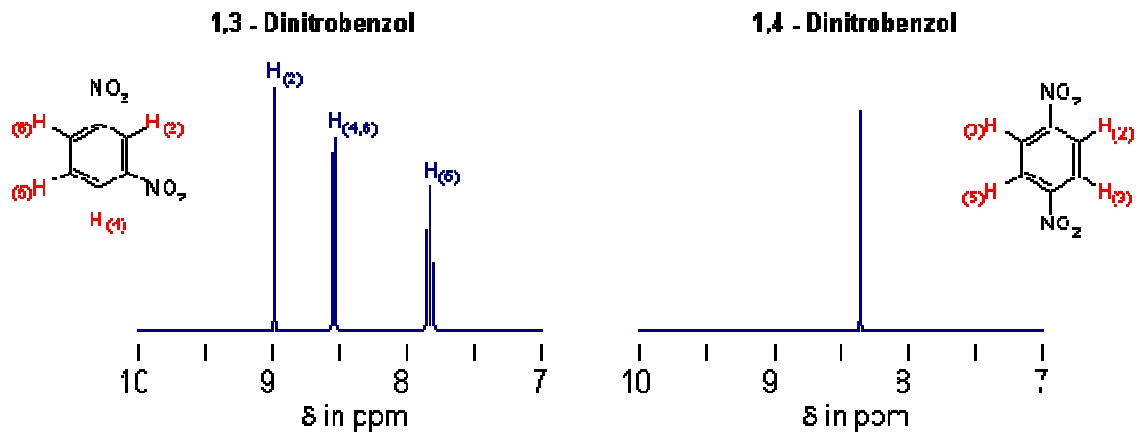


# Strukturaufklärung: MS, IR, NMR<sup>1</sup>

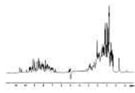
Das Lernziel dieser  
Unterrichtseinheit beinhaltet  
folgende Punkte:



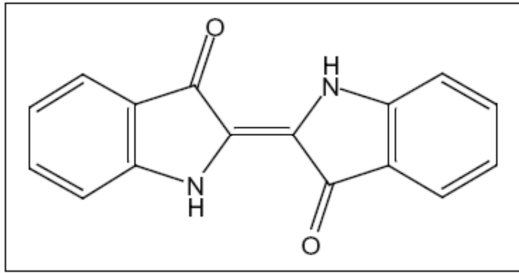
Wie kann aufgrund von physikalischen Daten (Spektren) auf die Struktur, das heisst die räumliche Verknüpfung der Atome geschlossen werden? Was ist ein MS, IR und NMR?



<sup>1</sup> Quellen: <http://www.chemgapedia.de>, <http://www.ksluzern.ch/fachschaften/chemie/homepage/>, [http://www.oci.unizh.ch/edu/lectures/material/AC\\_BII/Kap18/kap18.html](http://www.oci.unizh.ch/edu/lectures/material/AC_BII/Kap18/kap18.html)



## 11 Moderne Strukturaufklärung



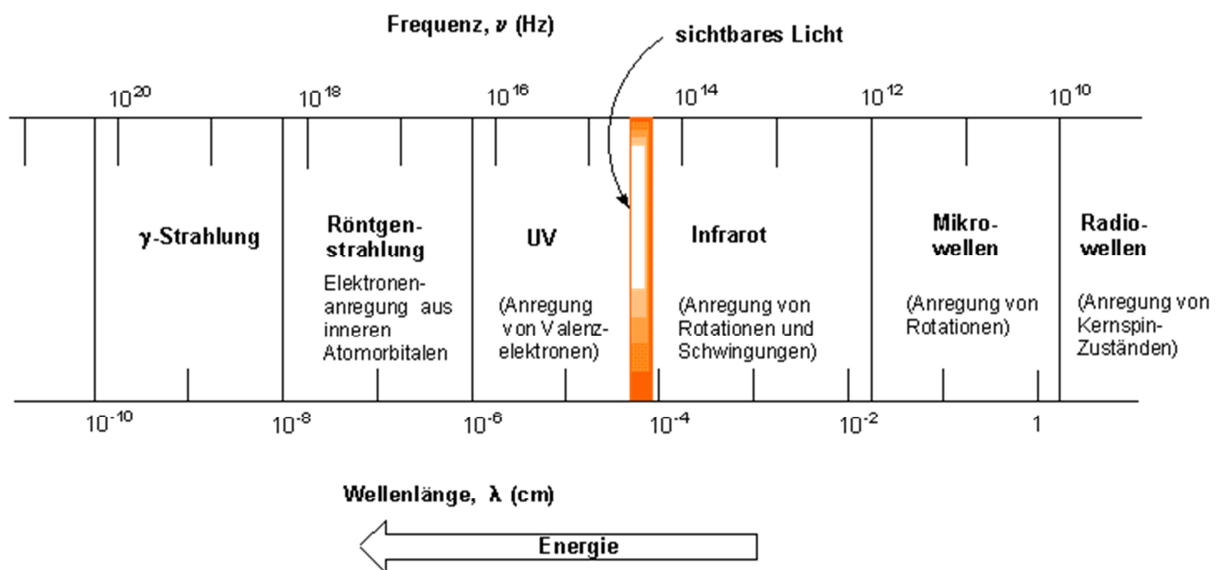
Früher gehörte das „Herausfinden“ der Struktur eines organischen Stoffes häufig zum Lebenswerk eines Chemikers. So arbeitete zum Beispiel Adolf von Baeyer 20 Jahre lang an der Aufklärung der Struktur von Indigo, einem ziemlich einfachen Stoff - und dabei war Baeyer ein hervorragender Chemiker.

Der klassische Weg zur Struktur einer Substanz bestand aus mehreren Schritten:

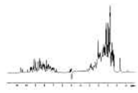
Stoffgemisch: <b>Trennmethode</b> → <b>Reinsubstanz</b> (z.B. Indigo)
<b>Quantitative Analyse</b> → <b>Verhältnisformel</b> ( $C_{16}H_{10}N_2O_2$ oder $C_8H_5NO$ oder $C_{32}H_{20}N_4O_4$ etc.)
Bestimmung der molaren Masse → <b>Summenformel</b> ( $C_{16}H_{10}N_2O_2$ )
Charakteristische <b>Reaktionen</b> → <b>Stoffklassen</b> (Aromat, Keton, Amin)
<b>Abbaureaktionen</b> → Identifizierung von Bruchstücken → <b>Strukturvorschlag</b>
<b>Totalsynthese</b> → Bestätigung des Strukturvorschlages

Während früher fast nur chemische Methoden zur Strukturaufklärung beigezogen wurden, sind es heute physikalische. Durch Hintereinanderschalten verschiedener solcher Methoden sind enorme Zeitersparnisse möglich. Heute würde Baeyer die Aufklärung der Indigostruktur nur noch wenige Stunden kosten.

Die physikalischen Methoden beinhalten alle die gleiche Idee: Durch Abgabe von Energie an das Molekül wird es ‚gestört‘ in seinem bevorzugten Zustand: es wird **angeregt**. Nach einer gewissen Zeit kehrt das Molekül wieder in seinen bevorzugten Zustand (**Grundzustand**) zurück und gibt dabei einen bestimmten Energiebetrag ab. Diese abgegebene Energie kann gemessen werden.



Je nach zugefügter Energie wird das Molekül dazu veranlasst, sich verschieden zu verhalten: wenig Energie reicht z.B. nur dazu aus, das Molekül in eine Rotation zu versetzen, sehr viel Energie kann das Molekül sogar zerstören. All diese aufgewendeten Energien geben einen Hinweis auf die Struktur des Moleküls.



