

Name

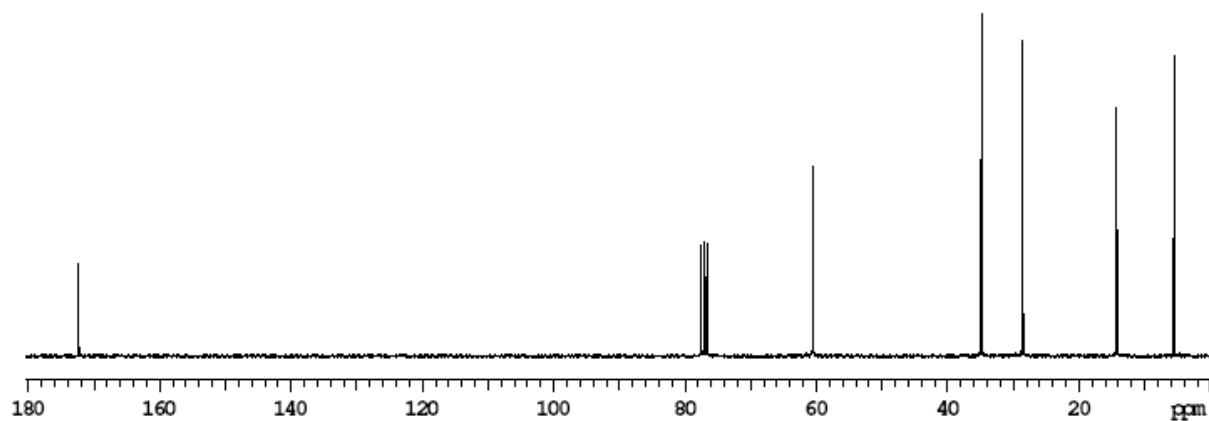
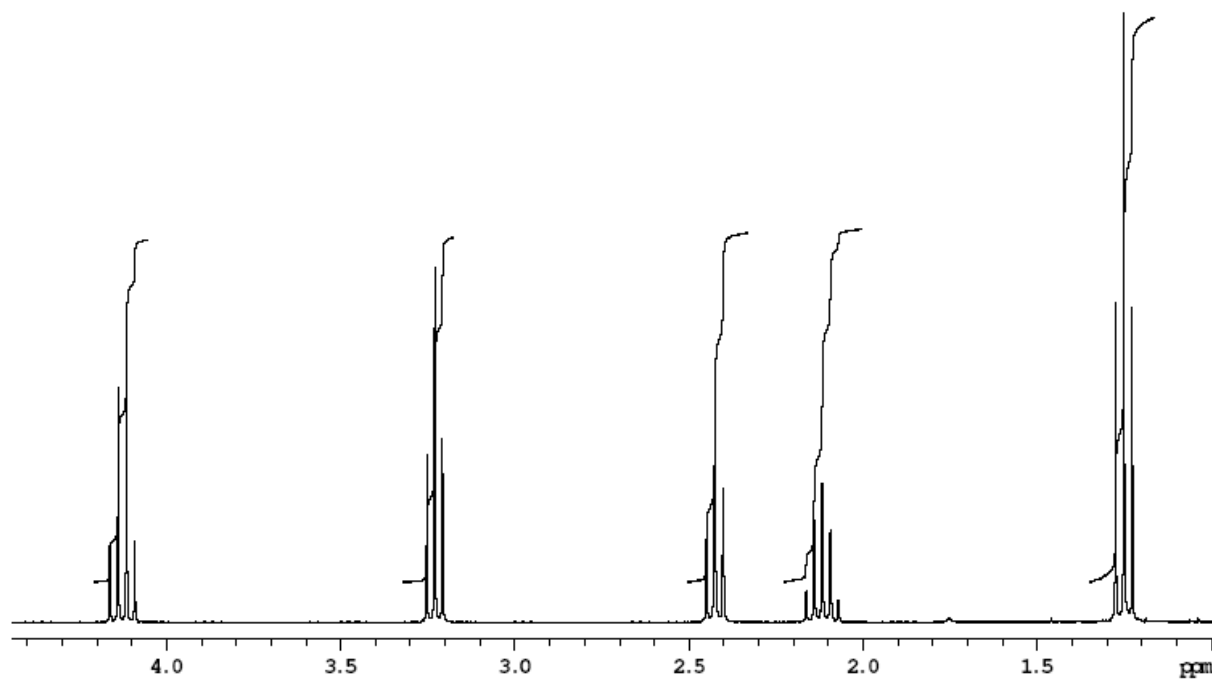
Spektroskopie und Beugung I (NMR)
SS 2008 Nachholklausur

