

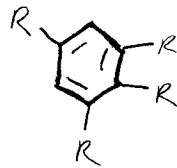
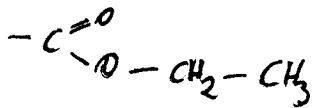
Spektroskopie und Beugung (NMR) SS 2004 Klausur (1. Nachholklausur)

9.9.2004

Frage 1: (9 Punkte)

Auf Seite 2 ff sind die NMR-Spektren einer Substanz mit folgender Summenformel abgebildet: $C_9H_7O_2I_3$

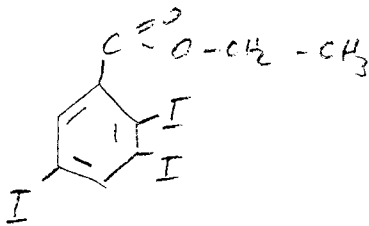
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des 1H -, ^{13}C - und DEPT-Spektren? (3 P)

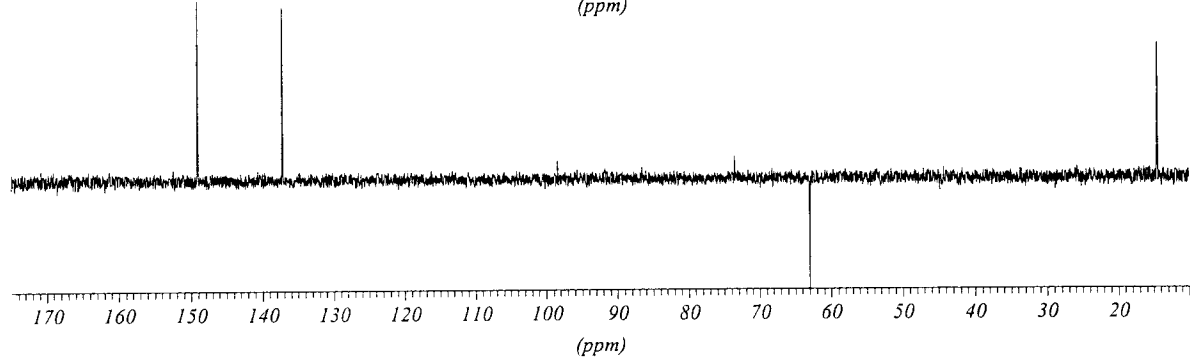
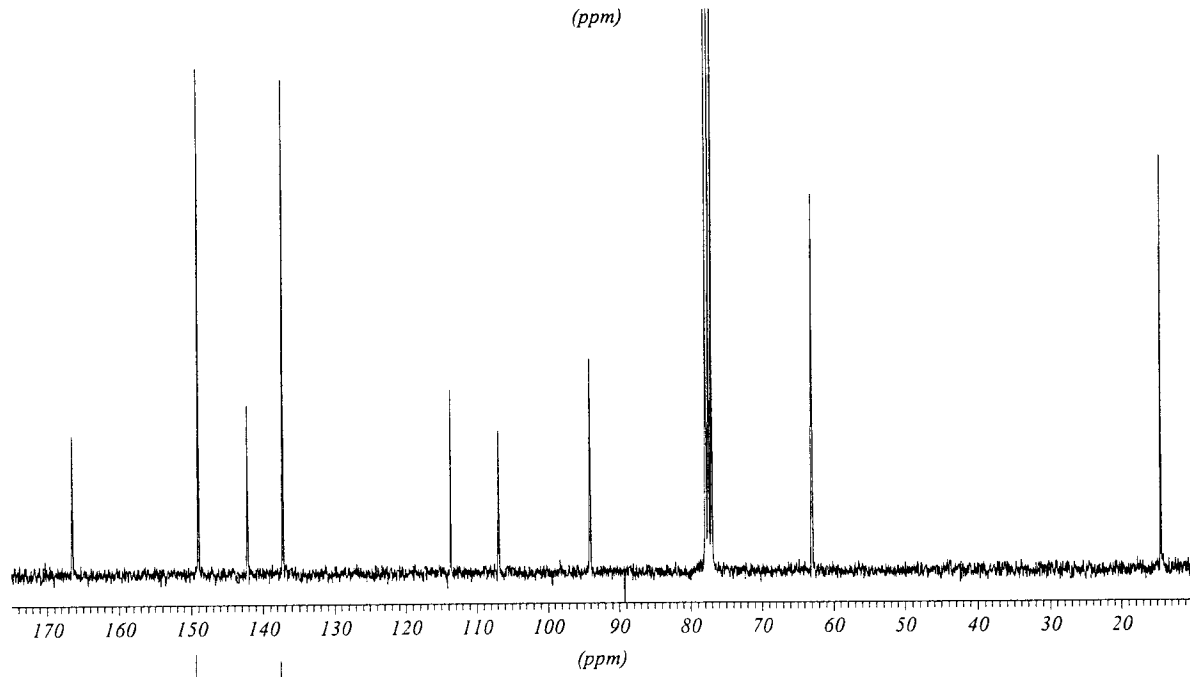
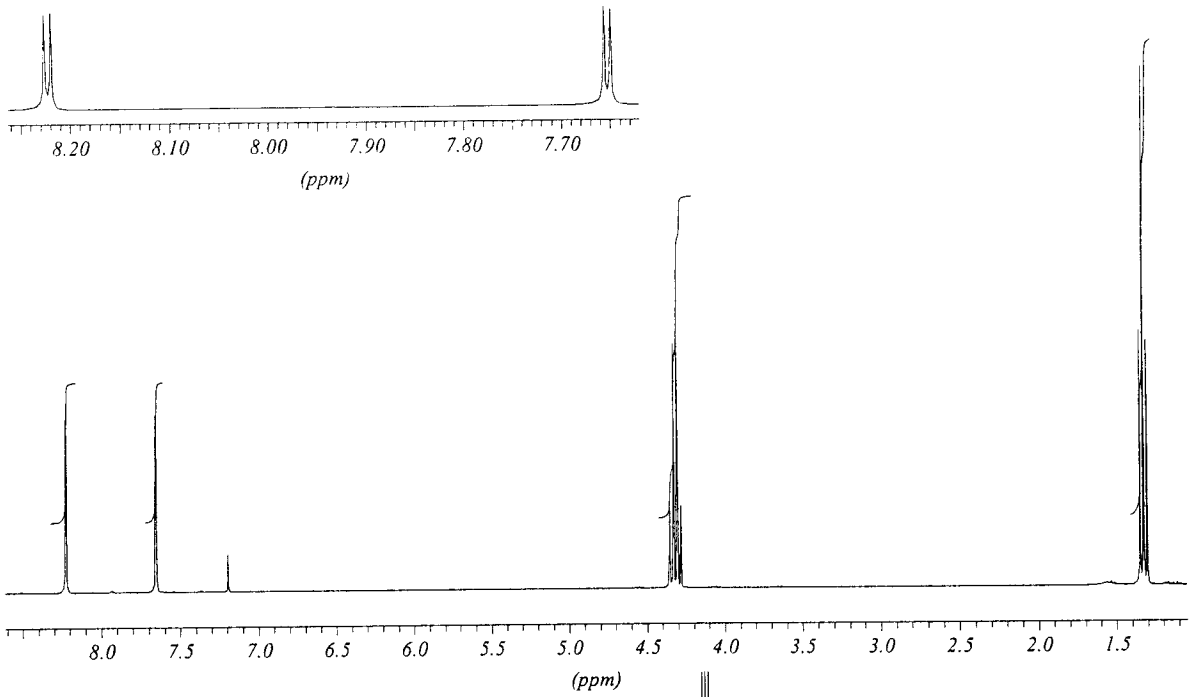


2 x I

→ muß unsymmetrisch sein!

