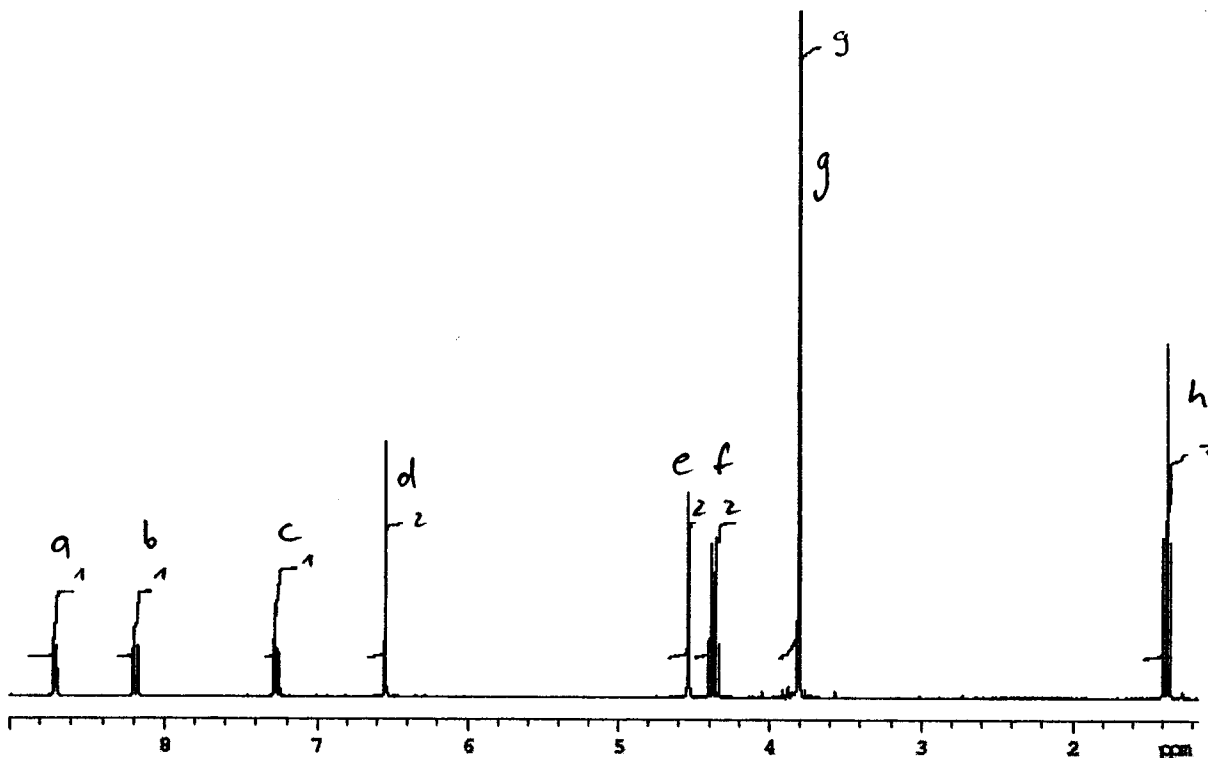
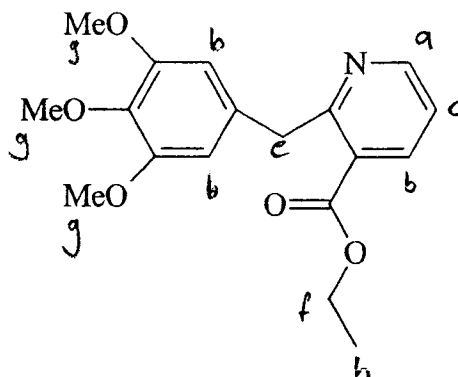