### Analytische Konzentrationsangaben

Die Mengen der Analyten werden in der chemischen Analytik meist als Konzentrationen angegeben. Das bedeutet, eine bestimmte Masse oder Molanzahl wird auf ein Volumen oder eine Masse von umgebender Matrix bezogen, z.B. Mol pro Liter ( $\text{mol L}^{-1}$ ) oder Gramm pro Kilogramm ( $\text{g kg}^{-1}$ ).

Bei Proben, in denen die gesuchten Stoffe nur im Spurenbereich vorkommen, findet man häufig Konzentrationsangaben wie ppm. Dahinter verbergen sich folgende Konzentrationen:

Abkürzung	Einheit	absolut	Konzentration	Konzentration [g/kg]	Beispiel
1%	Prozent	1:100	0,01kg/kg	10	Alkohol in Getränken
1‰	Promille	1:1000	1g/kg	1	Alkohol im Blut
1ppm	parts per million	1:10 <sup>6</sup>	1mg/kg	10 <sup>-3</sup>	Nitrat im Trinkwasser
1ppb	parts per billion	1:10 <sup>9</sup>	1µg/kg	10 <sup>-6</sup>	Schwermetalle in Trinkwasser
1ppt	parts per trillion	1:10 <sup>12</sup>	1ng/kg	10 <sup>-9</sup>	PAK (Polycycl. Aromaten) in Trinkwasser
1ppq	parts per quadrillion	1:10 <sup>15</sup>	1pg/kg	10 <sup>-12</sup>	Dioxine in Muttermilch

Anschaulicher:

Die Nadel im Heuhaufen ....

Annahme, dass der Stecknadelkopf eine Fläche von  $1\text{mm}^2$  aufweist. Dann wären folgende Größen analog:



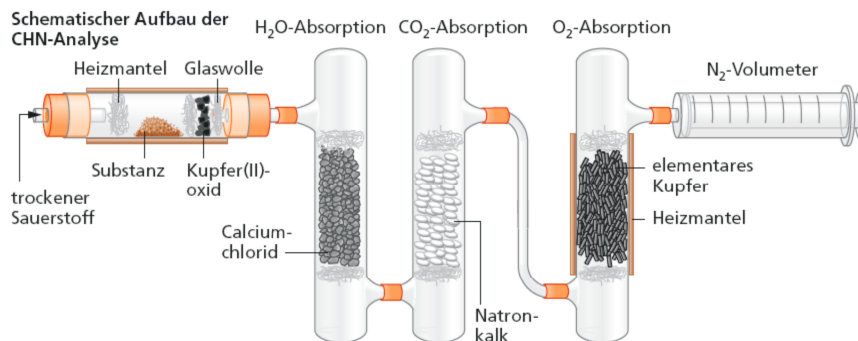
## 11.1 Die organische Elementaranalyse

Elementaranalyse:

Die Elementaranalyse erschliesst, in welchen Anteilen Elemente wie Kohlenstoff, Wasserstoff, Sauerstoff, Stickstoff, Schwefel und Phosphor in organischen Verbindungen enthalten sind.

Die meisten organischen Moleküle bestehen aus den Elementen Kohlenstoff, Wasserstoff, Sauerstoff und Stickstoff und weisen als Verbindung eine Molekülformel gemäss  $C_wH_xO_yN_z$ , beispielsweise TNT:  $C_7H_5O_6N_3$ .

Zur CHN-Analyse verbrennt man eine genau abgewogene Menge Substanz im Sauerstoffstrom. Dabei geht Kohlenstoff in Kohlenstoffdioxid und Wasserstoff in Wasser, der Stickstoffanteil in  $N_2$  über. Bei der Verbrennung im Sauerstoffüberschuss ( $a \gg b$ ) läuft also formal folgende Bruttoreaktion ab:



Beispiele:

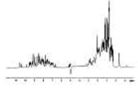
Eine Substanz, die nur C, H, N und O enthält, ergibt bei der Elementaranalyse folgende Werte:

	C	H	N	O
Gehalt	49.4 %	9.8 %	19.1 %	21.7 %
:Atomgewicht	:12.011	:1.0079	:14.0067	:15.9994
	4.11	9.72	1.36	1.36
:1.36	3.02	7.14	1.00	1.00
Gerundet	3	7	1	1

Die Substanz weist also die Verhältnisformel  $C_3H_7N_1O_1$  auf, oder kürzer  $C_3H_7NO$ . Die Elementaranalyse kann folgende Verhältnisformel nicht ausschliessen:  $C_6H_{14}N_2O_2$ ,  $C_9H_{21}N_3O_3$  oder allgemeiner:  $(C_3H_7NO)_k$  wobei  $k=1,2,3 \dots$

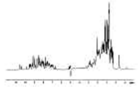
Aufgabe: Die qualitative Analyse einer Substanz ergibt, dass sie die Elemente C, H und Cl enthält. Die quantitative Analyse ergibt 24.27% C und 4.07% H.

Wie lautet die Verhältnisformel der Substanz?

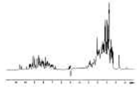


**Beispiel:** Die Verbrennung von 3,525 mg Ethanol lieferte 6,750 mg Kohlenstoffdioxid und 4,112 mg Wasser. Wie lautet die Verhältnisformel von Ethanol? Ethanol enthält die Elemente C, H und O

Hinweis: die Anzahl Mol C in der Substanz Ethanol muss gleich der Anzahl Mol C in Kohlendioxid sein!



**Aufgabe:** Bei der vollständigen Verbrennung von 0,8526 g einer unbekannt organischen Substanz wurden 1,0005 g  $\text{CO}_2$ , 0,5116 g  $\text{H}_2\text{O}$  und 139 ml  $\text{N}_2$  ( $p = 103 \text{ kPa}$ ,  $T = 30^\circ\text{C}$ ) gebildet. Wie lautet die Verhältnisformel der Substanz?



**Aufgabe** aus Forum ‚tomchemie‘ (<http://www.tomchemie.de/wbb2/thread.php?threadid=1417>)

Hallo, bin neu hier und möchte gleich mal diese für mich schwierige Aufgabe hier posten:

1. Eine Substanz besteht aus Kohlenstoff und Wasserstoff.
2. Bei der vollständigen Verbrennung von 1,75g der Verbindung erhält man 5,5g Kohlendioxid und 2,25g Wasser.
3. Die bei RT flüssige Substanz wird mit 50°C erhitzt.(1000hPa). 0,25g der Substanz werden dann ein Volumen von 96 ml annehmen.
4. Die Substanz reagiert negativ auf die Baeyersche Probe.

Frage: Um welche Substanz handelt es sich?

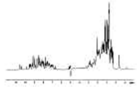
Danke

Hinweis zu 4: Nachweismöglichkeit um zu testen, ob in der Verbindung Doppelbindungen vorkommen.

Einheiten ....  $R = 8,134 \text{ J/K} \cdot \text{mol}$

$1 \text{ Joule} = 1 \text{ Nm}$

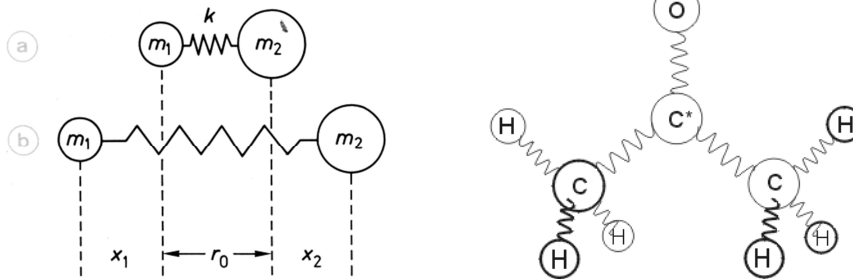
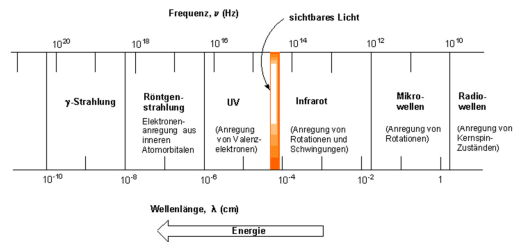
$\text{Pa} = \text{N/m}^2$



## 11.2 Infrarot-Spektroskopie (IR)

Bestrahlt man eine Probe mit Wellen aus dem IR-Bereich, so liegen wir im Energiebereich um **Schwingungen der Bindungslängen und Bindungswinkel** anzuregen.

