

Spektroskopie und Beugung I (NMR) SS 2006 Klausur

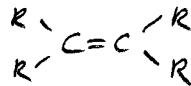
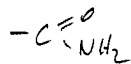
4.8.2006

Frage 1: (8 Punkte)

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

$$DBA' = 1 + \frac{1}{2} (10 - 8 - 1 + 1) = 2$$

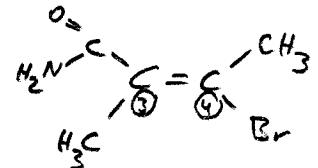
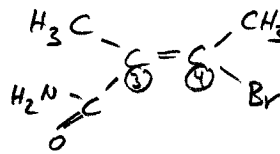
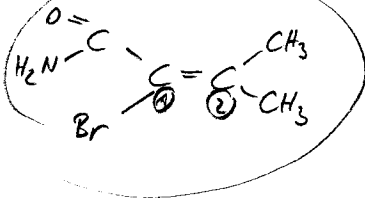
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des 1H -, ^{13}C - und DEPT-Spektren? (3 P)



2 verschiedene CH_3

Br

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)

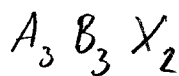
- 1) $123.5 + 4.2 - 7.9 - 7.9 - 7.9 = 104 \text{ ppm}$
- 2) $123.5 + 10.6 + 10.6 + 8.9 - 1.4 = 152.2 \text{ ppm}$
- 3) $123.5 + 10.6 + 4.2 - 7.9 - 1.4 = 129 \text{ ppm}$
- 4) $123.5 + 10.6 - 7.9 - 7.9 + 8.9 = 127.2 \text{ ppm}$

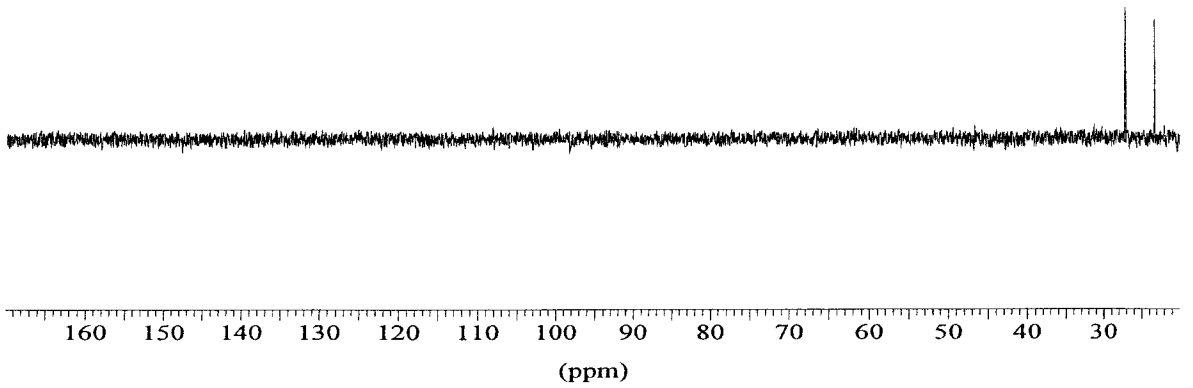
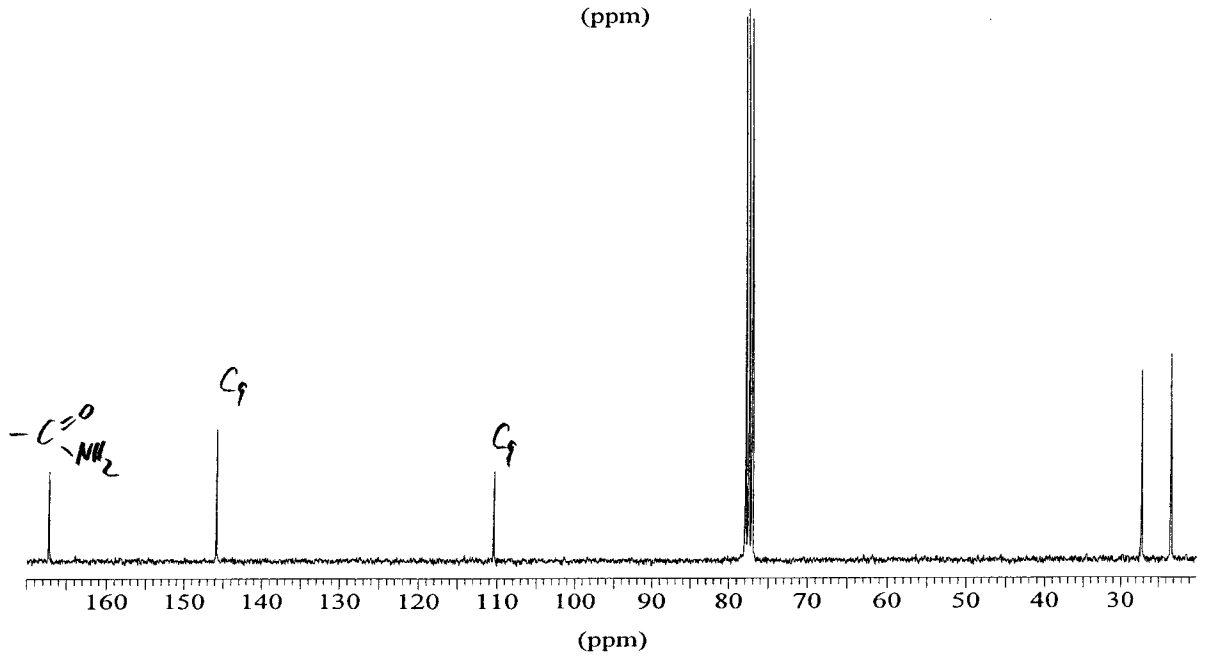
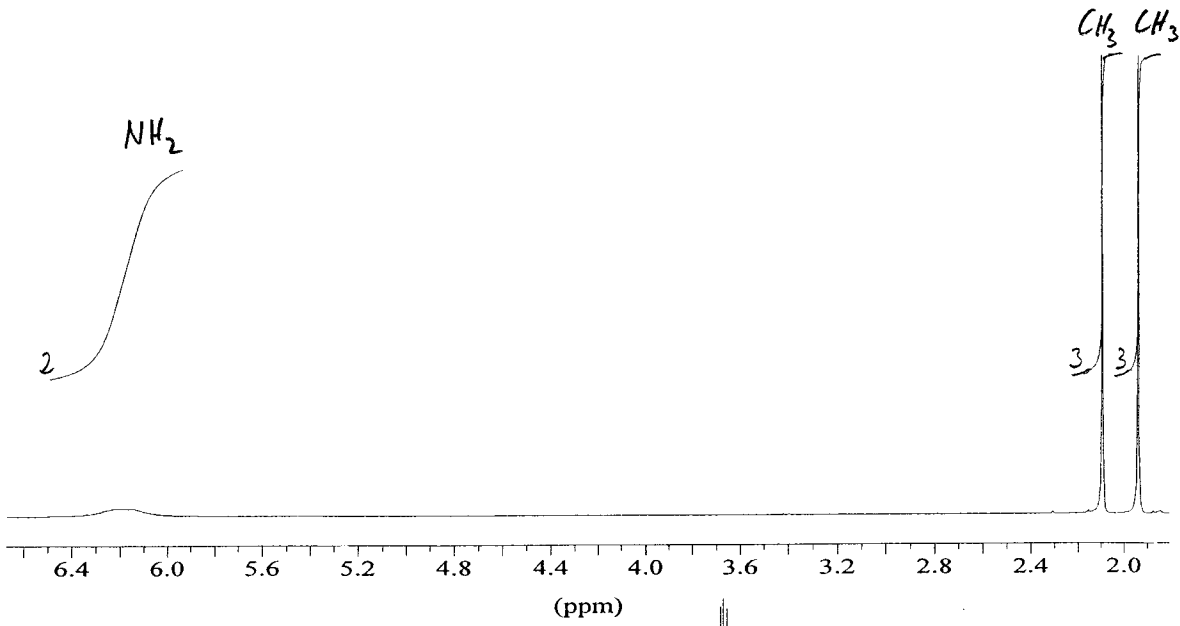
4. Bestimmen Sie das Spinsystem. (1 P).

