

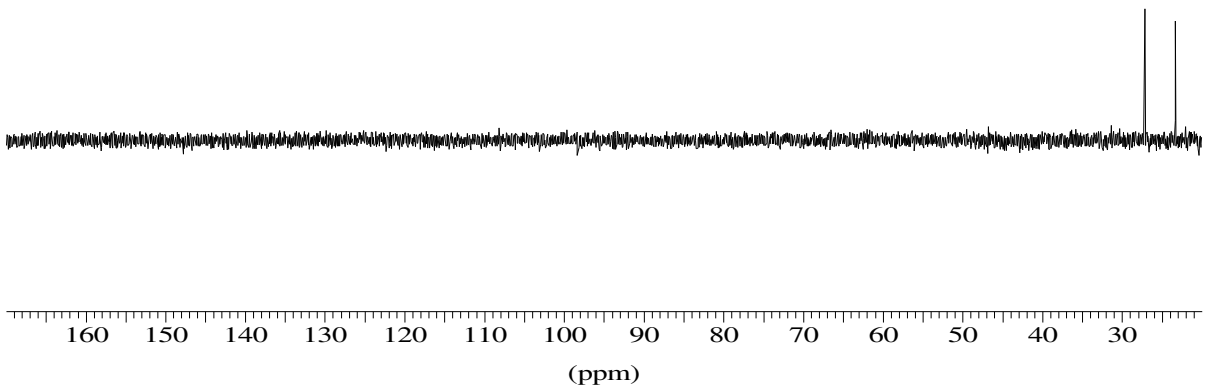
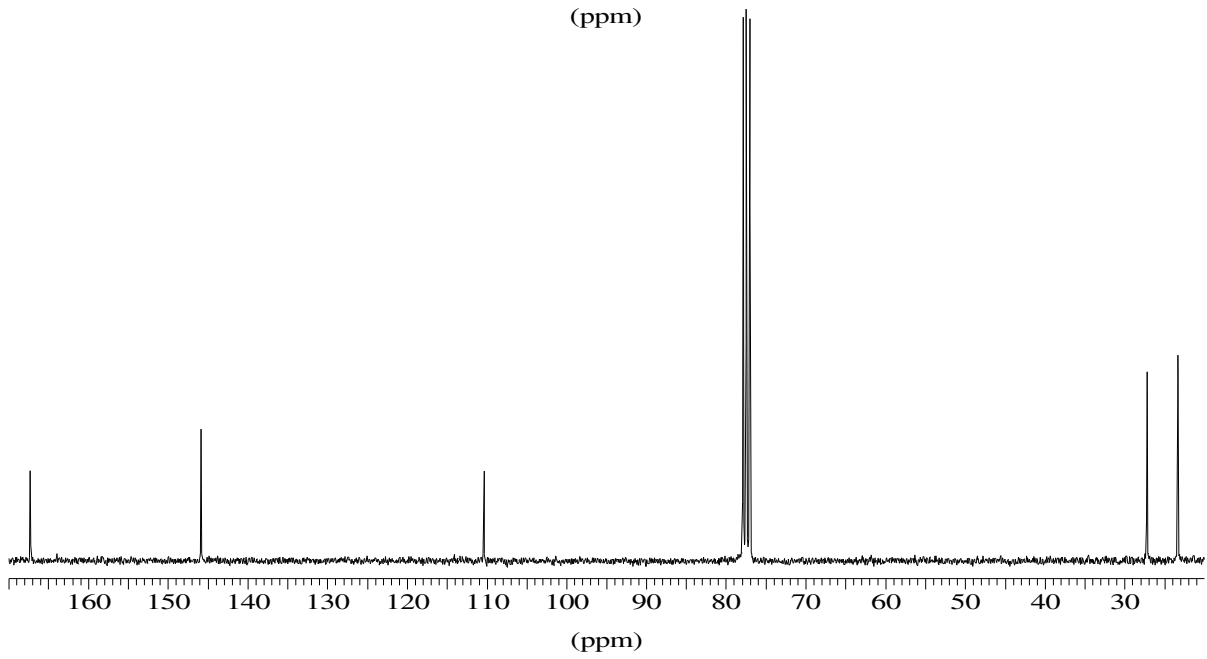
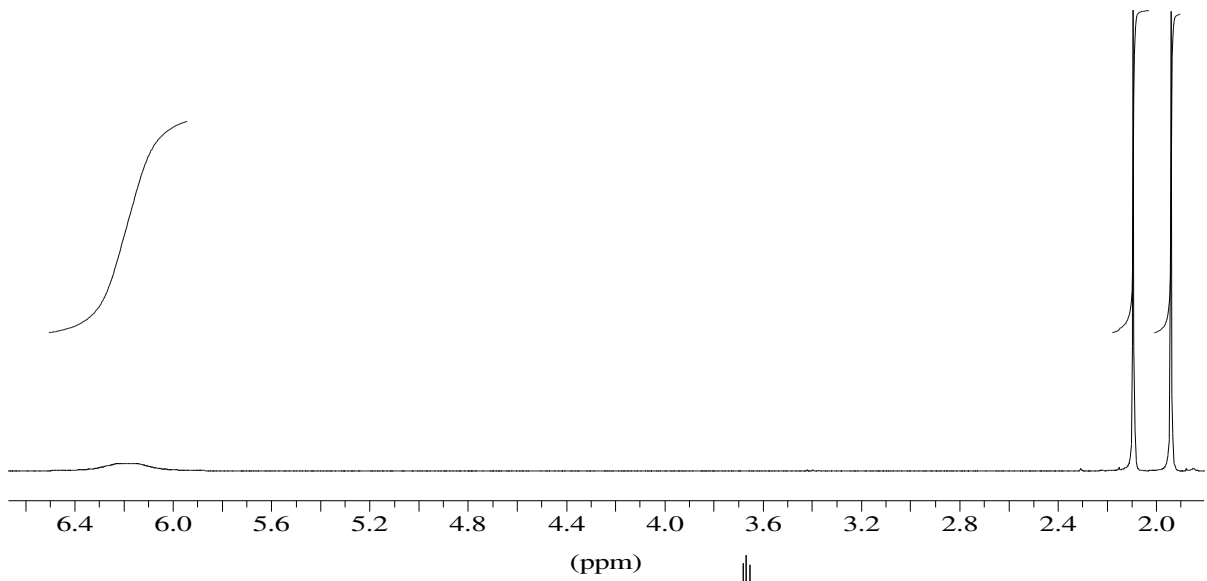
**Spektroskopie und Beugung I (NMR)**  
**SS 2006 Klausur**

