

Spektroskopie und Beugung I (NMR)
SS 2005 Nachholklausur

8.9.2006

Frage 1: (9 Punkte)

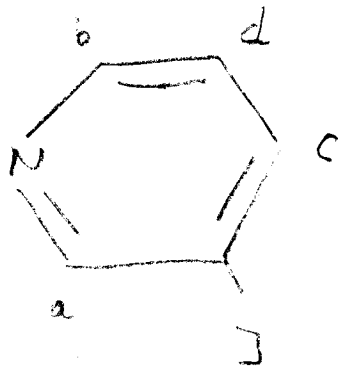
Auf Seite ³2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C_5H_4IN .

$$DBA' = 1 + \frac{1}{2} (10 - 4 - 1 + 1) = 4$$

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



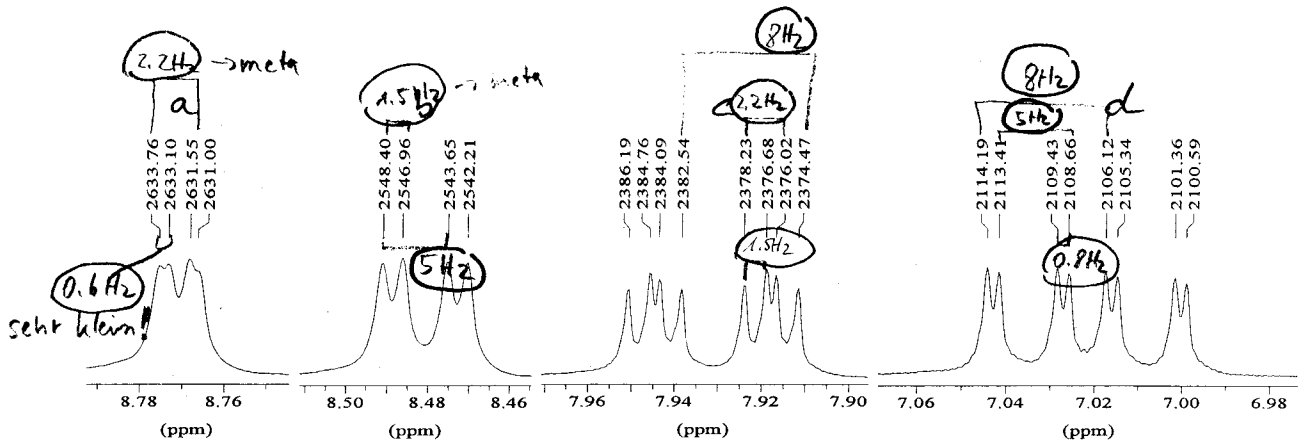
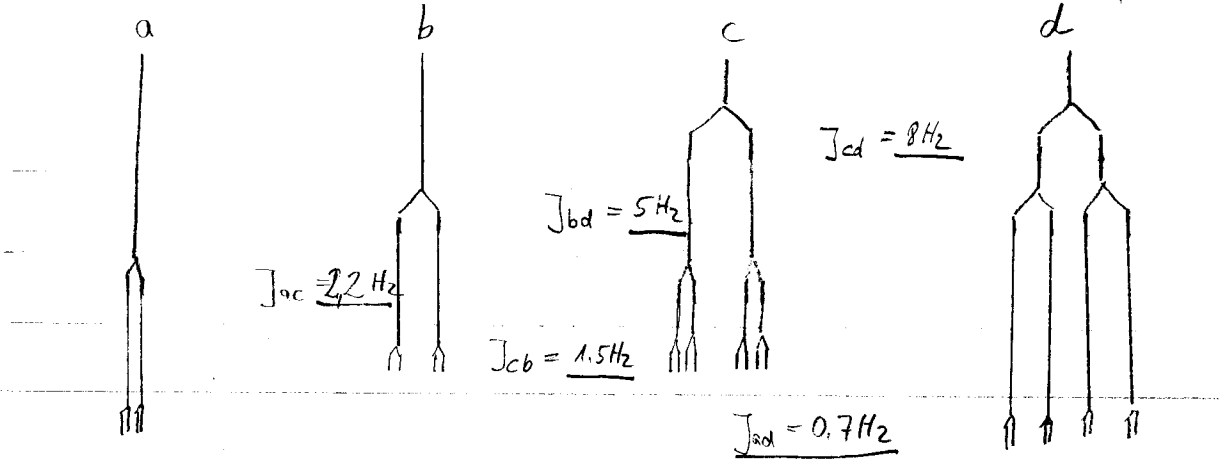
2. Ordnen Sie die 1H -Signale zu. (2 P)



