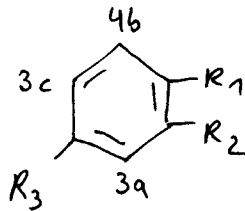


**Frage 2: (8 Punkte)**

Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_7H_3NCl_2$

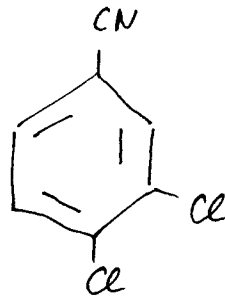
$$DBA' = 1 + \frac{1}{2}(14 - 3 + 1 - 2) = 6$$

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der NMR-Spektren?. (2 P)

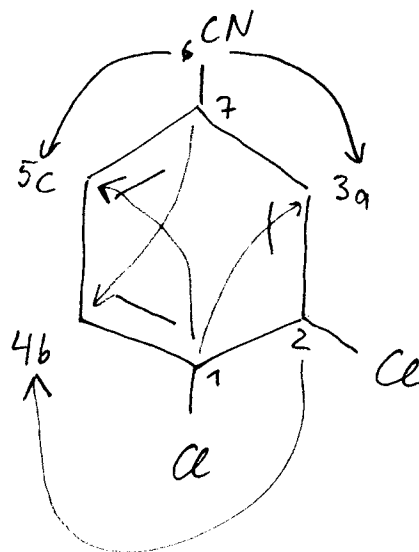


2x Cl  
C≡N

2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, bevor Sie Frage 3 beantworten.
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. Beachten Sie dabei auch die 2D-Spektren (2 P)

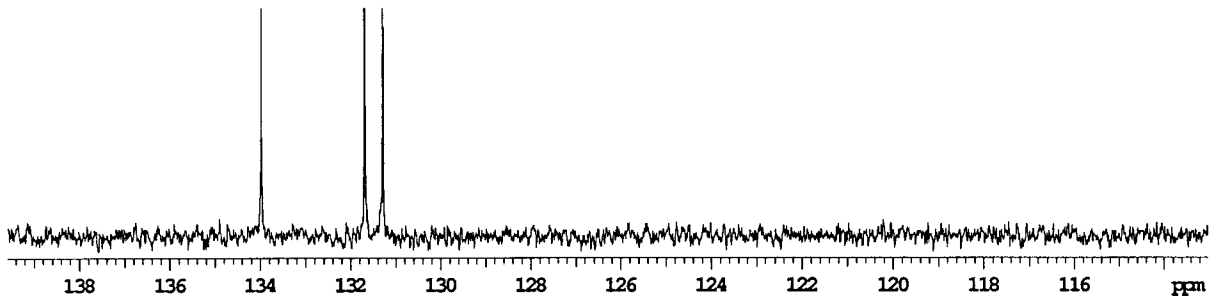
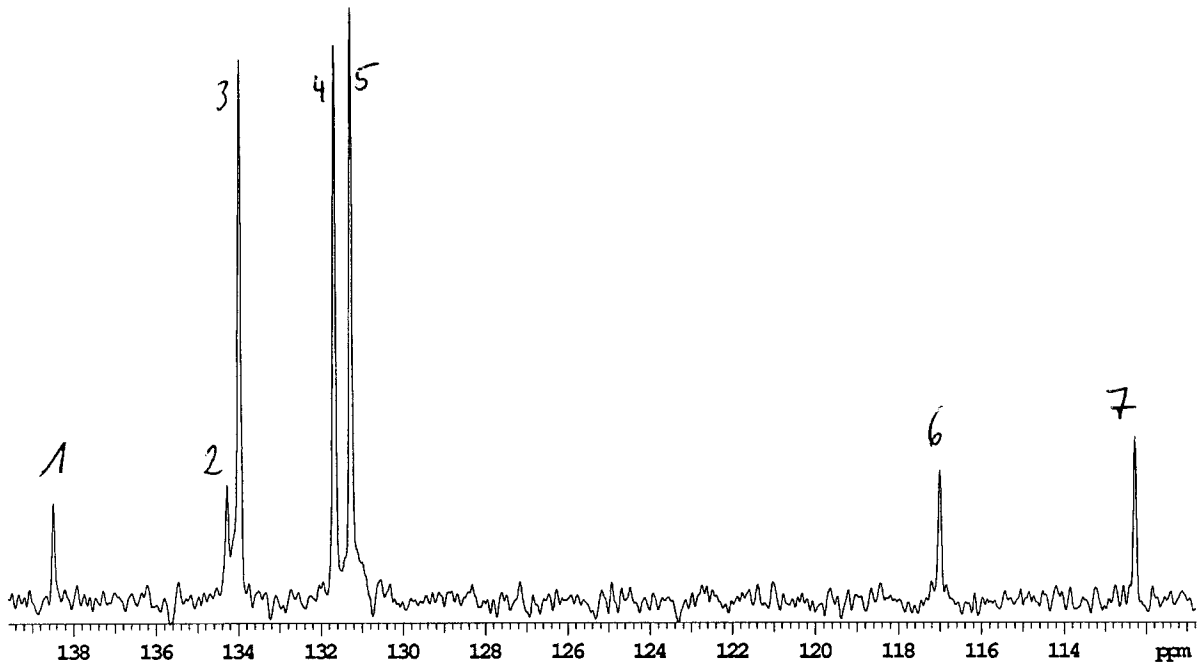
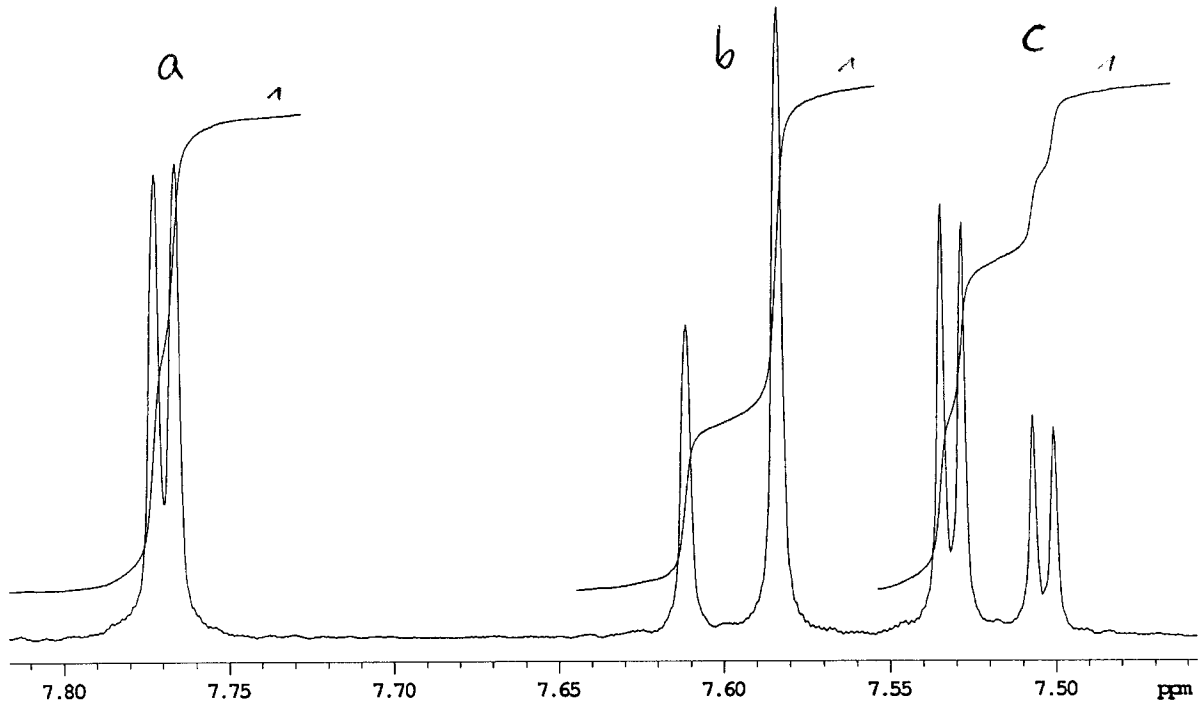