4.8.2006

**Frage 1: (8 Punkte)**

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren eines Säureamids mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_5H_8BrNO$ .

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des  $^1H$ -,  $^{13}C$ - und DEPT-Spektren? (3 P)
2. Geben Sie drei sinnvolle Struktur an. (2 P)
3. Berechnen Sie für relevante C-Atome die Inkremente und entscheiden Sie sich dann für eine Struktur. (2 P)
4. Bestimmen Sie das Spinsystem. (1 P).

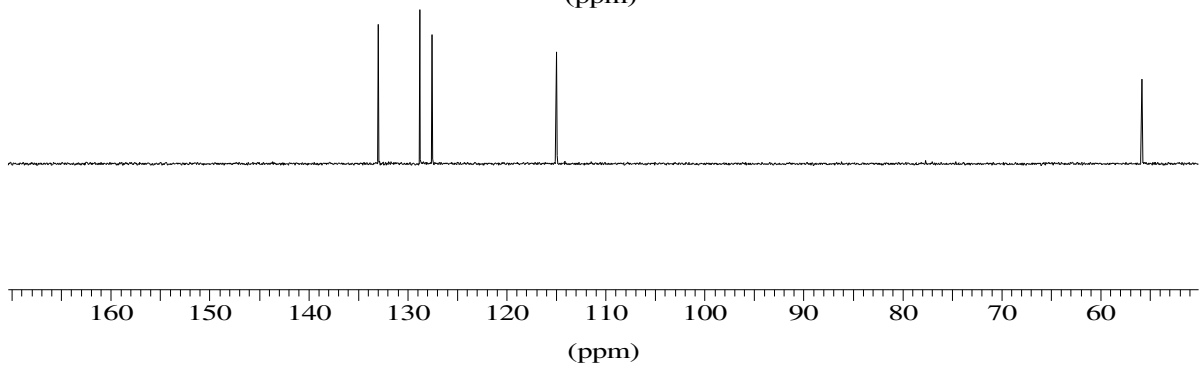
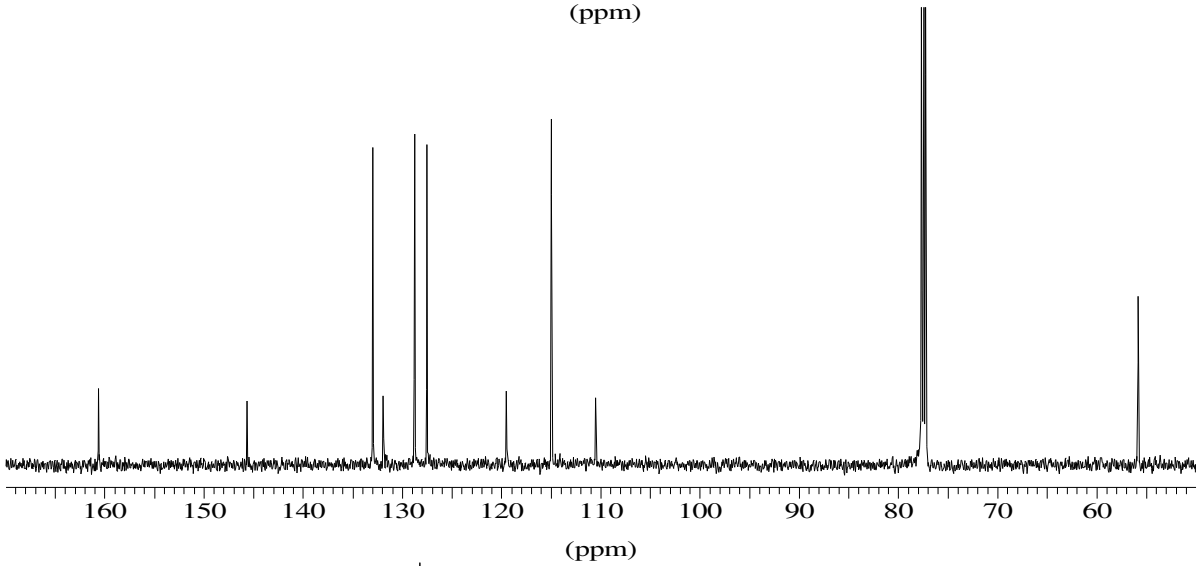
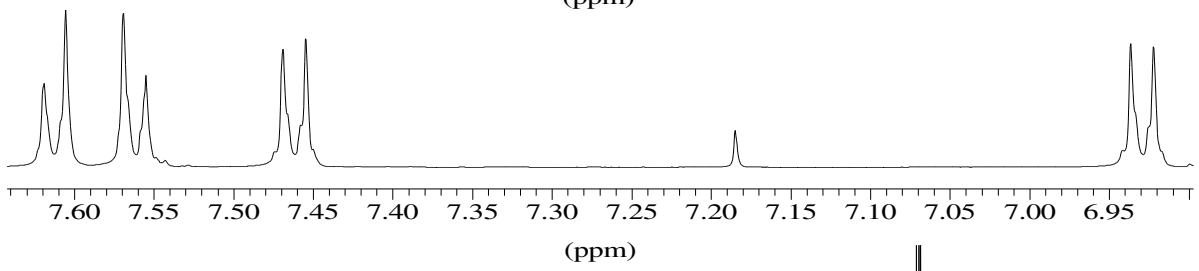
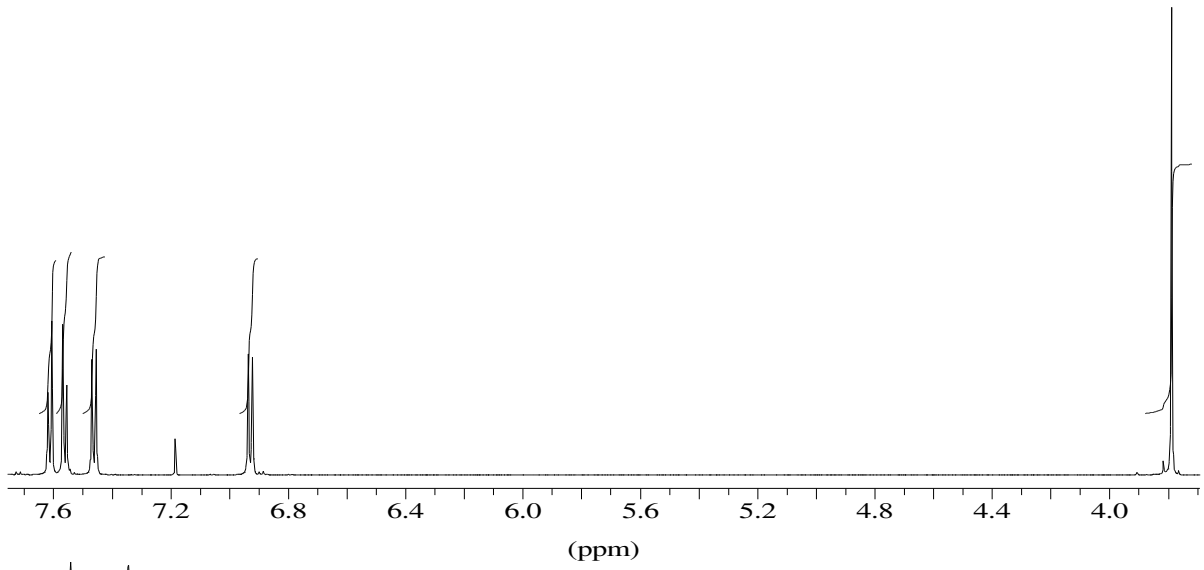