Spektroskopie und Beugung I (NMR)
WS 2008 Nachholklausur

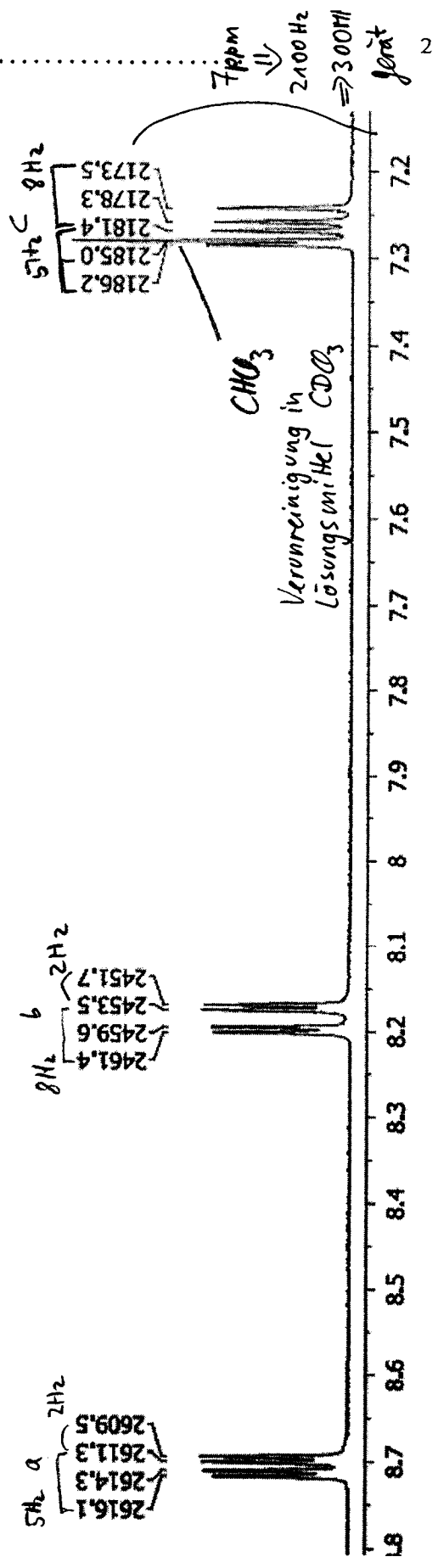
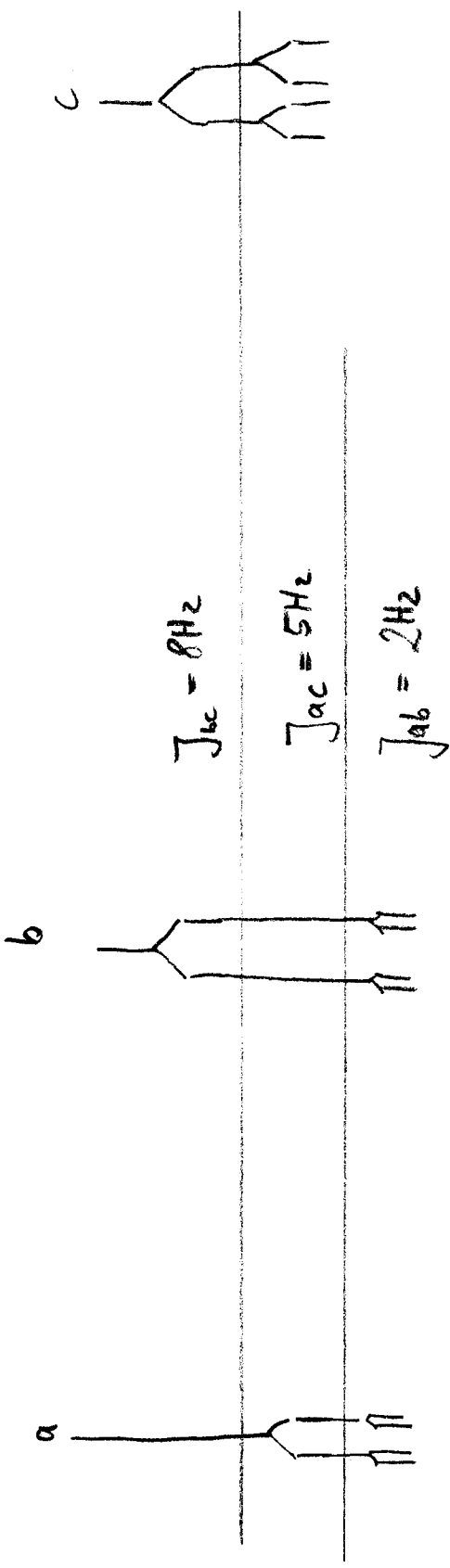
16.12.2008