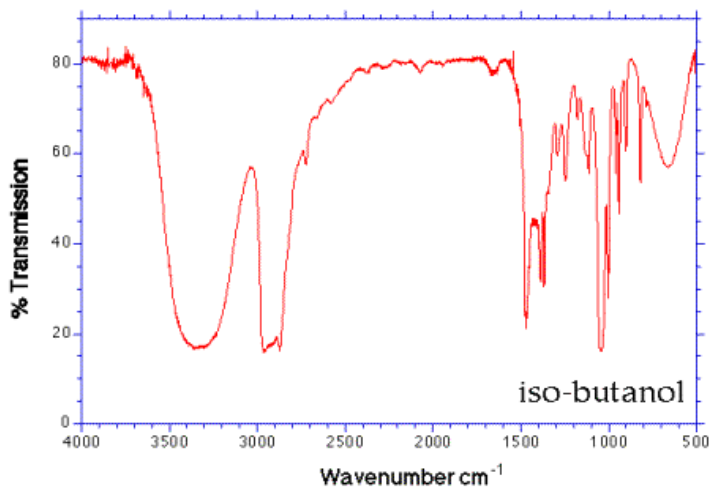
Eine Bindung zwischen zwei Atomen lässt sich vereinfacht mit folgendem mechanischen Modell erläutern:



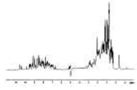
Die Schwingungsfrequenz lässt sich berechnen (Federgesetz von Hook):

### 11.2.1 Wie sieht nun ein IR-Spektrum aus?

Im IR-Spektrum wird meist die **Wellenzahl** als **Abszisse** und die **Transmission (% Durchlässigkeit)** als **Ordinate** angegeben. Die maximale Durchlässigkeit (keine Absorption) ist im IR-Spektrum oben. Absorptionen zeigen sich durch negative **Peaks**:

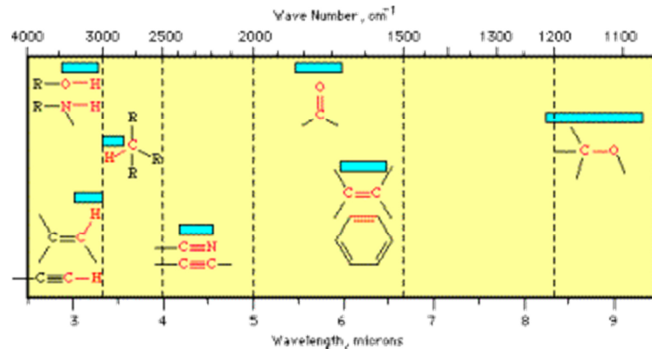




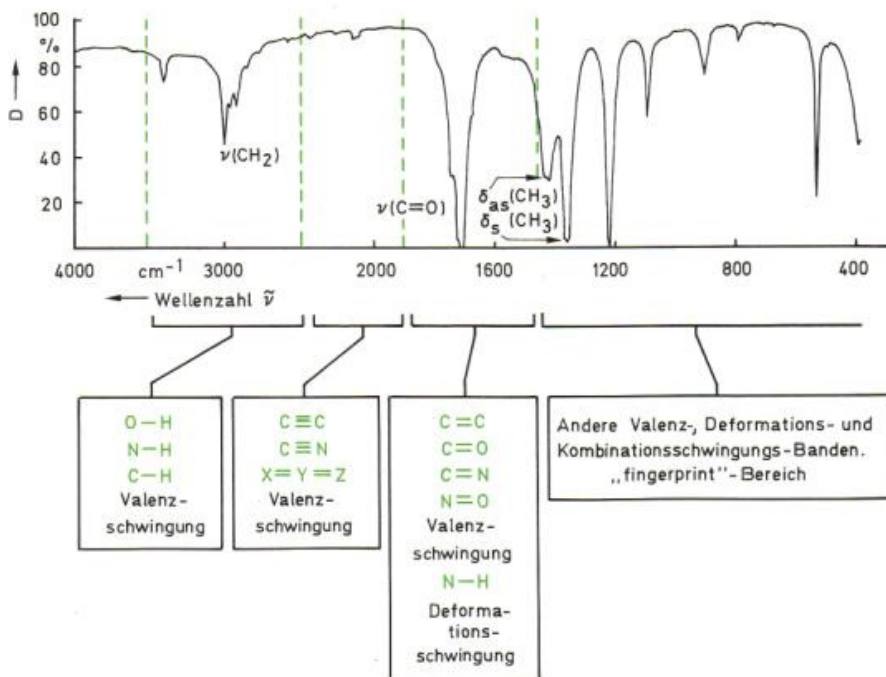
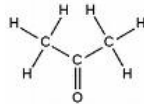


## 11.2.2 Strukturaufklärung.

Diverse Bereiche im IR-Spektrum sind charakteristisch für bestimmte Molekülgruppen und funktionelle Gruppen:



Beispiel Aceton:



2

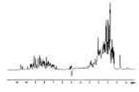
Zur Erinnerung:

Veränderungen der Bindungslängen: **Streckschwingung** oder auch **Valenzschwingungen** genannt

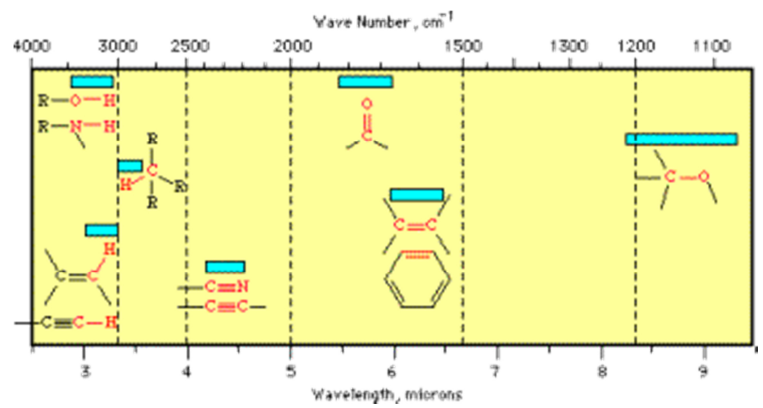
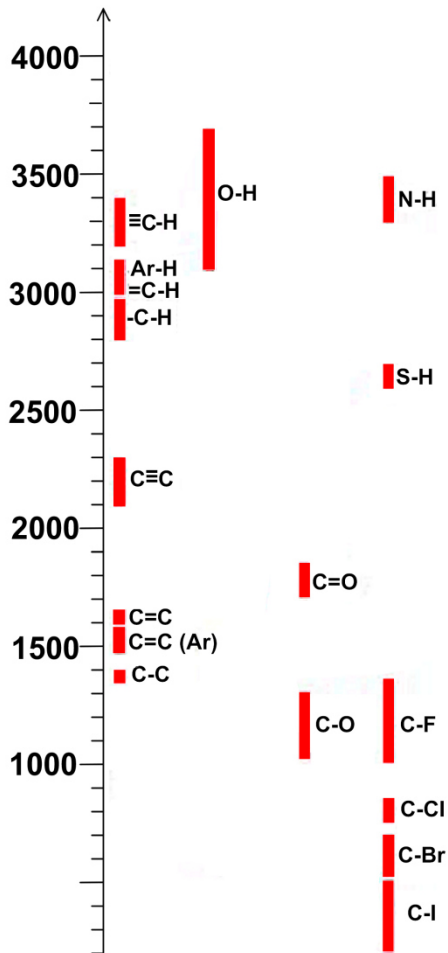
Veränderungen der Bindungswinkel: **Deformationsschwingungen**

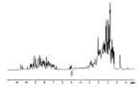
Die Auswertung des ‚fingerprint‘-Bereiches ist Stoff an der Uni / ETH. Wichtig ist somit für die Strukturaufklärung der Bereich von ca. 1500 - 4000  $\text{cm}^{-1}$ .