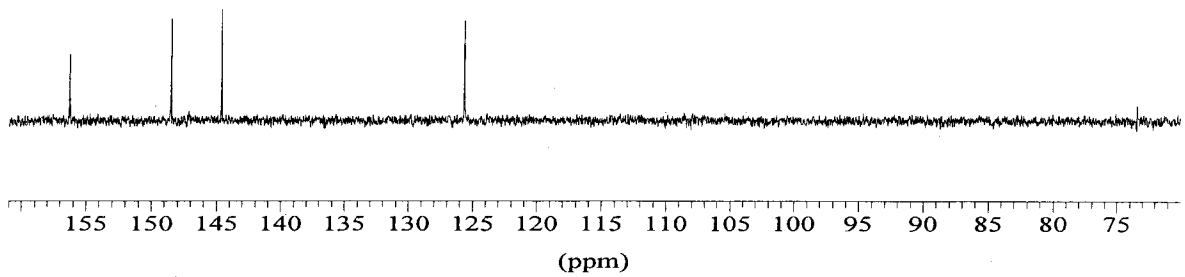
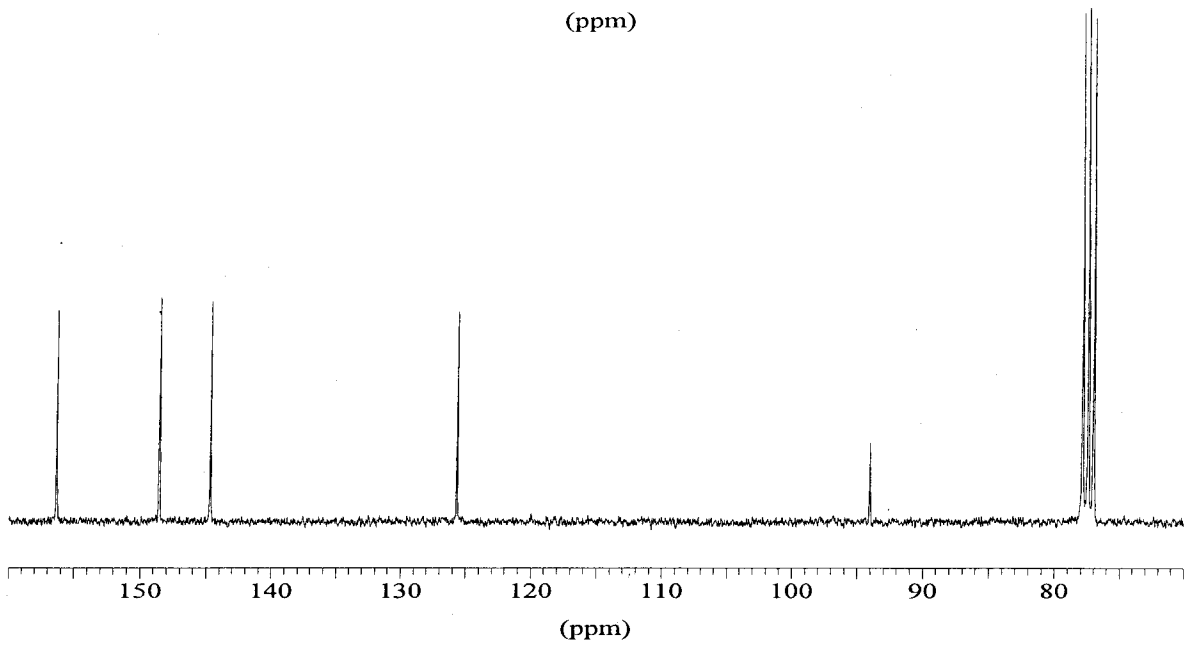
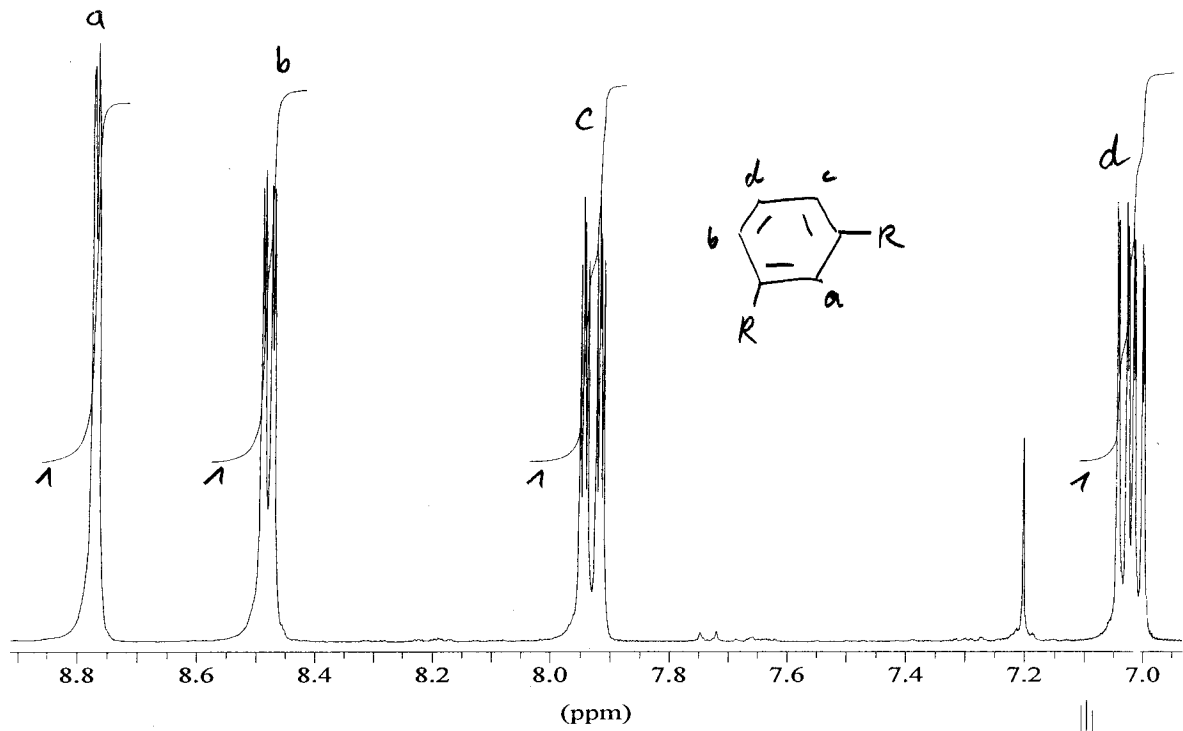
3. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die Protonen incl. allen Kopplungskonstanten.

Beachten Sie dabei das Kopplungsmuster im Spektrum. (4 P)

Vorsicht: eine Kopplung, die Sie erwarten würden, erscheint nicht $\rightarrow J_{ab}$ fehlt
 Eine Kopplung, die Sie nicht erwarten würden, erscheint. $\rightarrow J_{ad} = 0,7 \text{ Hz}$