Frage 1: (10 Punkte)

Lösung



1. Ordnen Sie die ¹H-Signale zu. (4 P)
2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die drei Protonen am Pyridin-Ring incl. allen Kopplungskonstanten. (nächste Seite) Maßstab: 1 Hz => 1 mm (3 P)



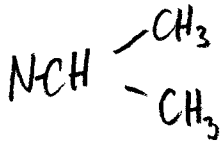
Frage 2: (4 Punkte)

$$DBA = 1 + \frac{1}{2} (14 - 17 + 1) = 0$$

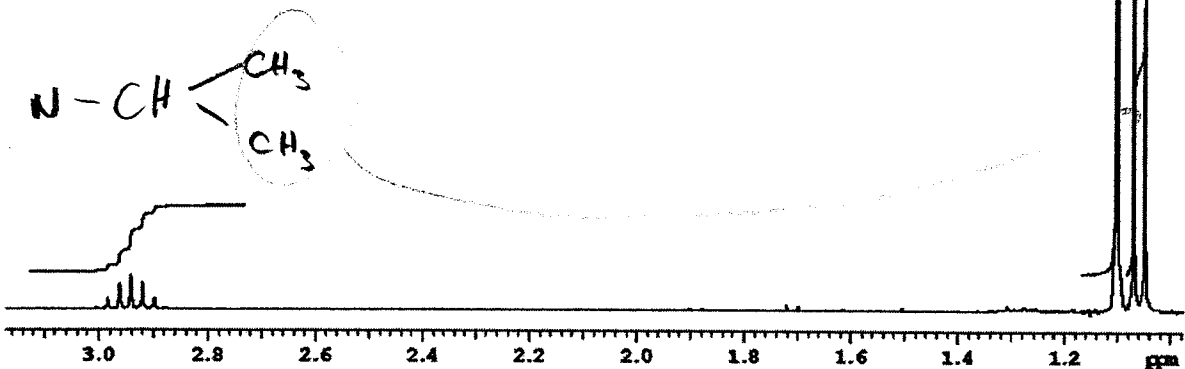
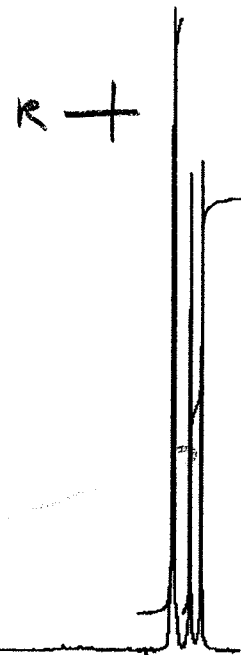
Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_7H_{17}N$.