Spektrum:

110 ppm

146 ppm





Frage 2: (8 Punkte)

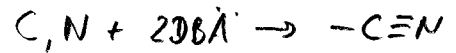
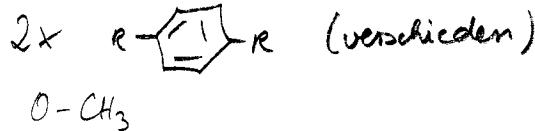
Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{14}H_{11}NO$. $DBA' = 1 + \frac{1}{2}(28 - 11 + 1) = 10$

Hinweis: Die Verbindung enthält kein Carbonsäure-Derivat!

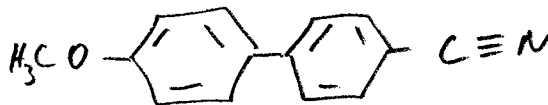
1. Berechnen Sie die Doppelbindungsäquivalente für diese Verbindung. (1 P)

$$DBA' = 1 + \frac{1}{2}(28 - 11 + 1) = 10$$

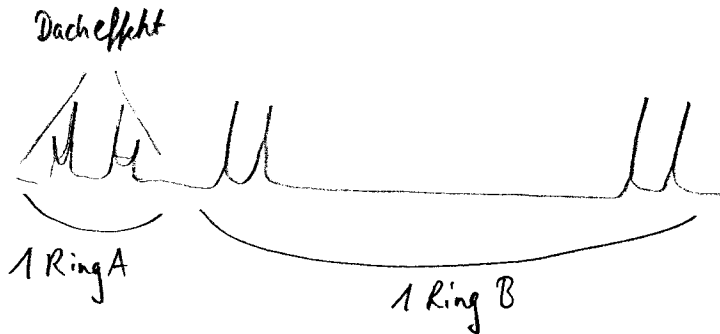
2. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des 1H -, ^{13}C - und DEPT-Spektren? (4 P)



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

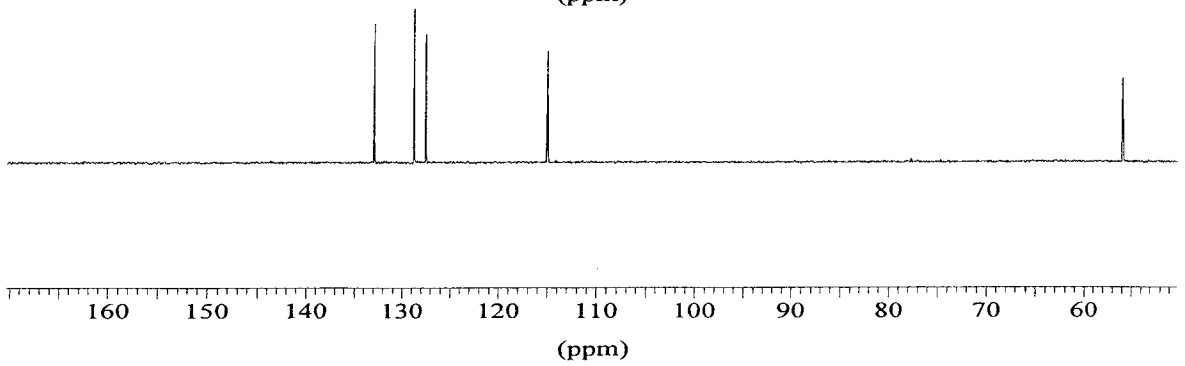
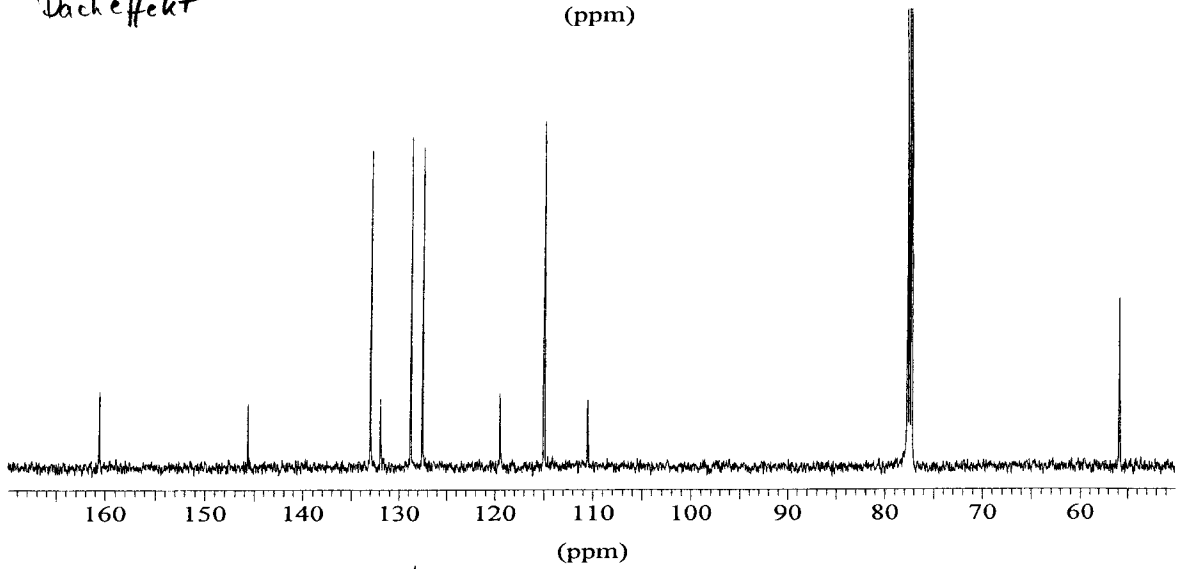
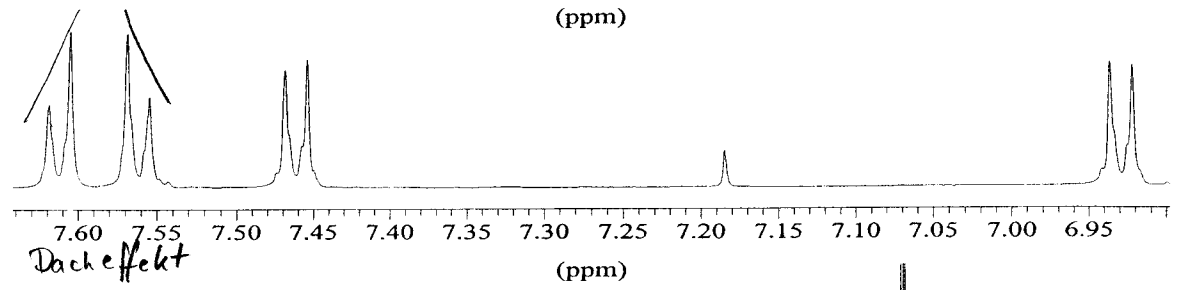
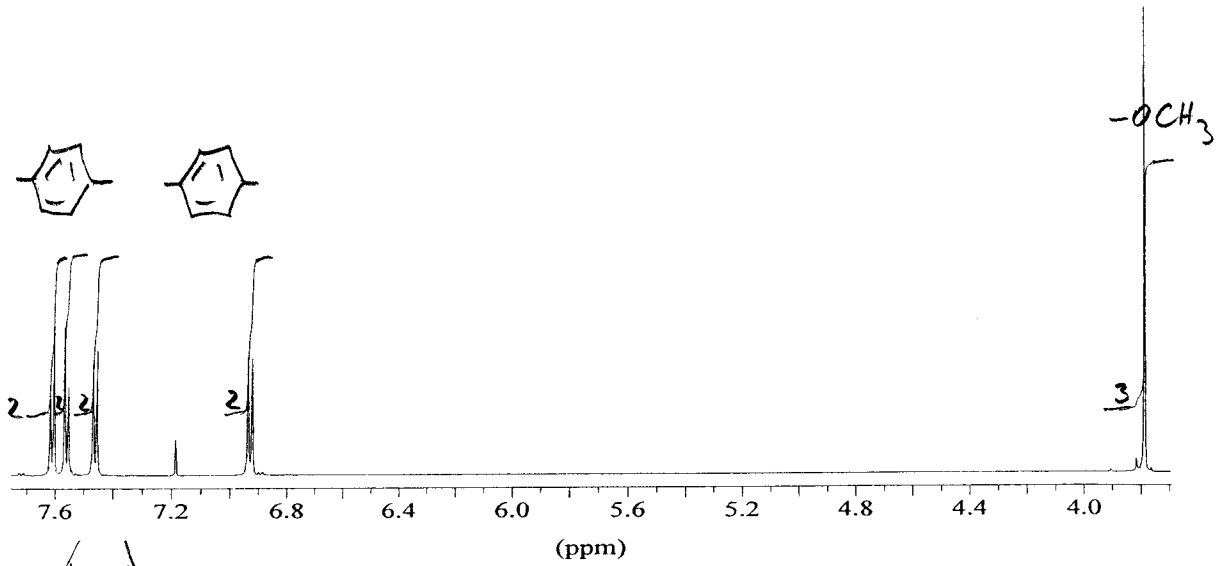