4.9.2008

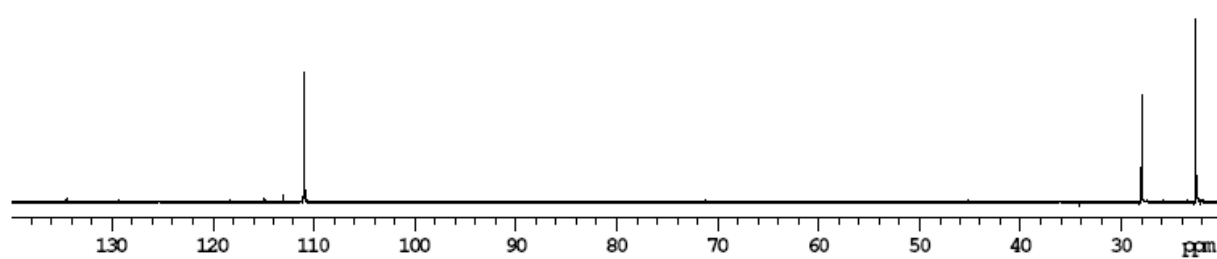
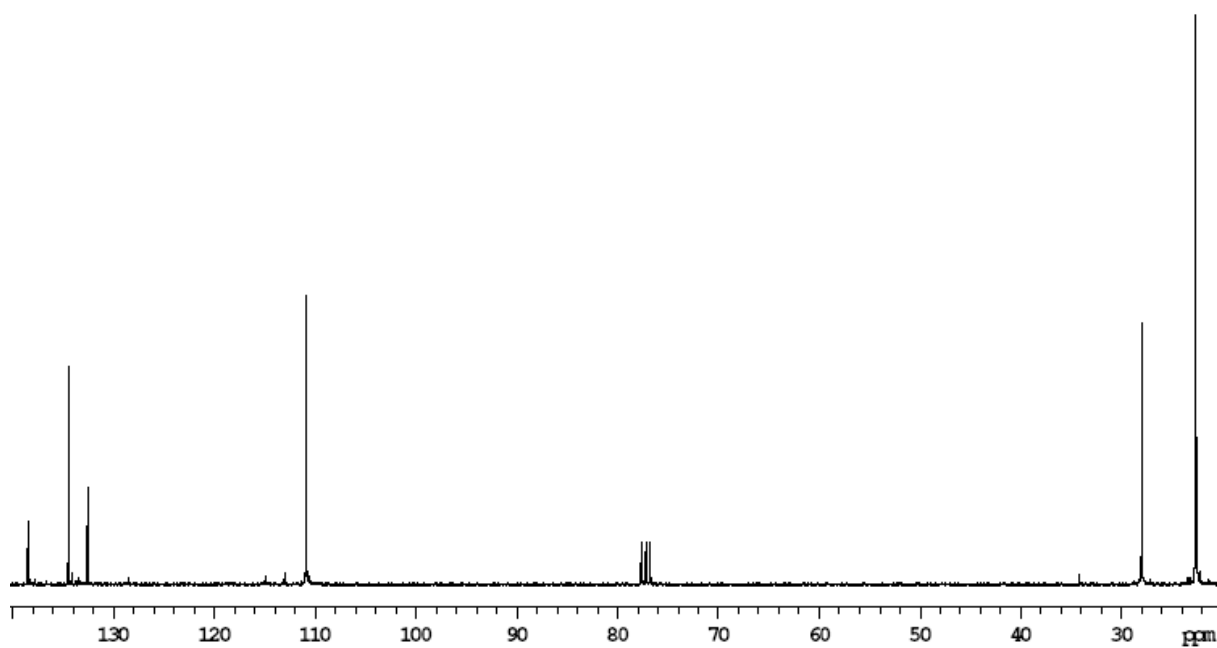
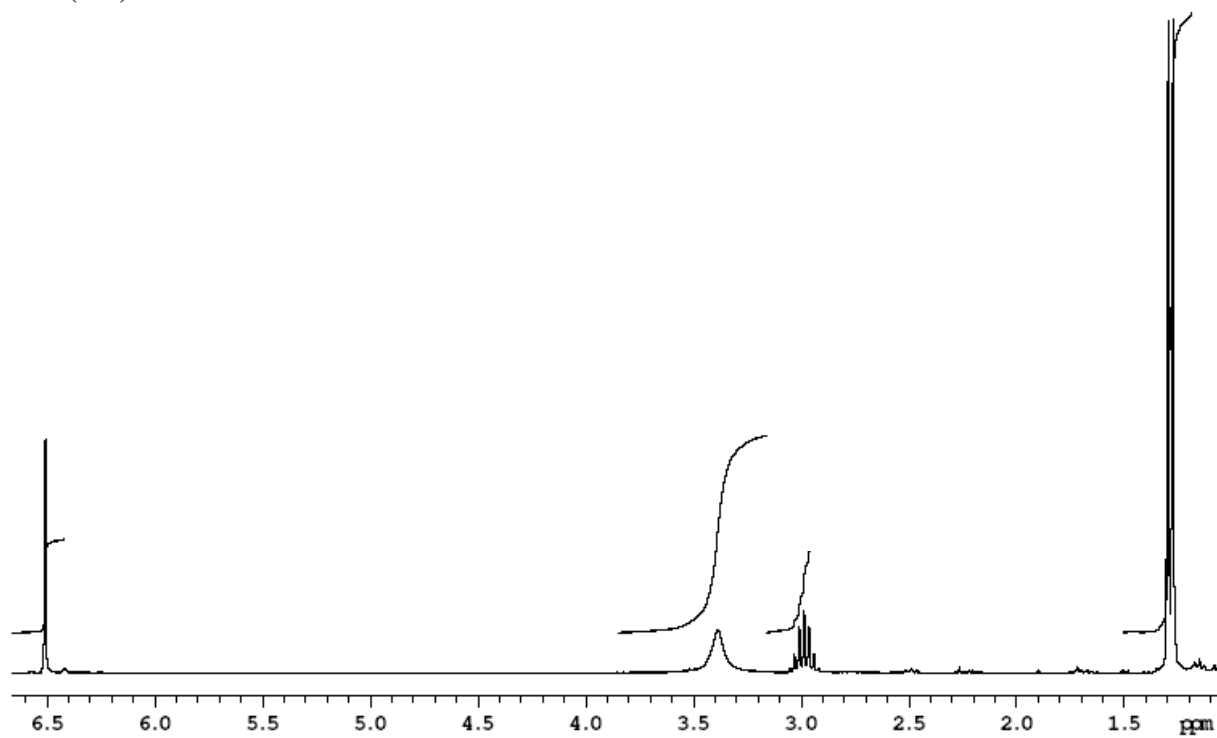
Frage 1: (6 Punkte)