Hinweis: Ein Proton wird im 1H -Spektrum nicht angezeigt. $\rightarrow NH$

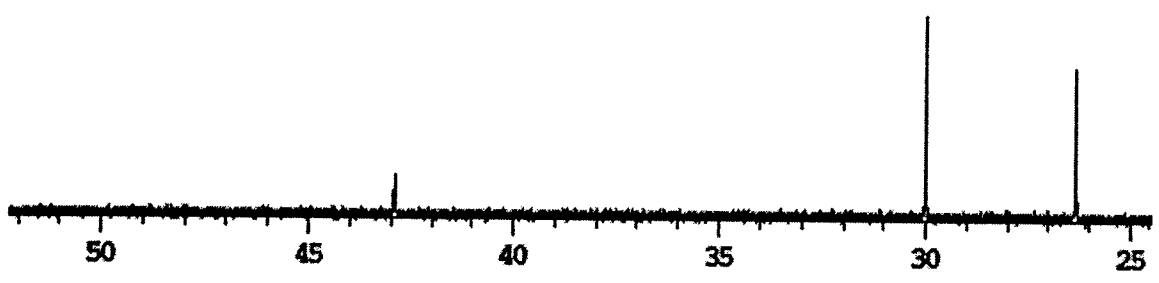
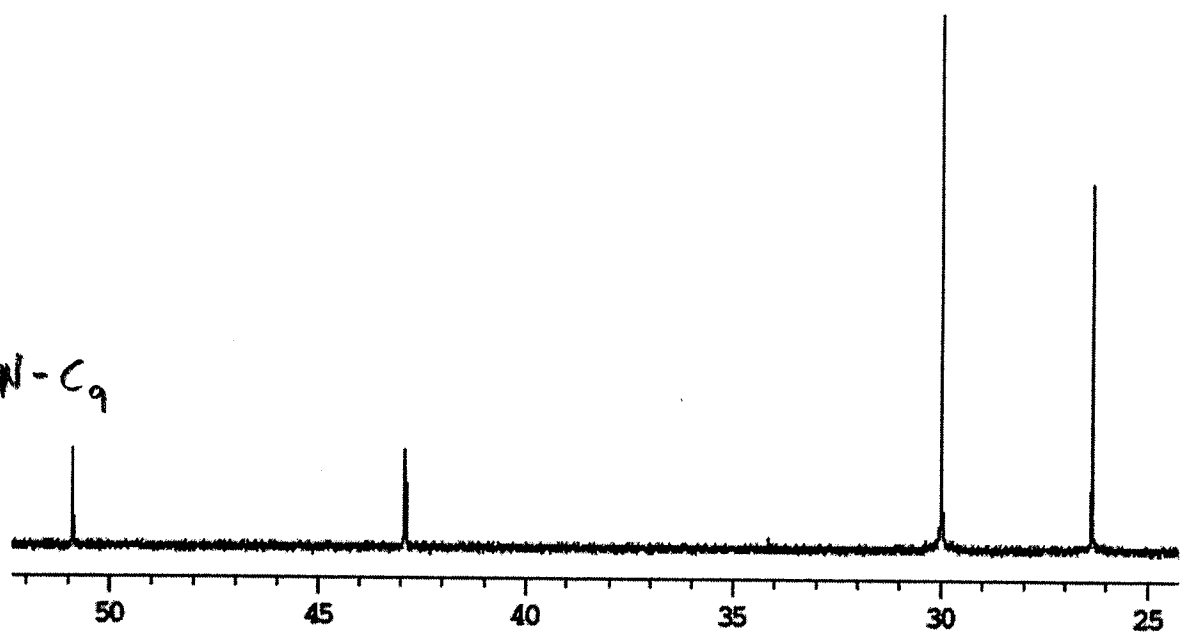
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (3 P)



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



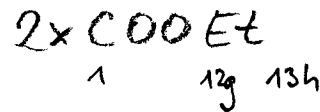
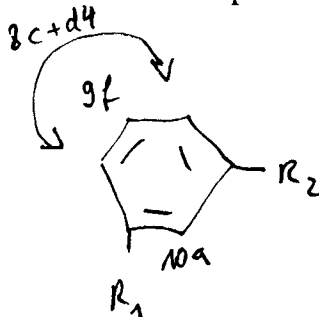
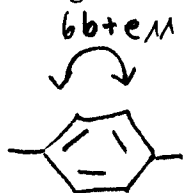
N-C₉



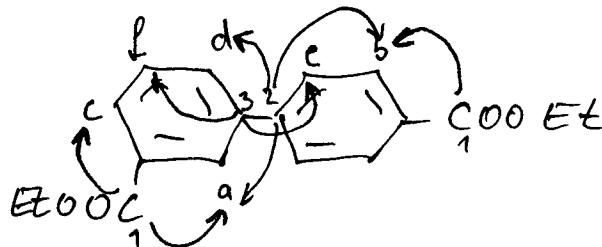
Frage 3: (7 Punkte)

Auf Seite 6 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{18}H_{18}O_4$.

