

### Spektroskopie und Beugung I (NMR) WS 2005 Klausur

15.12.2005

Lösung

**Frage 1: (7 Punkte)**

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:



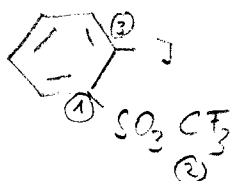
↓  
?

$DBA = 1 + \frac{1}{2}(14 - 4 - 4) = \underline{4}$

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



2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

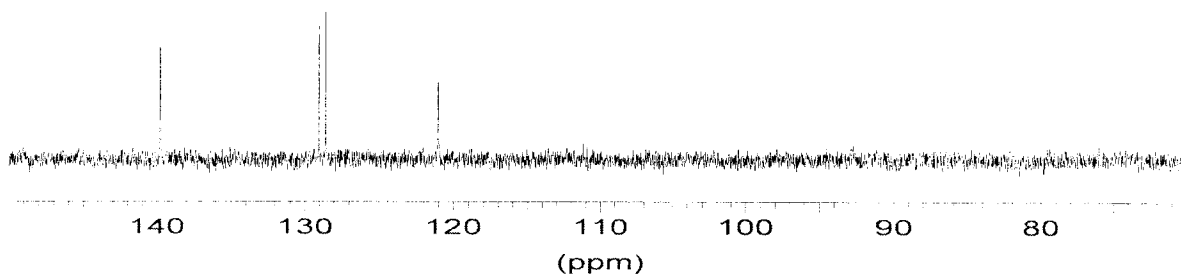
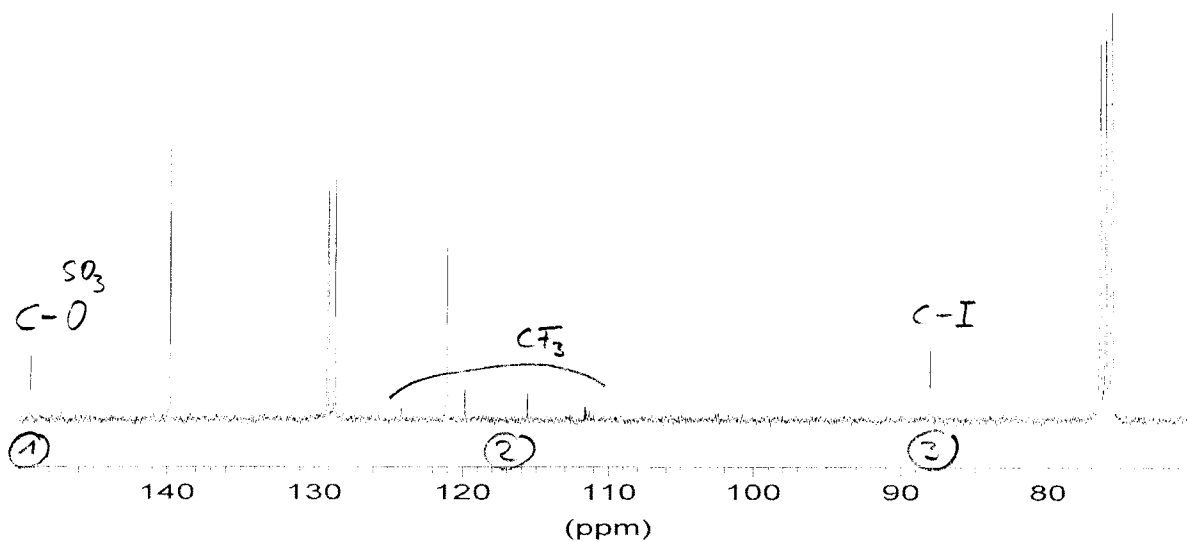
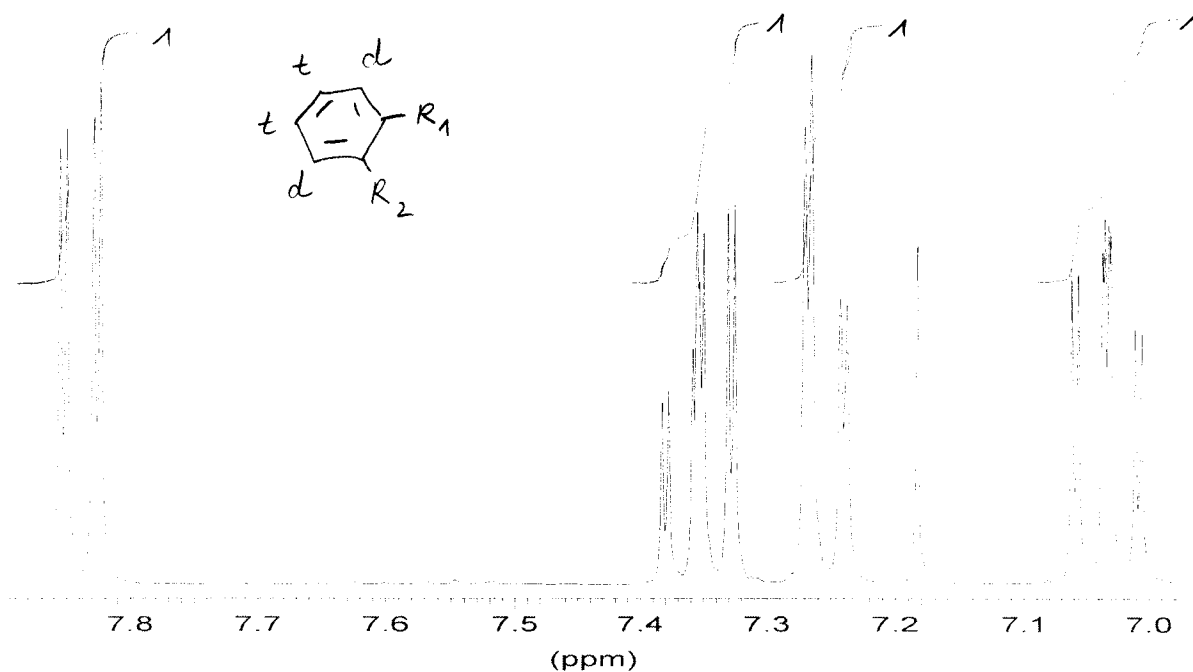


3. Nummerieren Sie die quartären C-Atome im  $^{13}C$ -Spektrum und ordnen Sie sie Ihrer gefundenen Struktur eindeutig zu. Begründen Sie Ihre Zuordnung. (3 P)

2: =  $CF_3$  wegen Quartett-Aufspaltung

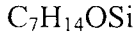
3: = daran hängt Iod, da Iod-Inkrement = -34.1  
in ipso-Stellung

1: = quartäres C, das übrig bleibt.