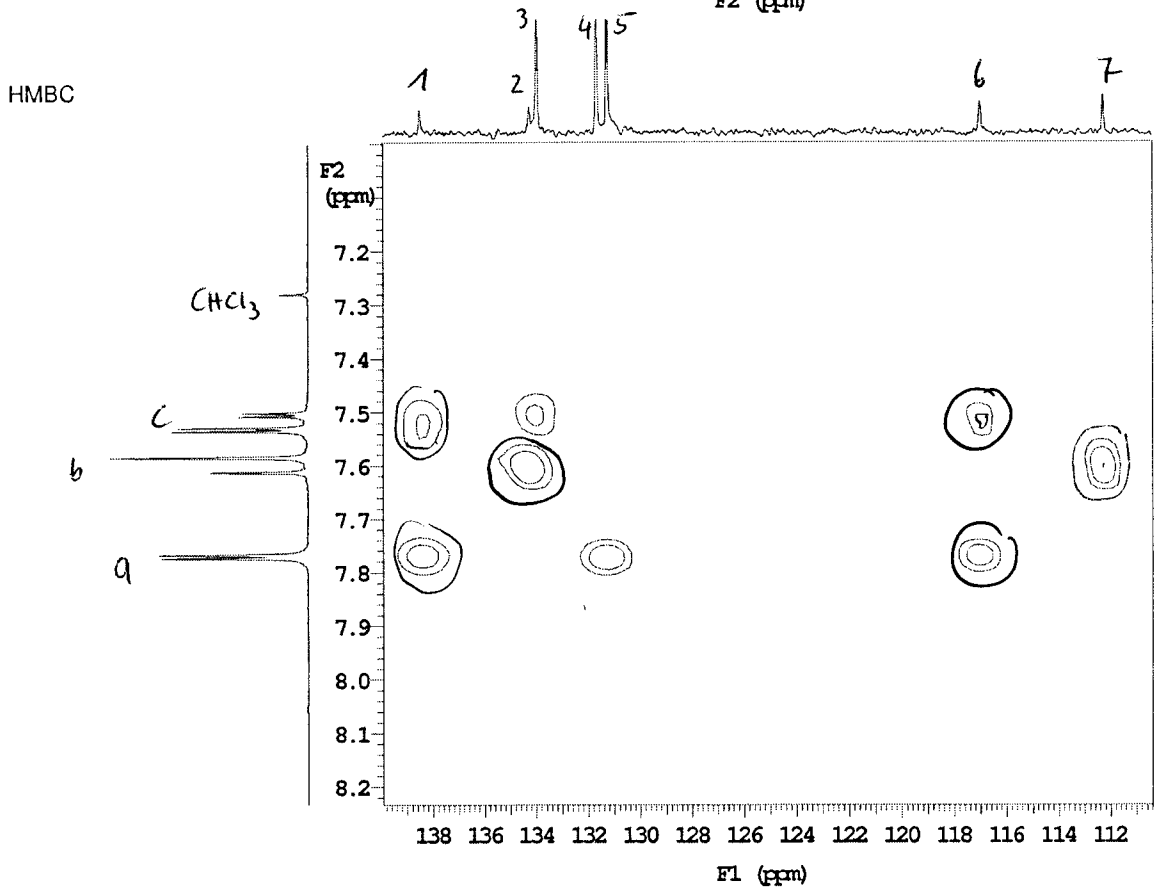
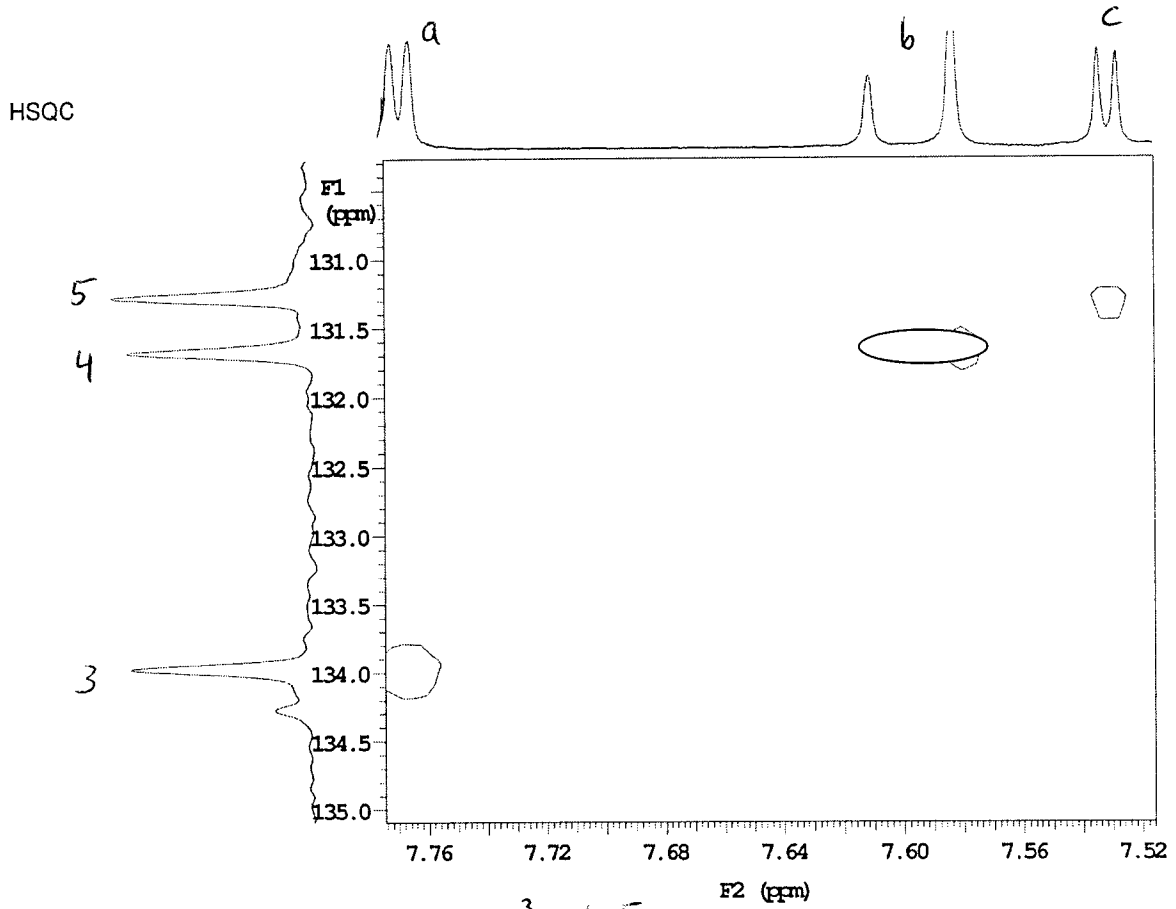
4. Begründen Sie die gefundene Struktur, indem Sie die 4 quartären C-Atome eindeutig zuordnen. Zeichnen Sie sichtbare Kopplungen im Molekül und Spektrum ein. (event. Farbstifte verwenden.) (4 P)