2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

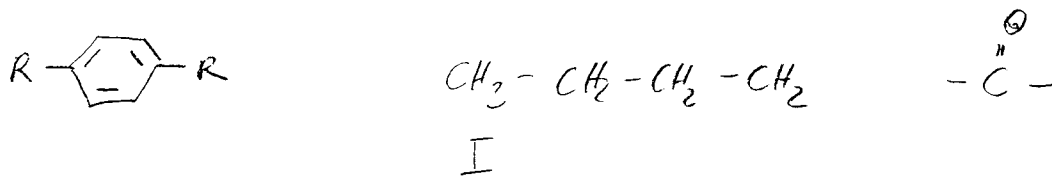




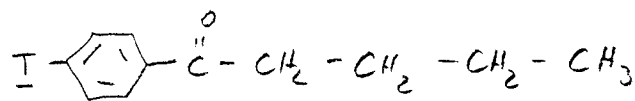
Frage 2: (9 Punkte)

Auf Seite 4 ff sind die NMR-Spektren einer Substanz mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{11}H_{13}OI$

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des 1H -, ^{13}C - und DEPT-Spektren? (3 P)

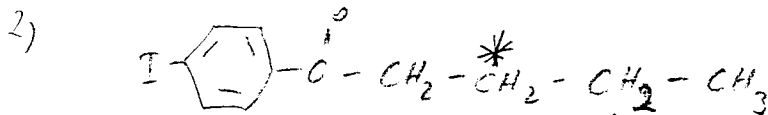
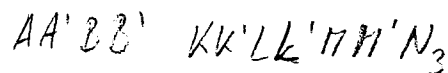


2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

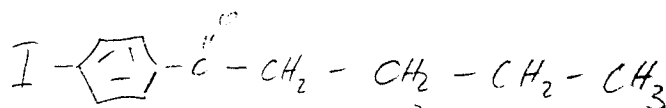


3. Die Multipletts bei 1.3 ppm und 1.6 ppm zeigen zusätzliche kleine Aufspaltungen und „Buckel“, die nicht zu einem Spektrum 1. Ordnung passen. Welche 2 Gründe gibt es? (4 P)

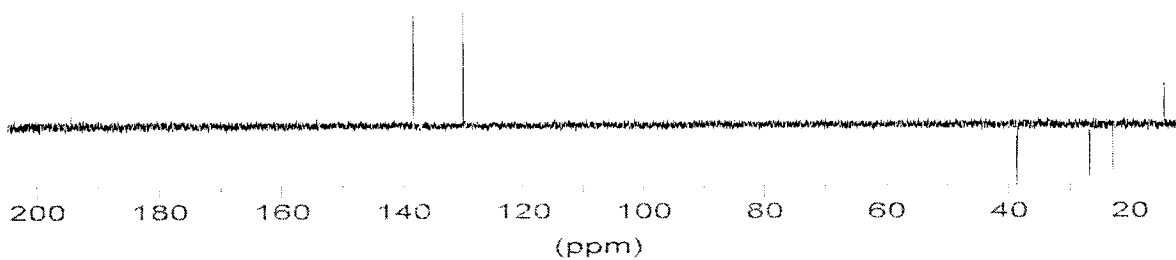
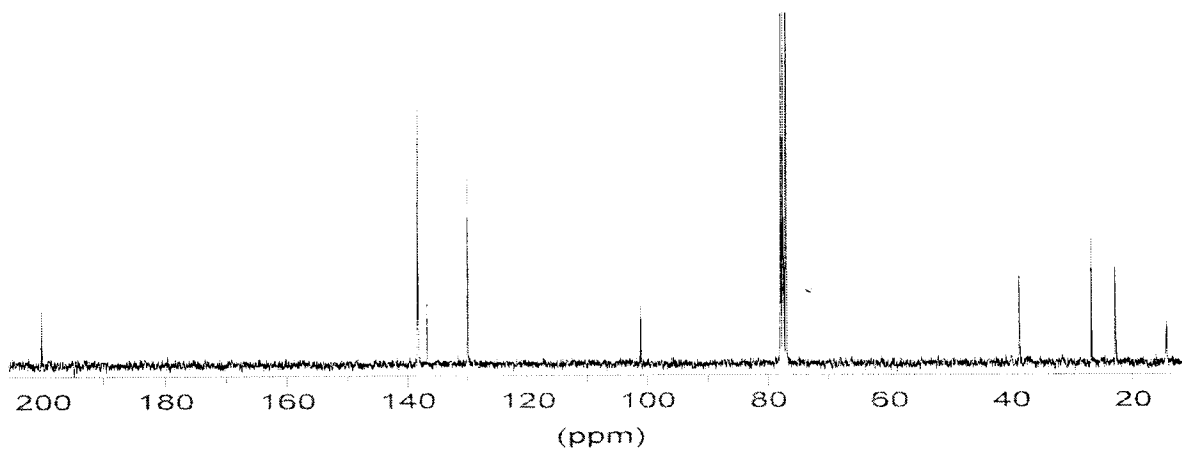
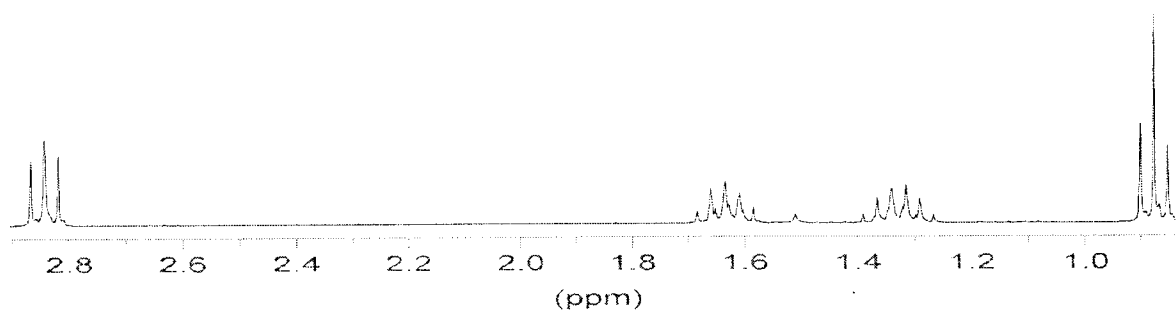
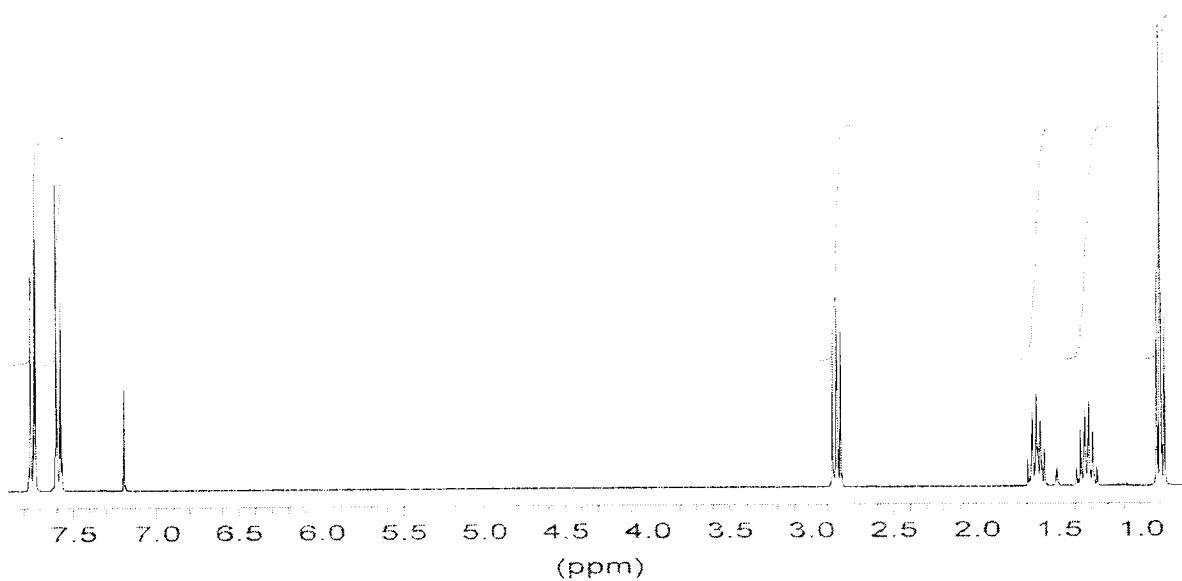
1) System höherer Ordnung



