

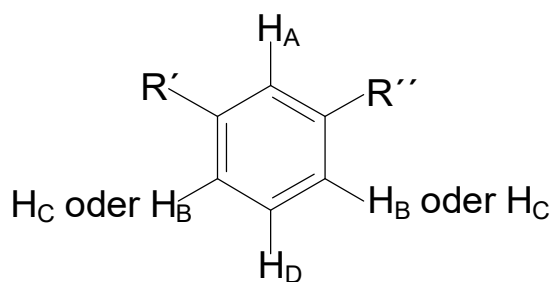
Lösung zu Aufgabe 1

Das Spektrum zeigt 6 deutlich getrennte Signalgruppen. Für die weitere Auswertung ist es günstig, die scheinbare Struktur der Multipletts **A** bis **D** auszuwerten. Unter scheinbarer Multiplettstruktur soll hierbei verstanden werden, daß sich z.B. hinter einem Triplet auch ein Dublett von Dubletts mit sehr ähnlichen Kopplungskonstanten verbergen kann. Diese Unterscheidung wird hier aber nicht betrieben. Die Ergebnisse dieser ersten Auswertung faßt die Tabelle zusammen.

δ [ppm]	Integral	Kopplungen
≈ 8.3 (A)	n . 1	t (2.0 Hz)
≈ 8.2 (B)	n . 1	ddd (8.2 Hz, 2.4 Hz, 1.2 Hz)
≈ 7.8 (C)	n . 1	dt (7.7 Hz, 1.4 Hz)
≈ 7.55 (D)	n . 1	t (8.0 Hz)
≈ 5.9	n . 1	s
≈ 4.1	n . 4	m

Aus dieser Darstellung sollte erkannt werden, daß die große Kopplung im Bereich der aromatischen Protonen zweimal zu einer Dublett- und einmal zu einer Triplettaufspaltung führt.

Selbstverständlich sind auch Aromaten denkbar, die sich nicht vom Benzol ableiten. Der erste Versuch sollte aber immer beim substituierten Benzol starten. Wegen der ausdrücklich herausgestellten Kopplungskonstanten kommt hier nur ein m-substituiertes Benzol in Frage.

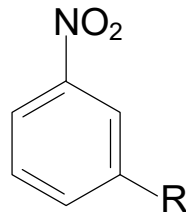


H_D zeigt zwei (große) vicinale Kopplungen zu H_C und H_B , das resultierende Dublett sieht wegen der vergleichbar großen Kopplungskonstanten wie ein Triplet aus. H_A zeigt ebenfalls triplettartige Struktur durch Kopplungen zu H_C und H_B , jedoch mit deutlich kleineren Kopplungskonstanten (4J).

Mit dem angenommenen m-disubstituierten Benzol korrelieren die sechs Kohlenstoffsignale zwischen 121.38 und 148.01 ppm (4CH und zwei quartäre Kohlenstoffe).

Ein Substituent des Benzolringes könnte eine Nitrogruppe sein. Diese Vermutung resultiert

- aus dem scharfen Protonensignal bei 5.9 ppm, das so von einem Amin kaum zu erwarten ist (das Multipllett bei 4.1 ppm kommt für Aminprotonen sowieso nicht in Frage) und -
- der großen Zahl der aus der Summenformel verfügbaren Sauerstoffatome.



Unter der Annahme eines substituierten Nitrobenzols bleiben bei der gegebenen partiellen Summenformel folgende Atome bis jetzt nicht zugeordnet:

- 2O,
- 5H (wegen des Integrals) und
- 3C (ein CH bei 101.96 ppm und zwei identische CH₂ bei 65.28 ppm).

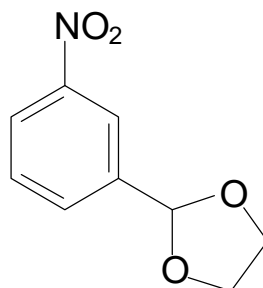
Die zwei identischen C-Atome resultieren aus den 4 Protonen bei 4.1 ppm.

Das Fragment weist ein Doppelbindungsäquivalent auf.

Das komplizierte Kopplungsmuster der 4 Protonen mit einer chemischen Verschiebung von 4.1 ppm kann nur durch Kopplung dieser Protonen untereinander entstehen. Die beiden CH₂-Gruppen (CH₂ resultiert aus dem DEPT-Spektrum) sind damit benachbart. Da jetzt nur noch ein Restfragment der Summenformel CH₂O zuzuordnen ist, läßt sich die ausgeprägte Tieffeldverschiebung der Methylenprotonen nur durch benachbarten Ethersauerstoff erklären.



Für die jetzt noch verbleibende CH-Gruppe gibt es nur noch eine Anordnungsmöglichkeit unter Bildung der Zielverbindung



Zum Verständnis des Spinsystem der Methylenprotonen benötigt man die Geometrie des 5-Ringes. Dieser weist auf alle Fälle eine Spiegelebene auf. Diese schneidet zum einen den Methinkohlenstoff und zum anderen die Bindung zwischen den beiden Methylenkohlenstoffatomen. Damit ergibt sich ein AA'BB'-Spinsystem.