Inkrementberechnung

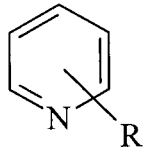
$$\begin{aligned}
 & \alpha \quad \alpha \\
 1: & 128.5 + 6.3 + 0.4 + 4.3 = 139.5 \\
 2: & 128.5 + 6.3 + 0.4 + 0.7 = 135.9 \\
 6: & - \\
 7: & 128.5 + 1.4 + -1.9 - 15.7 = 112.3
 \end{aligned}$$





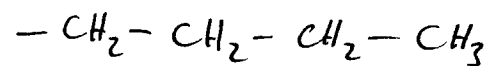
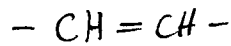
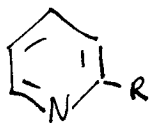
**Frage 3: (13 Punkte)**

Auf Seite 7 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet  $C_{11}H_{15}N$

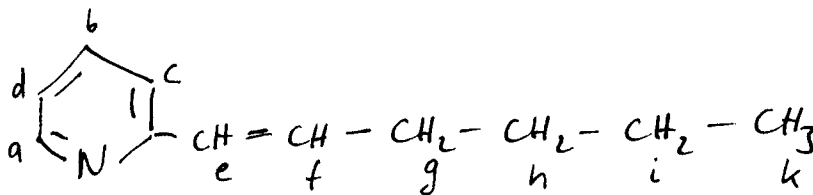


Hinweis:  ist enthalten

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



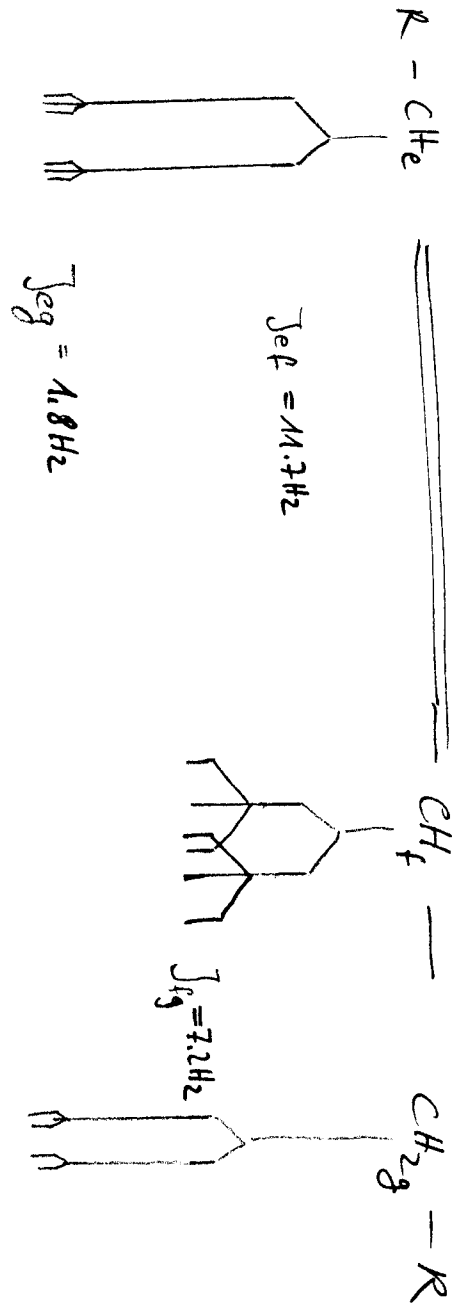
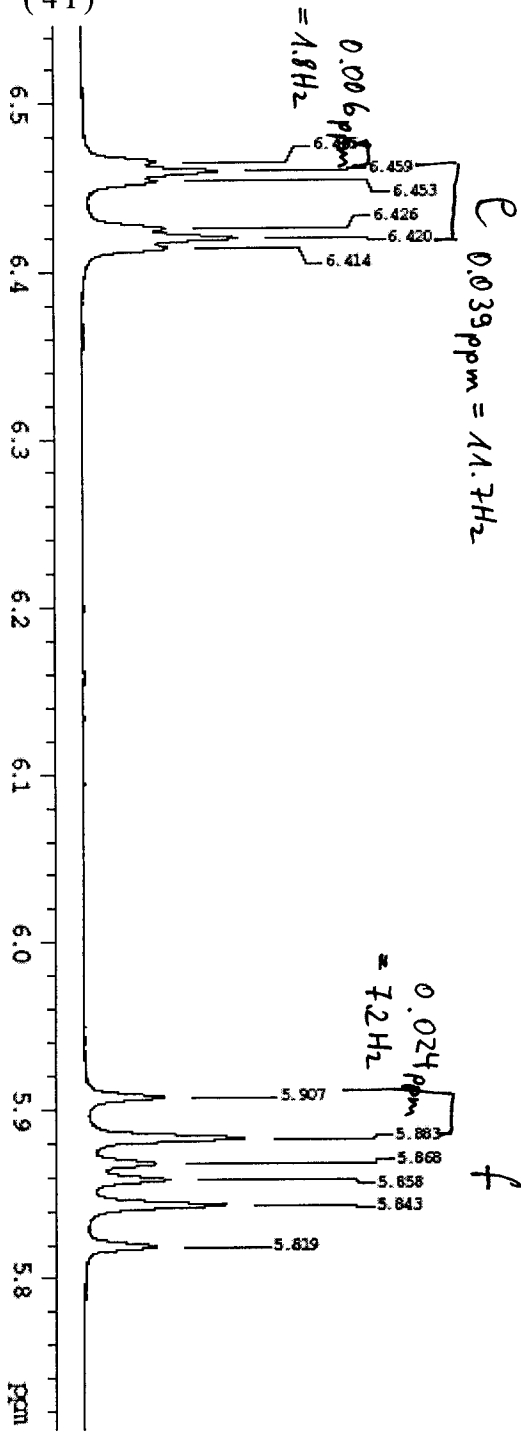
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