 Welche? (Wenn richtig: 2 Zusatzpunkte) $(0,6 \text{ bzw } 0,8)$



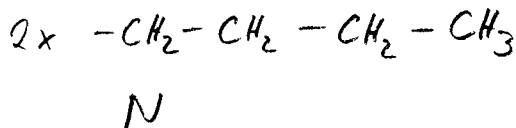
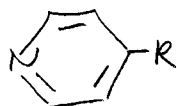
Maßstab: 1mm \Rightarrow 1 Hz



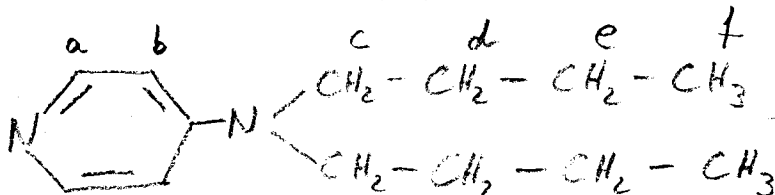
Frage 2: (7 Punkte)

Auf Seite ⁵4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{13}H_{22}N_2$. (N-3bindig) $1 + \frac{1}{2}(26 - 22 + 2) = 4$

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)

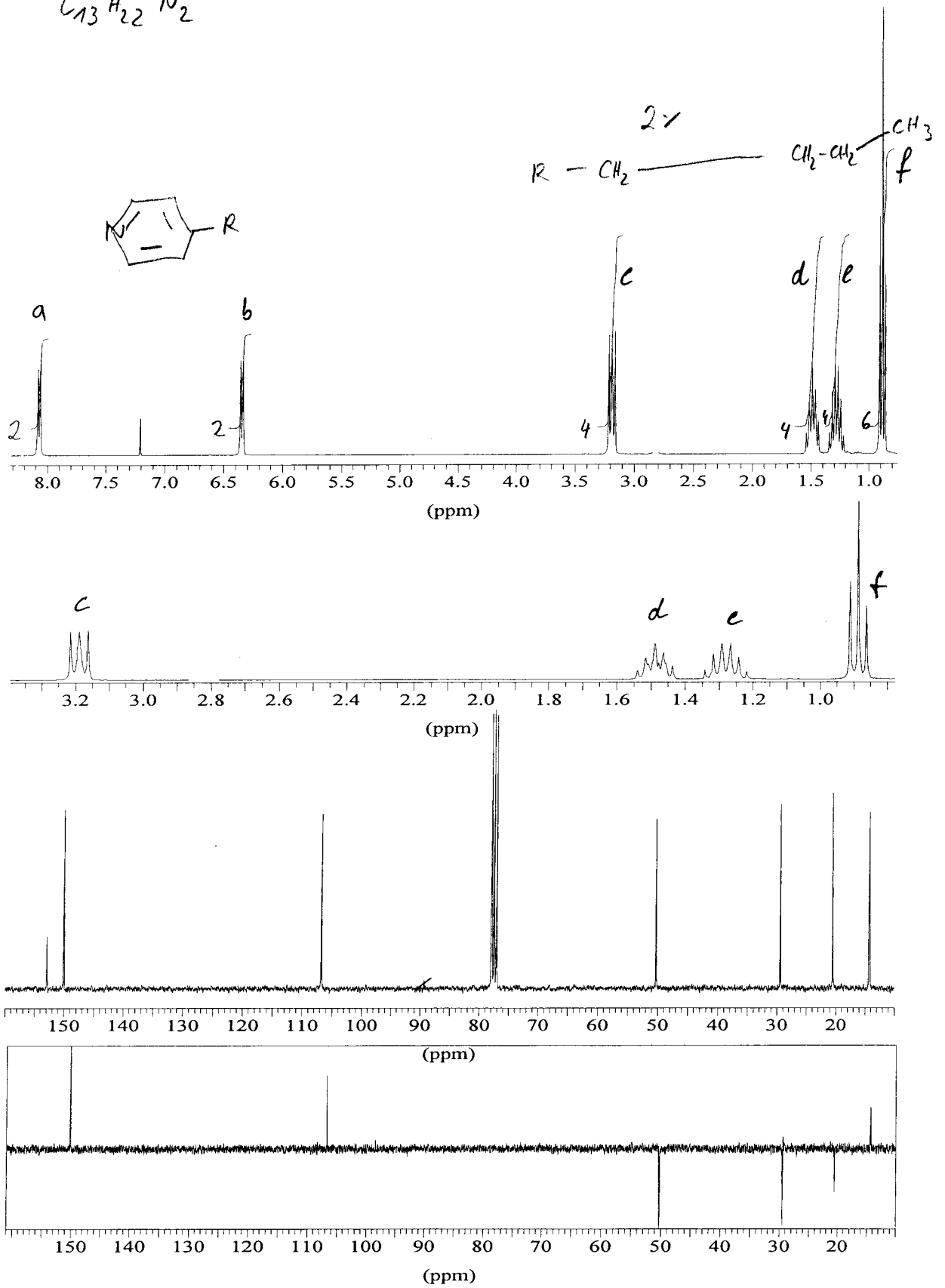
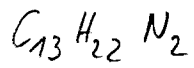