4. Warum zeigen einige Signale im 1H -Spektrum einen Dacheffekt – andere nicht? Was ist ein Dacheffekt? Zeichnen Sie den Dacheffekt im 1H -Spektrum ein. (2 P)



bei Ring A sieht man einen Dacheffekt, da die beiden Signale (im Verhältnis zu Ihrer Kopplungskonstante) nah beieinander liegen.

Ring B \rightarrow kein Dacheffekt \rightarrow Signale liegen weit auseinander.

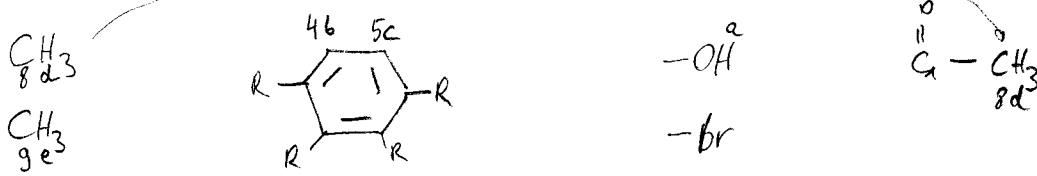


Frage 3: (13 Punkte)

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

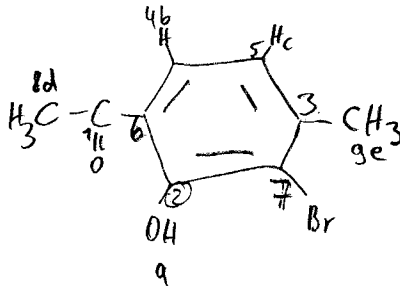
$DBA = 1 + \frac{1}{2}(18 - 9 - 1) = 5$

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der NMR-Spektren? (4 P)



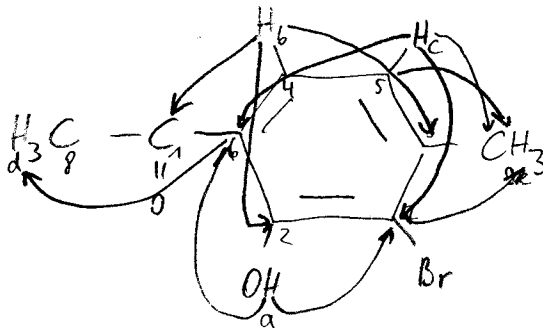
2. Ordnen Sie die Signale so weit wie möglich zu.

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)

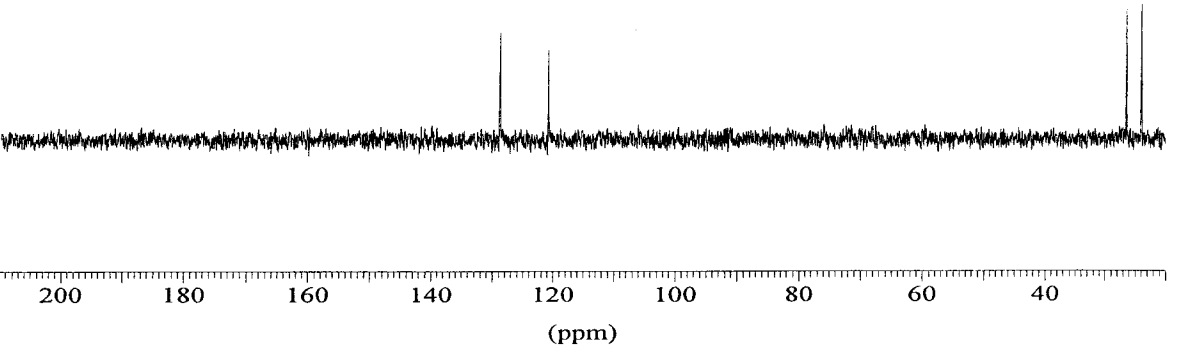
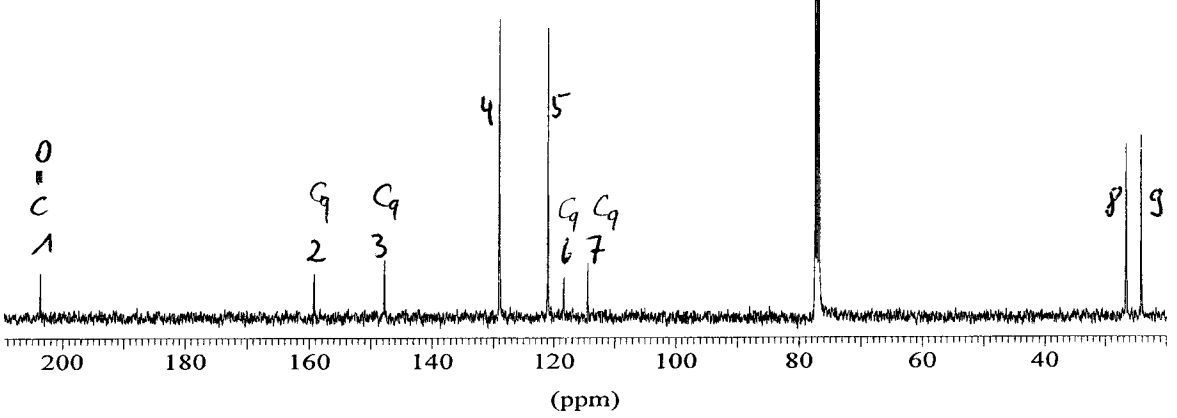
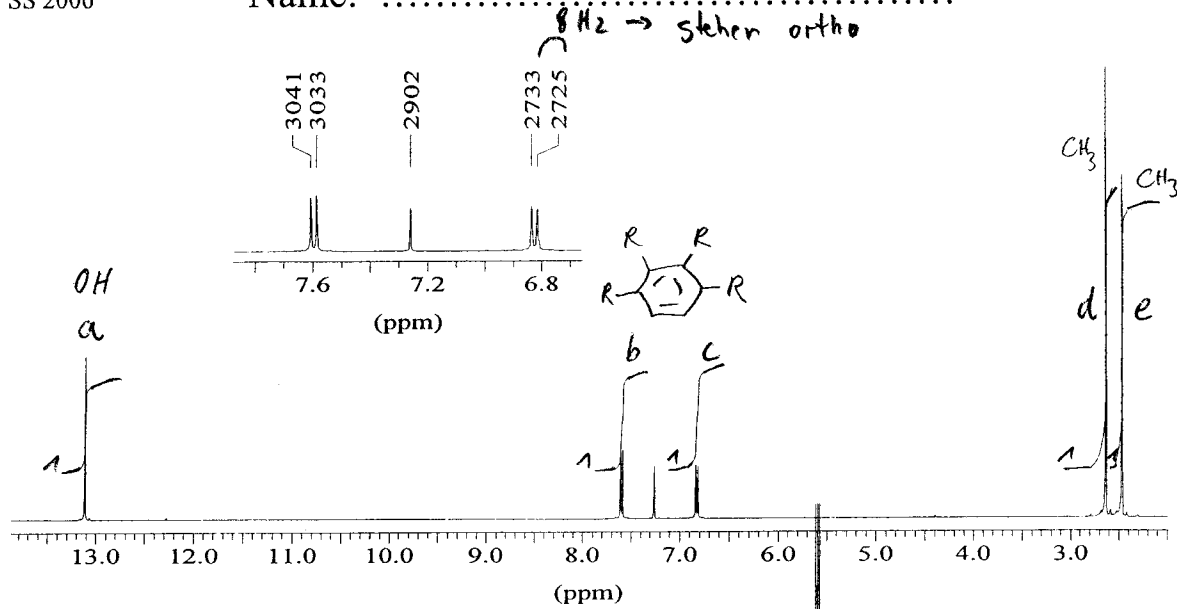
5. Begründen Sie Ihre Struktur, indem Sie alle im HMBC sichtbaren $^3J(C,H)$ -Kopplungen in Ihre gefundene Struktur einzeichnen und im HMBC-Spektrum markieren. (4 P)
Verwenden Sie (wenn möglich) für jedes Proton eine andere Farbe.