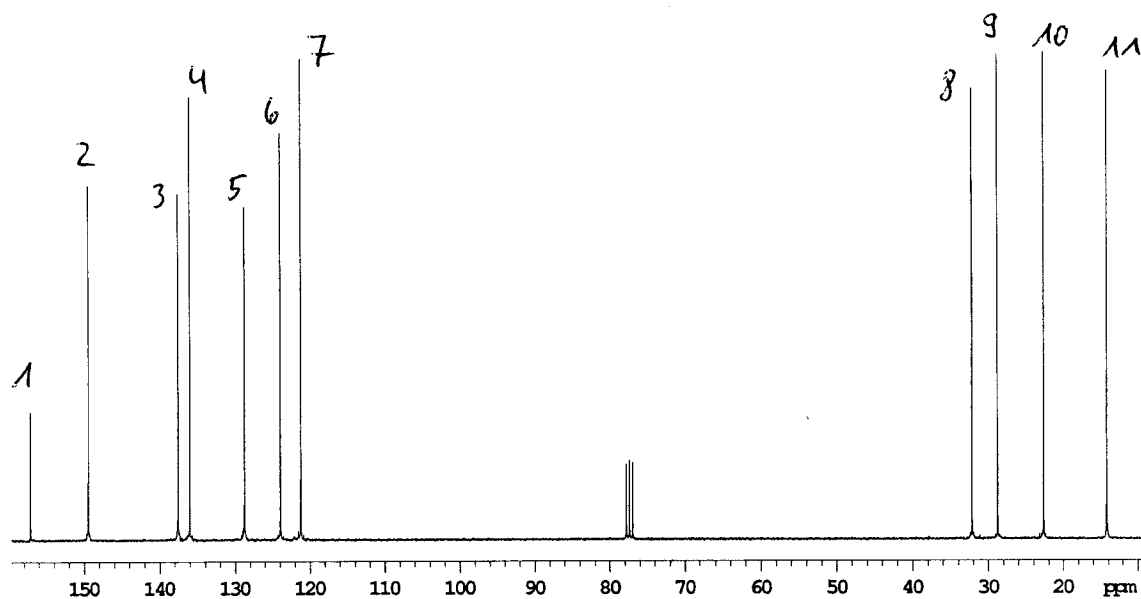
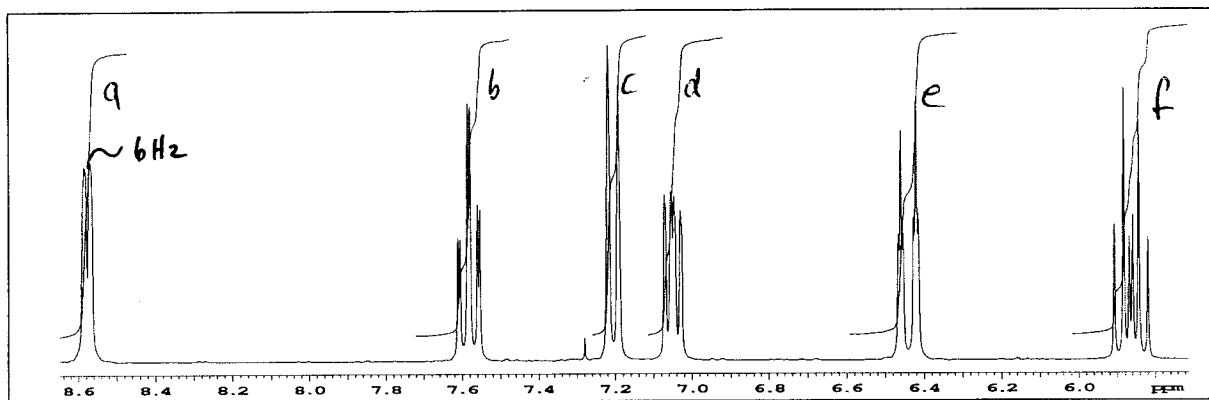
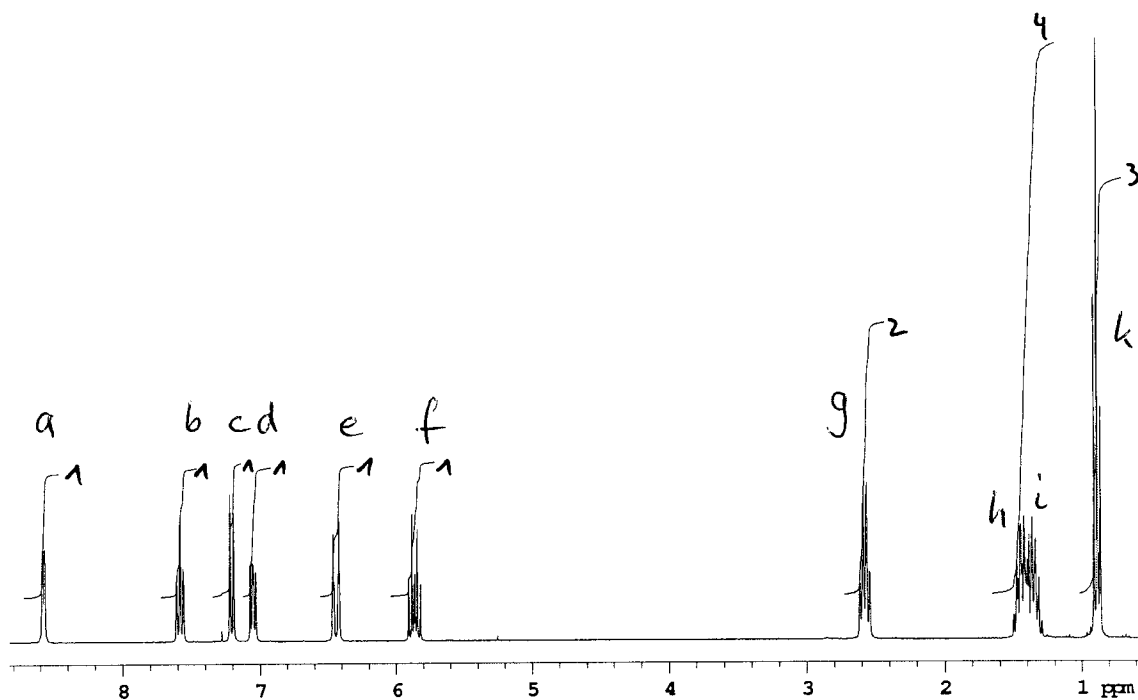


3. Ordnen Sie alle  $^1H$ -Signale zu. (5 P)

siehe 2.

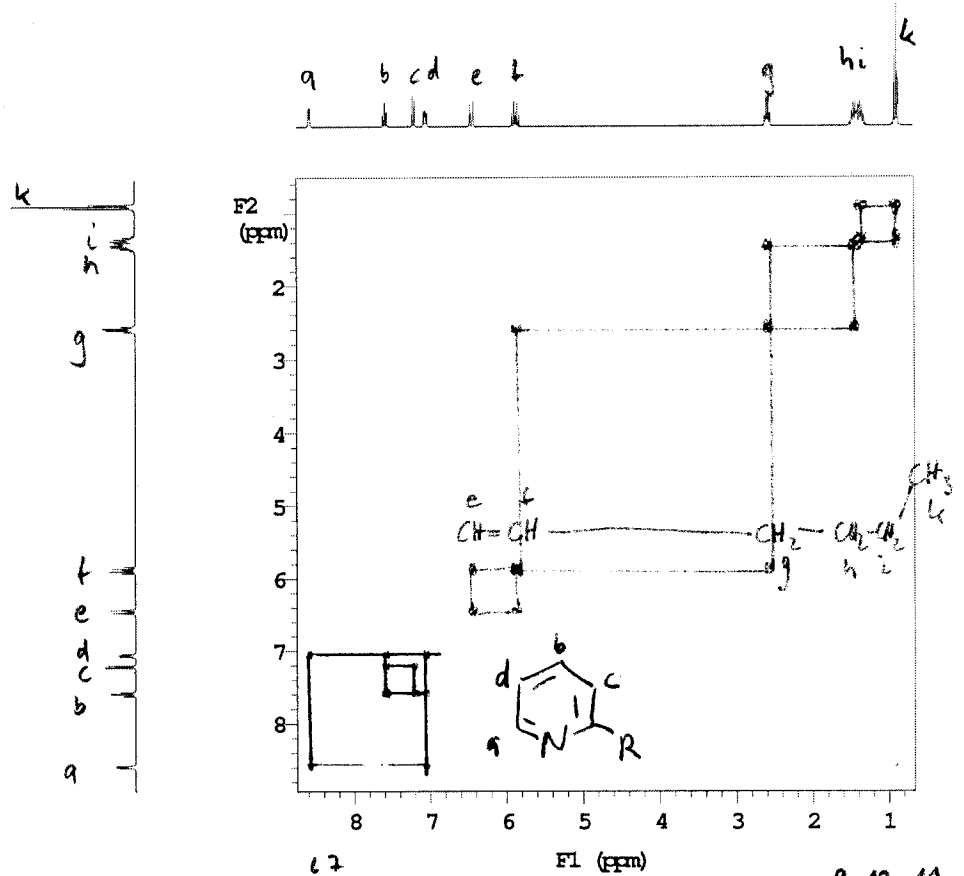
4. Zeichnen Sie den Splittingschlüssen für die Protonen e und f.  
 Bestimmen Sie die Kopplungskonstanten (Spektrum wurde bei 300 MHz aufgenommen)  
 (4 P)