**Frage 2: (8 Punkte)**

Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{14}H_{11}NO$ .

Hinweis: Die Verbindung enthält kein Carbonsäure-Derivat!

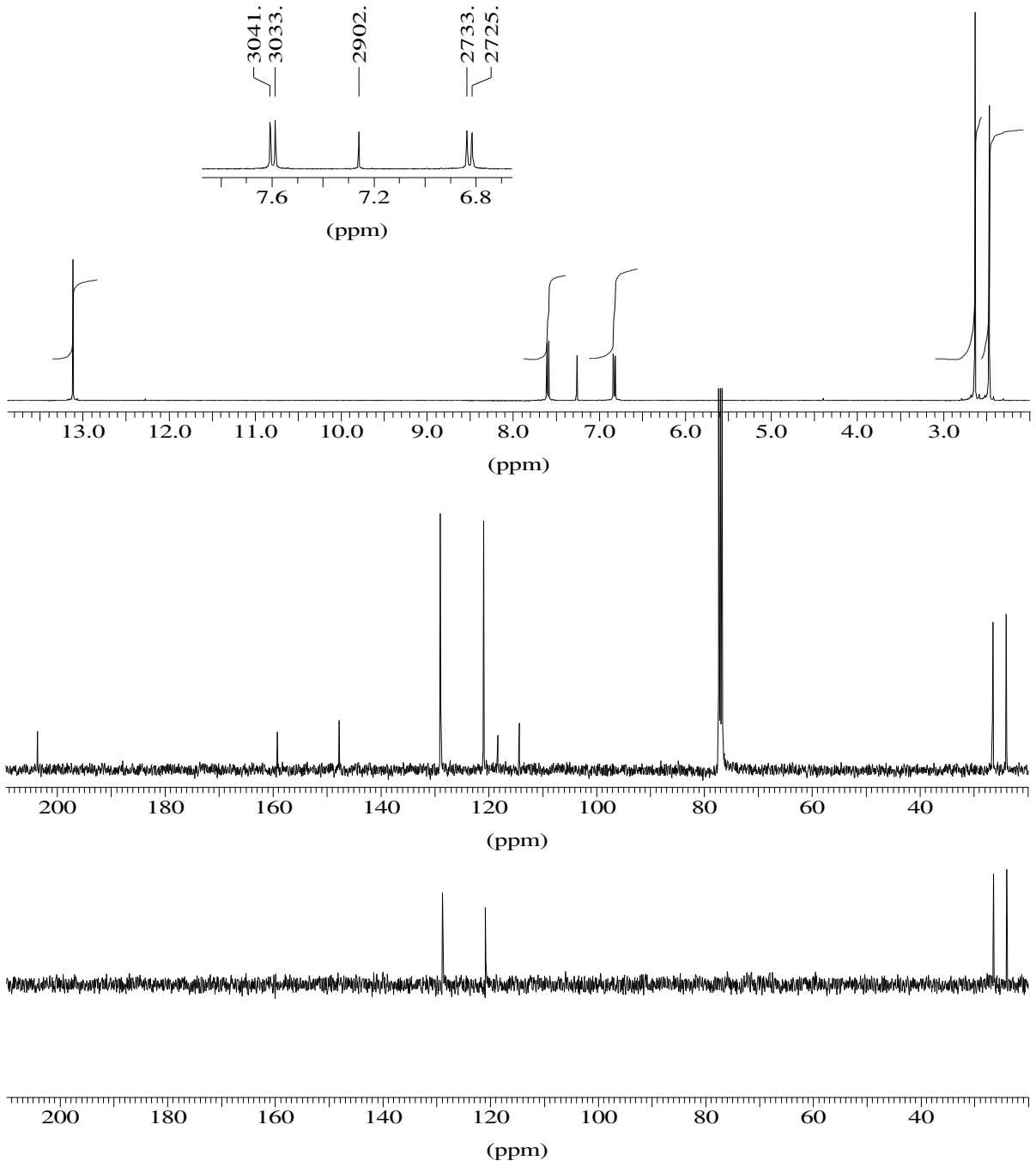
1. Berechnen Sie die Doppelbindungsäquivalente für diese Verbindung. (1 P)
2. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des  $^1H$ - ,  $^{13}C$ - und DEPT-Spektren? (4 P)
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
4. Warum zeigen einige Signale im  $^1H$ -Spektrum einen Dacheffekt – andere nicht? Was ist ein Dacheffekt? Zeichnen Sie den Dacheffekt im  $^1H$ -Spektrum ein. (2 P)