3. Ordnen Sie alle 1H -Signale zu. (1 P)

siehe 2.

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

AA'BB' CC'C''C''' DD'D''D''' EE'E''E''' F₃F'₃
{CC'DD'EE'F₃}₂



cosy

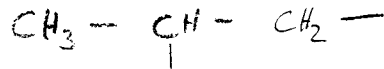
Frage 3: (9 Punkte)

Auf Seite 6 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_7H_{12}O_4$

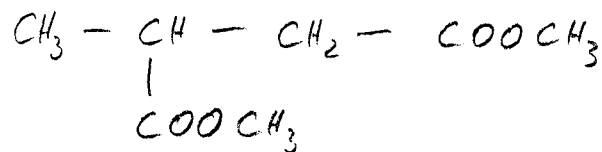
$$DBA = 1 + \frac{1}{2}(14 - 12) = 2$$

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

2 verschiedene $COOCH_3$



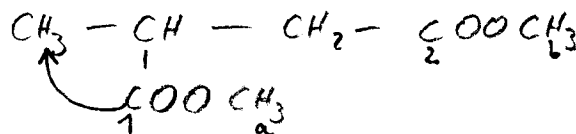
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)



3. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)



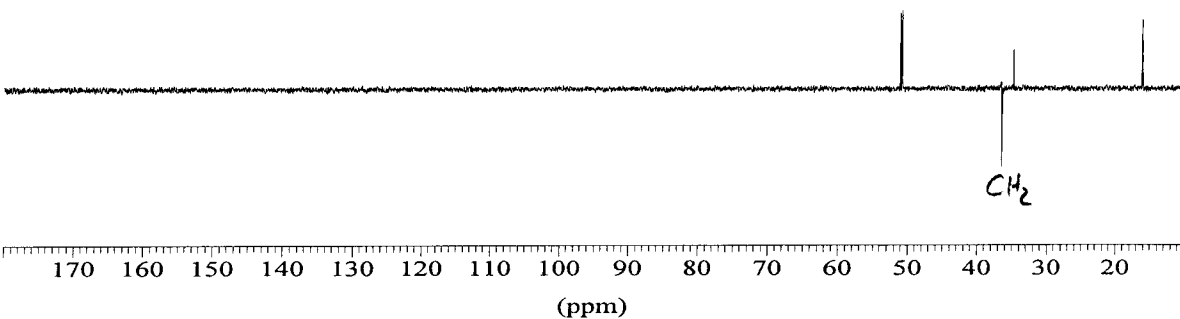
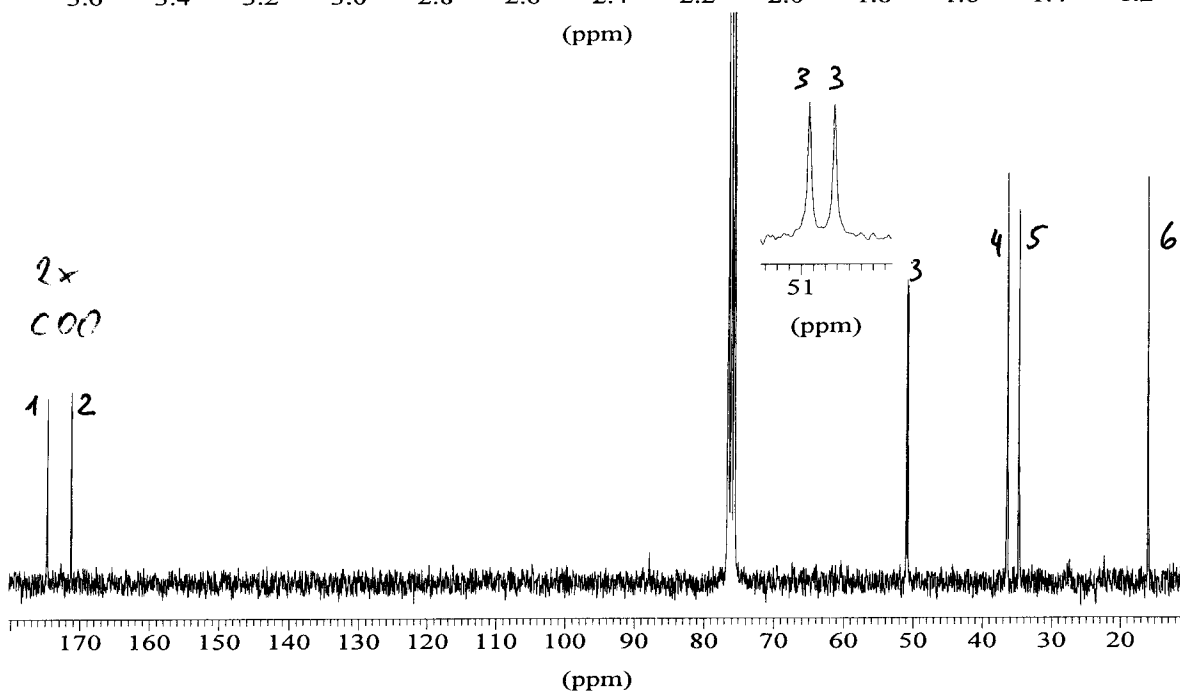
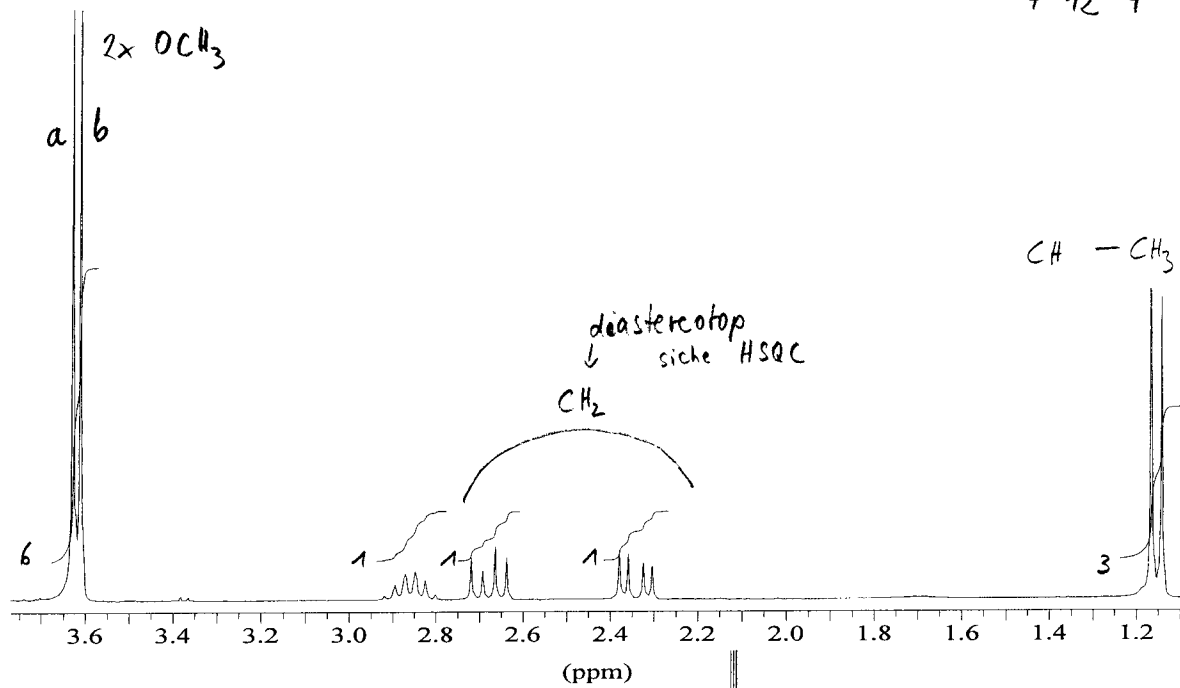
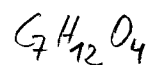
4. Ordnen Sie die ^{13}C -Atome 1 und 2 zu. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie im HMBC sichtbare, relevante Kopplungen in Ihr Molekül einzeichnen. (1 P)