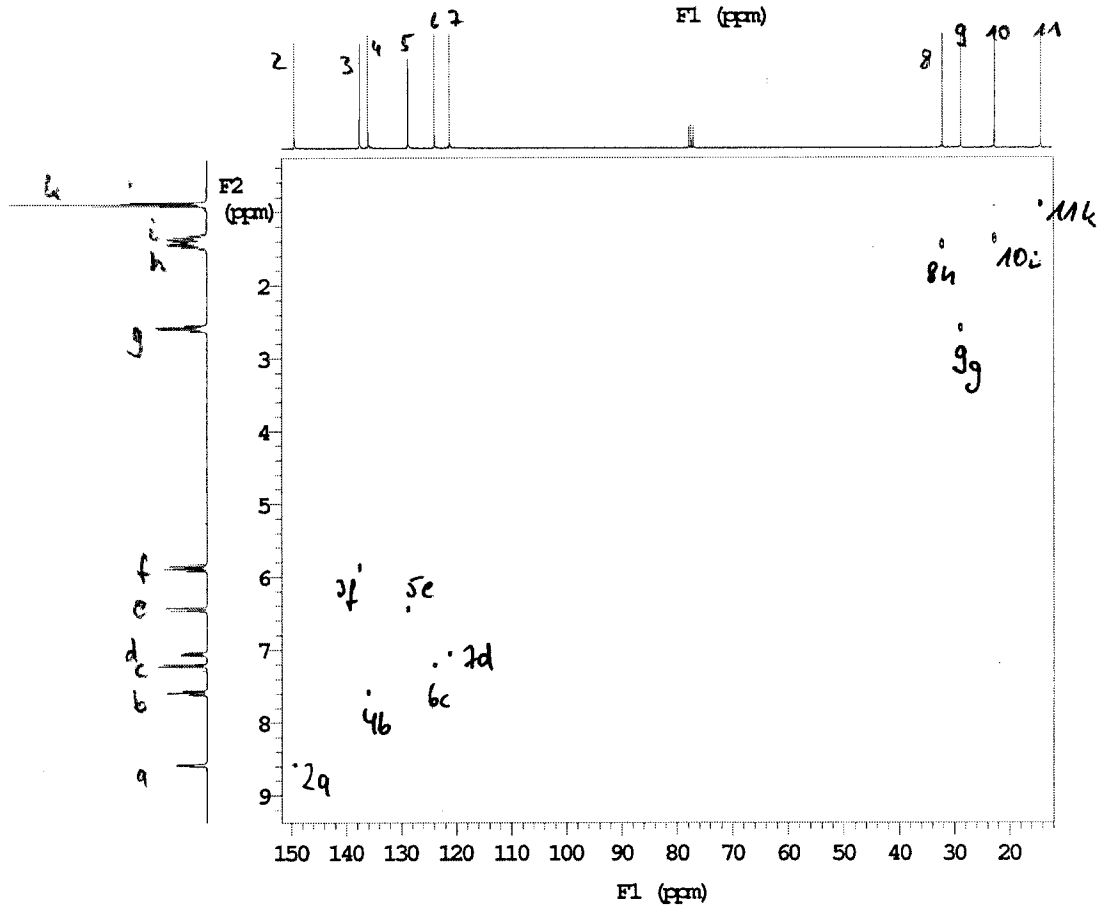




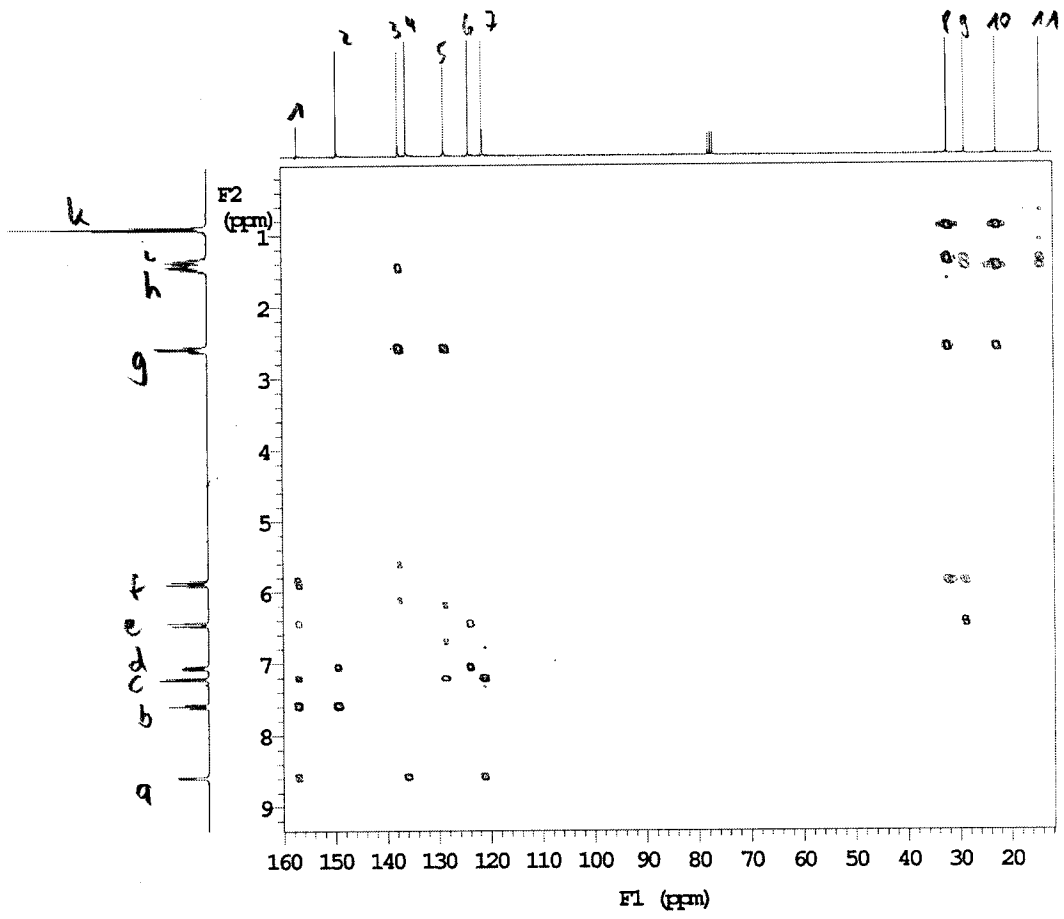
HH-COSY



HSQC

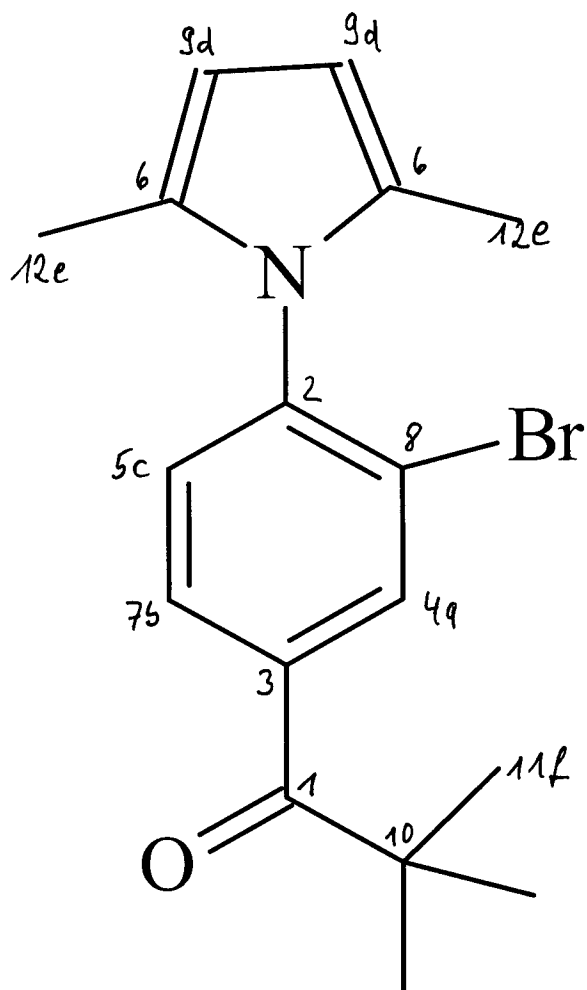