**Frage 2: (8 Punkte)**

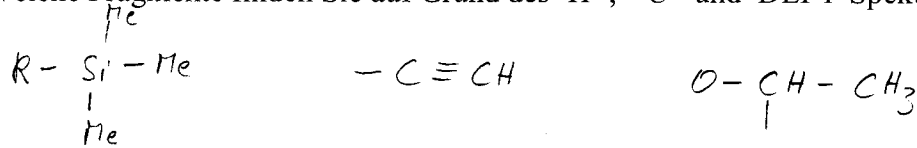
Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:



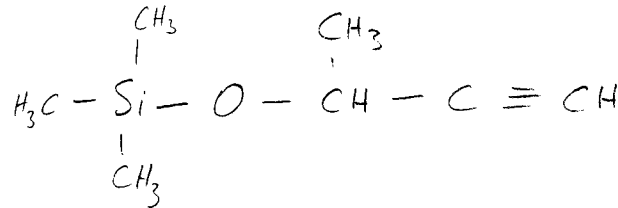
$DBA' = 1 + \frac{1}{2} (14 - 14 + 2) = \underline{\underline{2}}$

Hinweis: Es ist kein TMS enthalten.

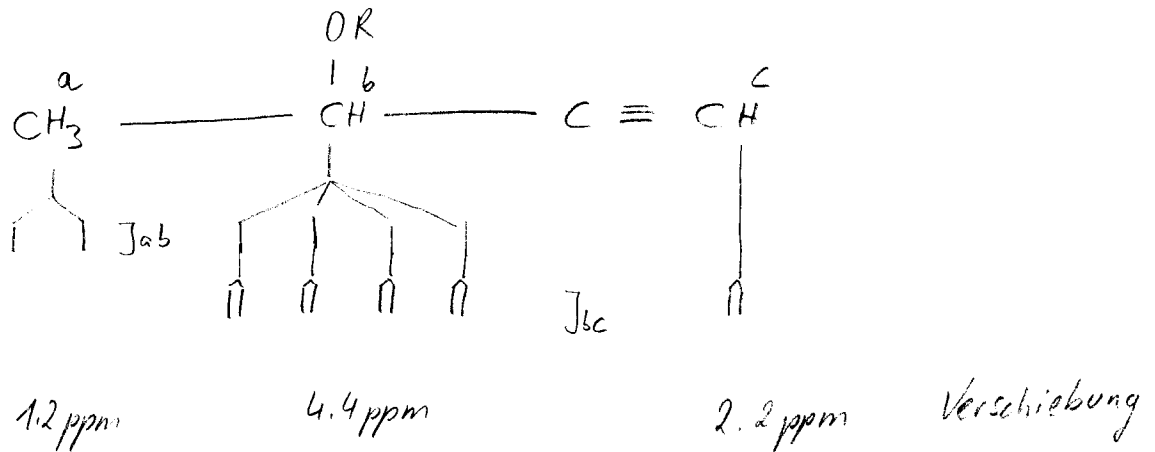
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des  $^1H$ -,  $^{13}C$ - und DEPT-Spektren? (3 P)

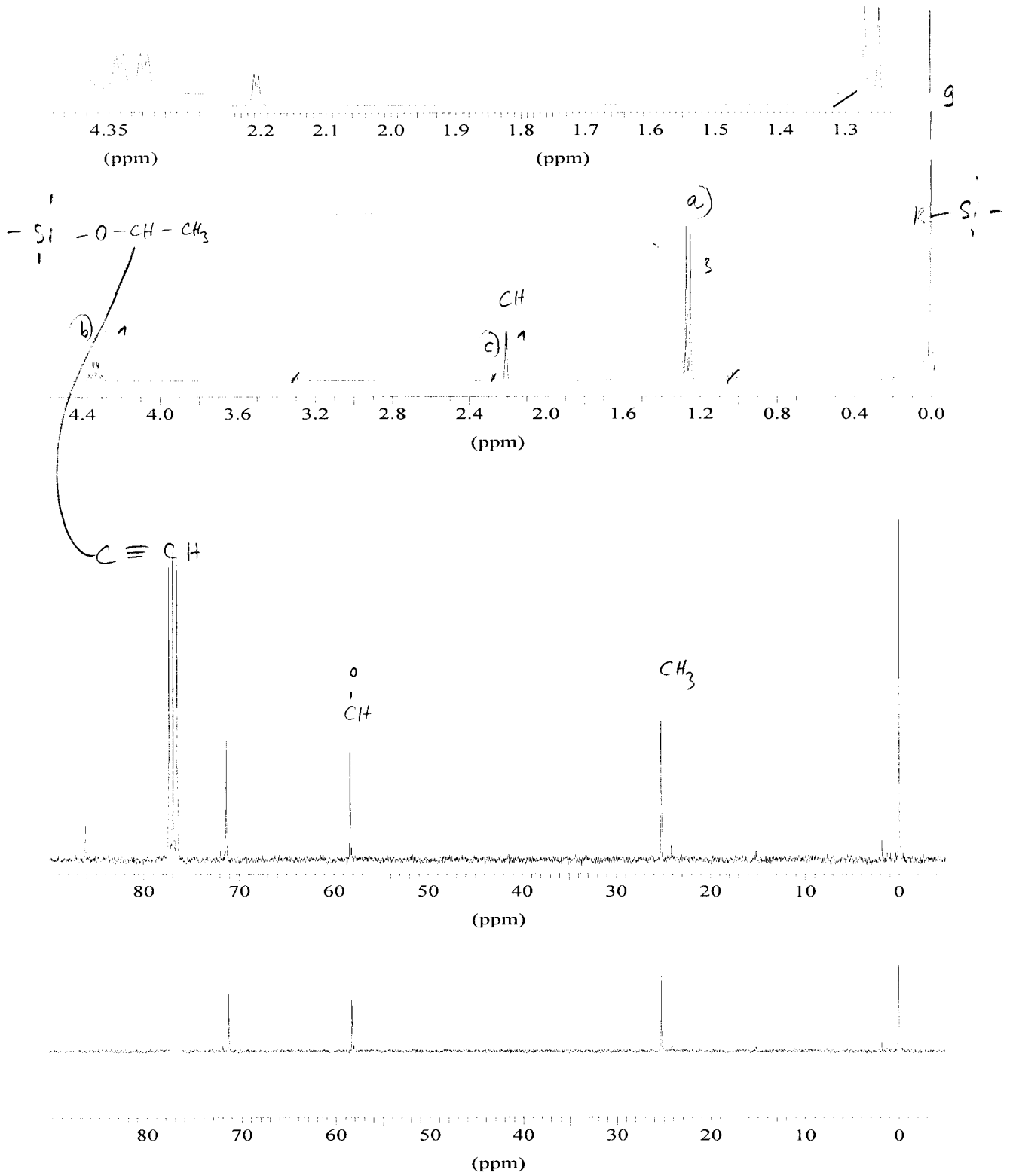


2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)



3. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die Protonen zwischen 1 und 5 ppm (3 P).  
 Wenn die Kopplungskonstanten etwa stimmen, gibt es einen Zusatzpunkt  
 (Kopplungskonst. groß, mittel, klein) (1 P)