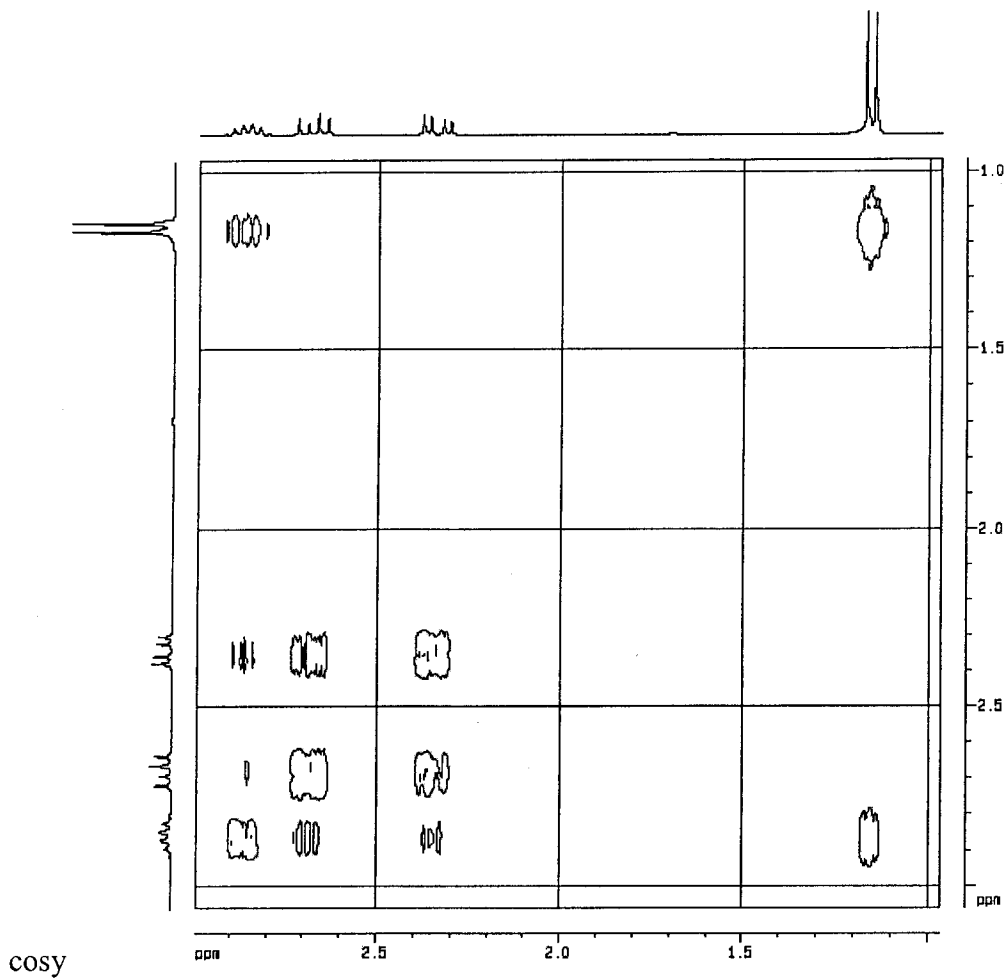


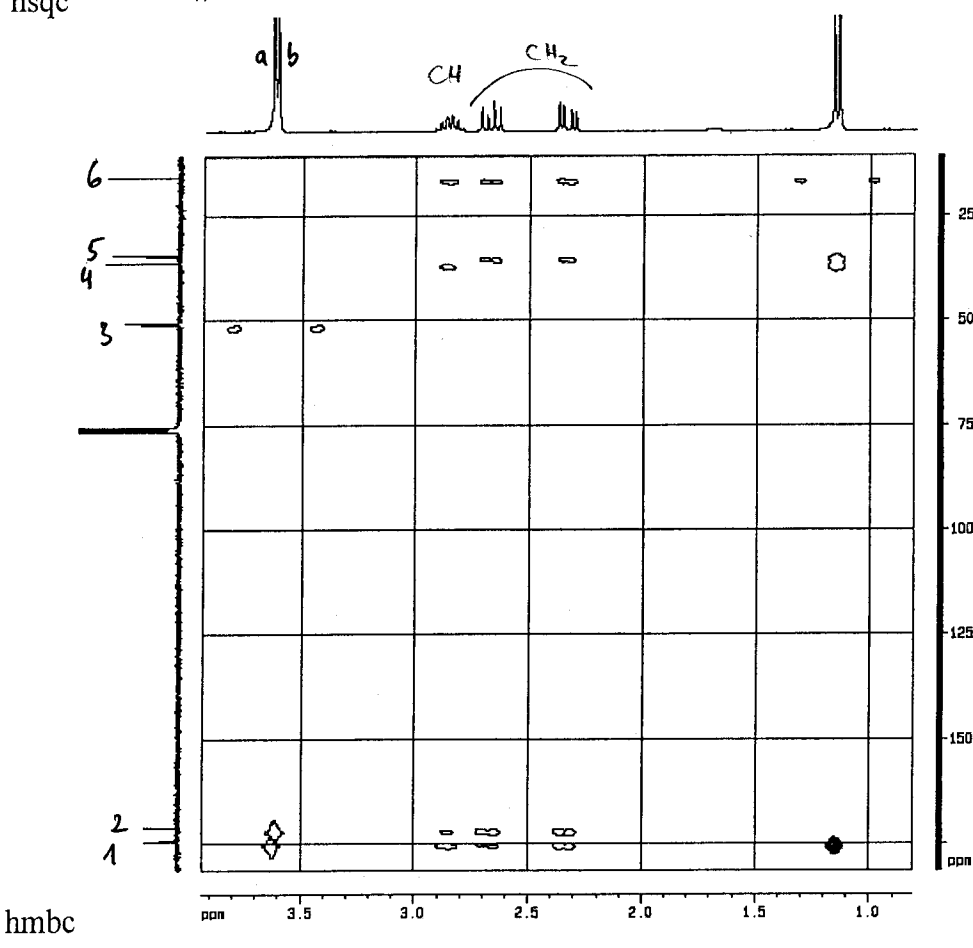
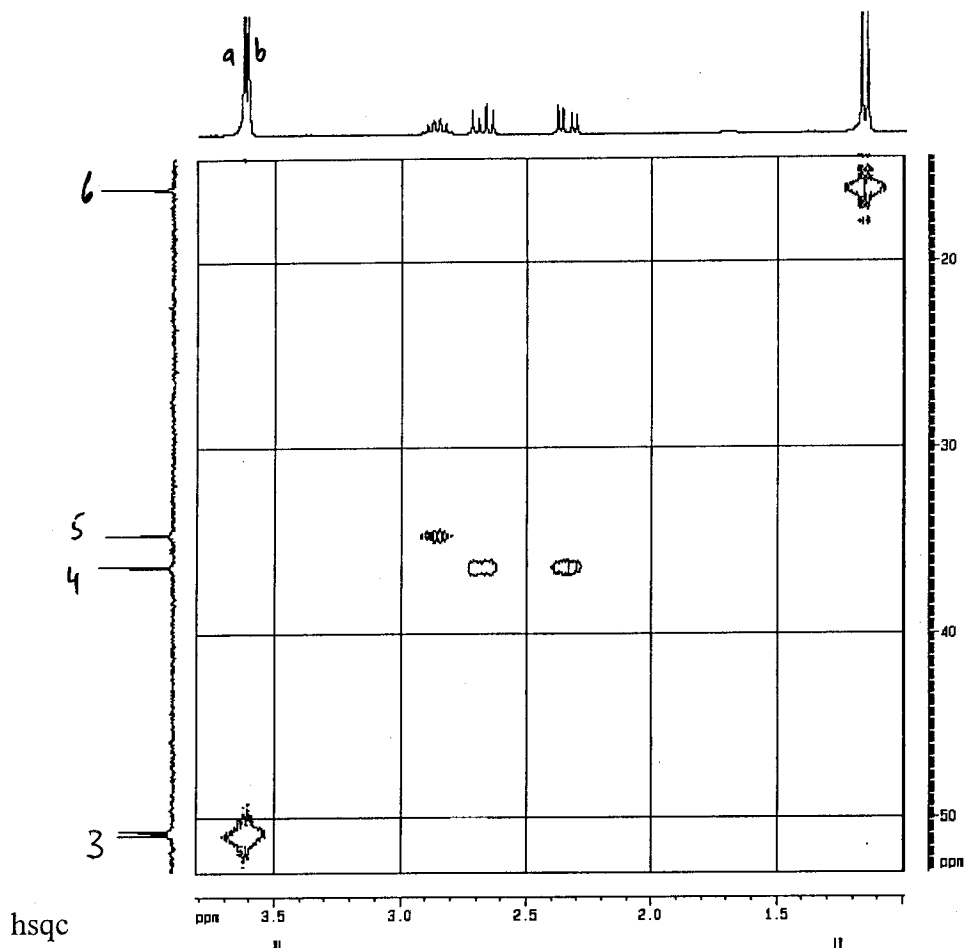
5. Was sind diastereotope Protonen? Welche Auswirkungen hat diese Eigenschaft auf das Spektrum? (2 P)

: sind weder durch Rotation noch durch Spiegelung ineinander überführbar

Eigenschaft: sie haben unterschiedliche Verschiebungen
(im Spinsystem: untersch. Buchstaben)

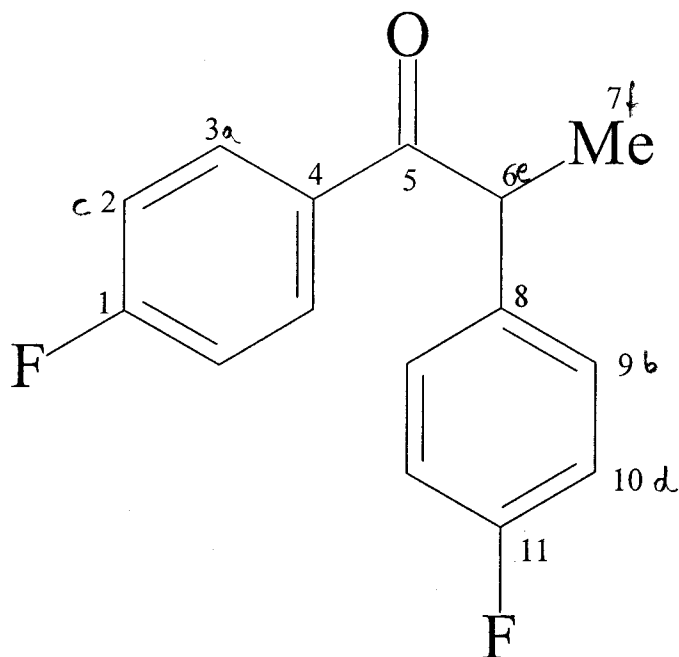






Frage 4: (13 Punkte)