HMBC

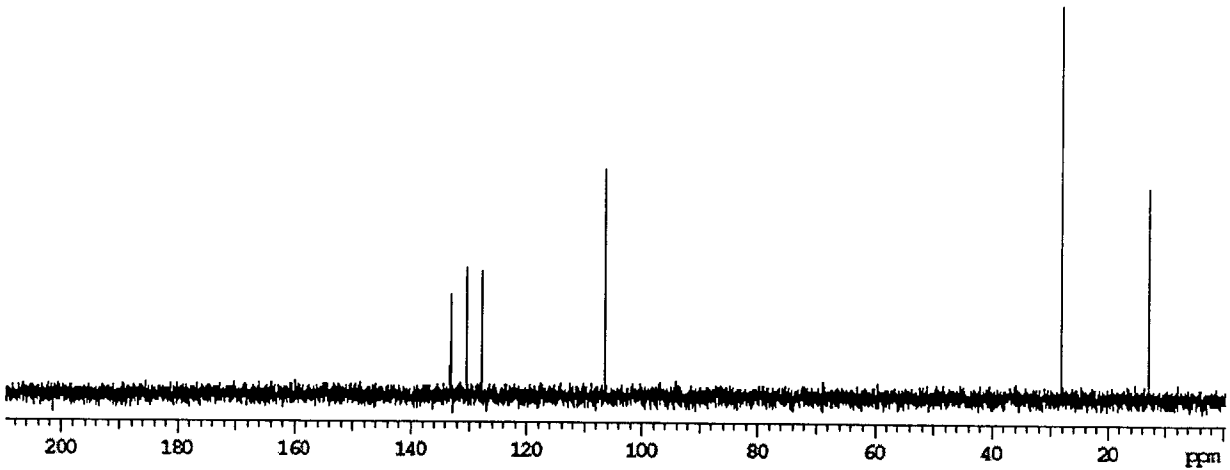
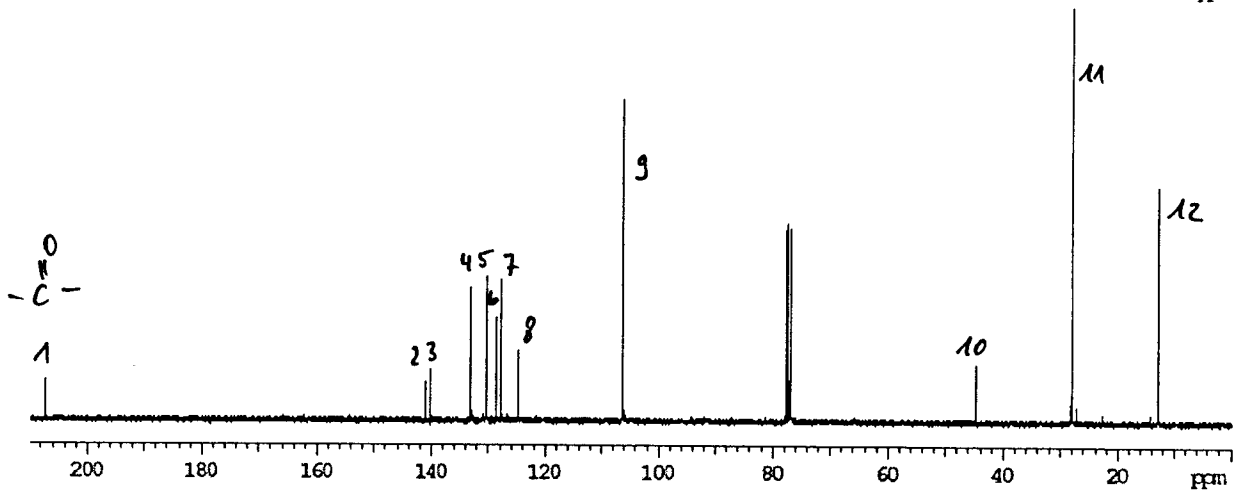
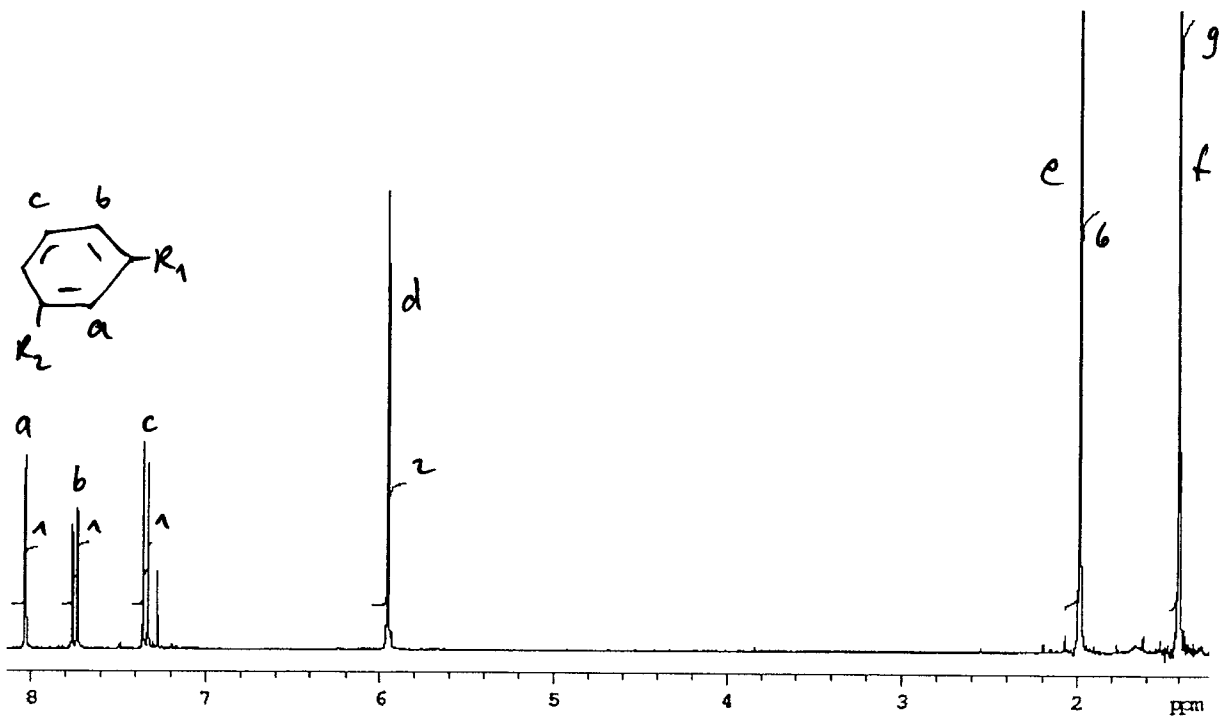