diese 2- CH_2 -Gruppen sind etwas unterschiedlich. Deshalb darf man die Protonen nicht zusammenzählen (=4Hs) und auf ein „sauberes“ Quintett hoffen (bei markierter $-CH_2^*$ -Gruppe)

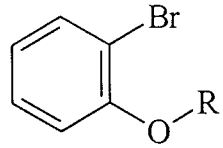


unterschiedliche Protonen \rightarrow kein „sauberes“ Sextett



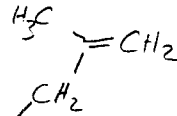
Frage 3: (11 Punkte)

Auf Seite 6 sind die NMR-Spektren einer Substanz mit folgender Summenformel abgebildet:
 $C_{10}H_{11}OBr$.

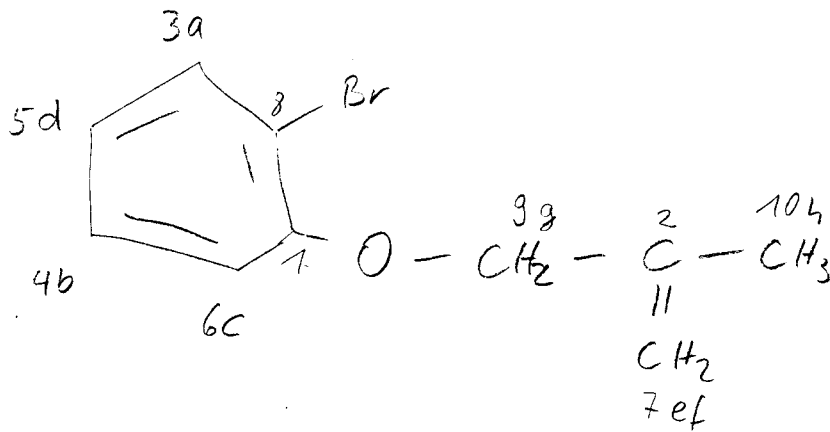


Struktur:

1. Bestimmen Sie den Rest R. (3 P)



2. Ordnen Sie die Signale aus 1H - und ^{13}C -Spektren zu. (8 P)



cosy

a - d - b - c

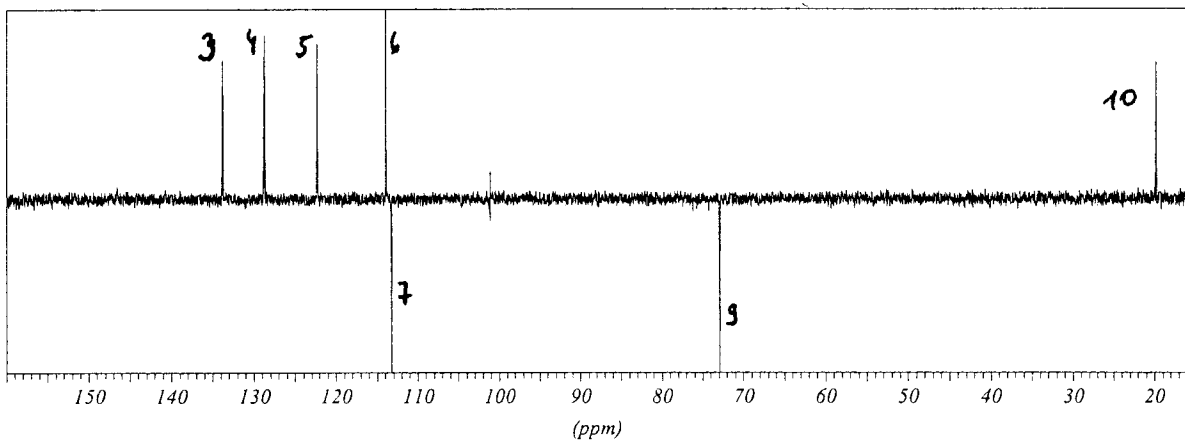
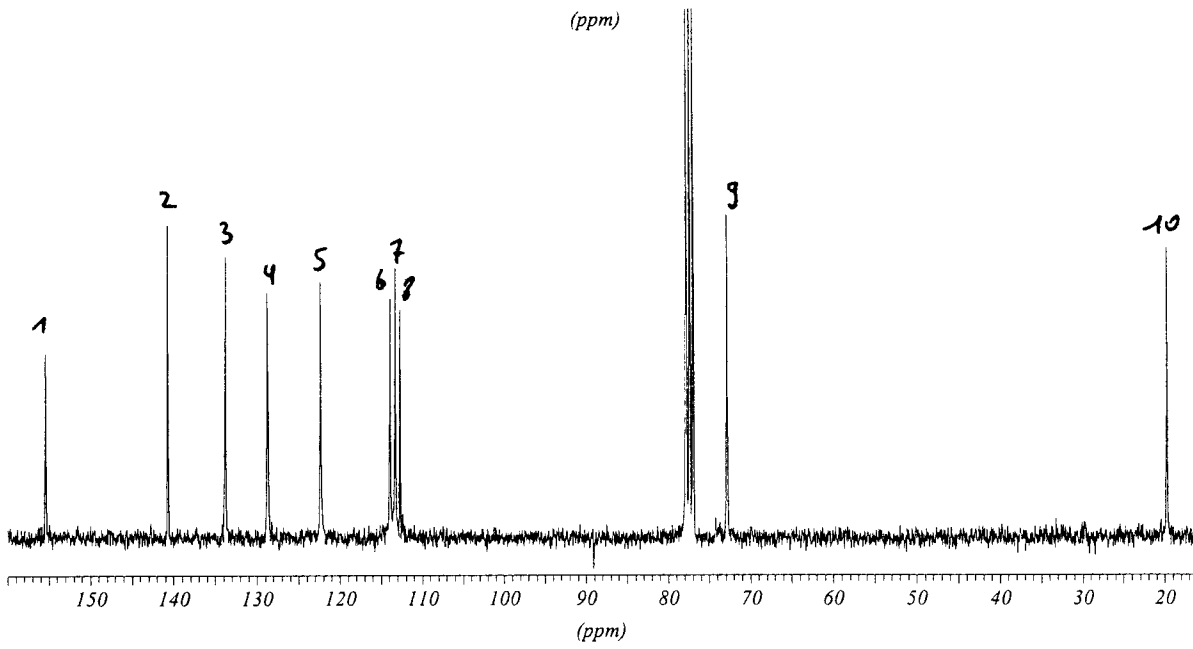
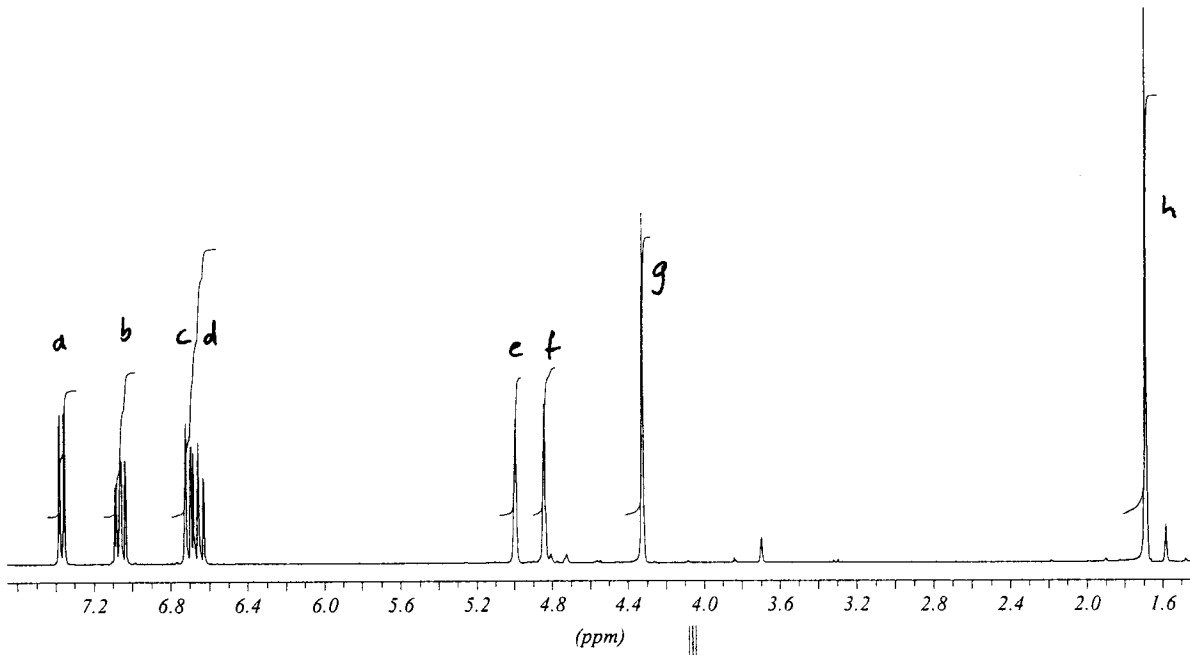
hetero 3 5 4 6