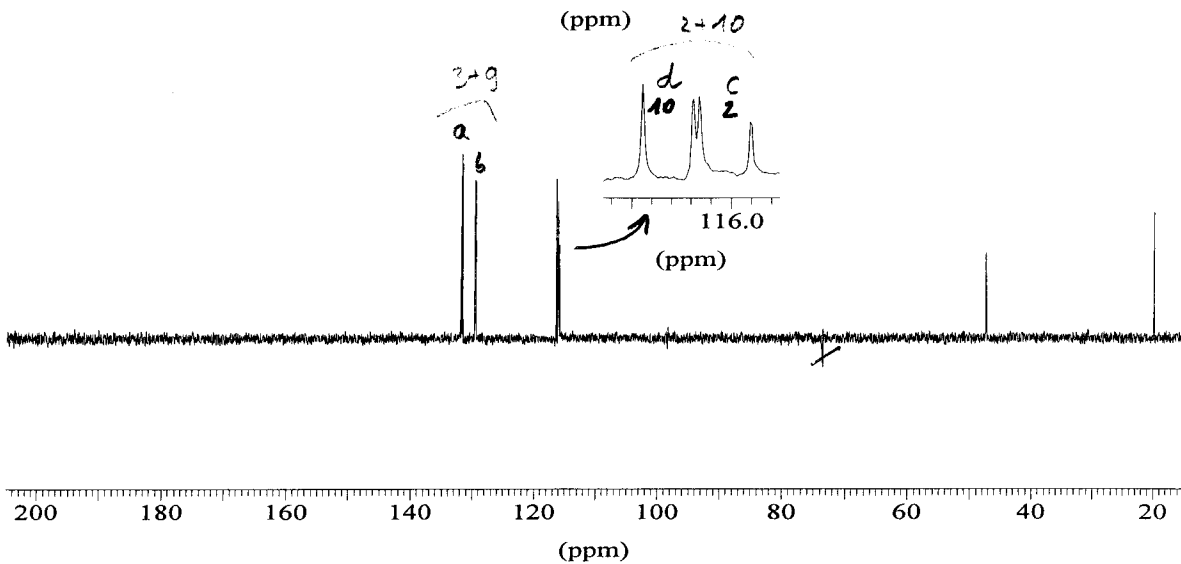
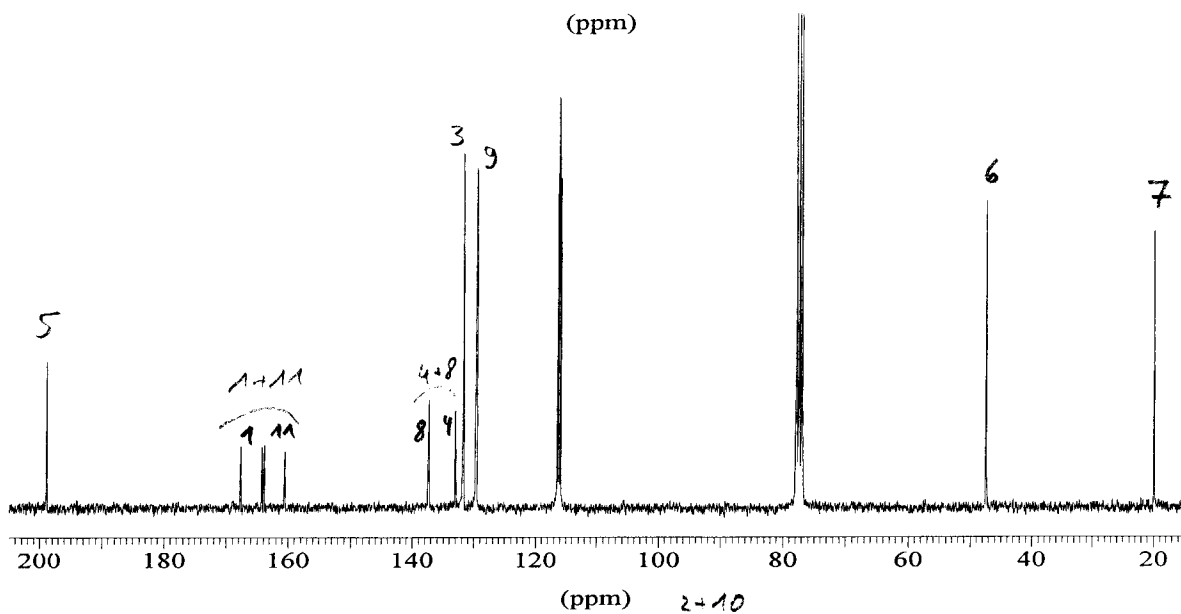
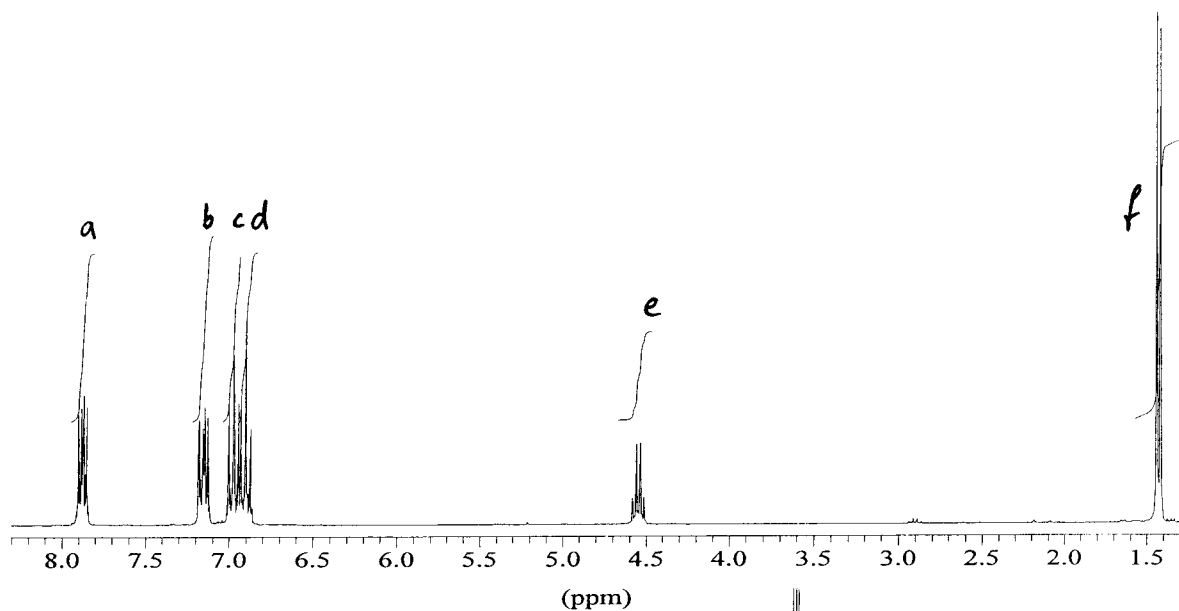
Auf Seite 10 ff sind die NMR-Spektren folgender Verbindungen gegeben