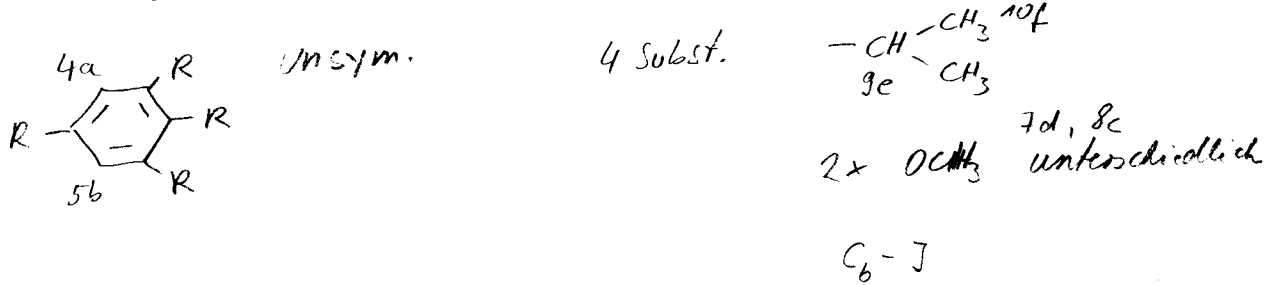


**Frage 3: (10 Punkte)**

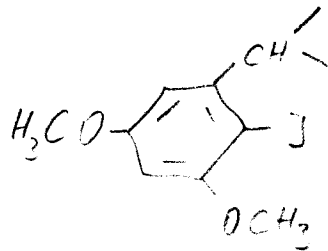
Auf Seite 6 sind die NMR-Spektren eines Aromaten mit folgender Summenformel abgebildet:  
 $C_{11}H_{15}IO_2$ .

$$DBA = 1 + \frac{1}{2} (22 - 15 - 1) = 4$$

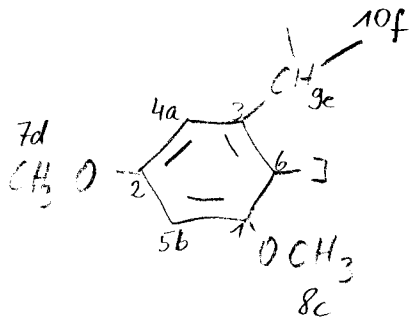
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des  $^1H$ -,  $^{13}C$ - und DEPT-Spektren? (3 P)

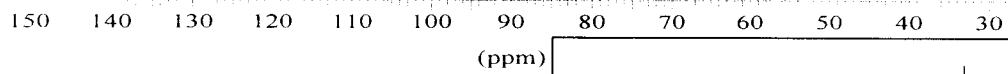
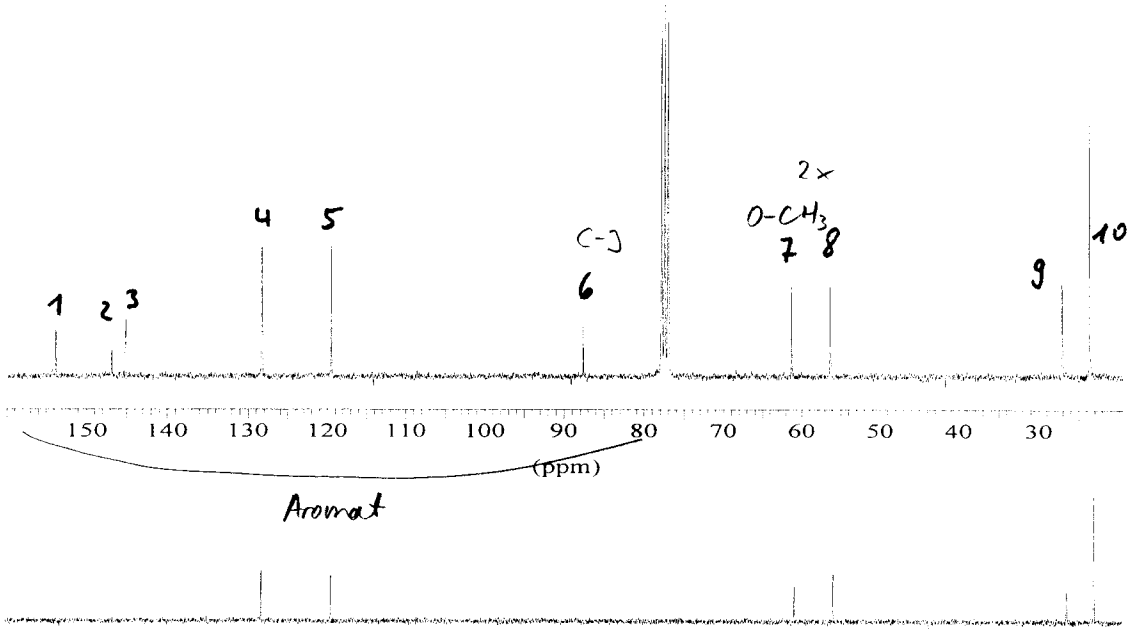
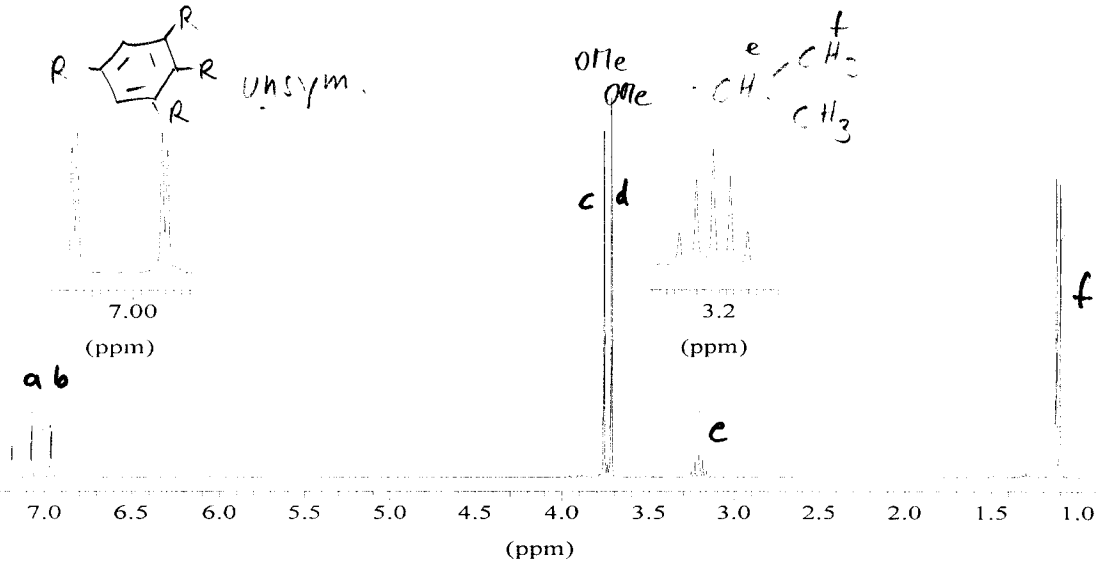