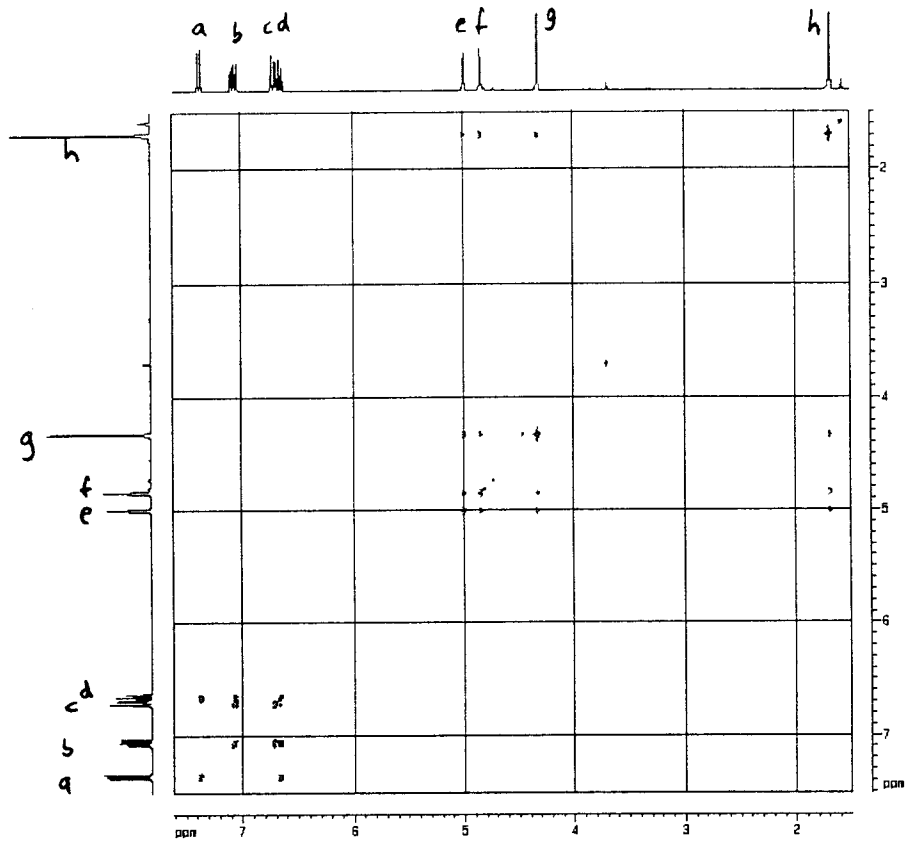
hmbc

2 → g + h

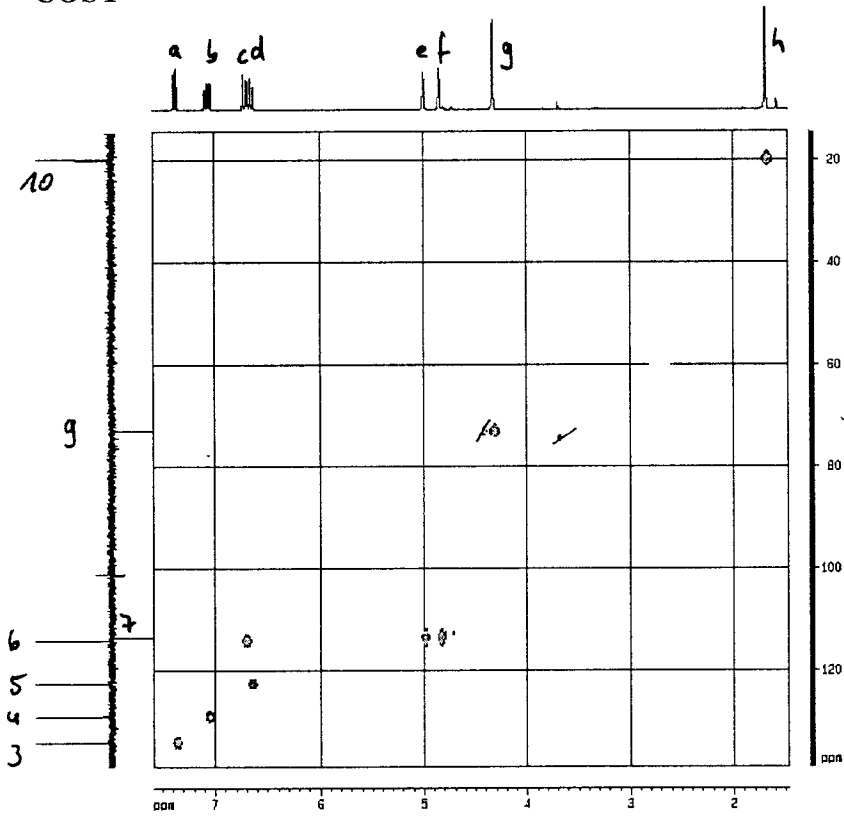
1 → g

1 → a + b

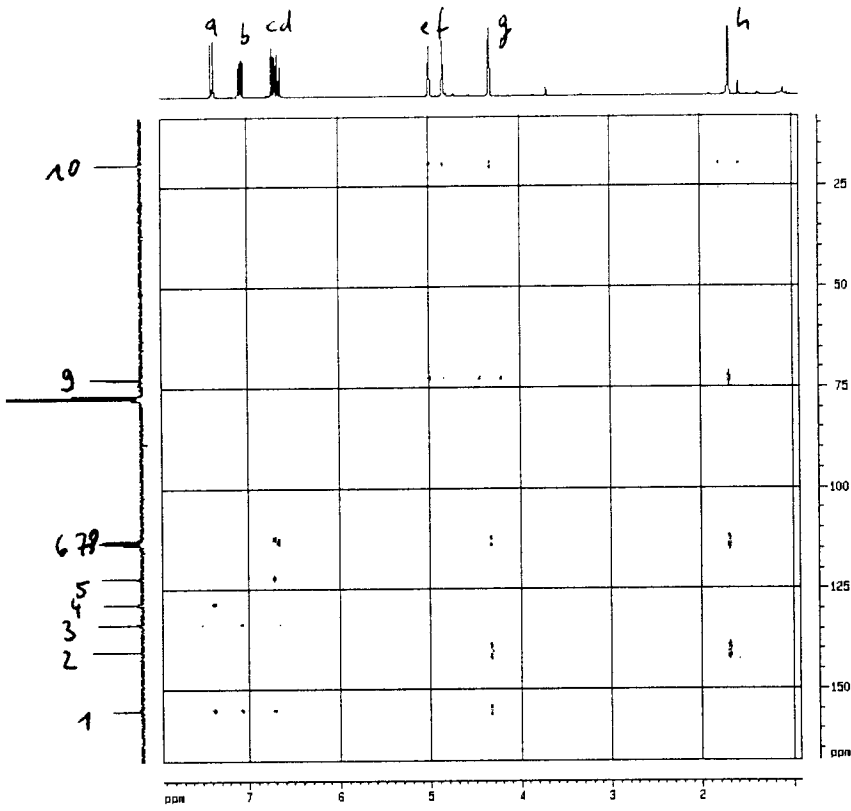




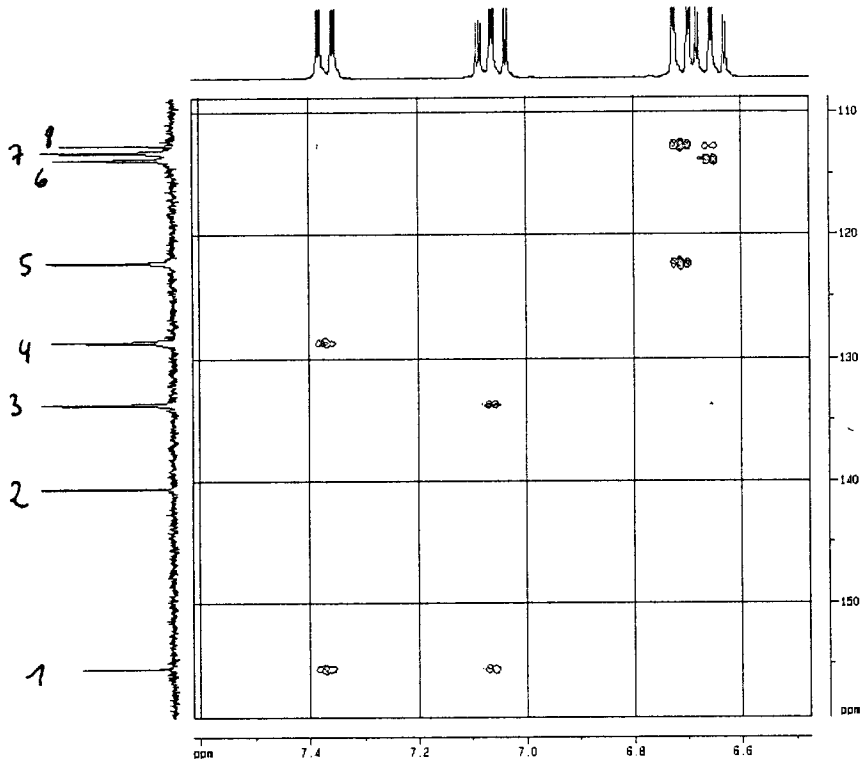
COSY



HSQC



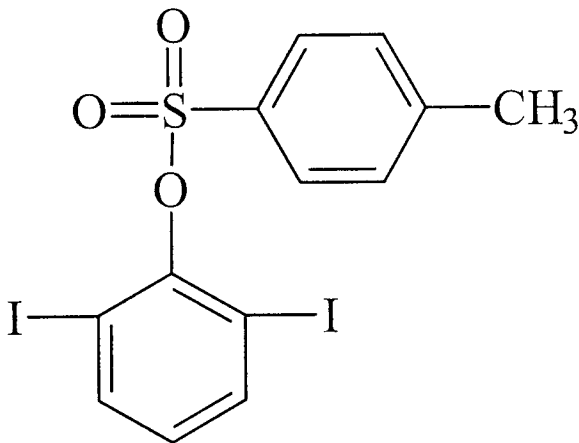
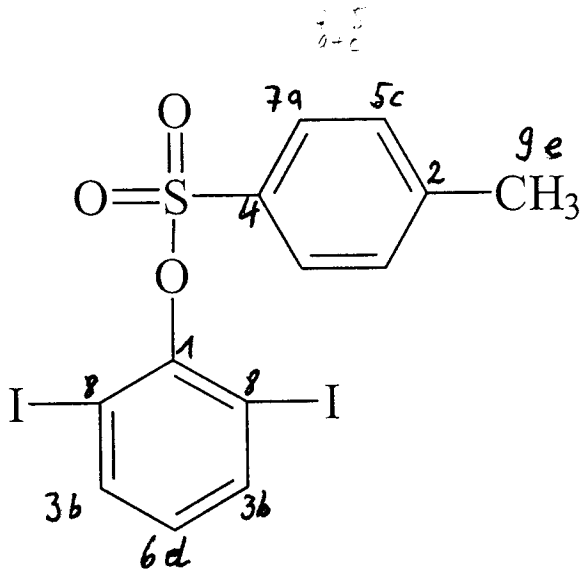
HMBC