<sup>2</sup> Graphik aus Spektroskopische Methoden in der Chemie, 4. Auflage, Seite



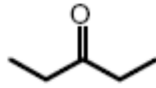
### 11.2.3 Übersicht charakteristischer IR-Absorptionen



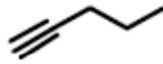


### 11.2.4 Übungen<sup>3</sup> und Beispiele:

Welcher der folgenden Verbindungen entspricht dem unten abgebildeten IR-Spektrum?



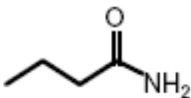
3-Pentanon



1-Pentin



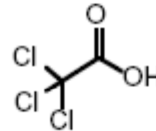
1-Chlor-trans-1,3-Butadien



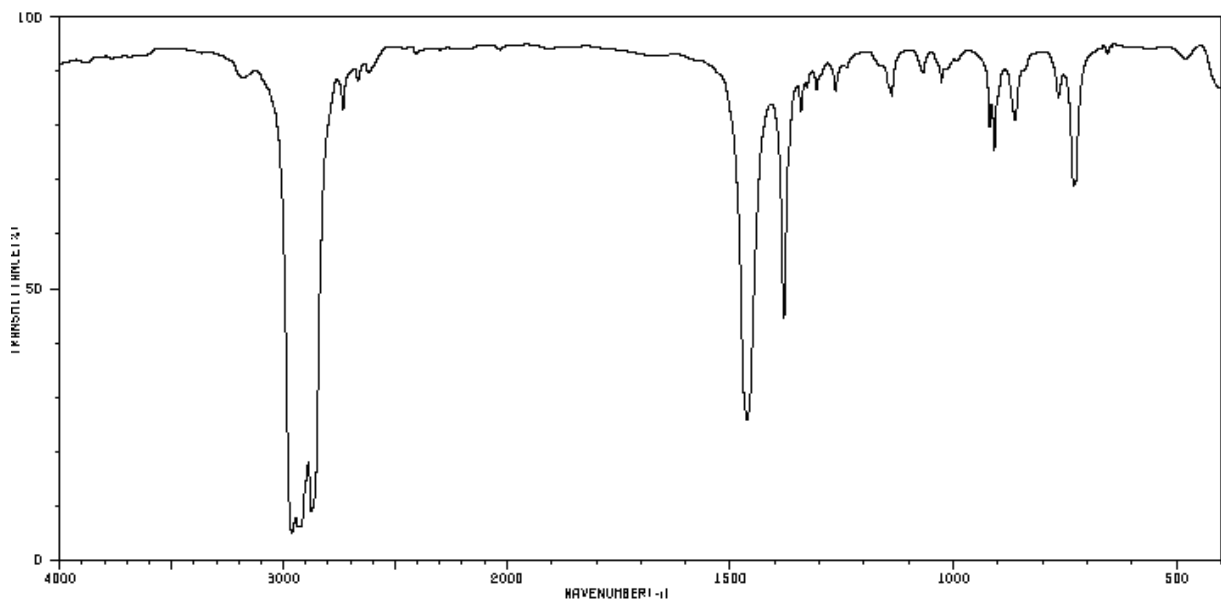
Butansäureamid



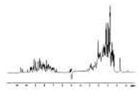
Pentan



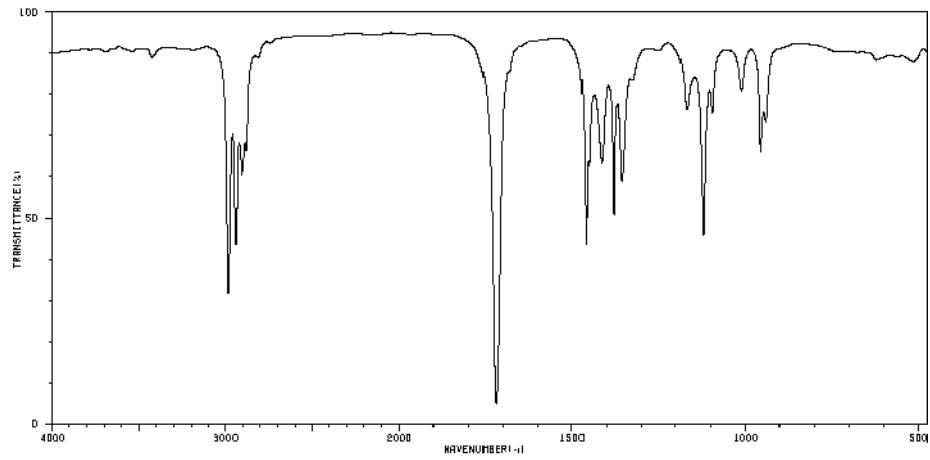
Trichlorethansäure



<sup>3</sup> Spektrum from [http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi?lang=eng](http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/direct_frame_top.cgi?lang=eng)

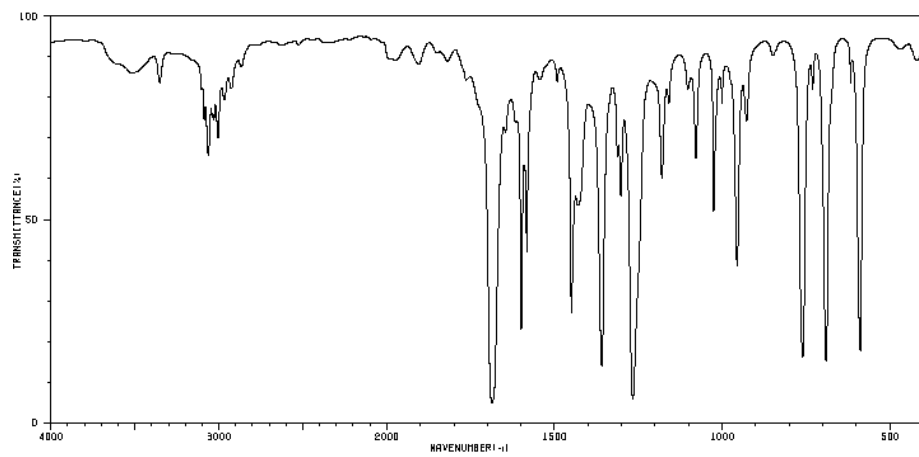


**Beispiel 1:** Summenformel:  $C_5H_{10}O$

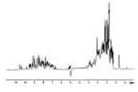


Interpretation:

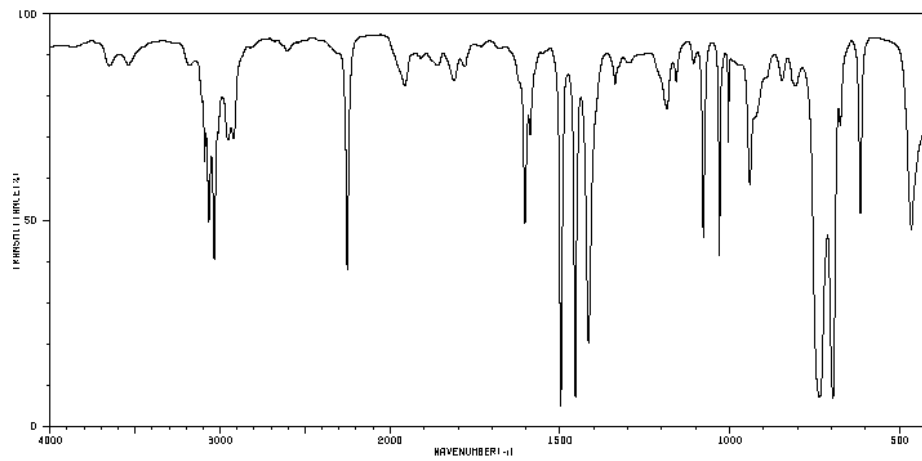
**Beispiel 2:** Summenformel:  $C_8H_8O$