2. Ordnen Sie die Signale Ihrer Spektren den gefundenen Fragmenten so weit wie möglich zu.  
*Siehe 1.*
3. Geben Sie unter Berücksichtigung der 2D-Spektren eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

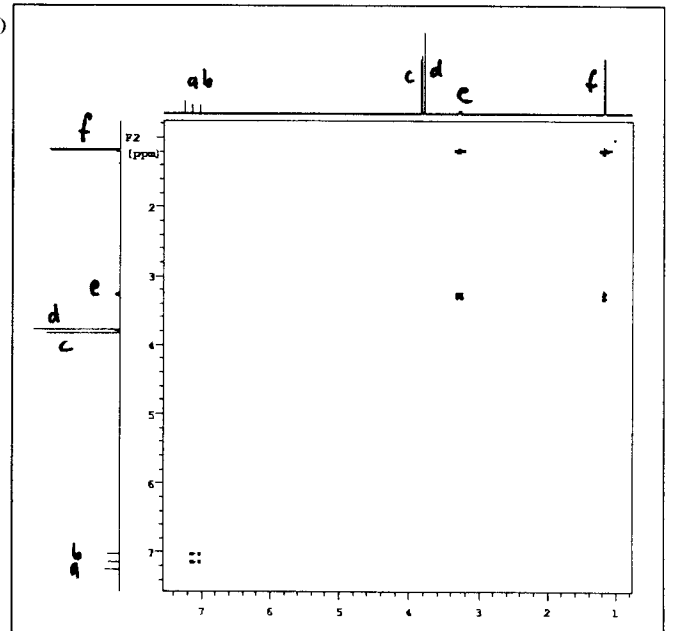


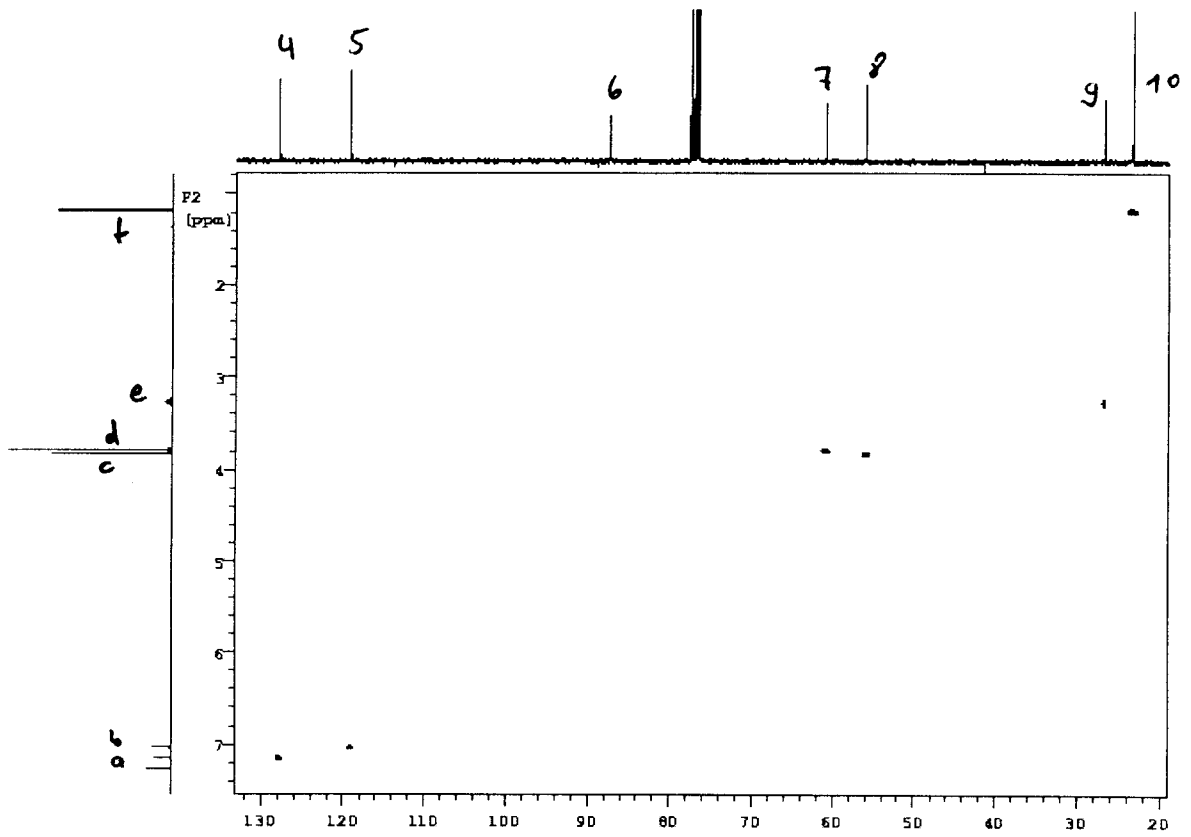
4. Ordnen Sie alle  $^1H$ - und  $^{13}C$ -Signale zu. (5 P)