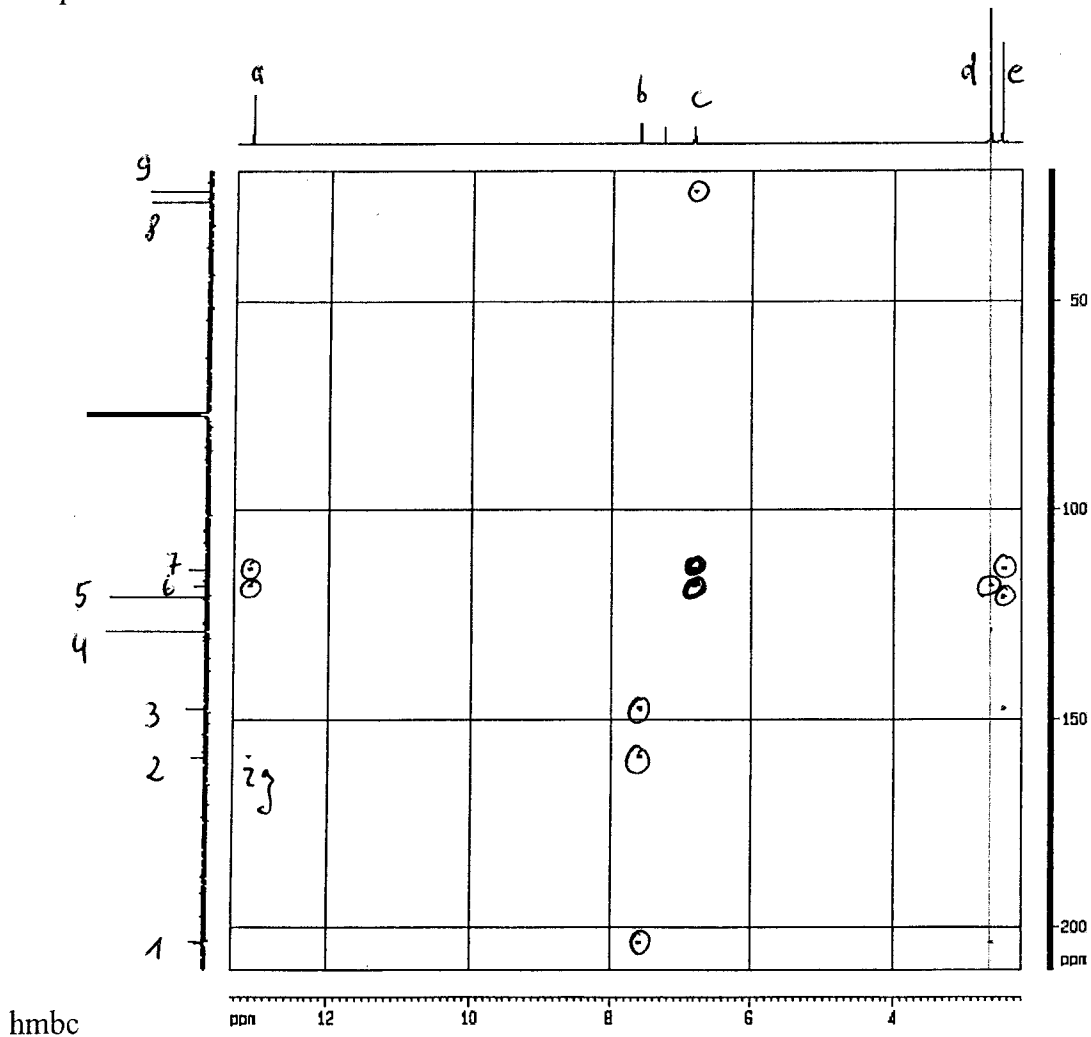
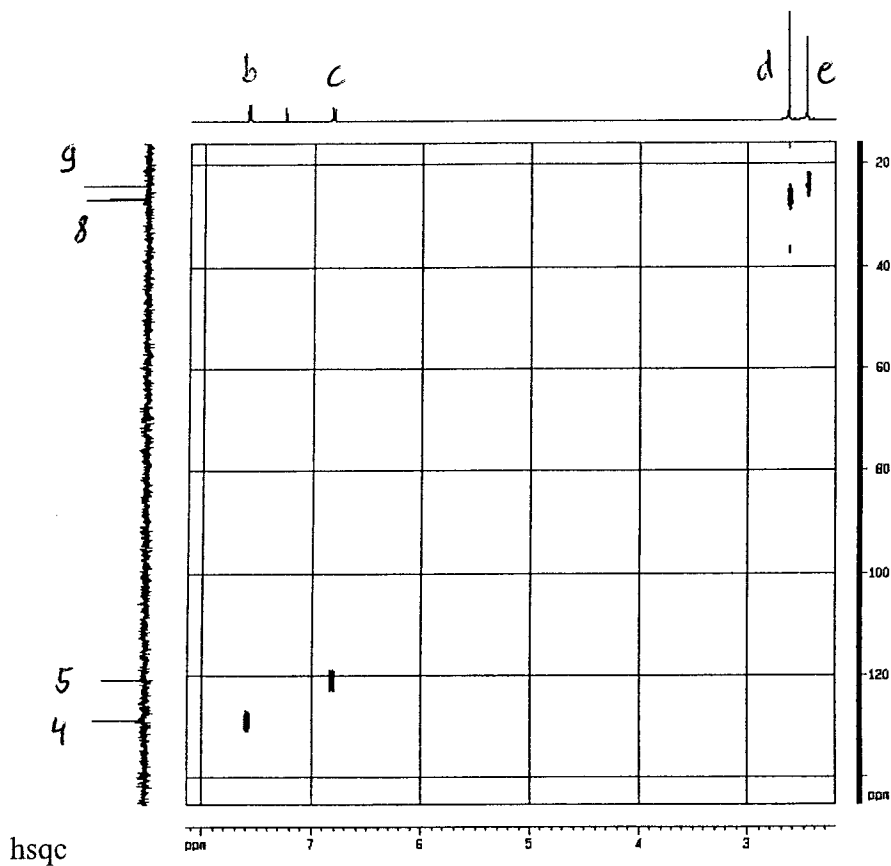