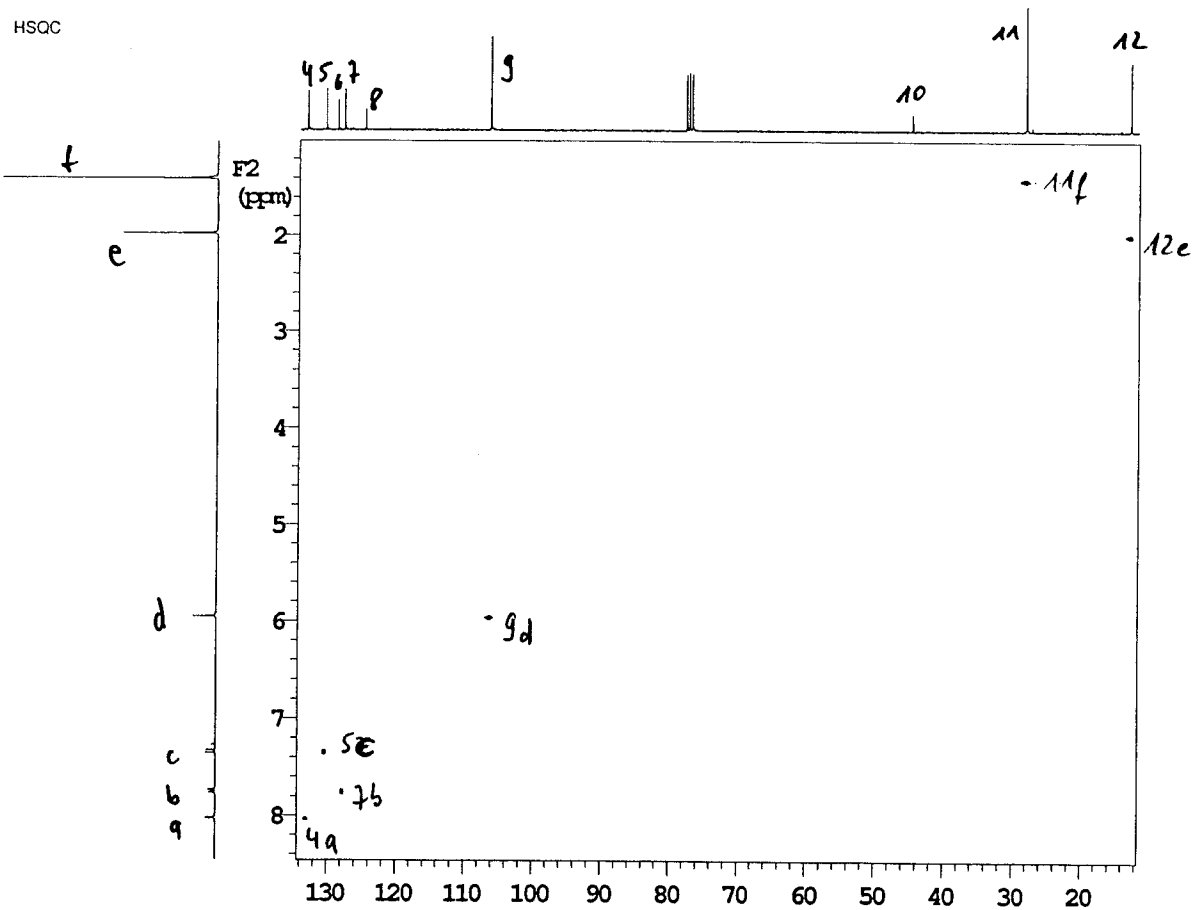
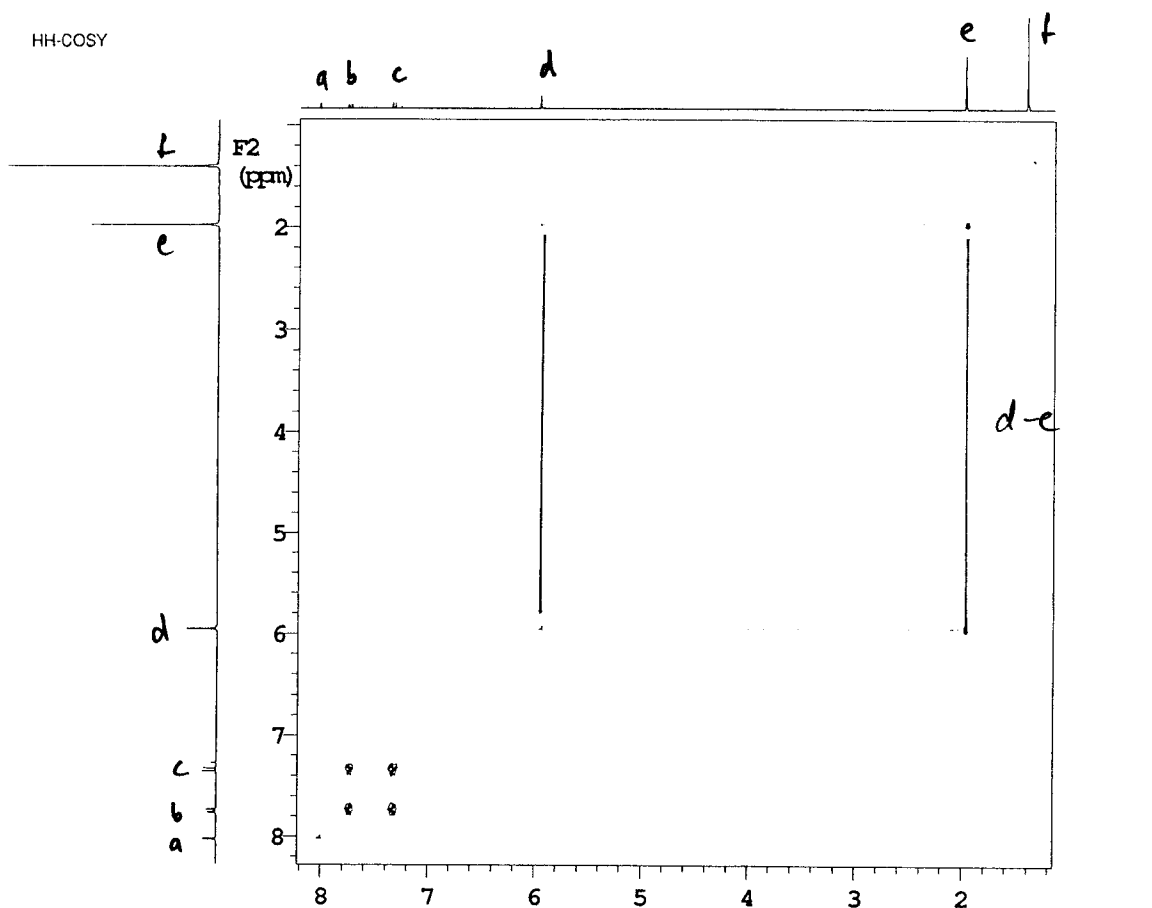
**Frage 4: (12 Punkte)**