Interpretation:

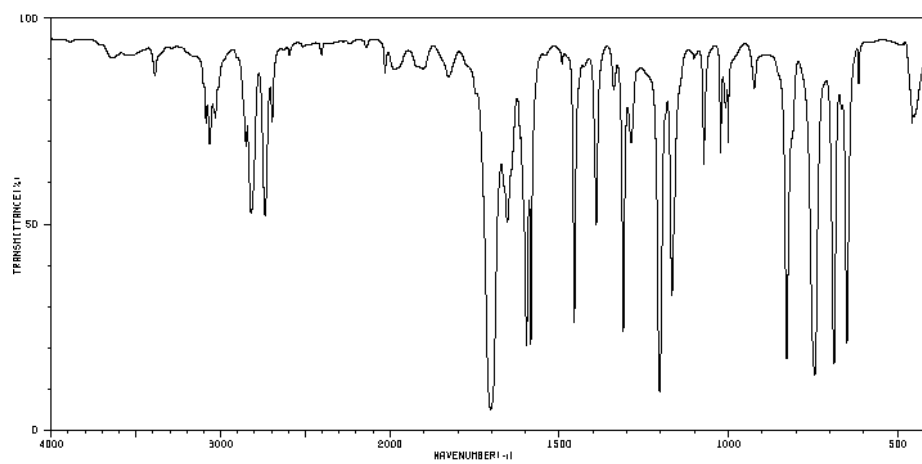


**Beispiel 3:  $C_8H_7N$**

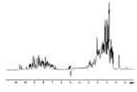


Interpretation:

**Beispiel 4: Summenformel:  $C_7H_6O$**



Interpretation:

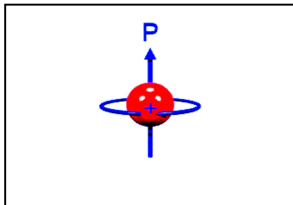
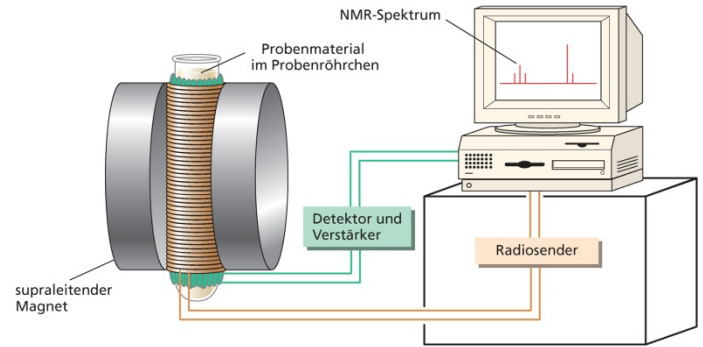


### 11.3 Kernresonanzspektroskopie oder NMR-Spektroskopie



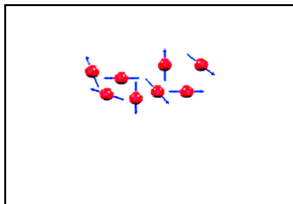
Der Name NMR-Spektroskopie leitet sich ab von der englischen Bezeichnung nuclear magnetic resonance (magnetische Kernresonanz). Bei der  $^1\text{H}$ -NMR-Spektroskopie wird die Absorption von Radiowellen durch

Wasserstoffverbindungen untersucht, die sich in einem starken homogenen Magnetfeld befinden. Daneben gibt es NMR-Arten, die sich auf  $^{31}\text{P}$  oder  $^{13}\text{C}$  spezialisieren. Aus Kernresonanzspektren kann heute am meisten Information von allen Spektroskopiearten herausgeholt werden.



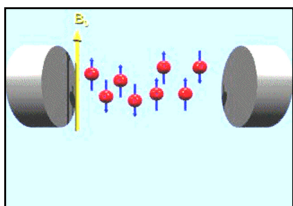
Der NMR-Effekt basiert auf magnetischen Eigenschaften von **Atomkernen**. Viele Atomkerne besitzen einen Eigendrehimpuls  $P$ , auch Kernspin genannt, der dem Kern besondere magnetische Eigenschaften verleiht. Vereinfacht betrachtet verhalten sich solche Kerne wie kleine Magnete.

Auch die Elemente Wasserstoff und Kohlenstoff, aus denen zum grössten Teil die Verbindungen der belebten Natur bestehen, besitzen mit den Isotopen  $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$  magnetisch aktive Kerne. Entsprechend können solche Verbindungen mit Hilfe dieser Methode besonders gut analysiert werden.



Die Spins der **Atomkerne** können sich beliebig im Raum ausrichten.

Dies ändert sich jedoch, wenn man die Kerne in ein statisches, homogenes Magnetfeld ( $B_0$ ) bringt. Wie bei zwei Magneten, die man einander annähert, wird die beliebige Ausrichtung im Raum aufgehoben, und es gibt für die Kernspins nur bestimmte Einstellungsmöglichkeiten relativ zum äusseren Magnetfeld.

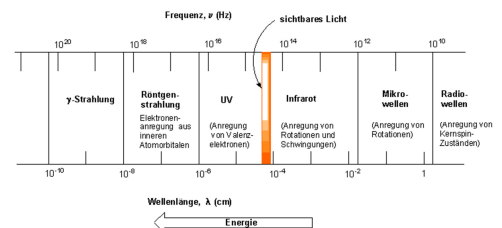


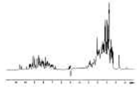
Beispiel: bei Kernen wie z.B.  $^1\text{H}$ ) gibt es zwei Ausrichtungsmöglichkeiten:

... zum äusseren Magnetfeld.

Zwischen diesen Einstellungen lässt sich durch Energiezufuhr in Form von elektromagnetischer Strahlung geeigneter Wellenlänge hin- und herschalten. Dieser Prozess wird als Anregung bezeichnet. Die benötigte Strahlungsenergie ist abhängig von

Die zur Änderung der Ausrichtung der Spins notwendige Strahlung ist relativ energiearm und liegt im Bereich der Radiowellen (s. elektromagnetisches Spektrum).





### 11.3.1 Exkurs: NMR und Nobelpreise

Felix Bloch (links, 1905-1982) und Edward Mills Purcell (rechts, 1912-1997), Nobelpreis für Physik 1952: nahmen die ersten NMR-Spektren in kondensierter Phase auf (in H<sub>2</sub>O bzw. Paraffin)

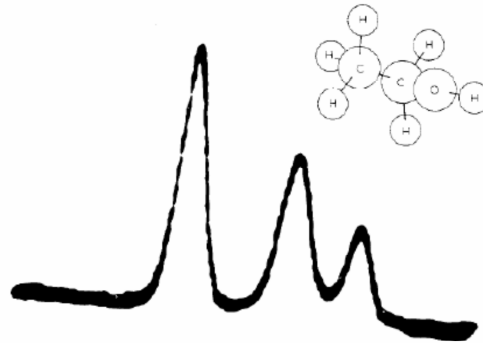


Fig. 6. The proton resonance in ethyl alcohol, observed with high resolution. The three lines arise from the CH<sub>3</sub> hydrogens, from the CH<sub>2</sub> hydrogens, and from the OH hydrogen, respectively.