- 8d → 5,7
- d → 6
- c → 6,7
- b → 1,2,3
- a → 6,7

6. Auf welchem Gerät wurden die Spektren gemessen. (200, 300, 400, 600 MHz-Gerät). Begründen Sie Ihre Antwort. (1 P)

$7.6 \text{ ppm} \cong 3040 \text{ Hz}$
 $1 \text{ ppm} \cong 400 \text{ Hz}$
 $\Rightarrow 400 \text{ MHz-Gerät}$

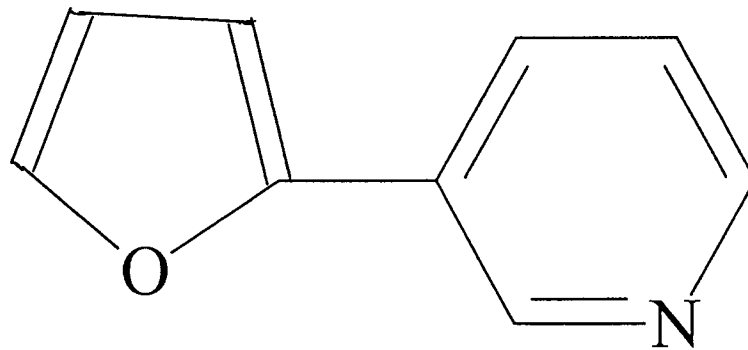
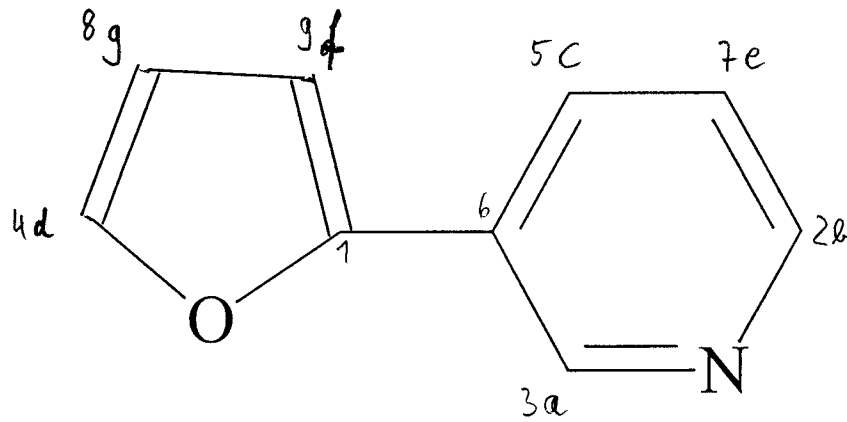




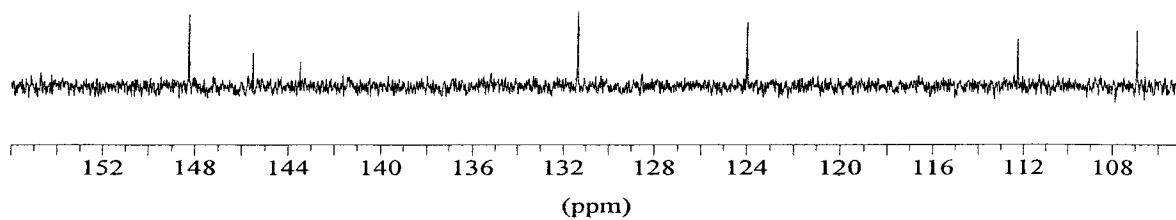
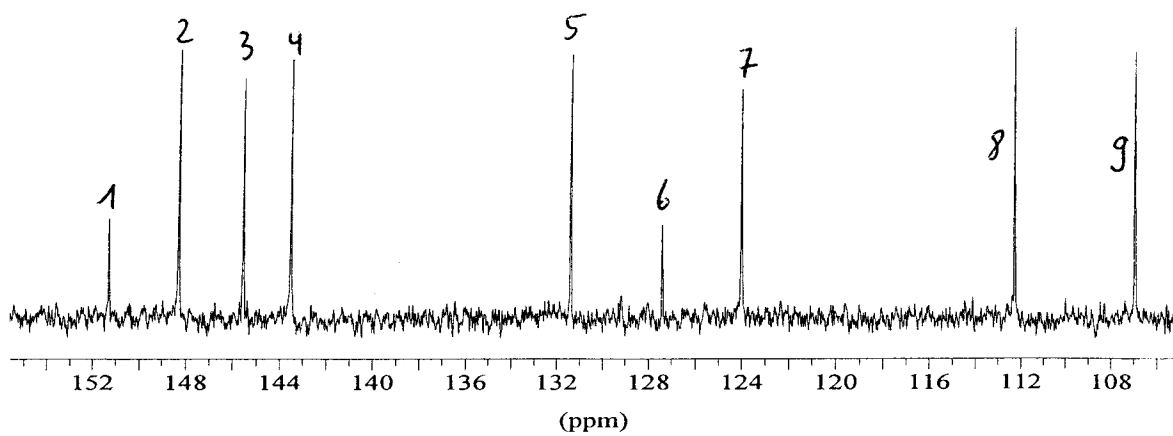
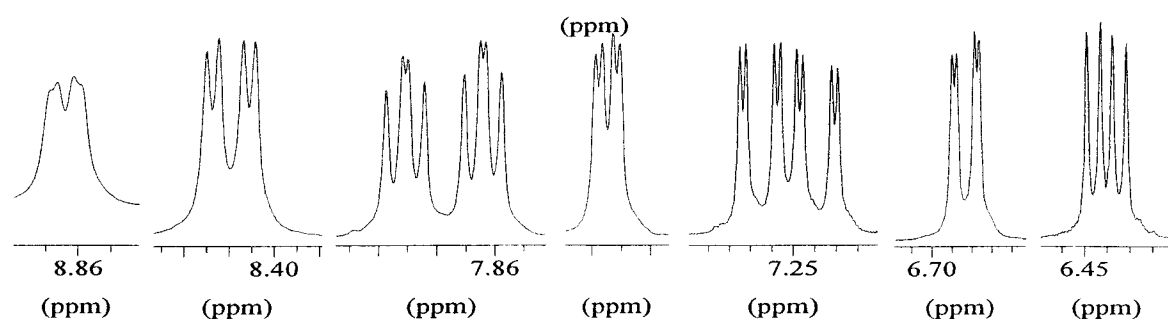
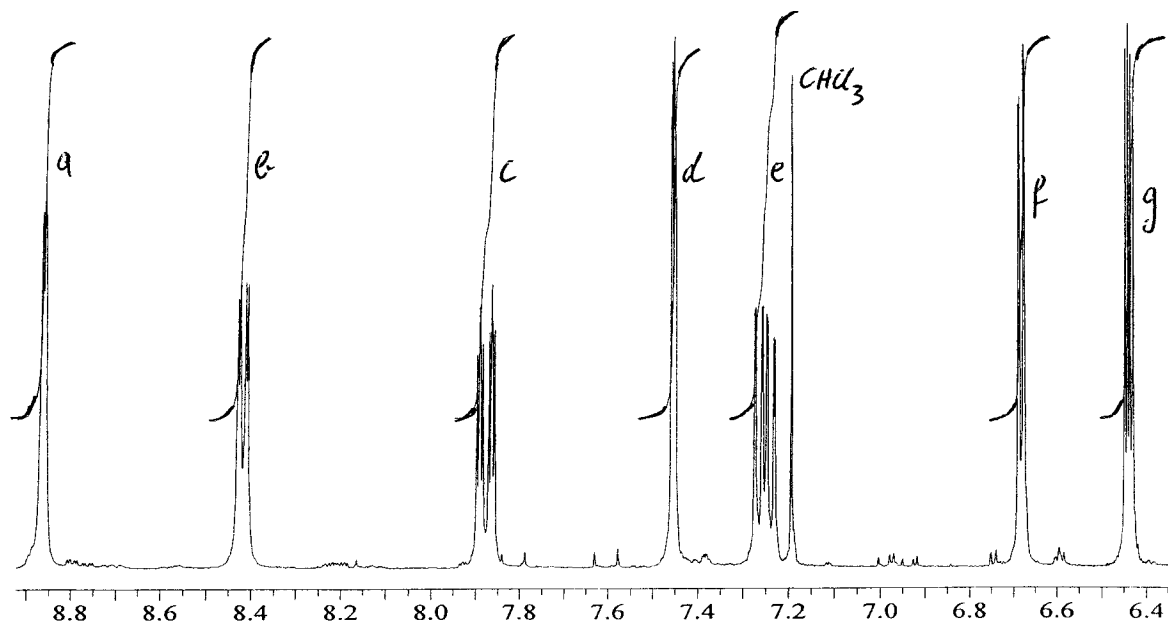
$a \rightarrow 6, 7, 2$
 $b \rightarrow 1, 2, 3$
 $c \rightarrow 6, 7, 9, 4$
 $d \rightarrow 6, 1, 2$
 $e \rightarrow 5, 7$
 $3 \rightarrow 2$