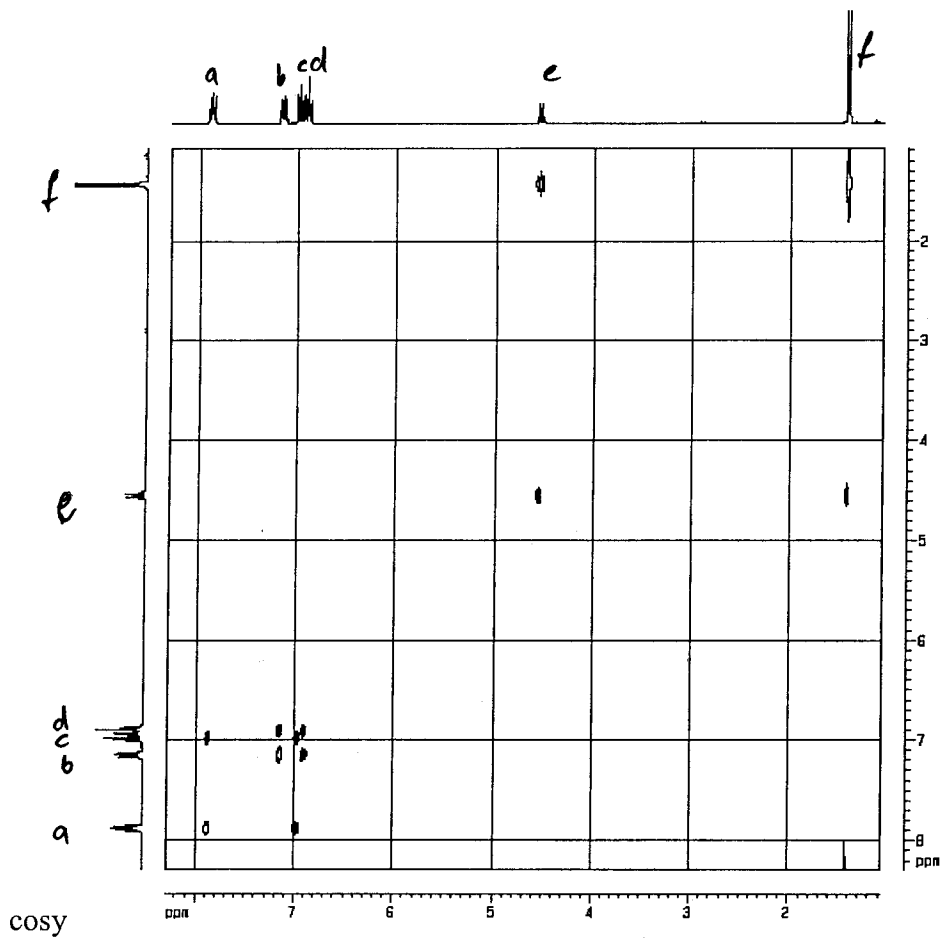


Ordnen Sie alle ^{13}C -Signale zu, indem Sie die Nummerierung aus obiger Struktur in das ^{13}C -Spektrum (^1H entkoppelt) eintragen. (11 P)
Es gibt 2 Sonderpunkte, wenn Sie Signal 1 und 11 richtig zugeordnet haben. (2 P)

cosy : a-c
b-d

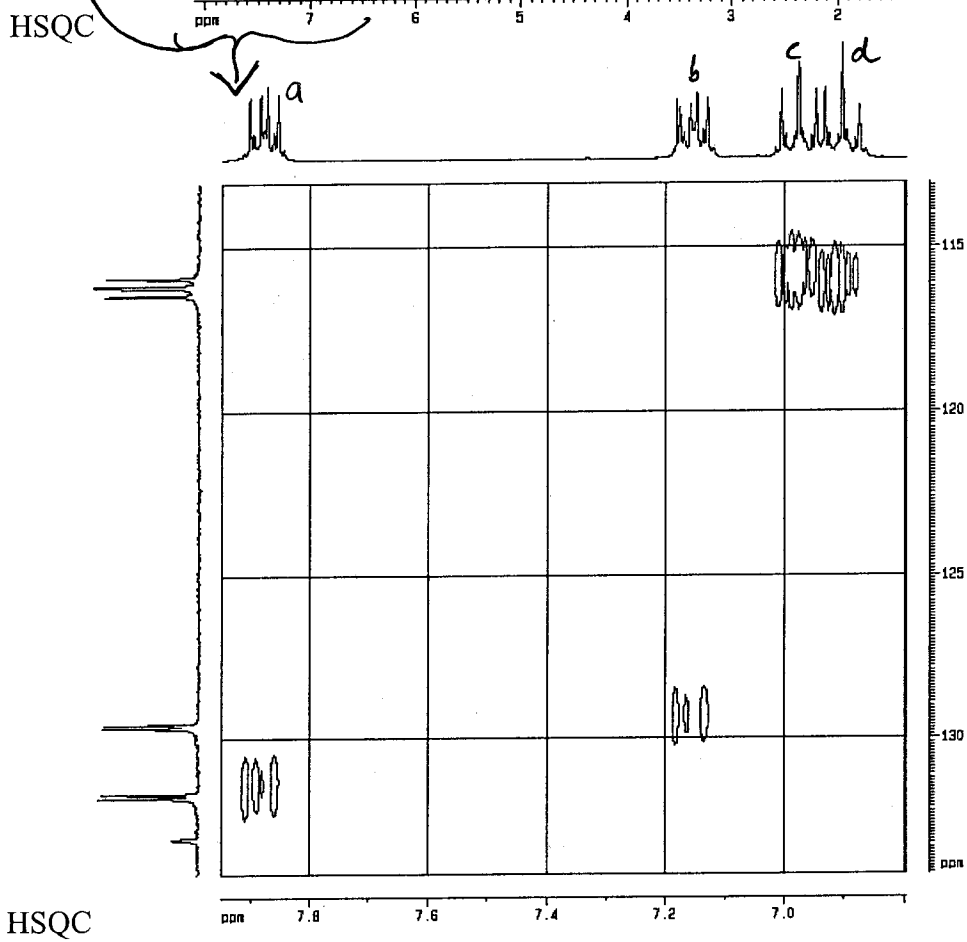
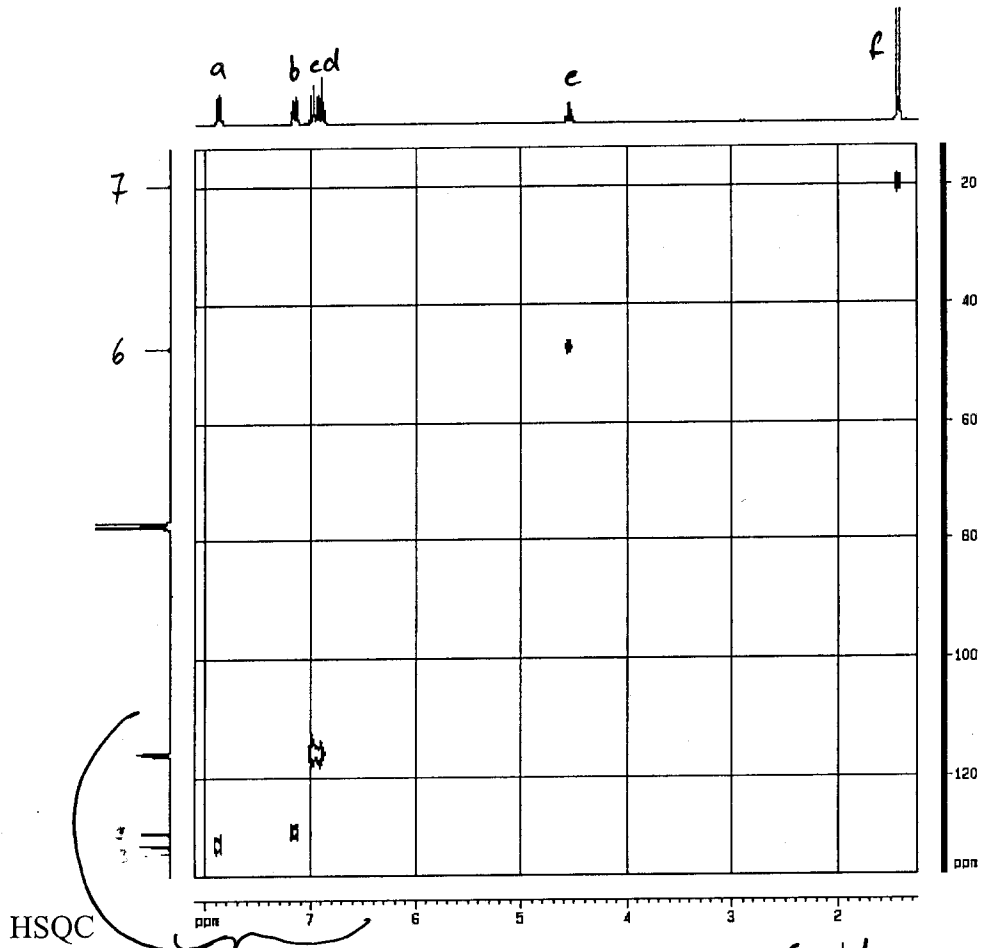
hsqc : 3a
9b