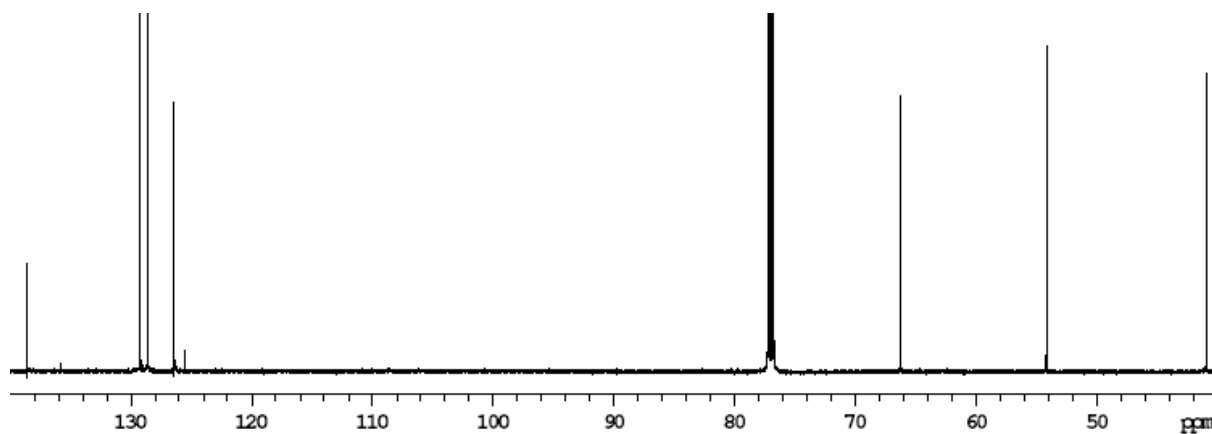
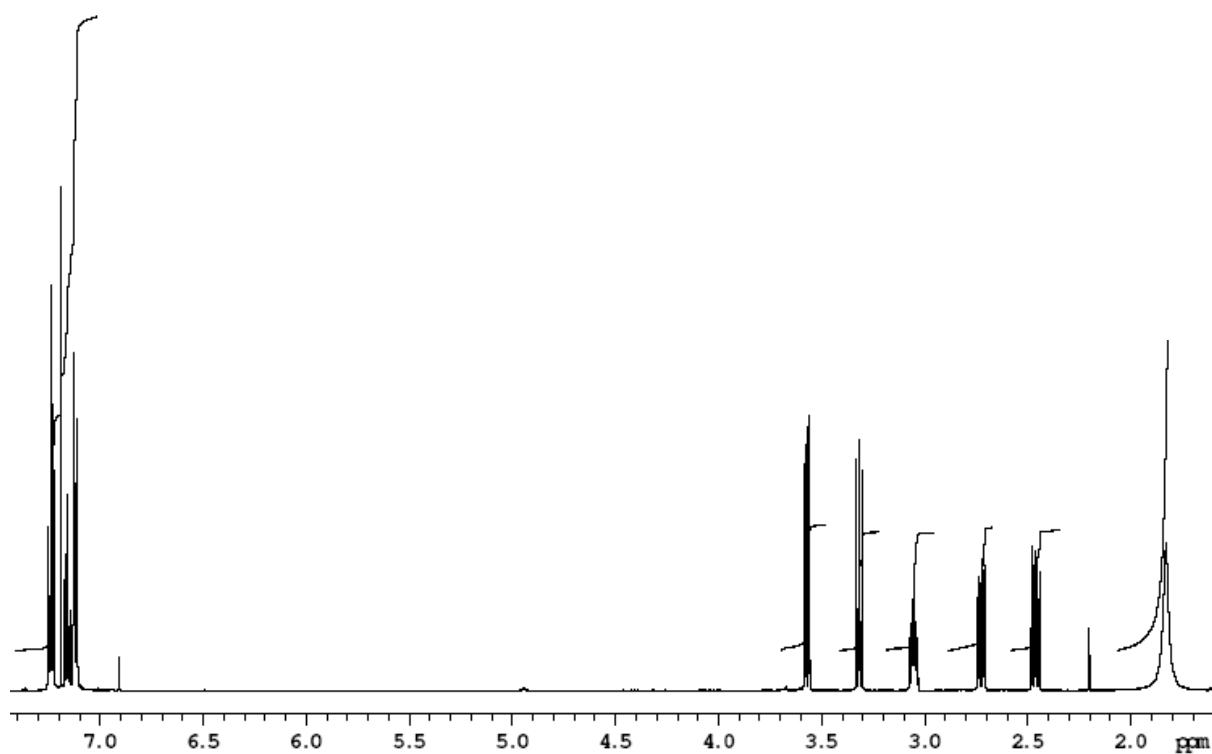
Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_6H_{11}IO_2$.

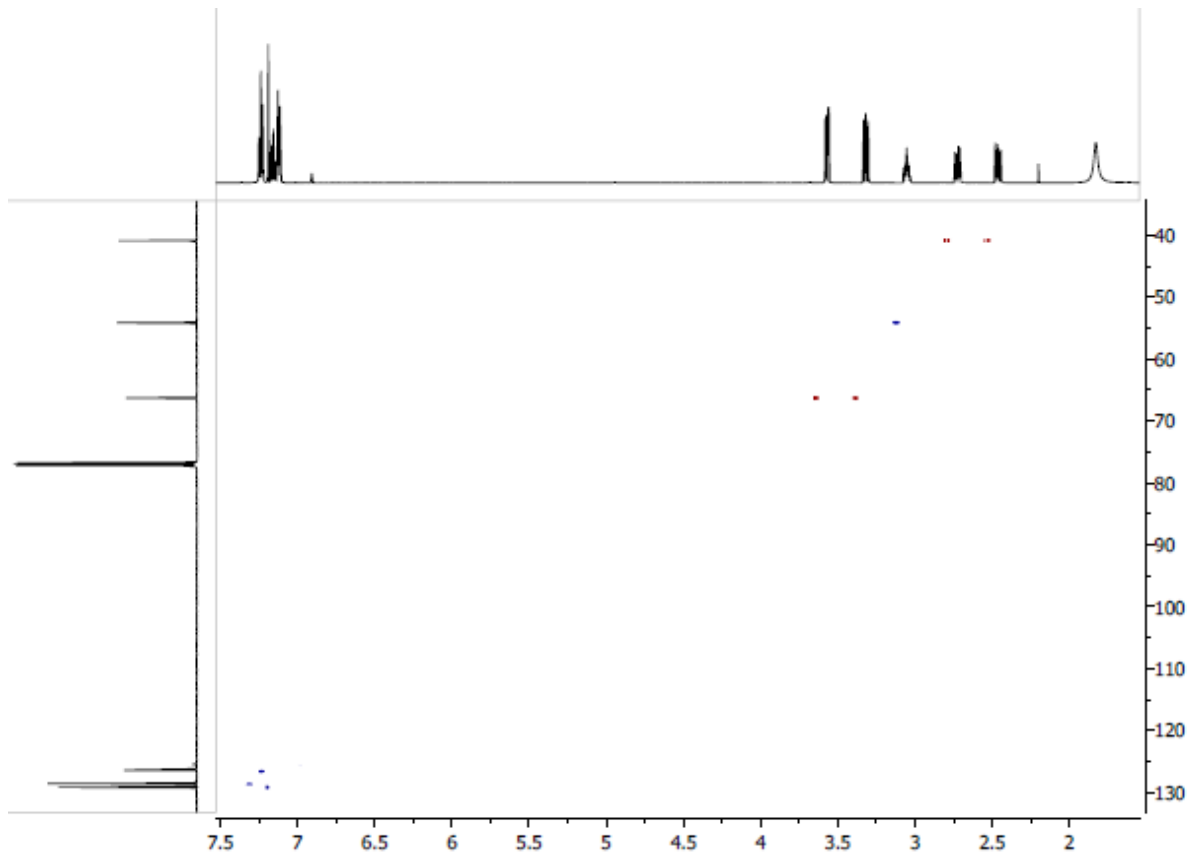
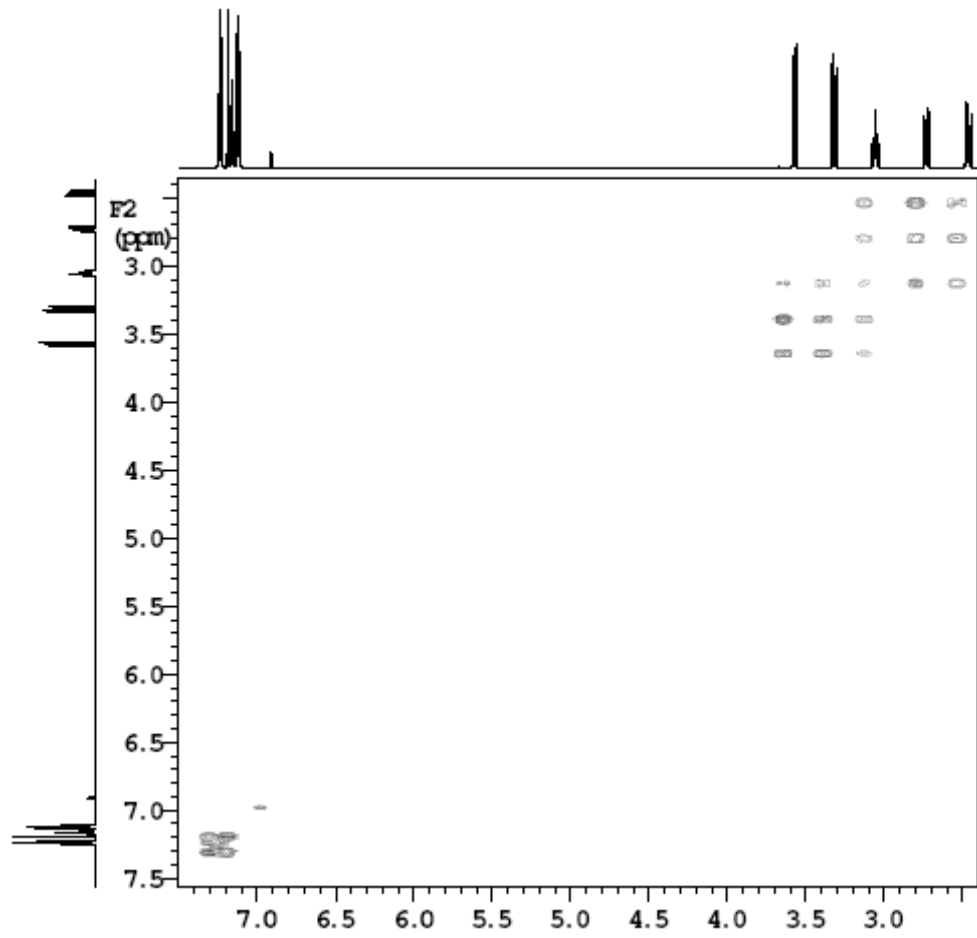
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des 1H - und ^{13}C -Spektren? (3 P)
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
3. Ordnen Sie das ^{13}C -Signale bei 6 ppm zu und berechnen Sie dessen Verschiebung (mit Rechnung mit Hilfe der Inkrementen-Tabelle). (1 P)
4. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)