Bloch: erstes <sup>1</sup>H-Spektrum von Wasser (mit MnSO<sub>4</sub>, links); Purcell: "hochaufgelöstes 1H-Spektrum von Ethanol" (rechts)

Richard R. Ernst (geb. 1933), Nobelpreis für Chemie 1991: Fourier-Transformations-NMR, zweidimensionale Techniken

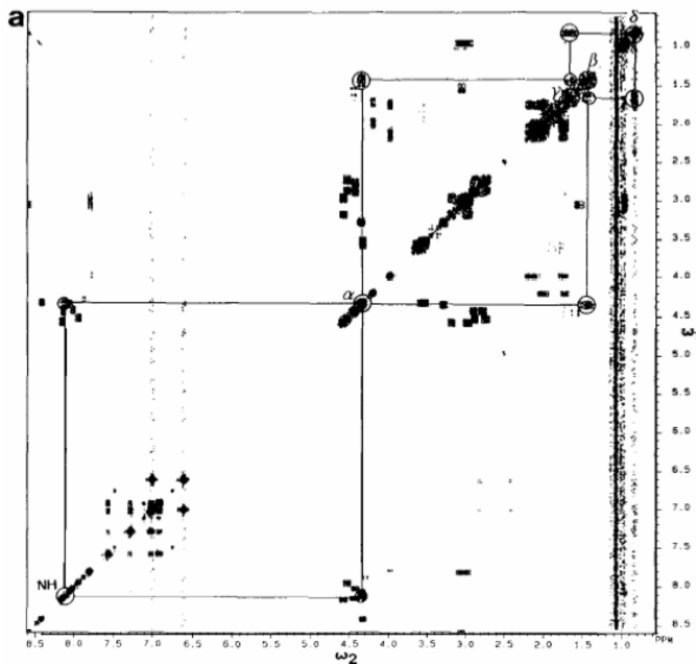
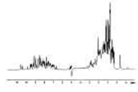
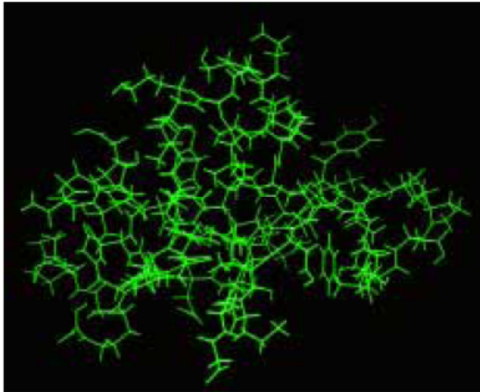


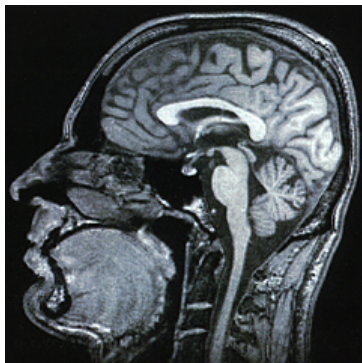
Figure 14. 300 MHz correlation spectra of the nonapeptide buserilin dissolved in dimethyl sulfoxide. Phase-sensitive plots with equal representation of positive and negative contours are shown. The resonance connectivities are indicated for leucine (79). (a) Double quantum-filtered



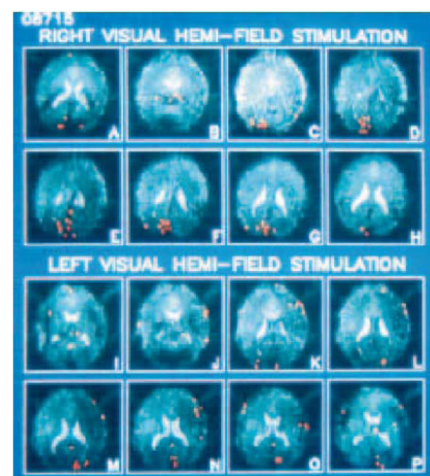
**Kurt Wüthrich (geb. 1938), Nobelpreis für Chemie 2002:**  
Anwendung der NMR-Spektroskopie zur Strukturbestimmung in Lösung von biologischen Makromolekülen (erste NMR-Struktur eines Proteins)



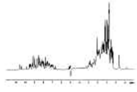
**Paul C. Lauterbur (links, geb. 1929),  
Sir Peter Mansfield (rechts, geb. 1933),  
Nobelpreis für Medizin 2003:**  
bildgebende NMR-Verfahren (MRI, *magnetic resonance imaging*), Kernspintomographie



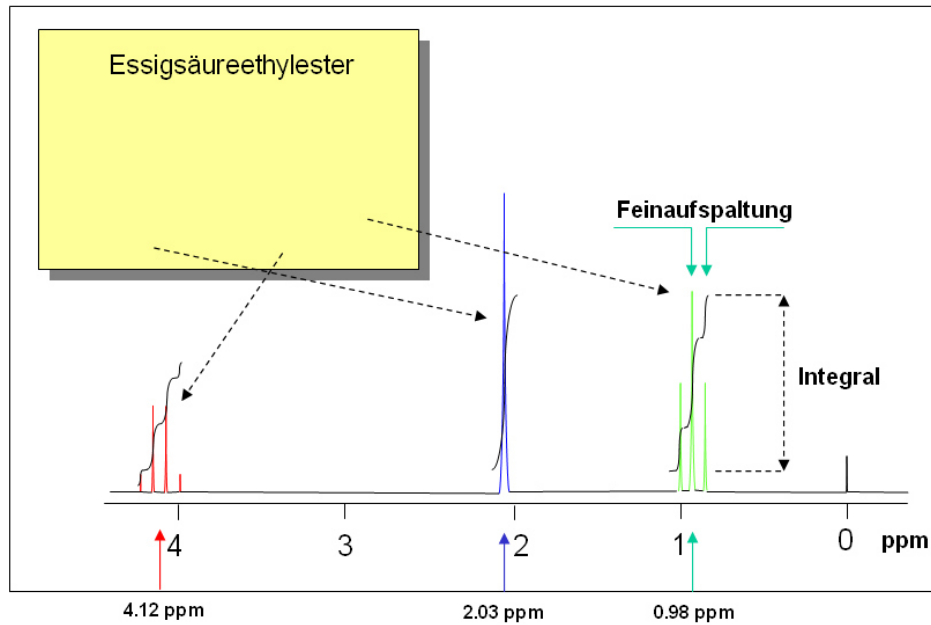
**fMRI (functional MRI) - Nobelpreis steht noch aus ... :**  
Aktive Hirnbereiche verbrauchen mehr Sauerstoff; Sauerstoff verändert die magnetischen Eigenschaften des Gewebes. In der Kernspintomographie können deswegen aktive Gehirnregionen erkannt werden („Gedanken lesen“)







### 11.3.2 Das $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum



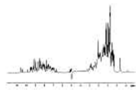
Das NMR-Spektrum liefert Informationen über:

Anzahl chemisch verschiedener Kerne einer Kernsorte

chemische Umgebung bzw. Bindungssituation durch chemische Verschiebung, der Lage der Resonanzen auf der ppm-Skala

Anzahl der Protonen in der Nachbarschaft über die Signalstruktur bzw. Feinaufspaltung des Signals durch Kopplungen

relatives Verhältnis der Protonen zueinander über das Integral (Fläche unter der Kurve) des Signals



### 11.3.3 Anzahl NMR-Signale

Rein gefühlsmässig ist diese Frage sehr einfach zu beantworten: haben zwei Kerne die gleiche chemische Umgebung (Symmetrie), so werden sie auch die gleiche chemische Verschiebung aufweisen, d.h. am gleichen Ort im Spektrum absorbieren. Man nennt solche Kerne äquivalent.