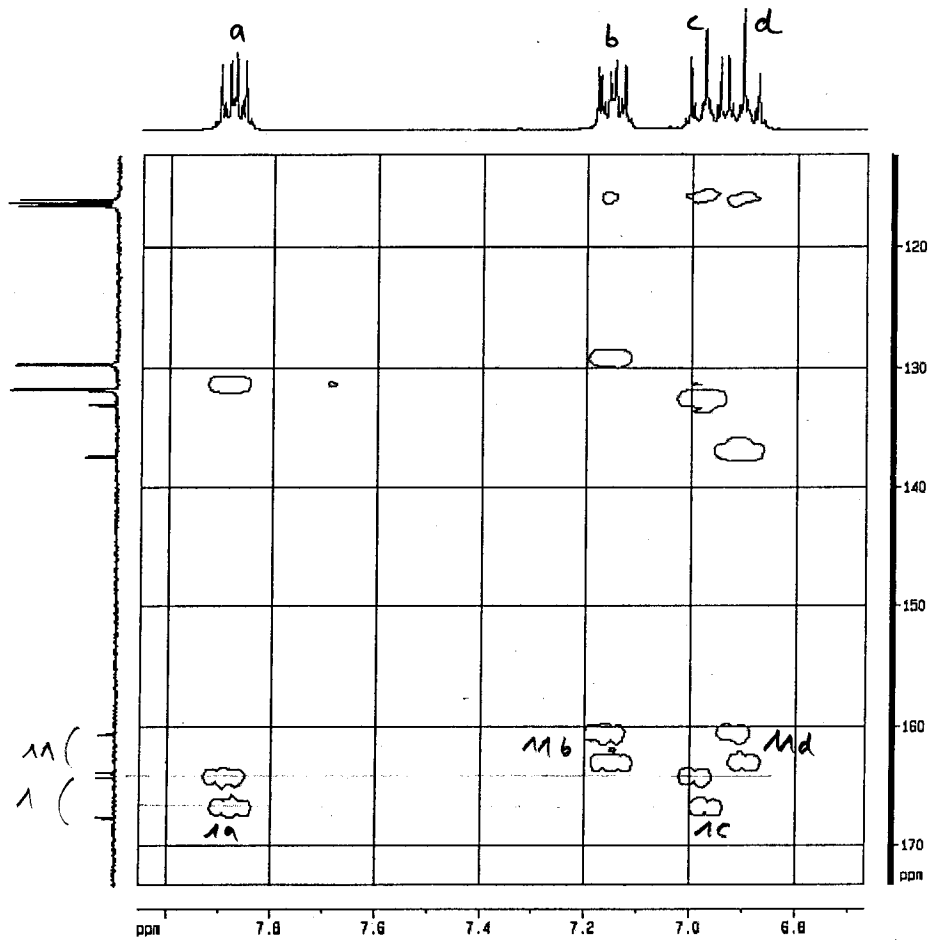
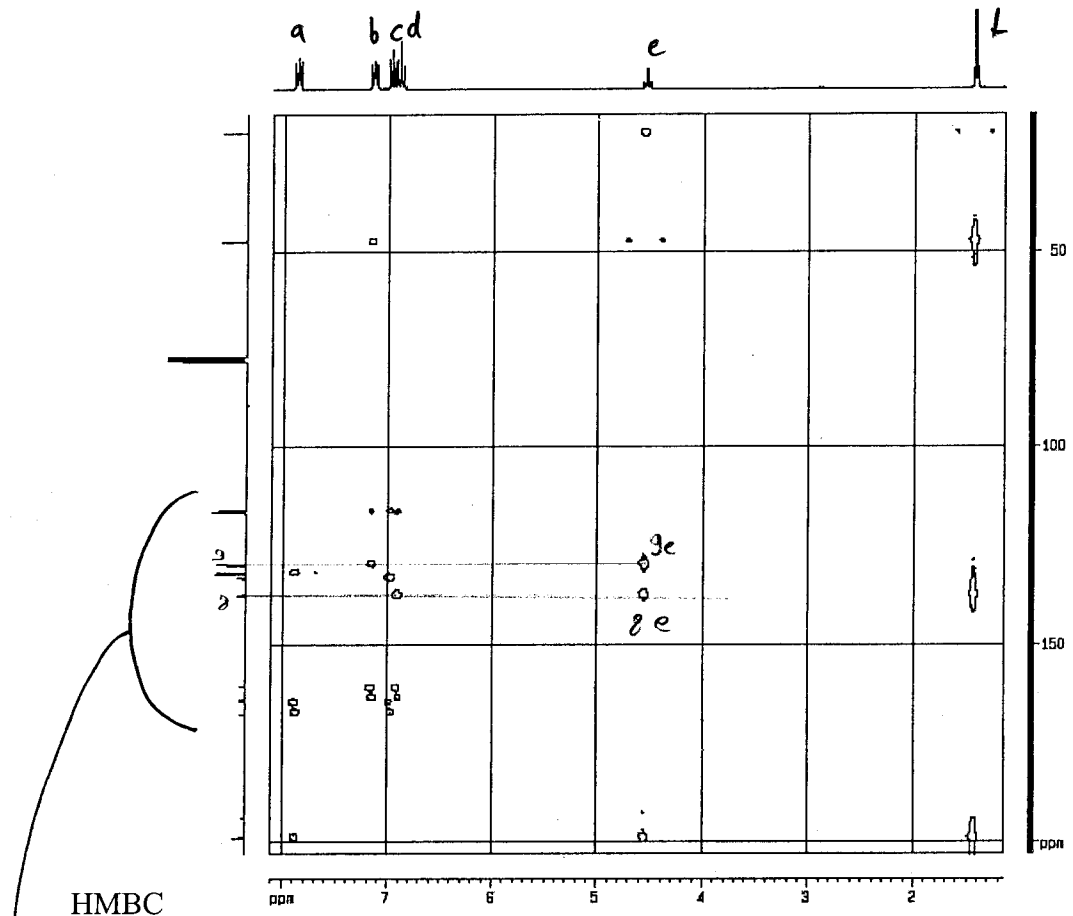




a-c

b-d





Frage 5: Theorie (10 Punkte)

1. Welche Rolle spielt die Spin-Spin-Kopplung bei der Magnetischen Äquivalenz. Erklären Sie an Hand von 2 Beispielen. (4 P)

Spin-Spin-Kopplung ist die Kopplung zweier benachbarter Kerne. (Doppelbindung-Kopplung "eins weiter")

gleiche Abstand von A zu B₁ und B₂ → B₁ + B₂ sind magn. äquivalent

unterschied. Abstand von A₂ zu B₁ und B₂ → B₁ und B₂ sind nur chem. äquivalent, nicht magnetisch.

2. Was ist ein Spinsystem? (1 P) : Spins, die miteinander koppeln. Nennen Sie 4 verschiedene Spinsysteme mit je einem Beispiel. (4 P)

AX H-C≡C-H A₃B₂ CH₃-CH₂-Cl

AA'BB'

AB₂

3. Welche Eigenschaften müssen Kerne haben, damit sie im NMR messbar sind? (1 P)

$$I \neq 0$$

↑
Spinquantenzahl

I = 1/2 : ¹H, ¹³C, ¹⁹F, ³¹P } messbar

I = 1 : D

I = 0 : ¹²C } nicht messbar