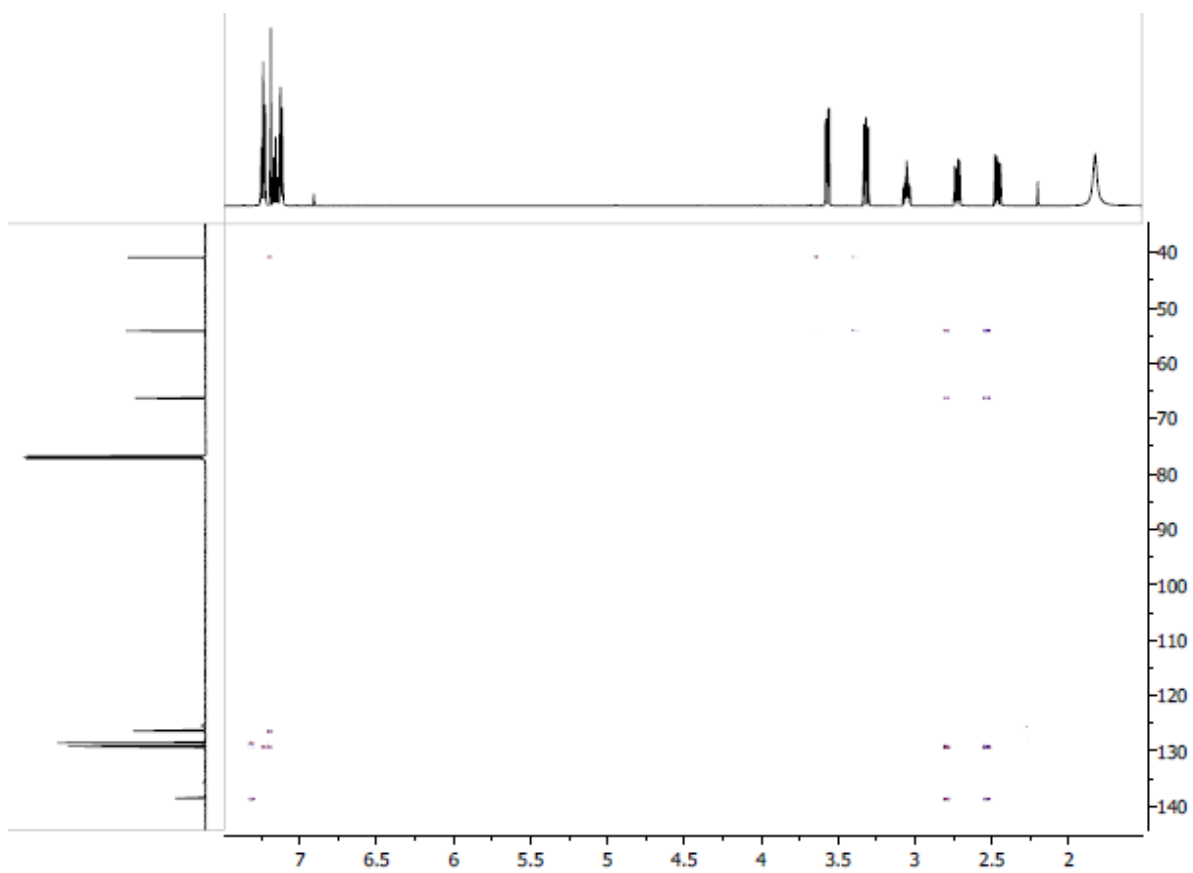


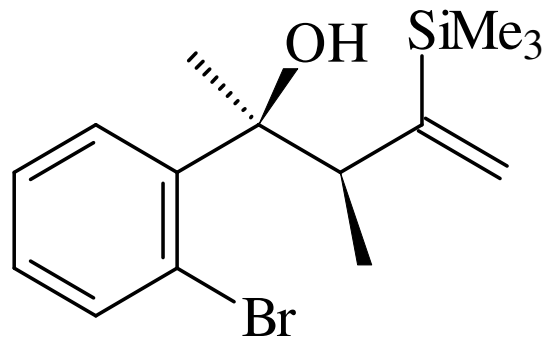
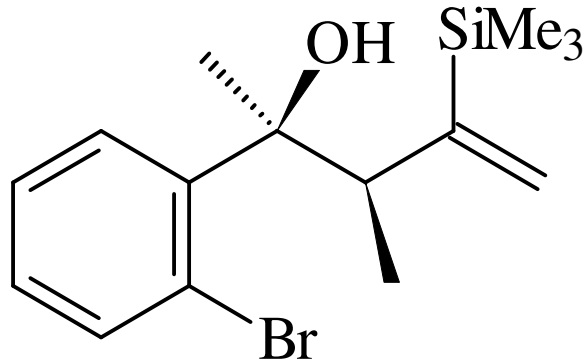
(1 P)