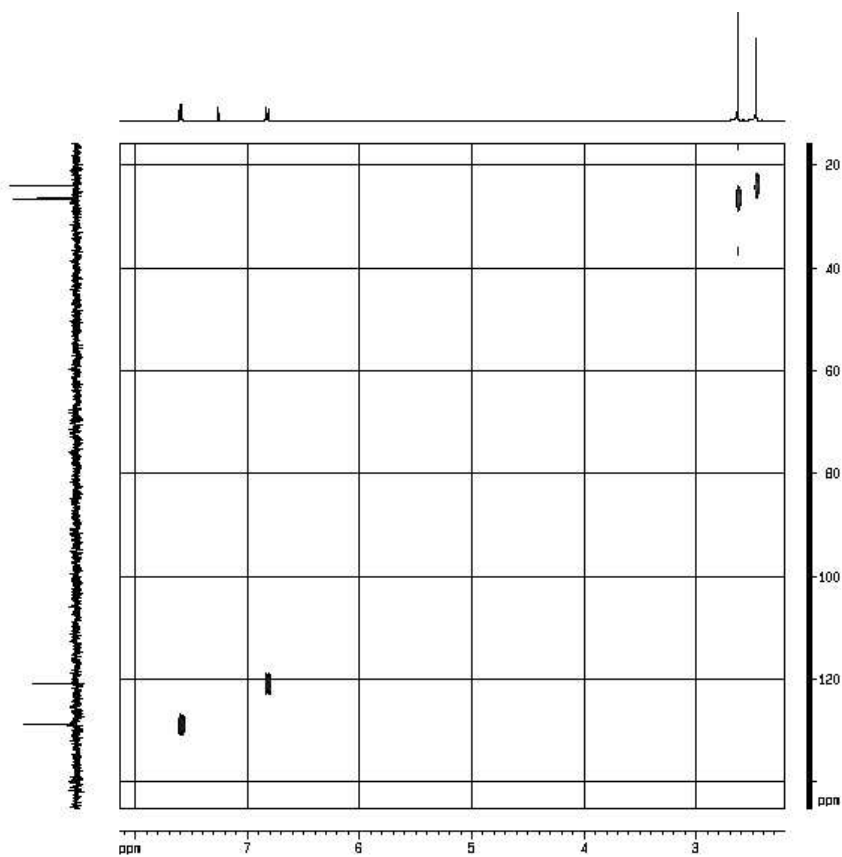


**Frage 3: (13 Punkte)**

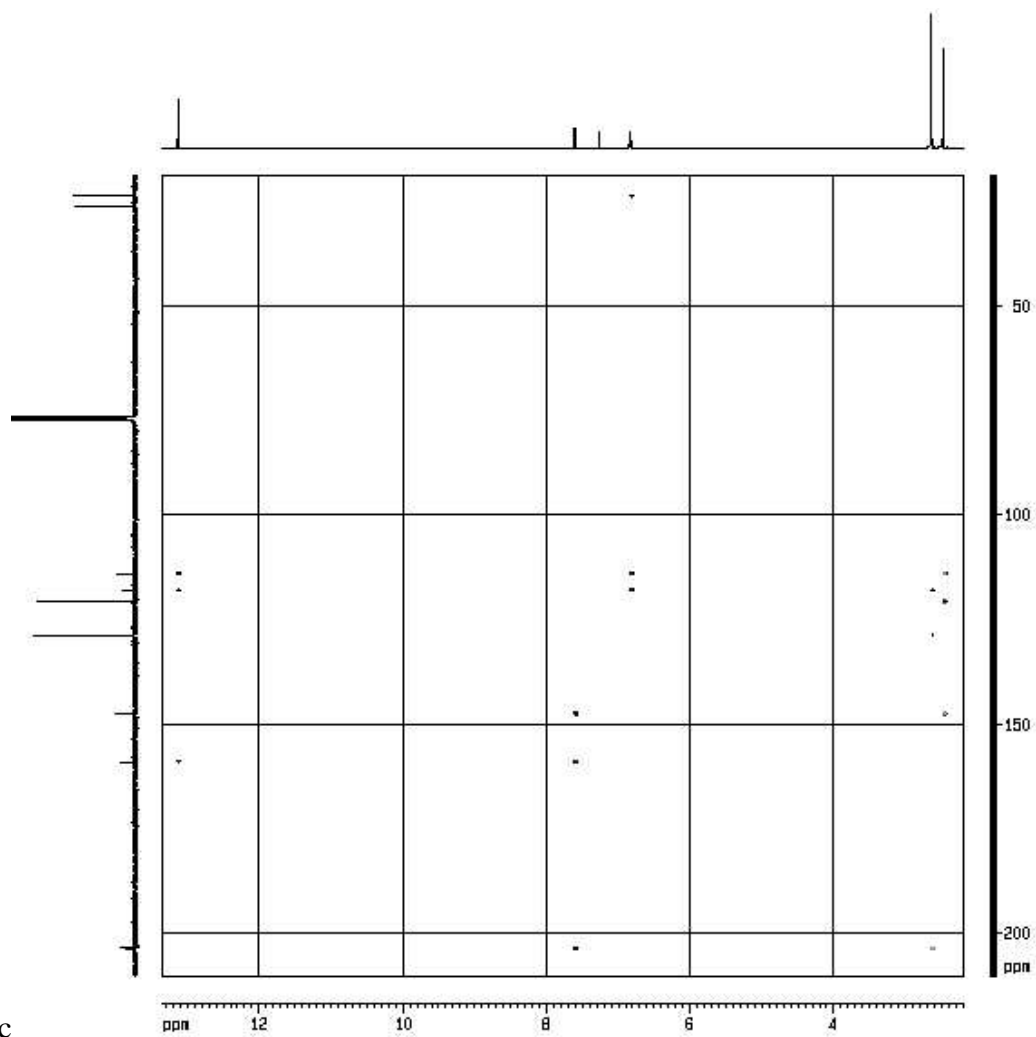
Auf Seite 6ff sind die NMR-Spektren eines Aromaten mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_9H_9O_2Br$