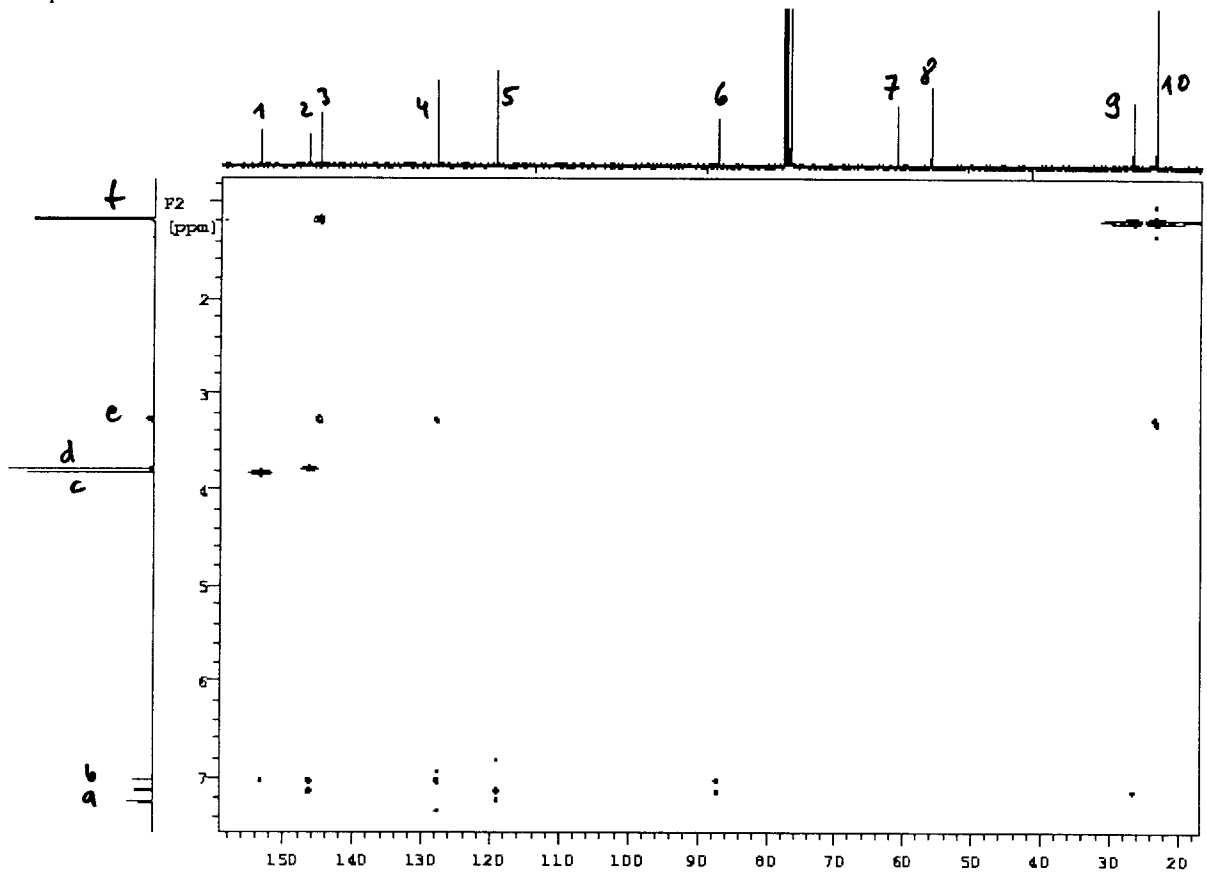


cosy





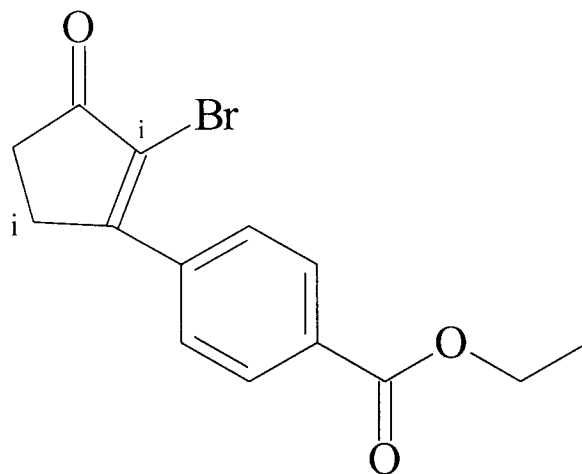
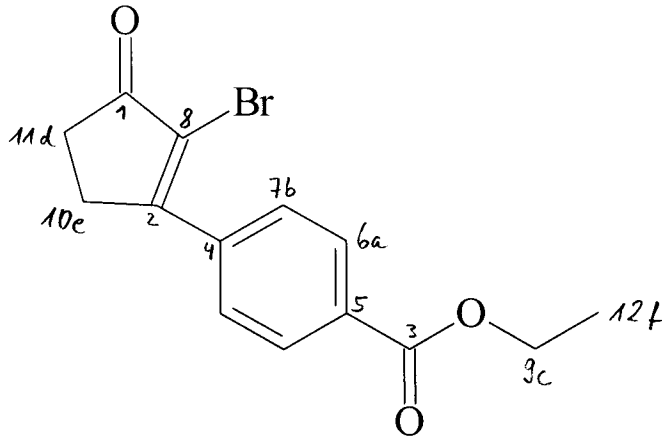
hsqc