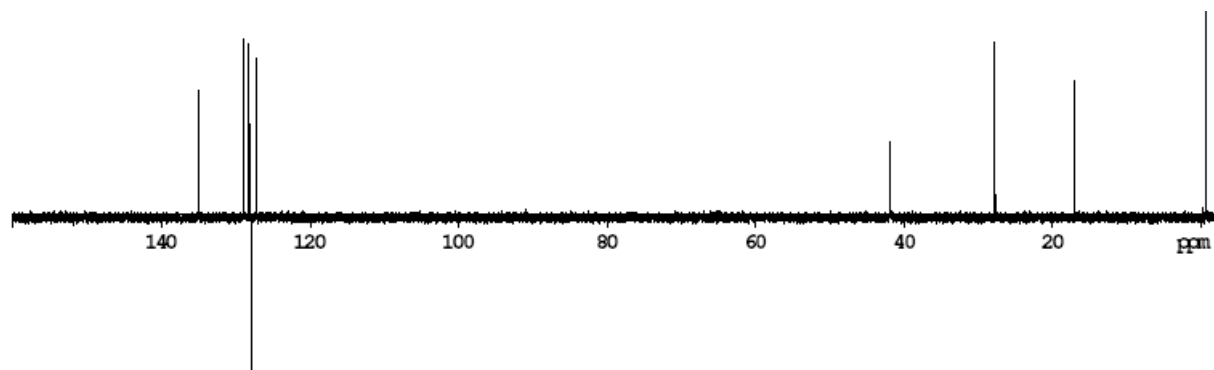
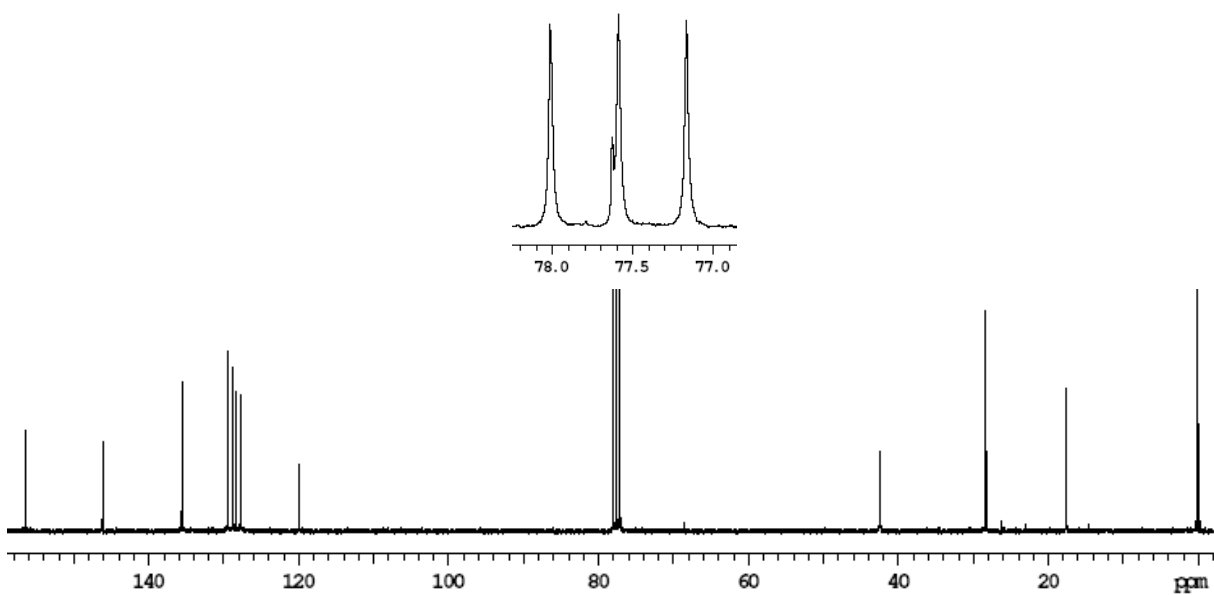
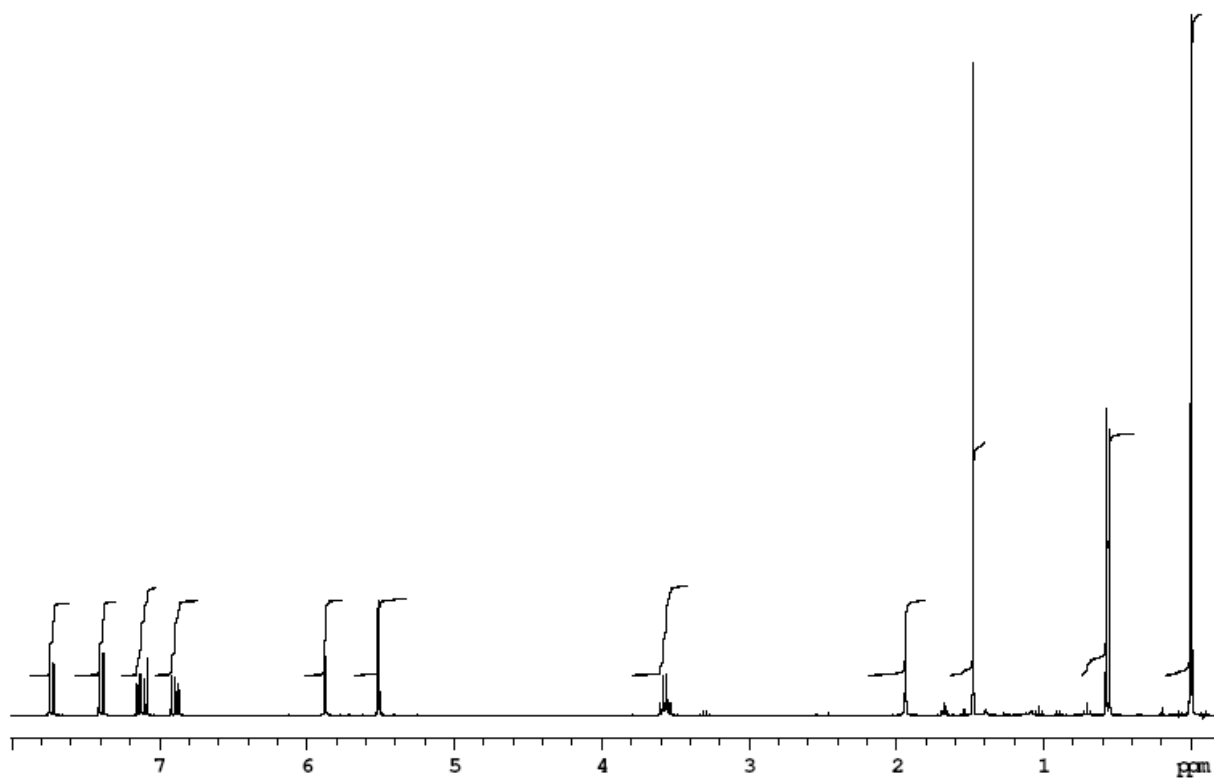