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der NMR-Spektren? (4 P)
2. Ordnen Sie die Signale so weit wie möglich zu.
3. Geben Sie unter Berücksichtigung der 2D-Spektren eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
4. Ordnen Sie alle Signale ( $^1H$  und  $^{13}C$ ) zu. (3 P)
5. Begründen Sie Ihre Struktur, indem Sie alle im HMBC sichtbaren  $^3J(C,H)$ -Kopplungen in Ihre gefundene Struktur einzeichnen und im HMBC-Spektrum markieren. (4 P)  
Verwenden Sie (wenn möglich) für jedes Proton eine andere Farbe.
6. Auf welchem Gerät wurden die Spektren gemessen. (200, 300, 400, 600 MHz-Gerät). Begründen Sie Ihre Antwort. (1 P)





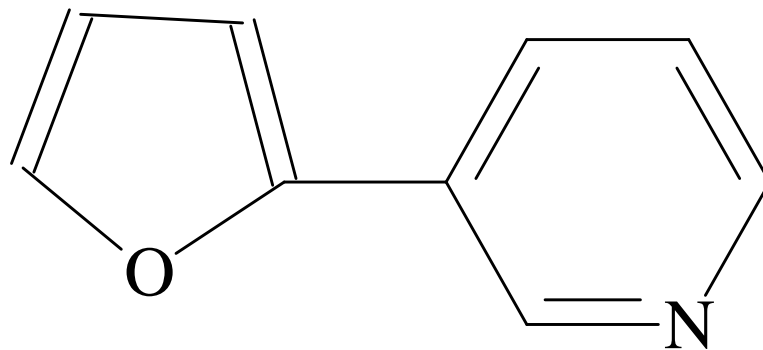
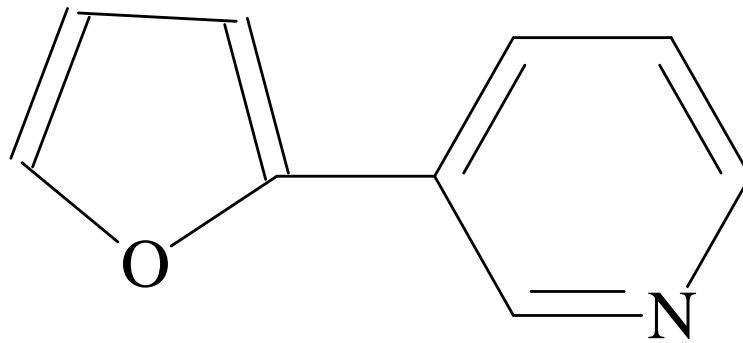
hsqc