HMBC vergrößert

Frage 4: (10 Punkte)

Auf Seite 10 ff sind die NMR-Spektren folgender Verbindungen gegeben

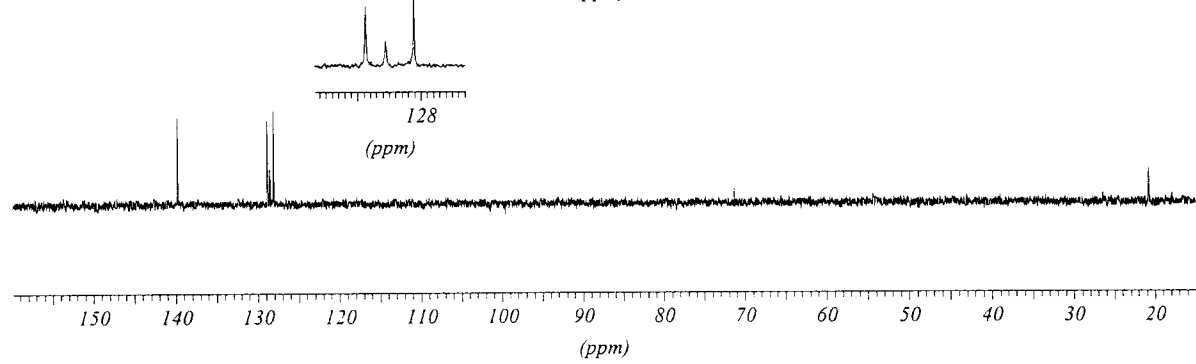
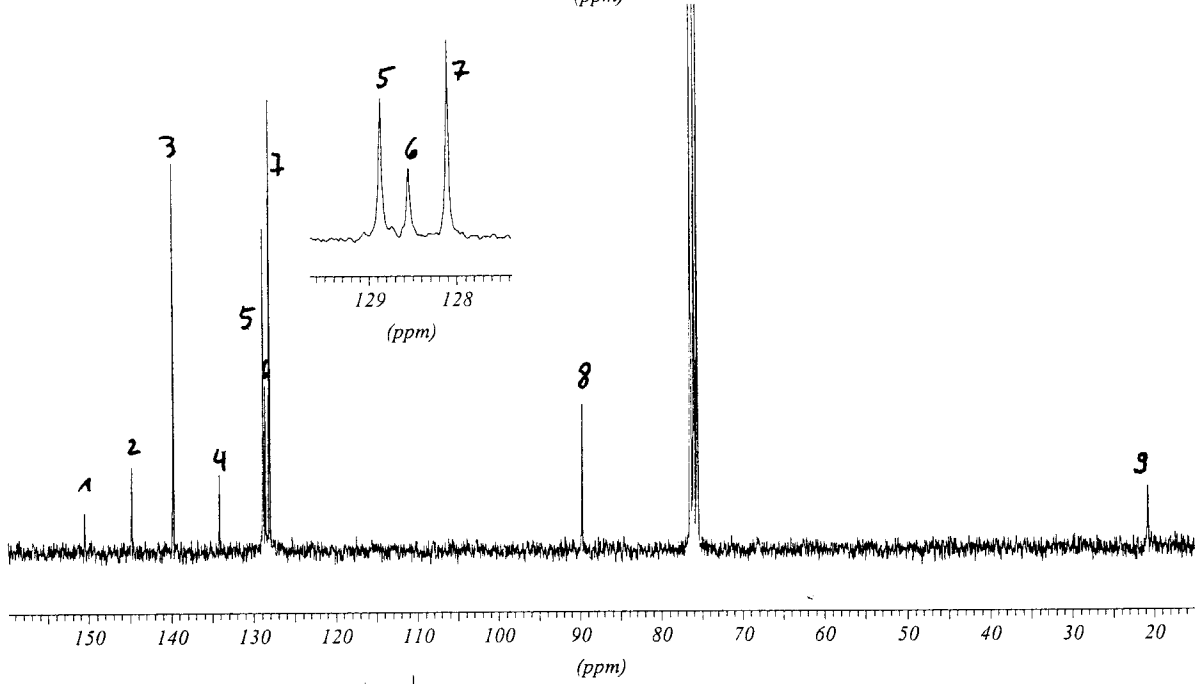
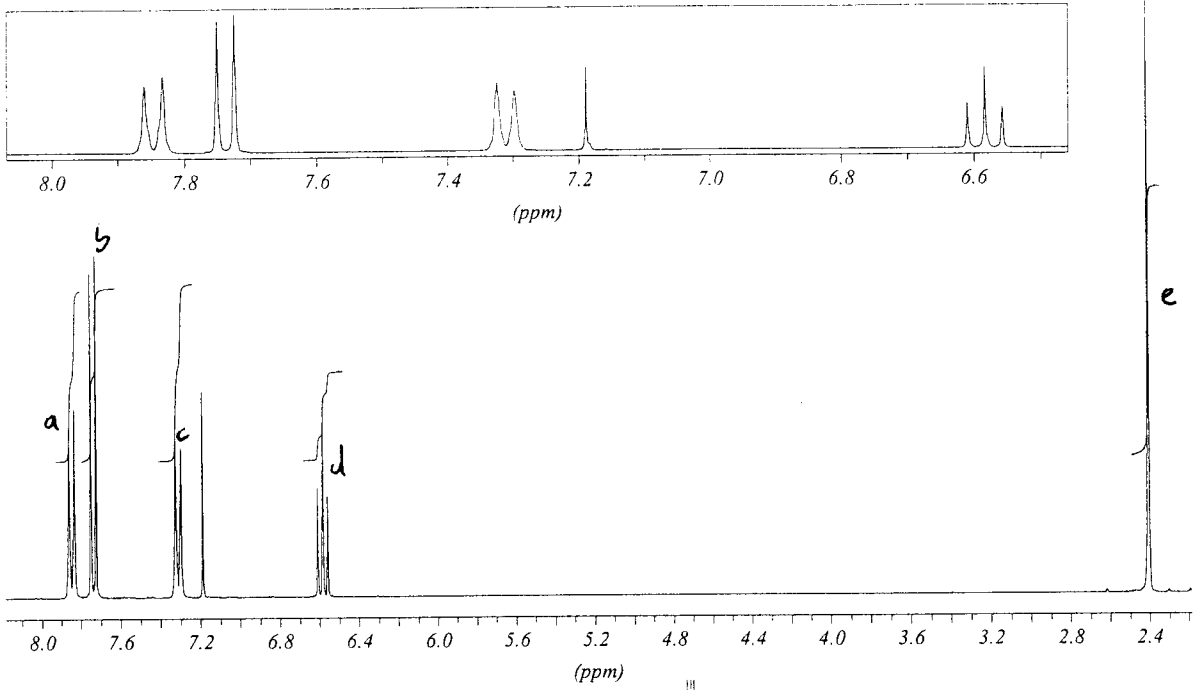