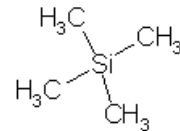
Oder anders formuliert:

Chemisch nicht-äquivalente Kerne haben eine unterschiedliche elektronische Umgebung, z.B. die C-Kerne in  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ . An den beiden C-Kernen wirkt ein unterschiedliches Magnetfeld ( $B_{\text{eff}}$ ), somit haben beide C-Kerne eine unterschiedliche Resonanzfrequenz  $\nu_i$  und ergeben letztendlich im Spektrum zwei getrennte Signale.

#### Chemisch äquivalente Kerne

Chemisch äquivalente Kerne, d.h. Kerne mit der gleichen elektronischen Umgebung, ergeben im NMR-Spektrum nur ein Signal.

Beispiel: Tetramethylsilan (TMS)



Im Tetramethylsilan haben alle Protonen und alle C-Atome die gleiche elektronische Umgebung. Somit erscheint sowohl im  $^1\text{H}$ - als auch im  $^{13}\text{C}$ -Spektrum jeweils nur ein Signal. Dass es im  $^{29}\text{Si}$ -Spektrum ebenfalls nur ein Signal gibt, ist selbstverständlich, da nur ein Si-Atom im Molekül vorkommt.

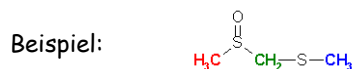
$^1\text{H}$ -Spektrum: 1 Signal

$^{13}\text{C}$ -Spektrum: 1 Signal

$^{29}\text{Si}$ -Spektrum: 1 Signal

#### Chemisch nicht-äquivalente Kerne

Chemisch nicht-äquivalente Kerne, d.h. Kerne mit einer unterschiedlichen elektronischen Umgebung, ergeben im NMR-Spektrum getrennte Signale.



Betrachtet man die Protonen der  $\text{CH}_3$ - (links),  $\text{CH}_3$ - (rechts) und  $\text{CH}_2$ -Gruppe zueinander, so sind diese nicht-äquivalent, da deren elektronische Umgebung verschieden ist. Zum Beispiel haben die Protonen der  $\text{CH}_3$ -Gruppe (links) eine  $\text{S}(\text{O})\text{CH}_2$ -Gruppe in der Nachbarschaft, wogegen an die  $\text{CH}_3$ -Gruppe (rechts) eine  $\text{SCH}_2$ -Gruppe grenzt.

Betrachtet man nun die Protonen der drei Gruppen in sich, so sind diese chemische äquivalent, z.B. die 3 Protonen der  $\text{CH}_3$ -Gruppe (links).

Deshalb gibt es im  $^1\text{H}$ -Spektrum drei Signale: eins für die  $\text{CH}_3$ -Gruppe (links), eins für die  $\text{CH}_3$ -Gruppe (rechts) und eins für die  $\text{CH}_2$ -Gruppe.

Analoge Betrachtungen gelten für die C-, O- und S-Spektren.

$^{13}\text{C}$ -Spektrum: 3 Signale

$^{17}\text{O}$ -Spektrum: 1 Signal

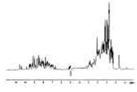
$^{33}\text{S}$ -Spektrum: 2 Signale

Bei den folgenden Molekülen erwarten wir so viele Signale, wie angegeben (Angabe für C):

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-Br}$   
a b  
2 Signale

$\text{CH}_3\text{-CHBr-CH}_3$   
a b a  
2 Signale

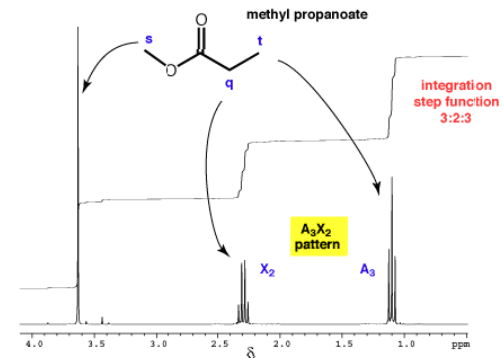
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{Br}$   
a b c  
3 Signale



### 11.3.4 Die Fläche der Absorptionsbanden (Integral)

Die Fläche eines Peaks entspricht der Menge der Wasserstoffatome, die die gleiche Verschiebung haben. Elektronisch wird diese Fläche durch Integration bestimmt und mit einem Schreiber in das Spektrum hinein gezeichnet. Je höher diese Kurve ist, umso mehr Protonen enthält die Fläche.

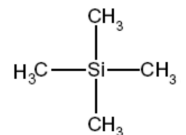
Als Beispiel folgendes Spektrum von Methylpropylester



### 11.3.5 Chemische Verschiebung

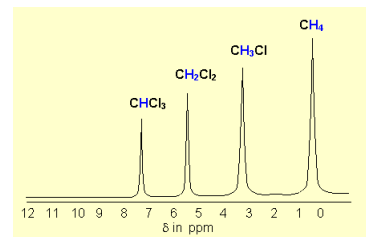
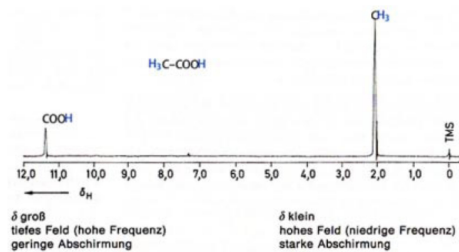
Das Absorptionsverhalten ist von der Elektronendichte und damit auch vom Bindungspartner des H-Atoms abhängig. Dieser als **chemische Verschiebung** bezeichnete Effekt macht die NMR-Spektroskopie natürlich für die Chemie interessant, denn **H-Atome mit unterschiedlicher chemischer Umgebung geben sich im NMR-Spektrum durch verschiedene Signale zu erkennen.**

Chemische Verschiebungen  $\delta$  ('Delta') werden relativ zu Tetramethylsilan ((CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>Si, TMS) als Vergleichssubstanz gemessen. Aufgrund der geringen Elektronegativität des Siliciums ist die Abschirmung der Protonen im TMS grösser als in den meisten organischen Verbindungen.



**Je kleiner die Abschirmung umso grösser ist die chemische Verschiebung  $\delta$  oder sehr salopp: Je nackter umso weiter links, desto grösser die Verschiebung  $\delta$ .**

Beispiele einiger <sup>1</sup>H chemische Verschiebungen:



Elektronenziehende Gruppen verringern die Abschirmung:

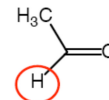
CH<sub>3</sub>F  $\delta=4.27$  ppm

CHF<sub>3</sub>  $\delta=6.49$  ppm

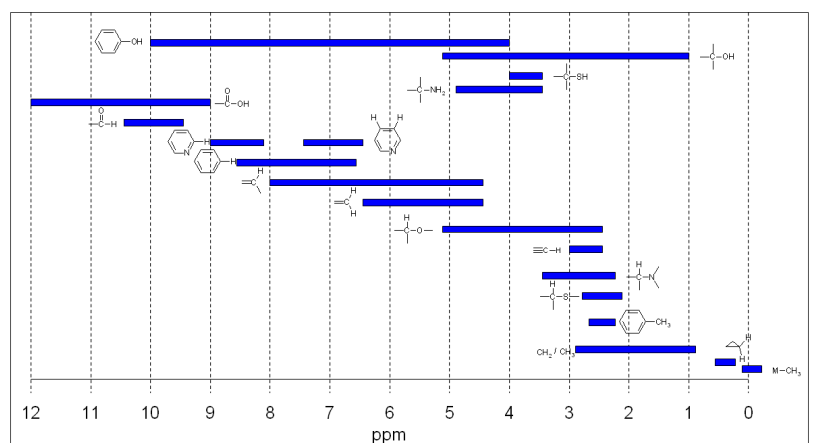
CH<sub>3</sub>Cl  $\delta=3.06$  ppm

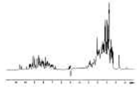
C  $\equiv$  C und insbesondere C=O führen zu starker Entschirmung:

H  $\delta=9.80$  ppm



<sup>1</sup>H-Chemische Verschiebungen von organischen Verbindungen (Hinweis: es sind jeweils die H-Atome gemeint, welche 'ausgeschrieben' sind).