hmbc

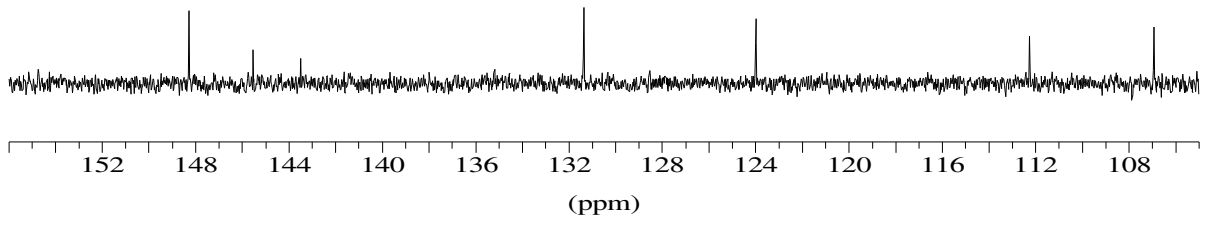
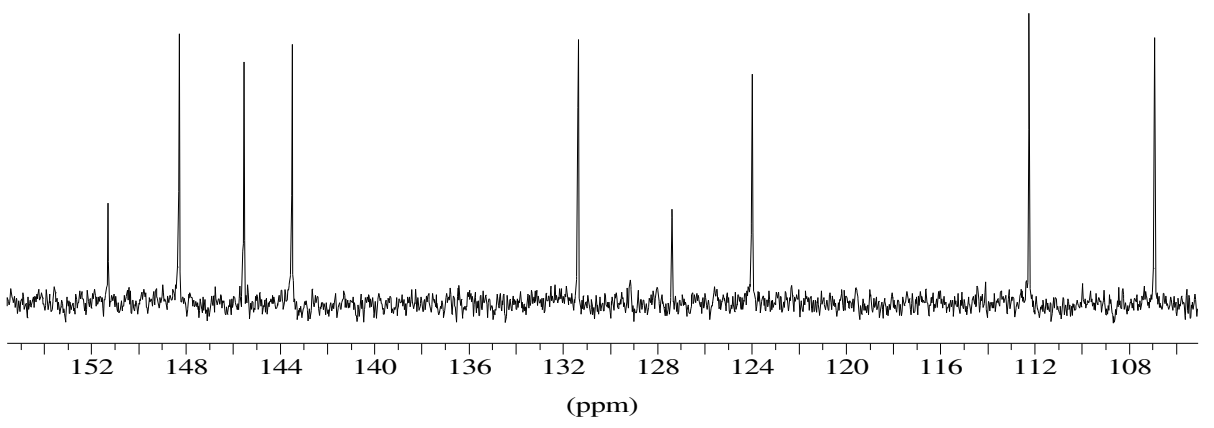
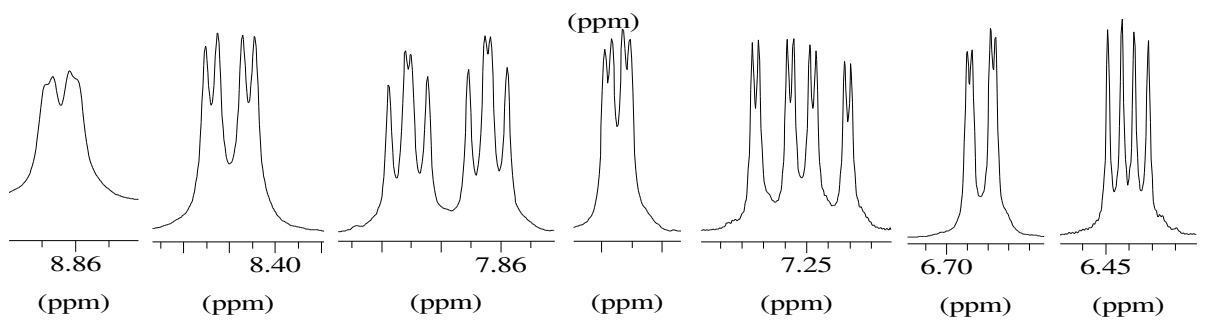
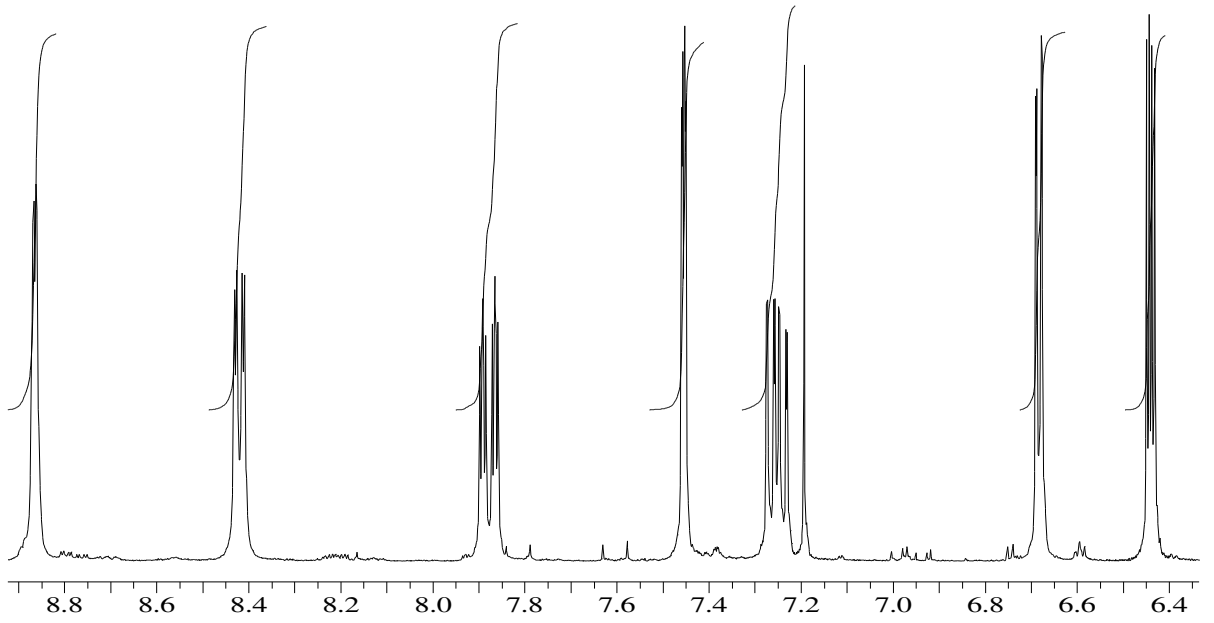
**Frage 4: (9 Punkte)**