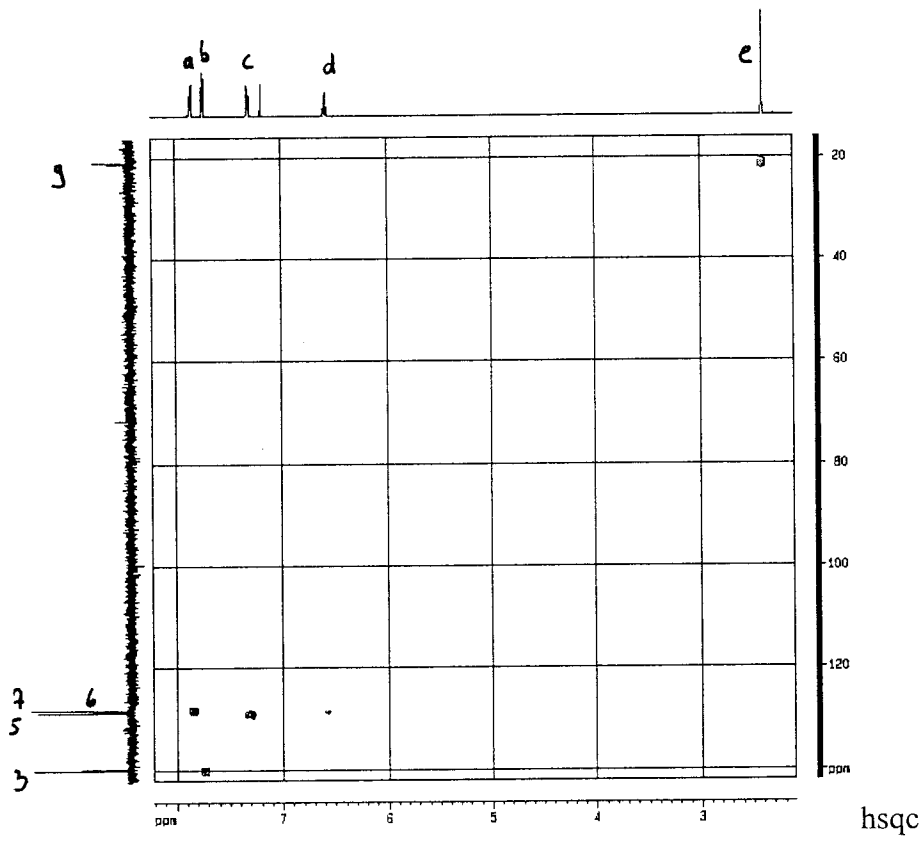
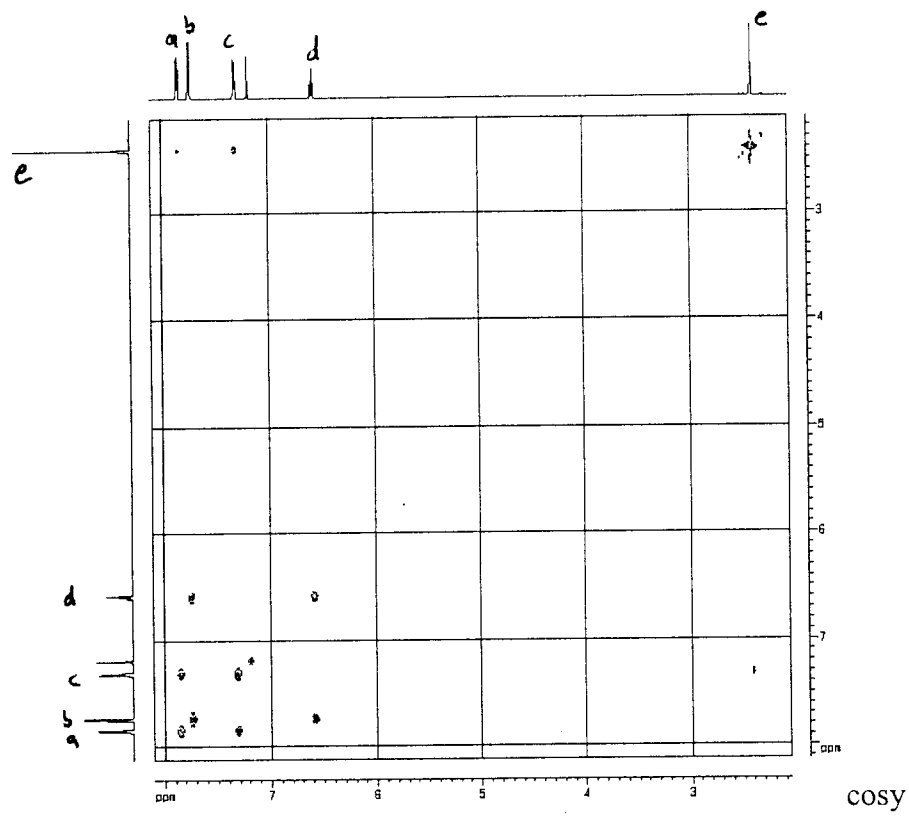
Ordnen Sie alle Signale (^1H und ^{13}C) zu (7 P)