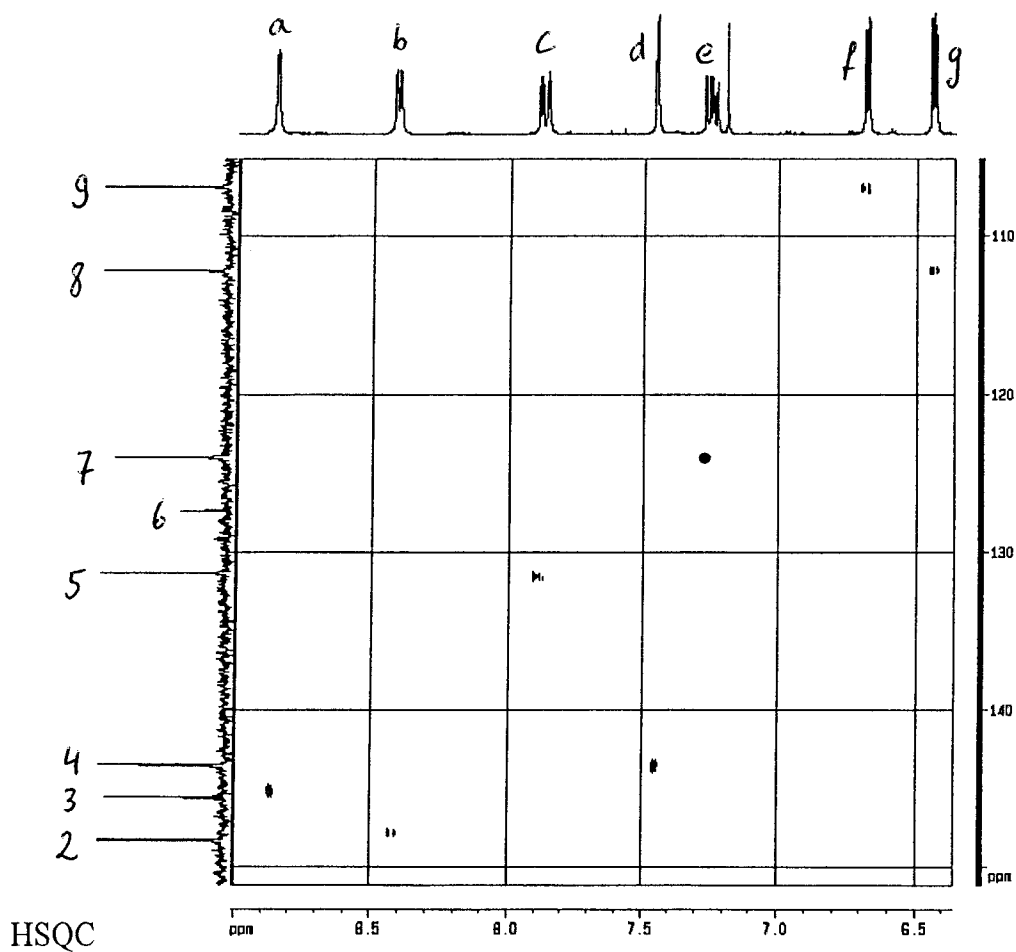
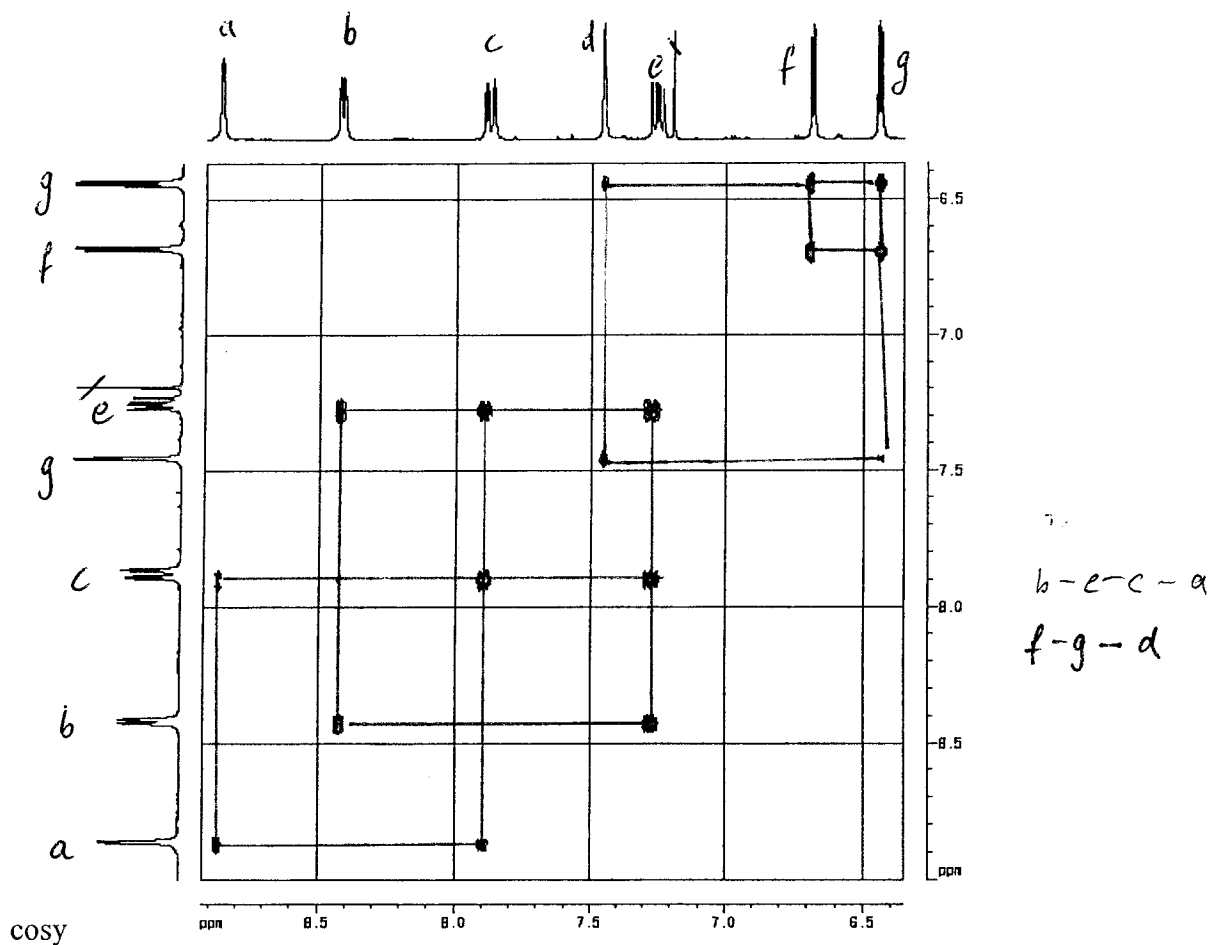
Frage 4: (9 Punkte)