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren?
Vergrößerungen der Spektren siehe 2D-Spektren. (3 P)

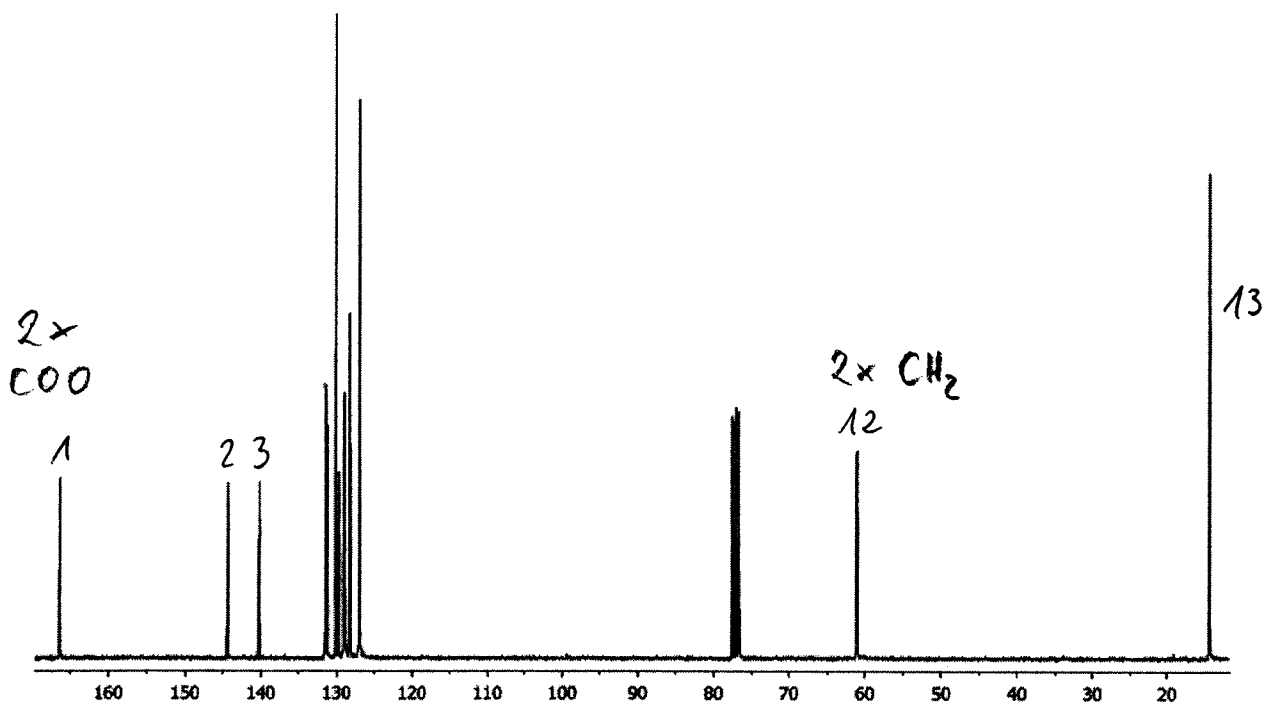
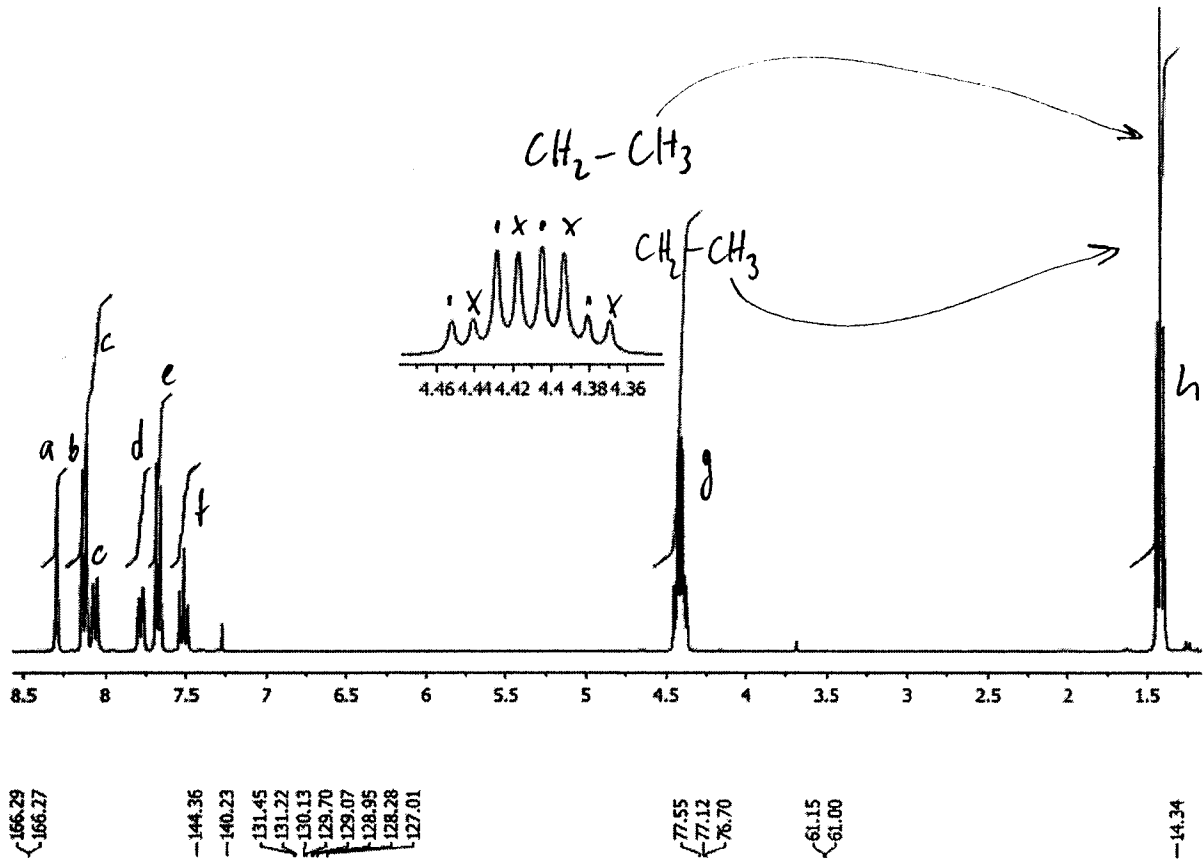