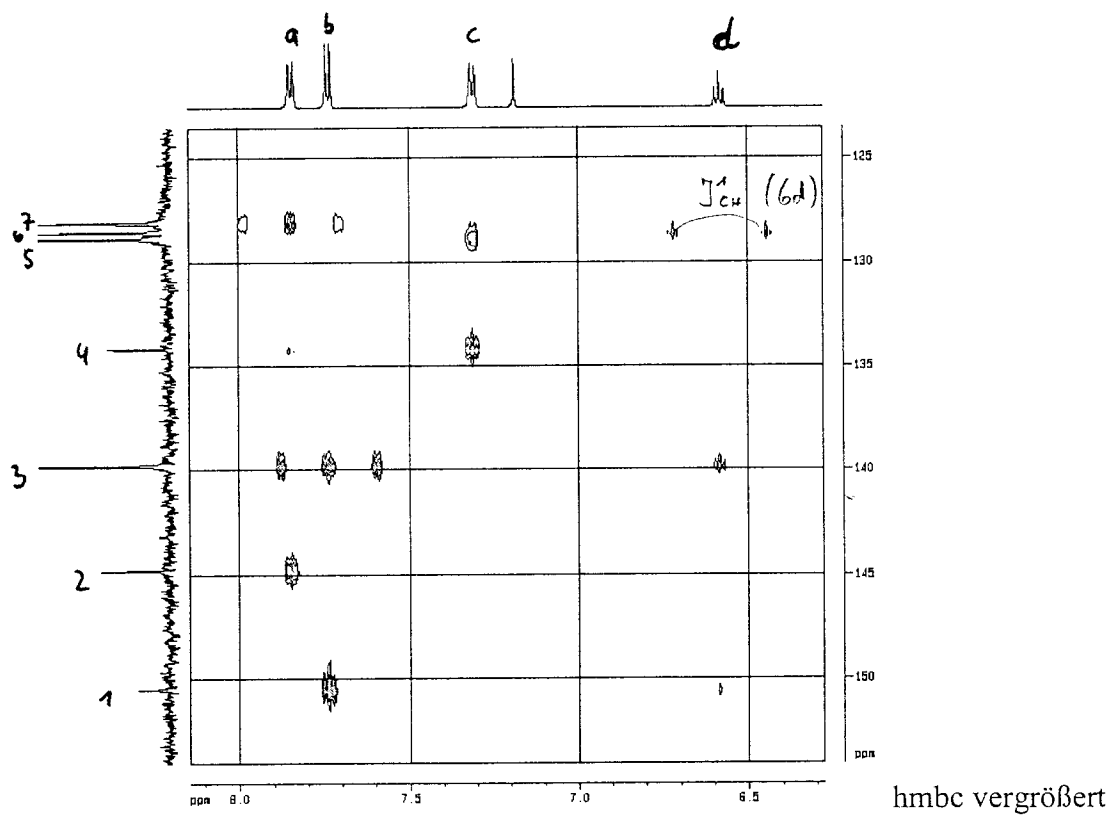
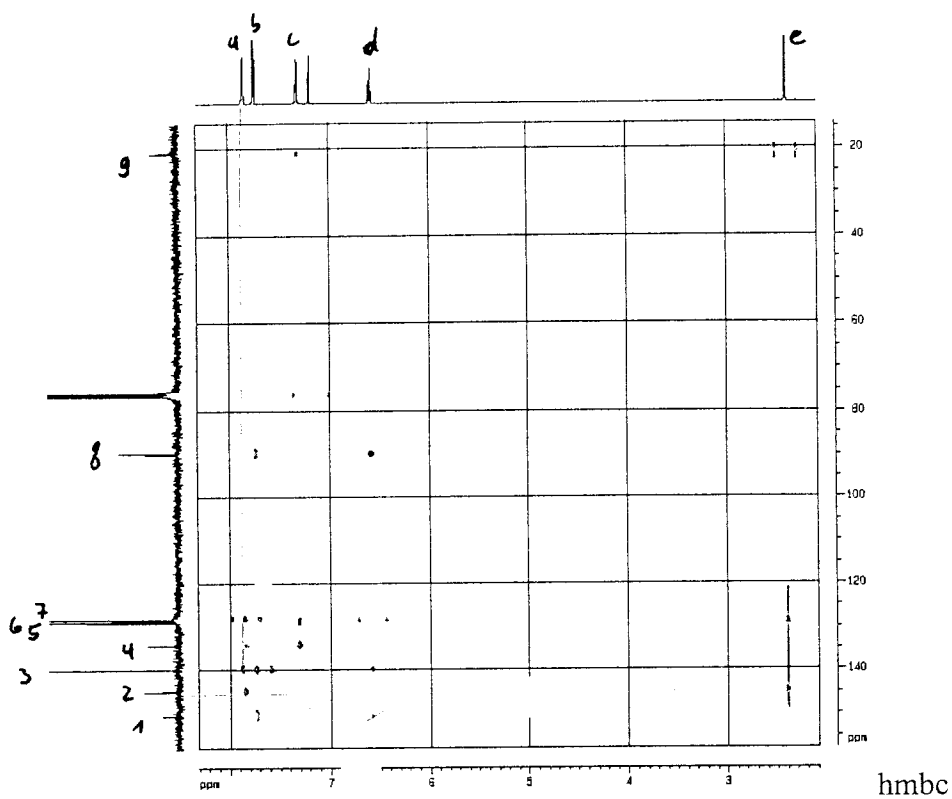
cosy $d \rightarrow b$

hmbc $2 \rightarrow a, e$

$1 \rightarrow f$

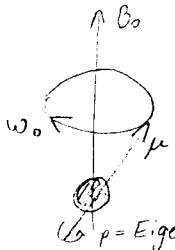






Frage 5: (11 Punkte)

1. Was bedeutet „präzedieren“? (2 P)



rotieren im Magnetfeld (spinnen)

$\omega = \mu = \text{Eigenrotation}$

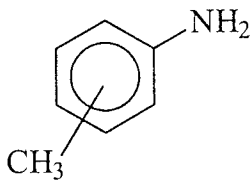
2. warum kann man ^{12}C nicht messen. Welche Eigenschaften müssen Kerne haben, um in der NMR gemessen werden zu können? (1 P)

$I \neq 0$

$I = 0$, kein magnetisches Moment

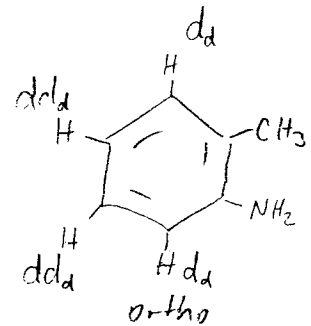
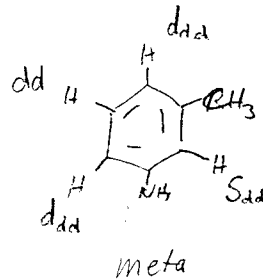
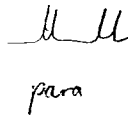
3. Was muss man messen lassen, um festzustellen, ob immer mit Erklärung!

- Die Methylgruppe bei folgender Substanz in ortho-, meta- oder para-Stellung sitzt. (1 P)



Erklären Sie genau.. (3 P)

^1H -Spektrum

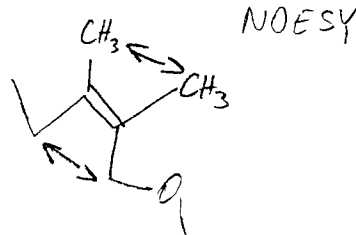
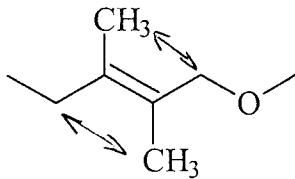


- das ^{13}C -Signal einer CH-Gruppe unter dem Signal des Lösungsmittel CDCl_3 liegt? (Lsgmittelwechsel nicht möglich) (1 P)

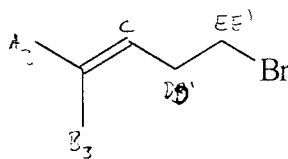
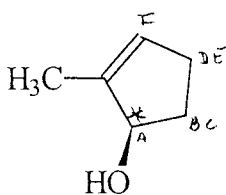
DEPT

im DEPT ist CDCl_3 nicht sichtbar.

- die 2 gekennzeichneten Methylgruppen zueinander cis oder trans stehen. (1 P)



4. Bestimmen Sie das Spinsystem: (2 P)



$A_2 B_3 C D D' E E'$

ABCDEF $G_3 X$