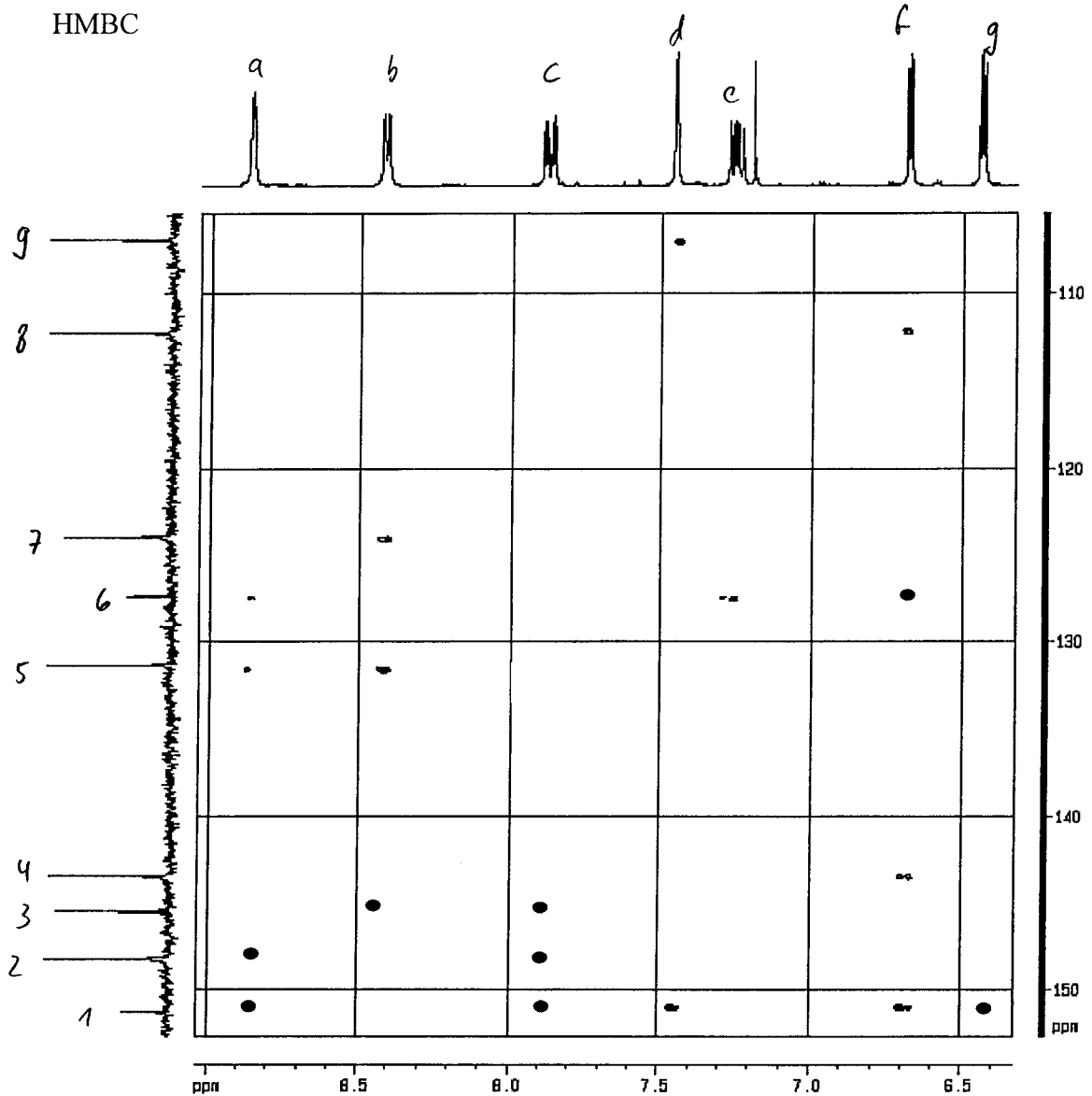
Auf Seite 9ff sind die NMR-Spektren folgender Verbindungen gegeben



Ordnen Sie alle Signale zu (9 P)

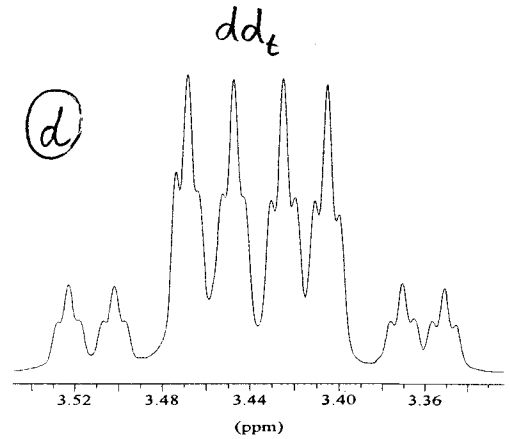
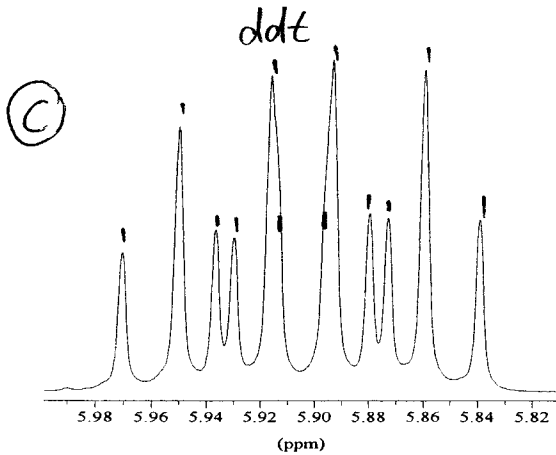
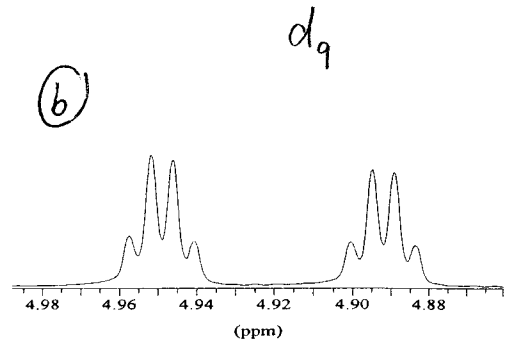
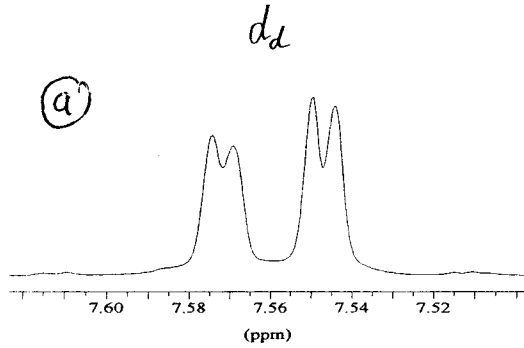