hmbc

**Frage 4: (11 Punkte)**

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



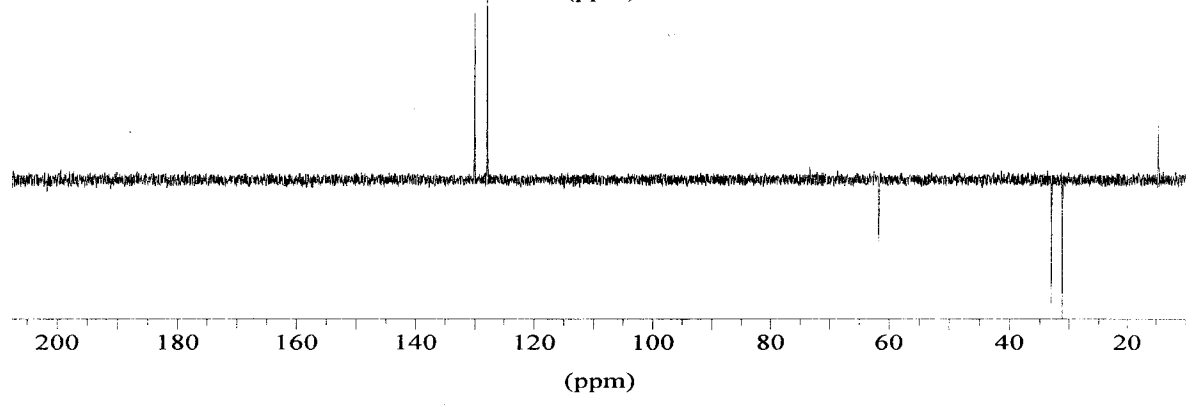
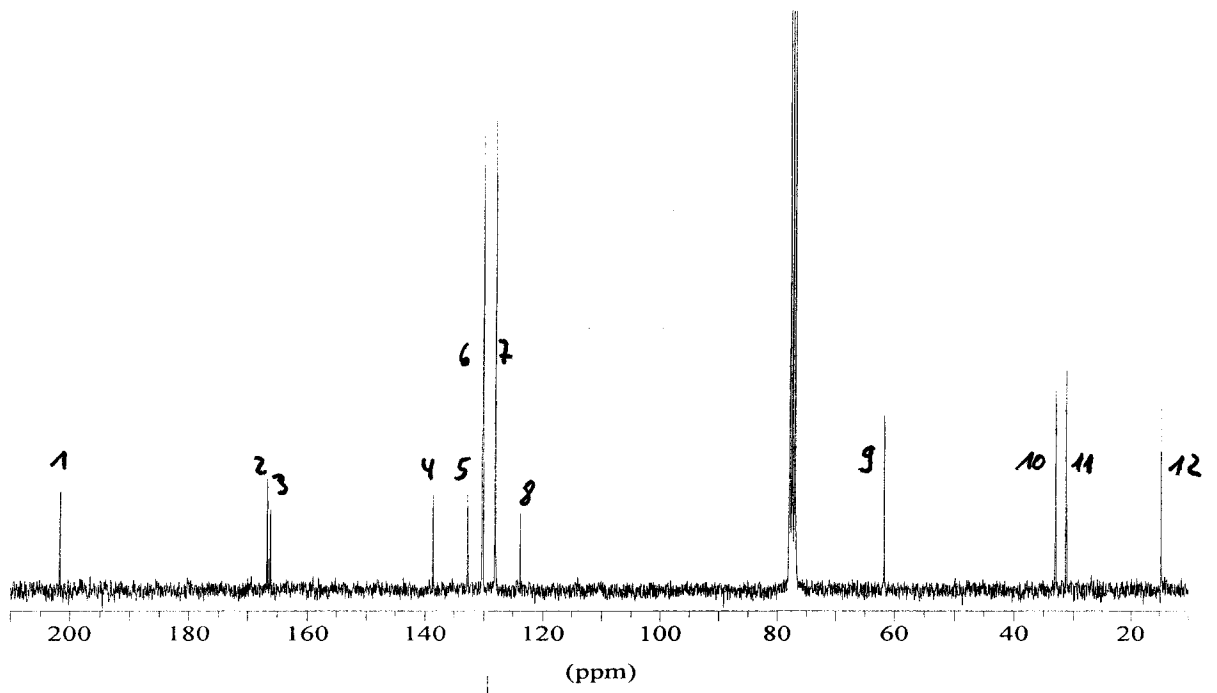
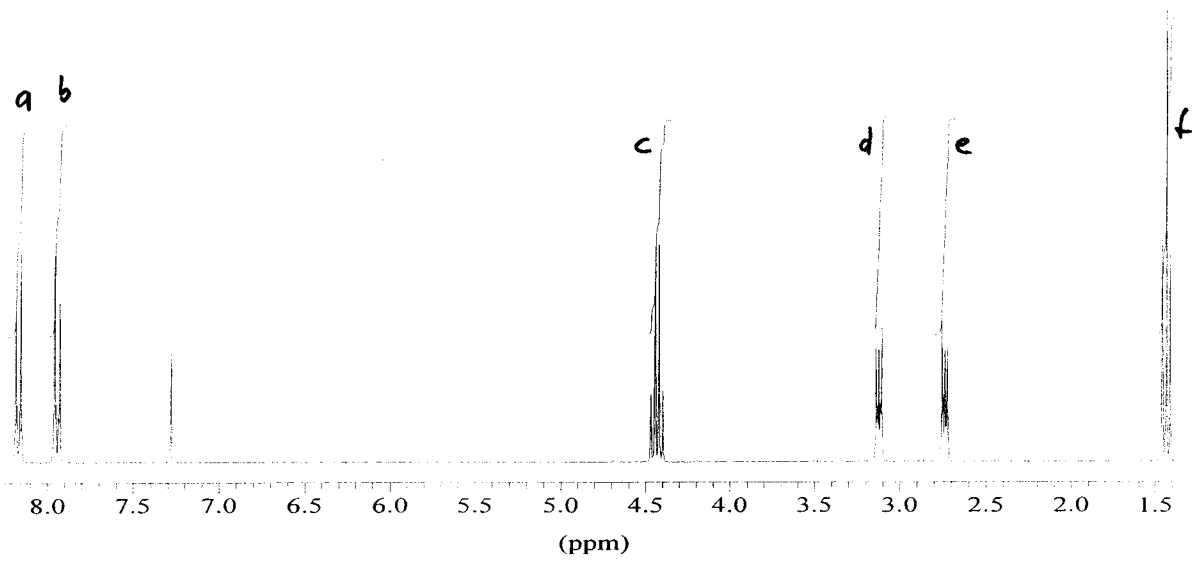
i: siehe Frage 2 unten

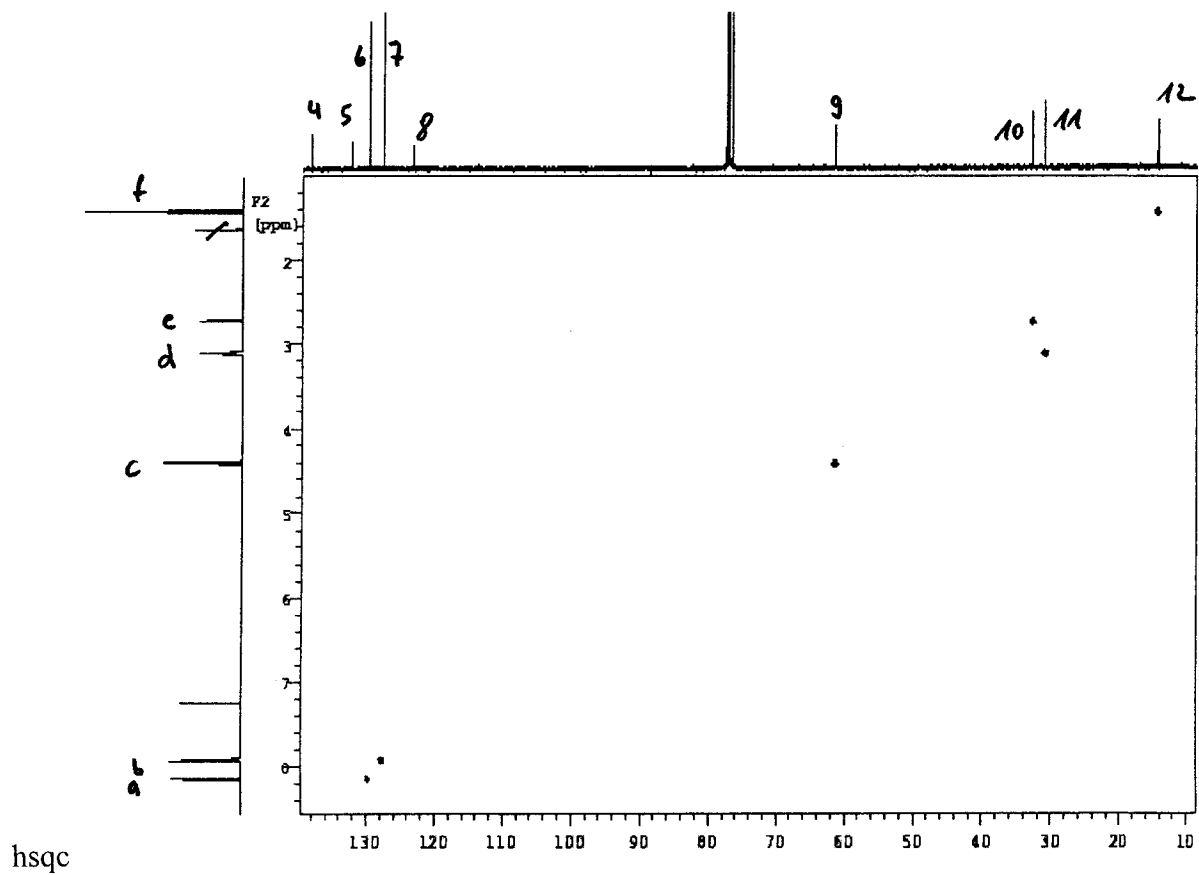
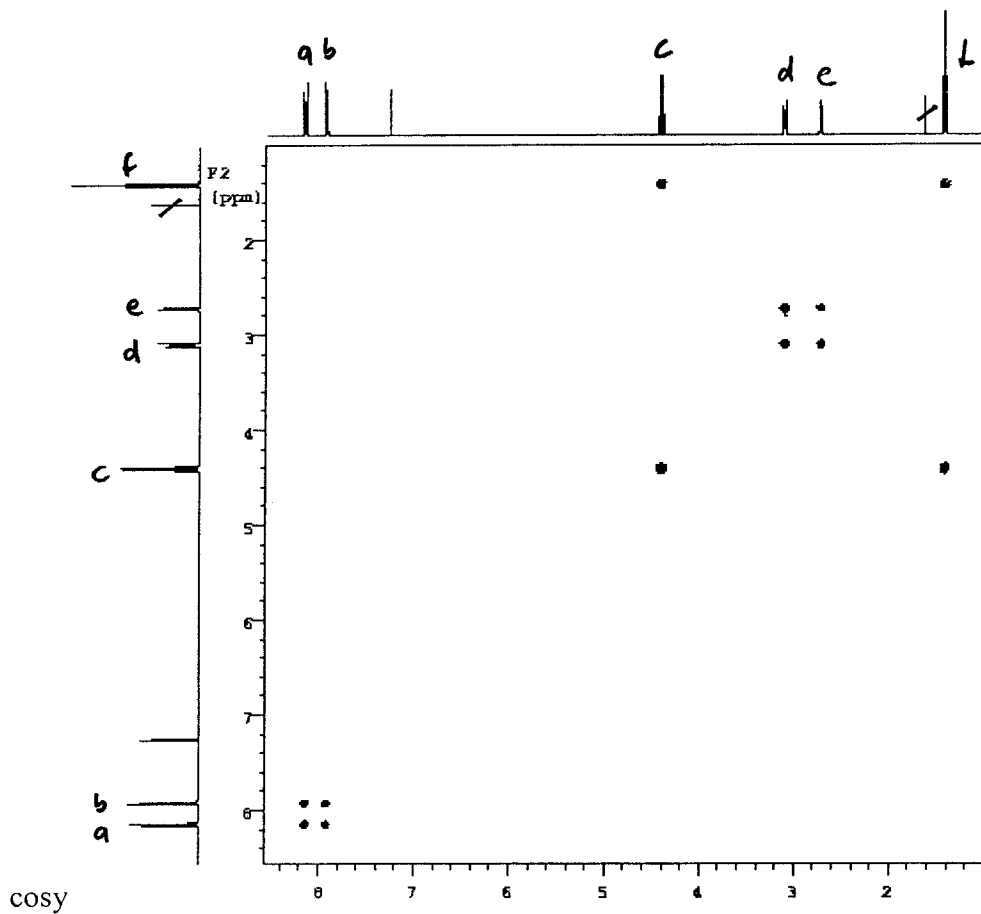
1. Ordnen Sie alle Signale (<sup>1</sup>H und <sup>13</sup>C) (8 P)
2. Berechnen Sie die Inkremente der mit i gekennzeichneten <sup>13</sup>C-Atome so genau wie möglich. (2 P)
 