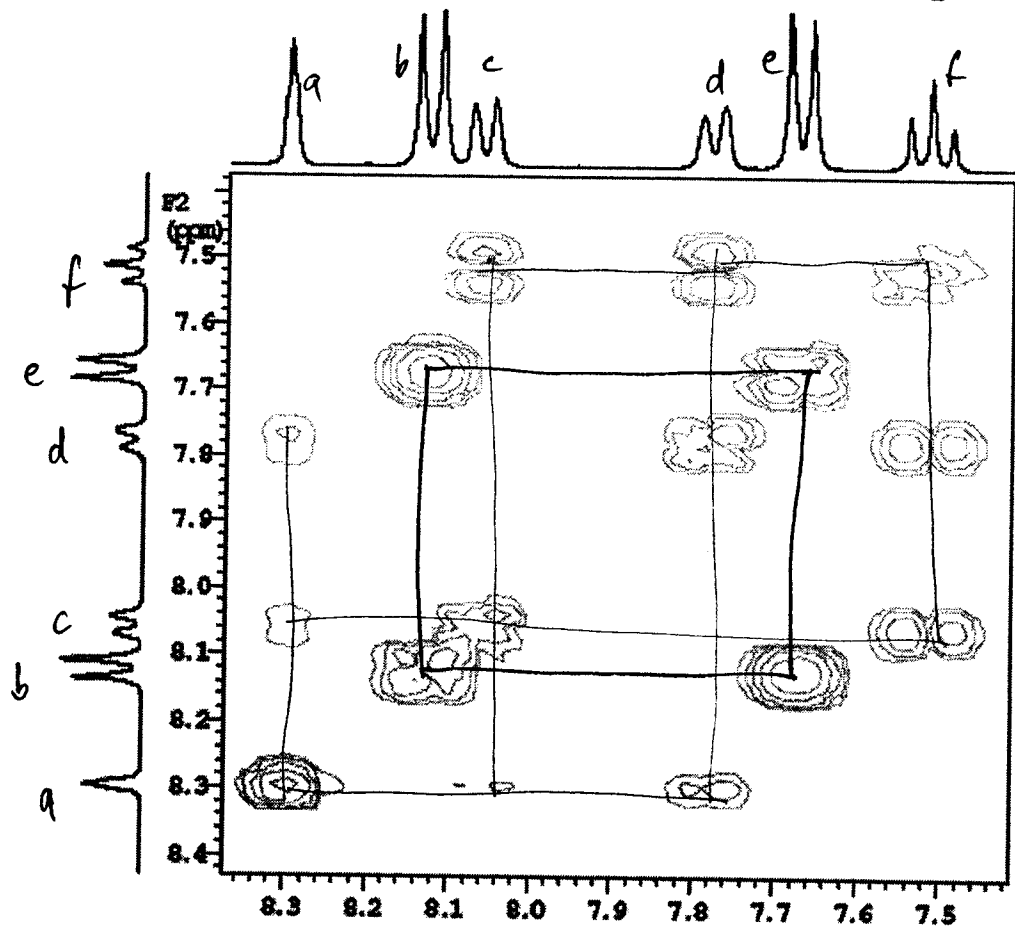
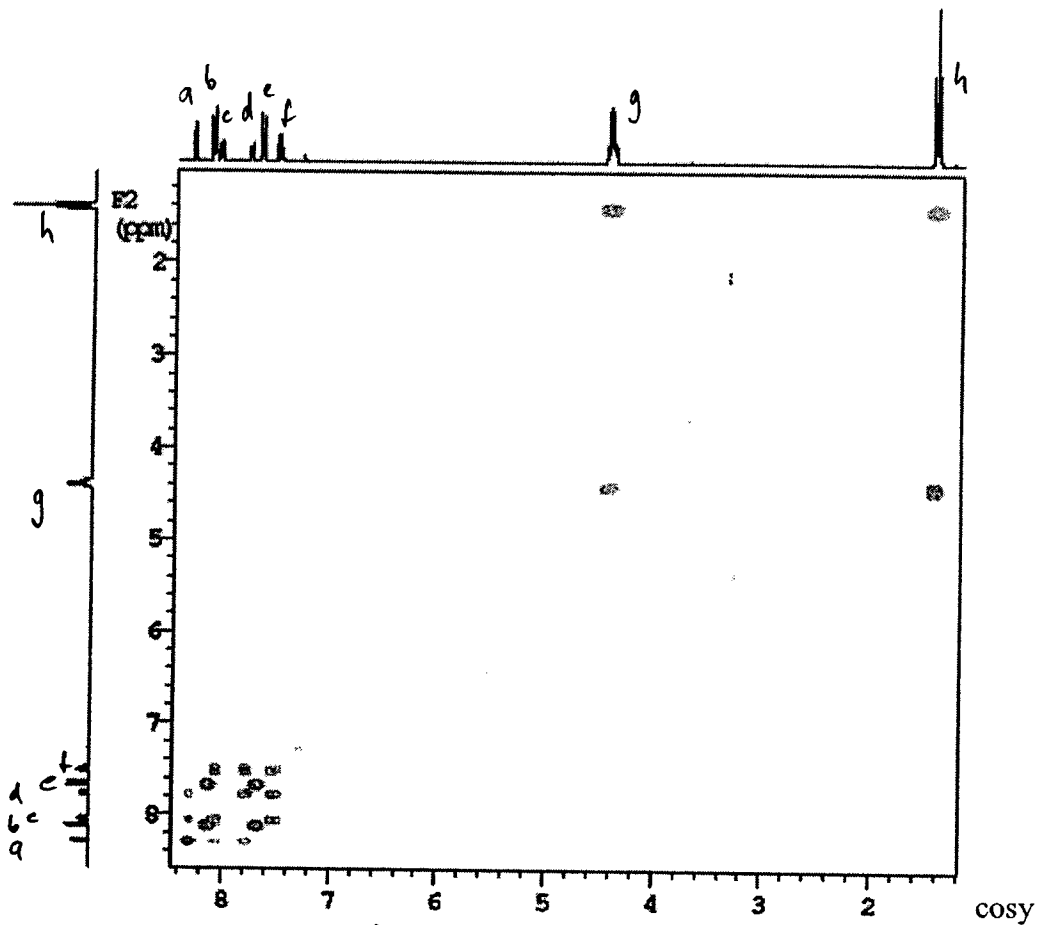
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, um Frage 3 beantworten zu können.
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