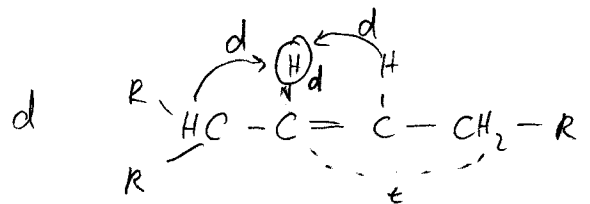
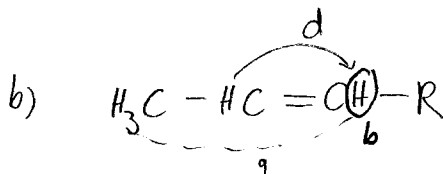
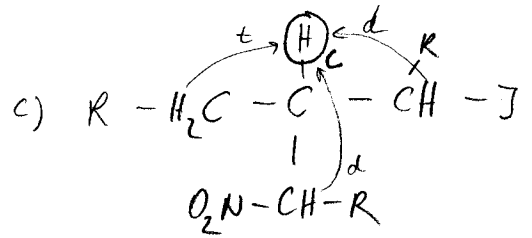
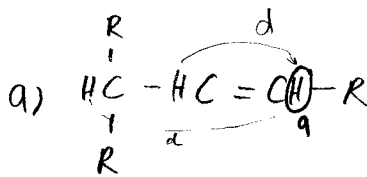


Frage 5: Theorie (12 Punkte)

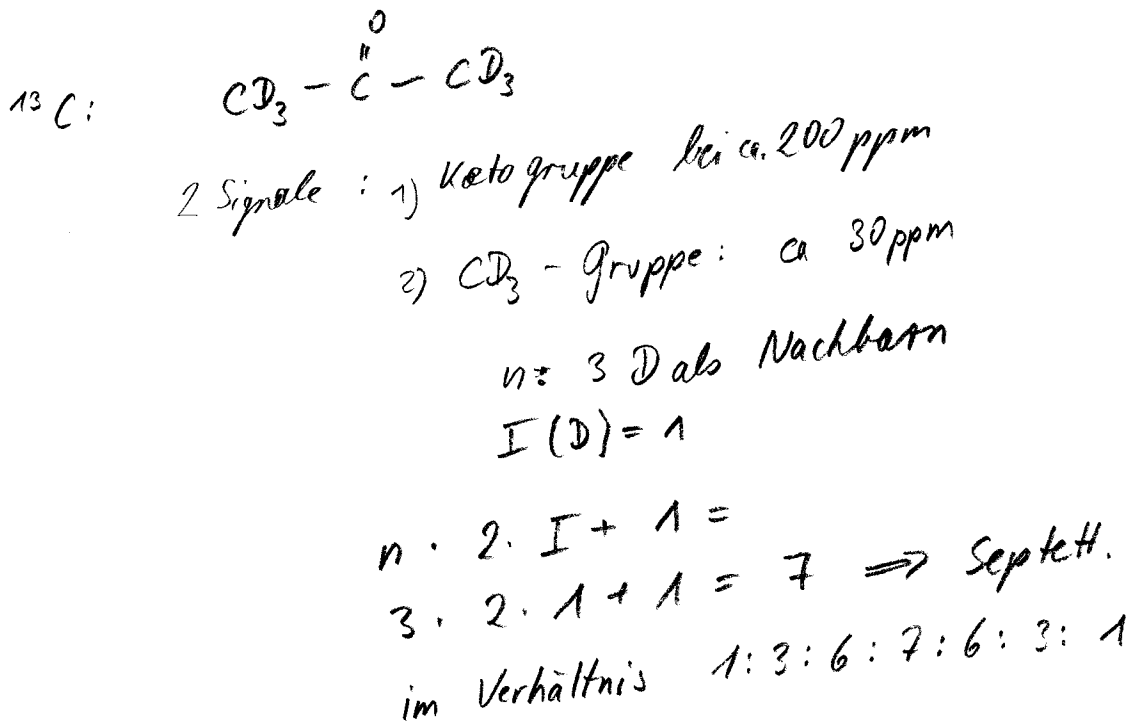
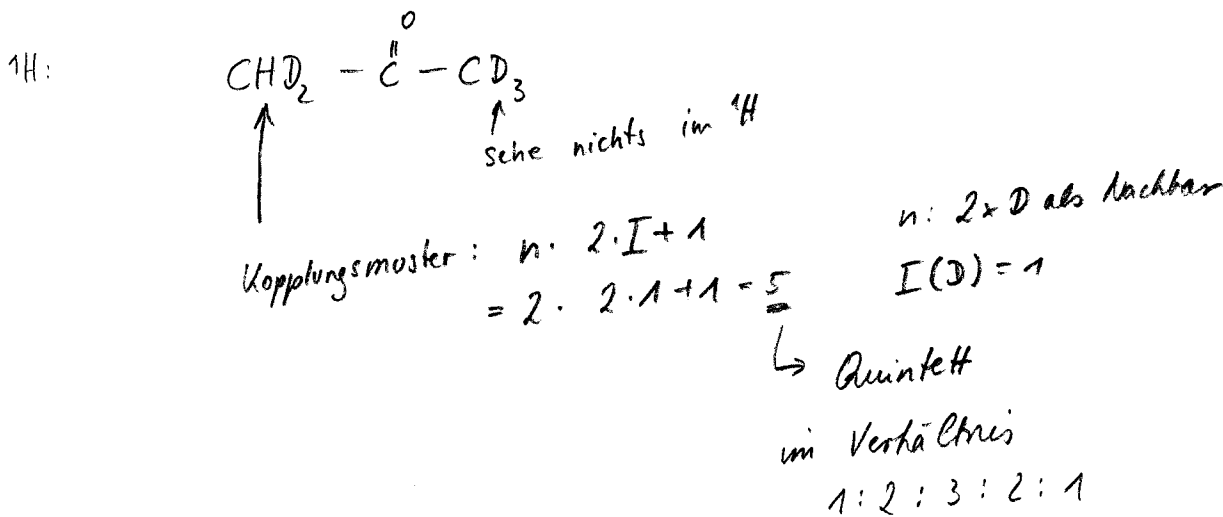
1. Um welche Kopplungsmuster handelt es sich bei folgenden Spektren-Ausschnitten. Markieren Sie die Fernkopplung, indem Sie den dazugehörigen Buchstaben kleiner schreiben. Z. B. t_d (Triplett von Dublett, Dublett über Fernkopplung) (4 P)



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



2. Erklären Sie das Kopplungsmuster von d6-Aceton (99 %ig) im ¹H- und ¹³C-Spektrum. (4 P)



n=0							1
n=1				1	1	1	
n=2		1	2	3	2	1	
n=3		1	3	6	7	6	3
	1	4	10	16	19	16	10
							4
							1