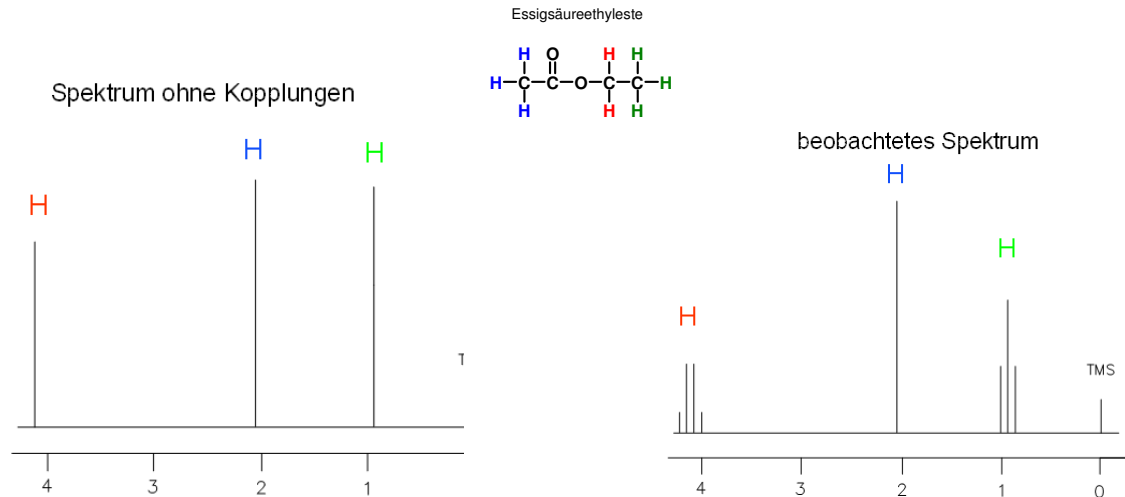
### 11.3.6 Kopplungen

NMR-aktive Nachbarkerne, insbesondere Kerne mit einem Spin von  $I=1/2$ , bewirken über magnetische Kopplungen eine Feinaufspaltung der Resonanz, da das Eigenmagnetfeld der Nachbarkerne das Magnetfeld am Kernort und damit die Lage der Resonanz der gerade beobachteten Kernsorte beeinflusst.

Farbkodierung: blau ( $\text{CH}_3$ ) links von  $\text{COO}$ , grün rechts ( $\text{CH}_3$ ) und rot mittlere ( $\text{CH}_2$ )  
Somit: rote Kerne beeinflussen grüne Kerne, grüne Kerne beeinflussen rote Kerne, blaue Kerne werden nicht beeinflusst, da sich in **direkter** Nachbarschaft keine Protonen befinden.

Relative Peak Areas for Multiple Peaks

			1		
		1	2	1	
	1	3	3	1	
1	4	6	4	1	
1	5	10	10	5	1



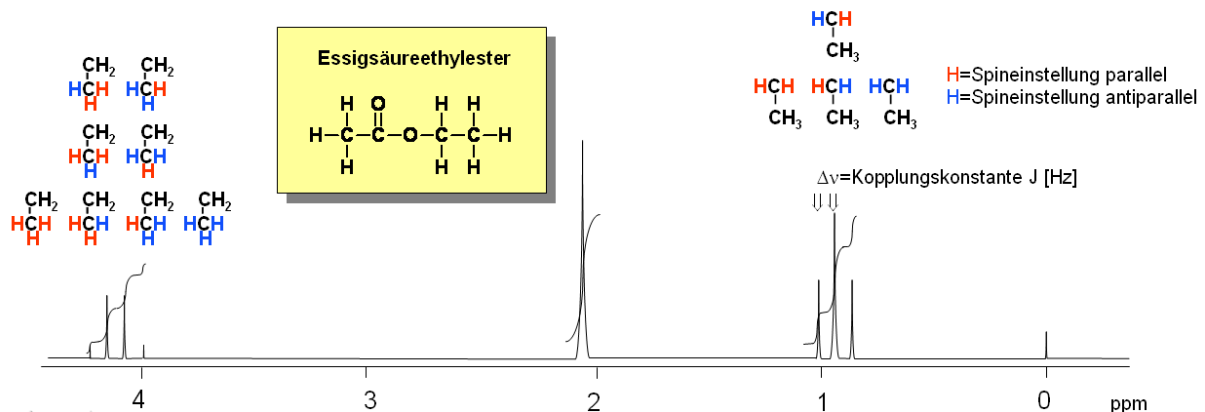
#### Kopplungen

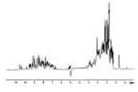
Die Spins der Protonen in der Nachbarschaft einer beobachteten Protonensorte können sich entweder parallel oder antiparallel relativ zum äusseren Magnetfeld einstellen. Daraus resultierenden Einstellungsmöglichkeiten ergeben aus der Statistik.

Beispiel:  $\text{CH}_2$ -Gruppe (Signal bei 4.12 ppm); für die Einstellung der Protonen in der Nachbar- $\text{CH}_3$ -Gruppe ergeben sich folgende Einstellungszustände

- alle drei Protonen sind antiparallel ausgerichtet: 1 Möglichkeit
- zwei Protonen sind antiparallel und ein Proton ist parallel ausgerichtet: 3 Möglichkeiten
- ein Proton ist antiparallel und zwei Protonen sind parallel ausgerichtet: 3 Möglichkeiten
- alle drei Protonen sind parallel ausgerichtet: 1 Möglichkeit

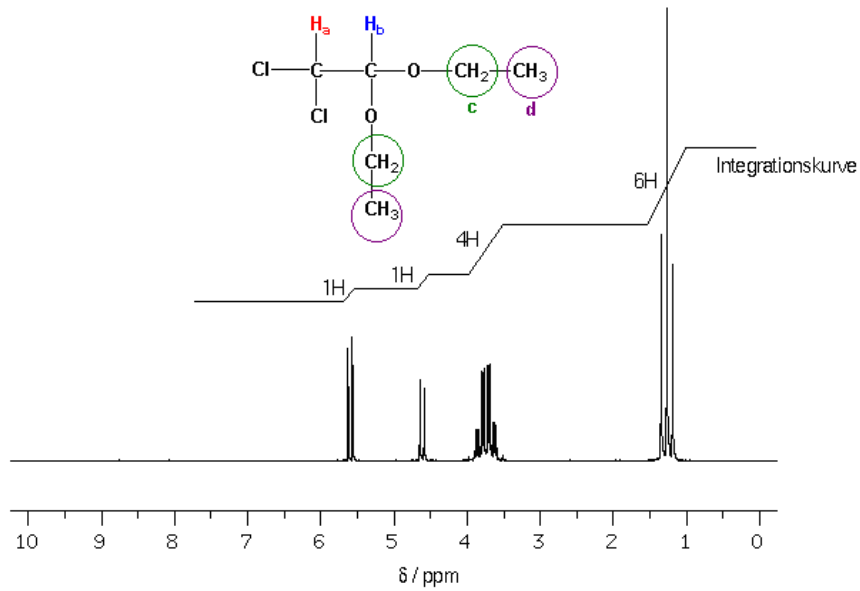
Die Grösse der Feinaufspaltung (Abstand zwischen den einzelnen Linien in Hz) wird als Kopplungskonstante  $J$  bezeichnet.





## Übungen

Übung: Betrachte folgendes Beispiel und weise die Peaks den Atomen H<sub>a</sub>, H<sub>b</sub> resp. c) und d) zu.



Weitere Aufgabe: verstehe folgendes Spektrum