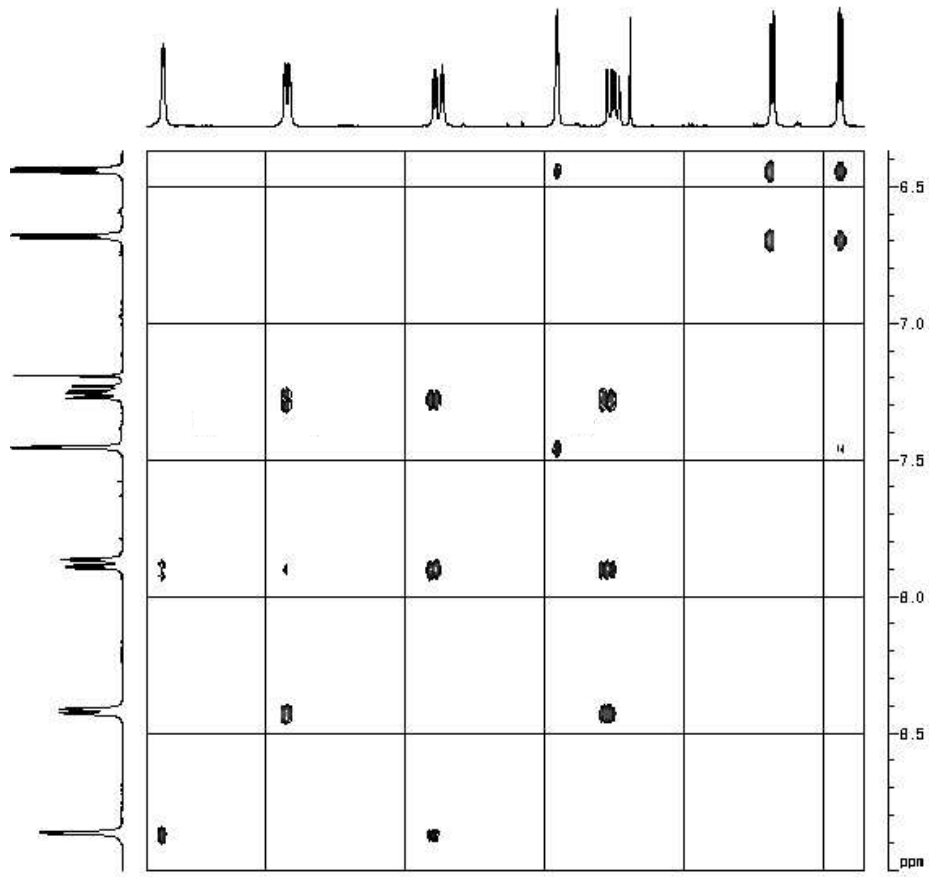
Auf Seite 9ff sind die NMR-Spektren folgender Verbindungen gegeben



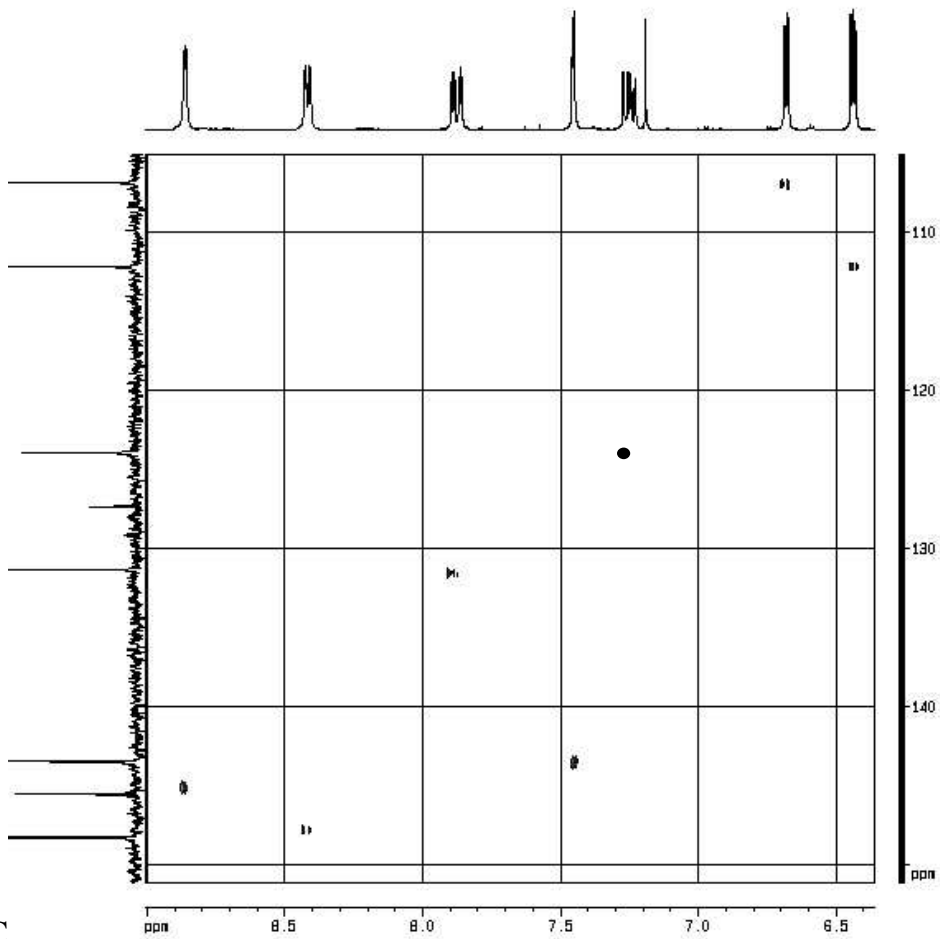
Ordnen Sie alle Signale zu (9 P)