$$i(\text{Olefin}) = 123.5 - 7.3 + 15.0 - 11.0 = 119.6 \text{ ppm}$$

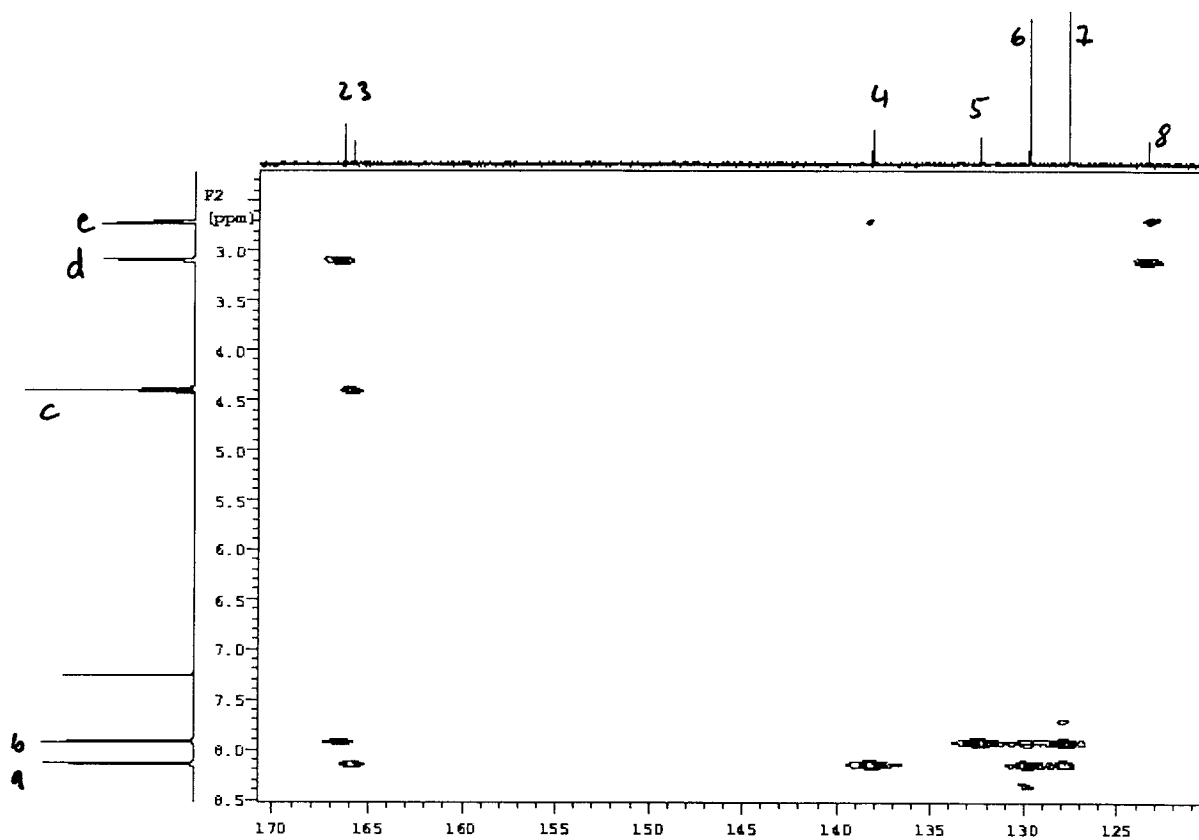
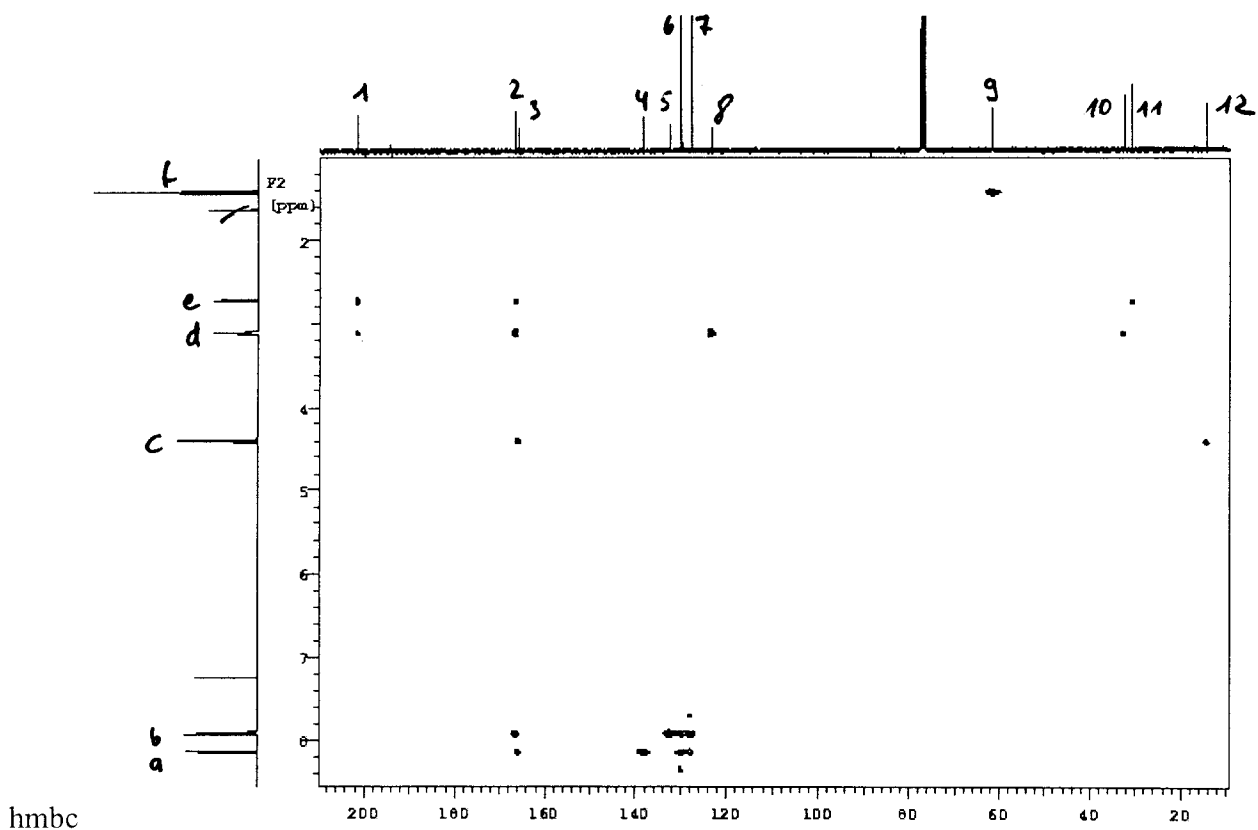
$$i(\text{Alkan}) = -2.3 + 9.1 + 2.3 + 15.7 = 22.8 \text{ ppm}$$
3. Geben Sie das Spinsystem der Protonen an. (1 P)