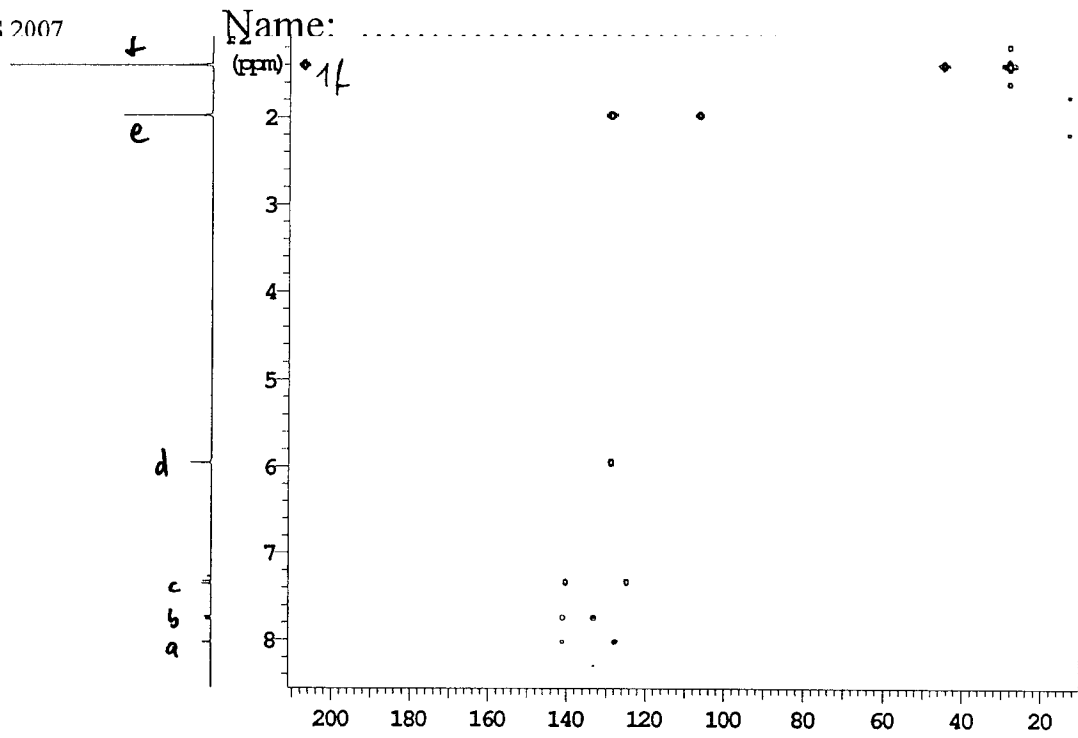
Auf Seite 11 ff sind die NMR-Spektren folgender Verbindungen gegeben



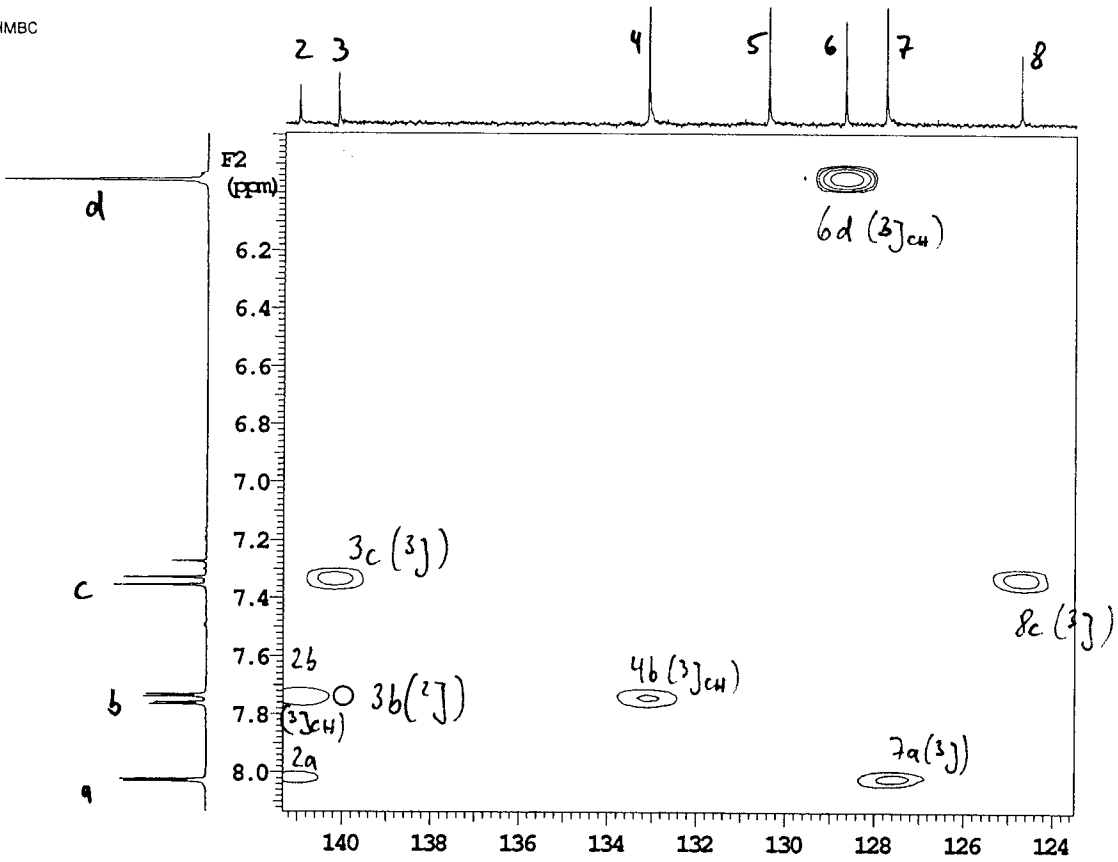
Ordnen Sie alle Signale zu. (12 P)



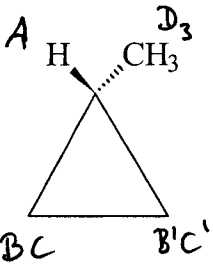




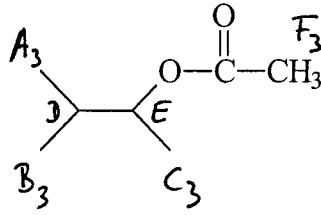
HMBC



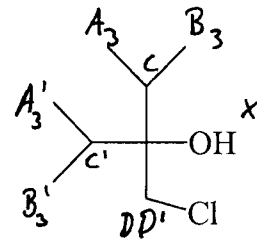
1. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen: (3 P)



ABB'CC'D<sub>3</sub>  
2. NOE



A<sub>3</sub>B<sub>3</sub>C<sub>3</sub>DE F<sub>3</sub>



A<sub>3</sub>A<sub>3'</sub>B<sub>3</sub>B<sub>3'</sub>CC'DD'X

- Was bedeutet diese Abkürzung (1 P)
- Was ist der NOE? (1 P)
- Zeigen Sie seine Wirkung am Beispiel 13C (1H-entkoppelt) (1 P)
- Zeigen Sie seine Wirkung am Beispiel NOESY (1 P)

a) NOE: Nuclear Overhauser Effect

b) der NOE wirkt räumlich, nicht über Bindungen. Wenn man auf ein Proton einstrahlt, werden die Signale von den Kernen, die in der Nähe sind, stärker. Diese Kerne müssen nicht mit dem H verbunden sein, sondern nur nahe bei dem H sein.

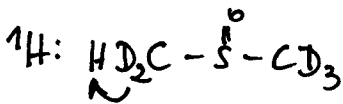
c) <sup>13</sup>C-Signale, an deren C ein H hängt, werden durch den NOE größer (da Protonen in der Nähe, auf die eingestrahlt wird.) Bei quartären C-Atome sind die Protonen weiter entfernt → weniger / kein NOE

d) Man sieht, welche Protonen in der Nähe des eingestrahleten Proton's liegen.

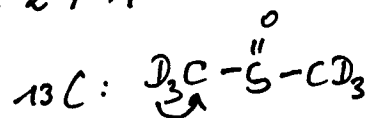
3. Zeichnen Sie die Signale (mit Multipllettstruktur), die man für das Lösungsmittel d<sub>6</sub>-DMSO (99 %ig) im <sup>1</sup>H-Spektrum (bei δ=2.49 ppm) und im <sup>13</sup>C-Spektrum (bei δ=40 ppm) erwartet. Erklärung! (2P)

$$J(D) = 1$$

$$\text{Aufspaltung: } n \cdot I \cdot 2 + 1$$



$$2 \cdot 1 \cdot 2 + 1 = \underline{5}$$



$$3 \cdot 1 \cdot 2 + 1 = 7$$