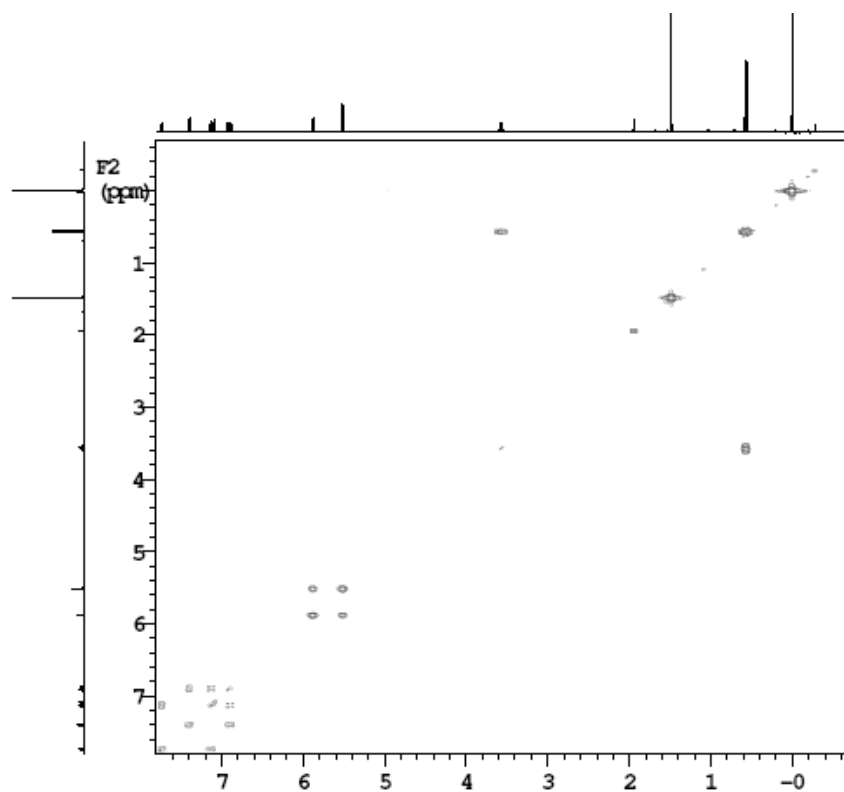


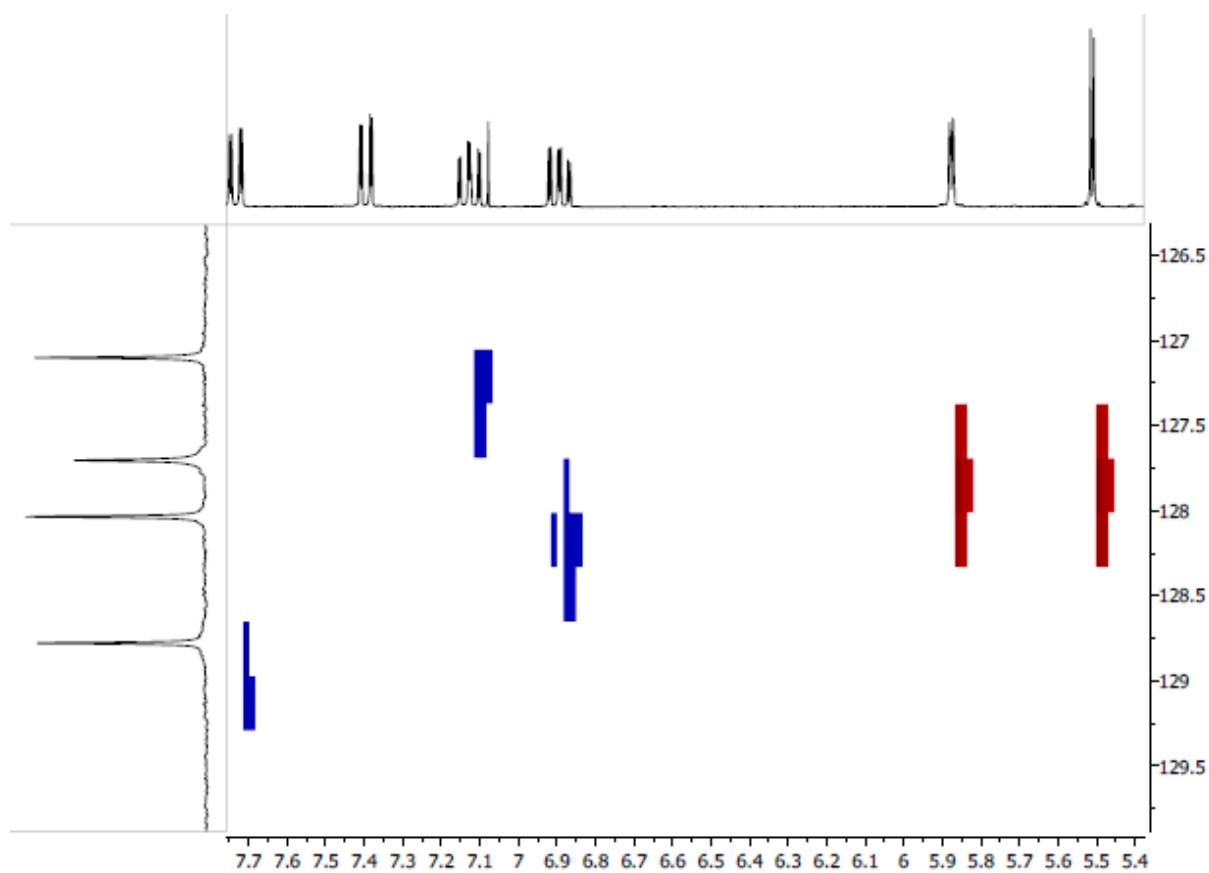
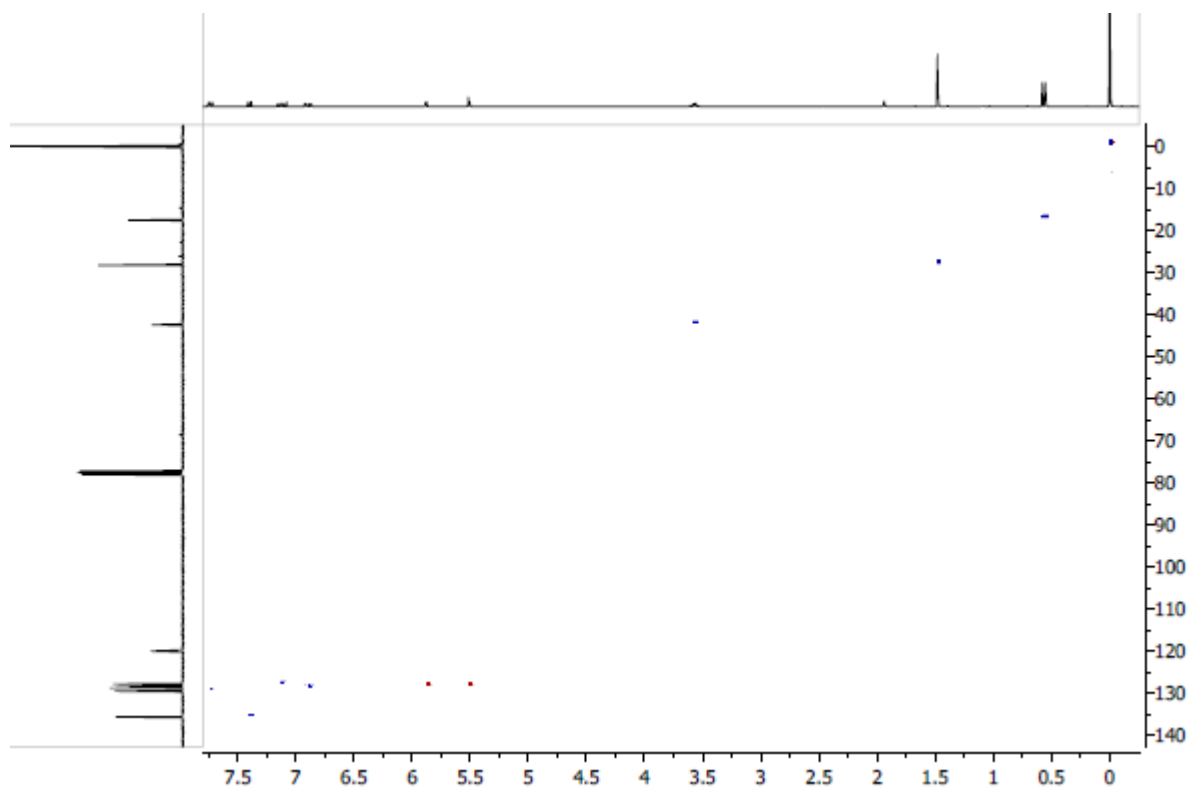