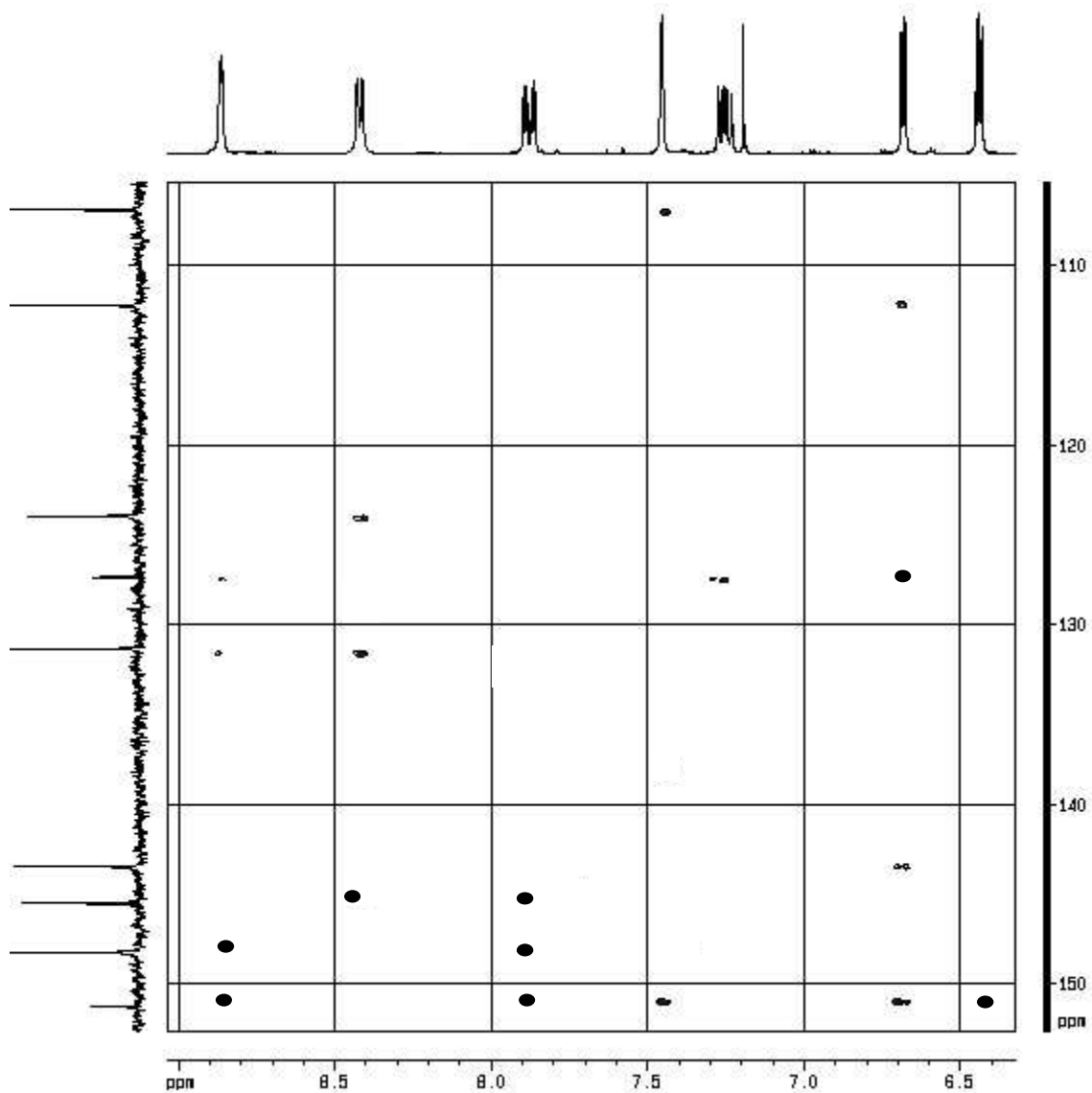


cosy



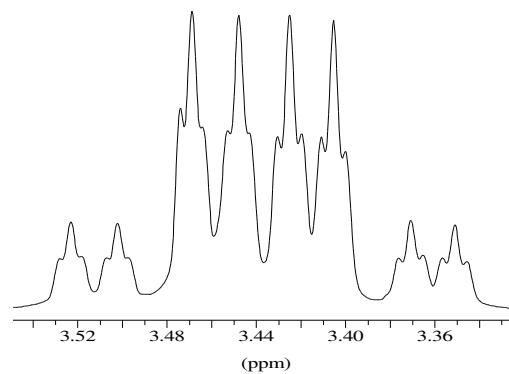
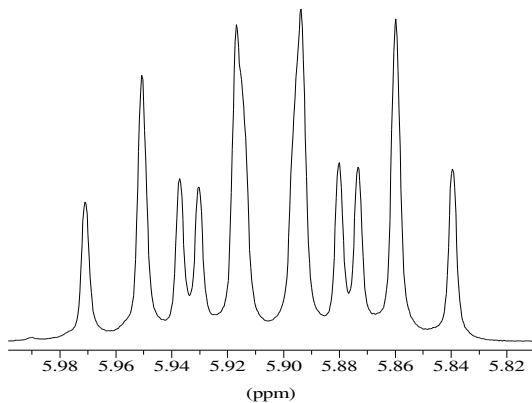
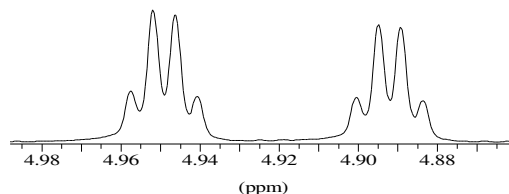
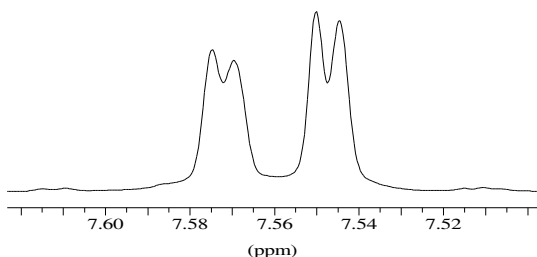
HSQC

HMBC



**Frage 5: Theorie (12 Punkte)**

1. Um welche Kopplungsmuster handelt es sich bei folgenden Spektren-Ausschnitten. Markieren Sie die Fernkopplung, indem Sie den dazugehörigen Buchstaben kleiner schreiben. Z. B.  $t_d$  (Triplet von Dublett, Dublett über Fernkopplung) (4 P)



Geben Sie je ein Beispiel an, wie ein solches Kopplungsmuster entstanden sein kann. (4 P)

2. Erklären Sie das Kopplungsmuster von d<sub>6</sub>-Aceton (99 %ig) im <sup>1</sup>H- und <sup>13</sup>C-Spektrum.  
(4 P)