AA' BB' K<sub>2</sub>L<sub>3</sub> MM' NN'



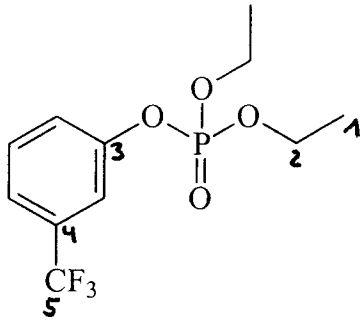






**Frage 5: (14 Punkte)**

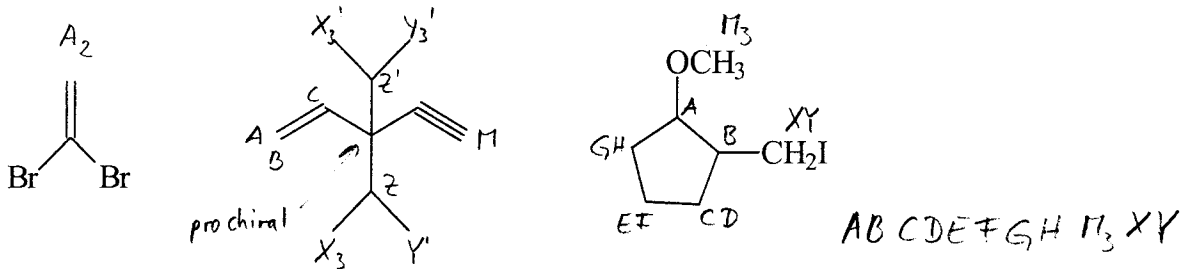
1. Auf Seite 13 sind das <sup>13</sup>C/Dept-Spektren folgender Verbindungen gegeben



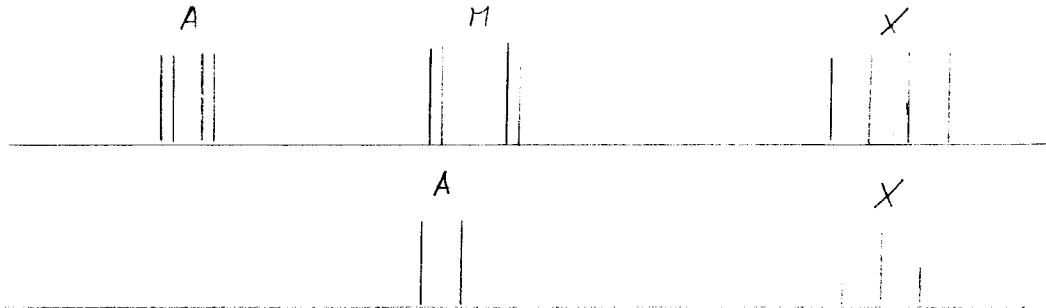
Das C-Atom 5 ist nicht leicht zu finden. Überlegen Sie, wie es ausschauen muß!

Ordnen Sie die C-Atome 1 – 5 zu, indem Sie die entsprechende Nummer in das (<sup>1</sup>H entk.) <sup>13</sup>C-Spektrum eintragen. Erklären Sie die Aufspaltung. (5 P)

2. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (3 P)



3. Zeichnen Sie ein <sup>1</sup>H-Spektrum für ein AMX-Spinsystem und ein A<sub>2</sub>X-Spinsystem. Verwenden Sie ein Liniäl und beschriften Sie mit A, M und X. (4 P)



4. Wozu braucht man die Fourier-Transformation in der NMR? (einfache Erklärung)(1 P)

gemessene Signal  $\xrightarrow{\text{FT}}$  Spektrum  
 zeit-Domäne  $\xrightarrow{\quad}$  Frequenz-D.

5. Wofür steht die Abkürzung NMR? (1 P)

Nuclear Magnetic Resonance