Frage 4: (14 Punkte)

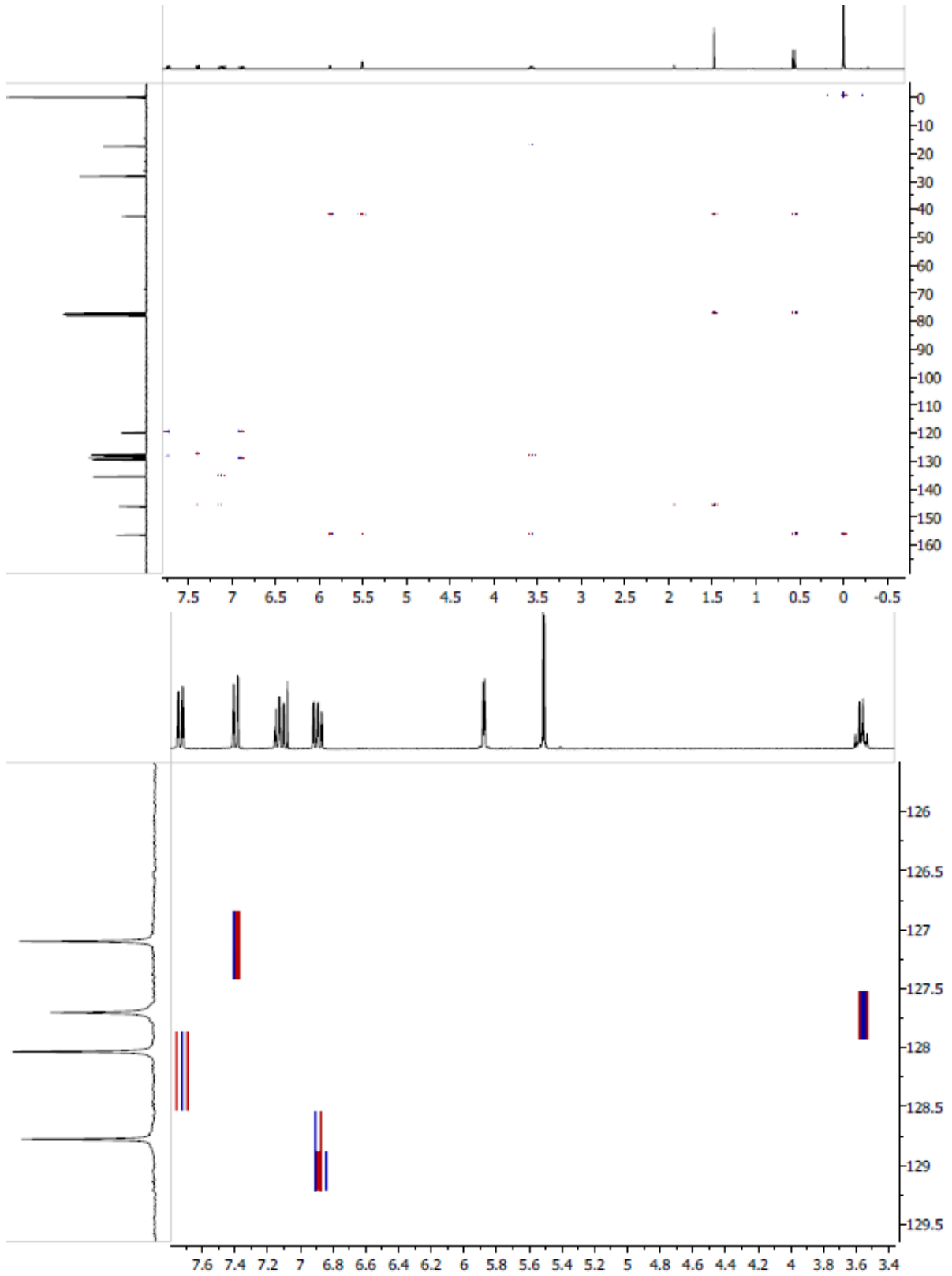
1. Ordnen Sie alle Signale zu. (7 P)
2. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie für C-Atom 1, 2, 8 und 9 die im HMBC sichtbaren Kopplungen einzeichnen. Verwenden Sie Farbstifte. (1 P)
3. Zeichnen Sie für die aromatischen Protonen einen Splittingschlüssel. (incl. allen Kopplungskonstanten) auf Seite 14 (4 P)
4. Auf welchem NMR-Gerät wurden diese Spektren gemessen (100, 200, 300, 400, 500, 600 MHz). Mit Begründung! (1 P)
5. Geben Sie das Spinsystem dieser Verbindung an. (1 P)



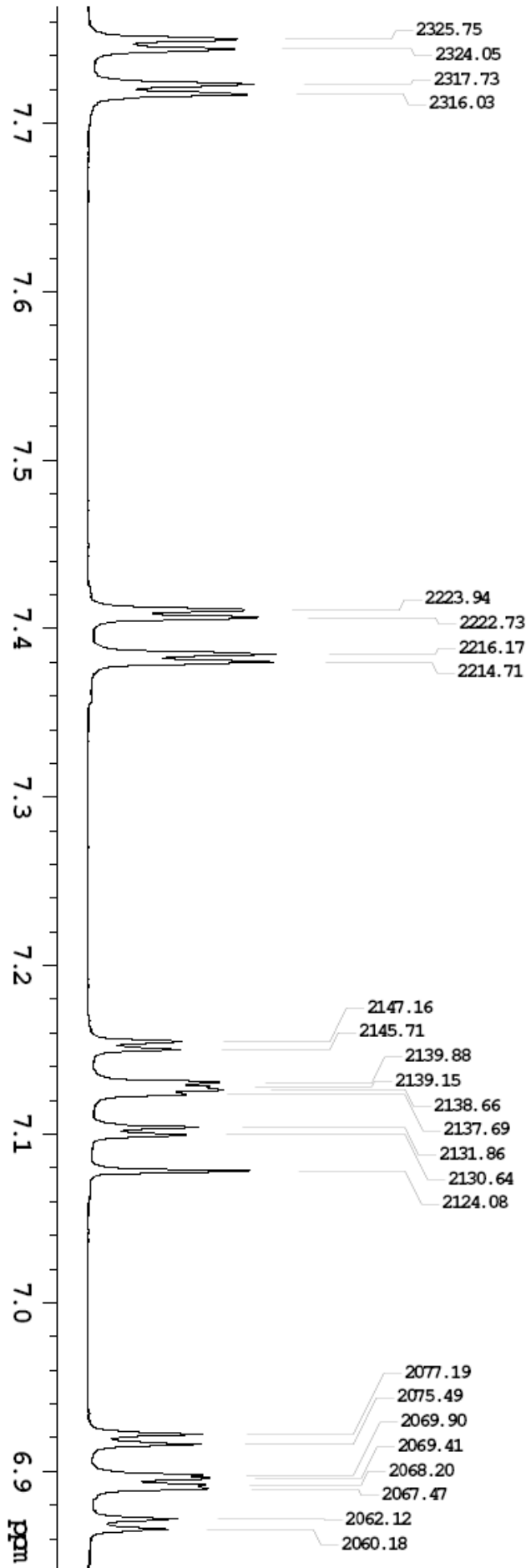




HSQC-Vergrößerung



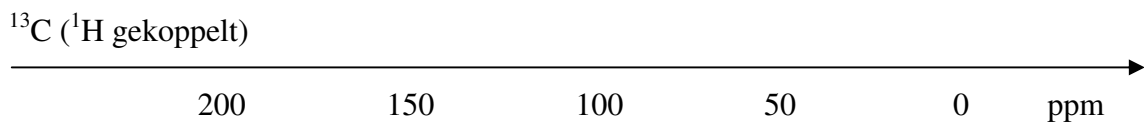
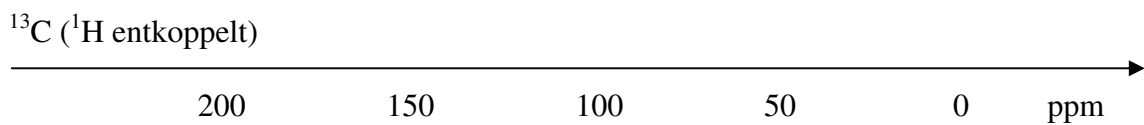
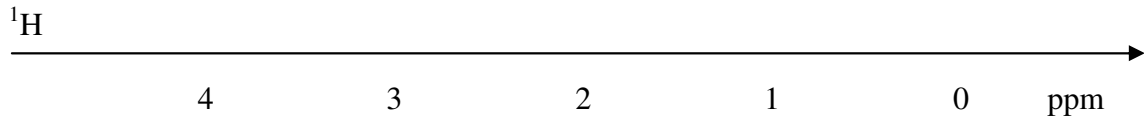
HMBC-Vergrößerung



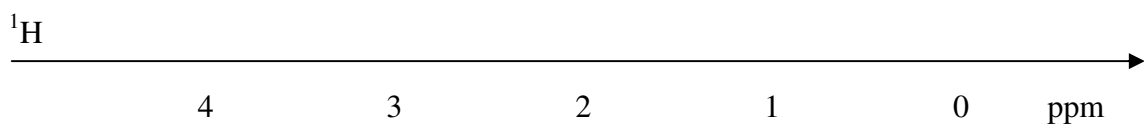
Frage 5: Theorie (10 Punkte)

1. Zeichnen Sie das ^1H - , ^{13}C (^1H entkoppelt) und ^{13}C (^1H gekoppelt)-Spektrum von d6-Aceton (100 % deuteriert), jeweils mit kurzer Erklärung (3 P)

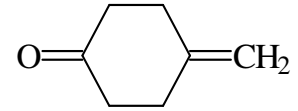
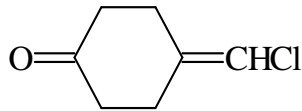
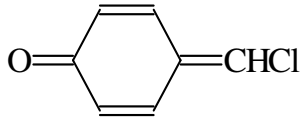
Aceton (100 % deuteriert)



2. Zeichnen Sie das ^1H -Spektrum von d6-Aceton (99.5 % deuteriert) (mit kurzer Erklärung) (1 P)



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



4. T1-Zeit (3 P)

a) Erklären Sie kurz, was man unter T1-Zeit versteht.

b) Welche Aussage ist richtig, welche falsch? (r für richtig, f für falsch)

je kleiner die T1-Zeit, umso

- größer die Energiedifferenz zwischen angeregtem und nicht angeregtem Spin
- kleiner die Energiedifferenz zwischen angeregtem und nicht angeregtem Spin
- länger muß der Anregungspuls sein, um den Spin von z-Achse nach x-Achse zu drehen.
- kürzer muß der Anregungspuls sein, um den Spin von z-Achse nach x-Achse zu drehen.
- schneller kann man messen
- langsamer muß man messen