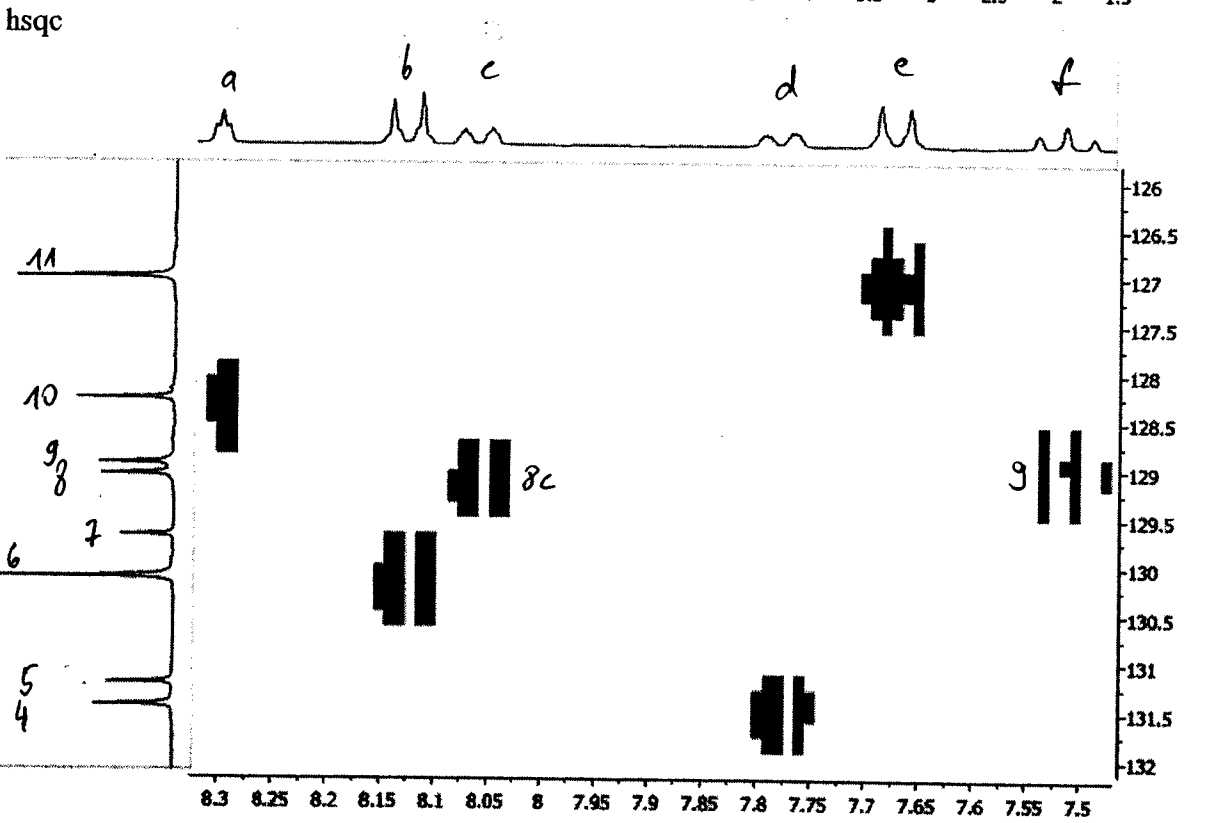
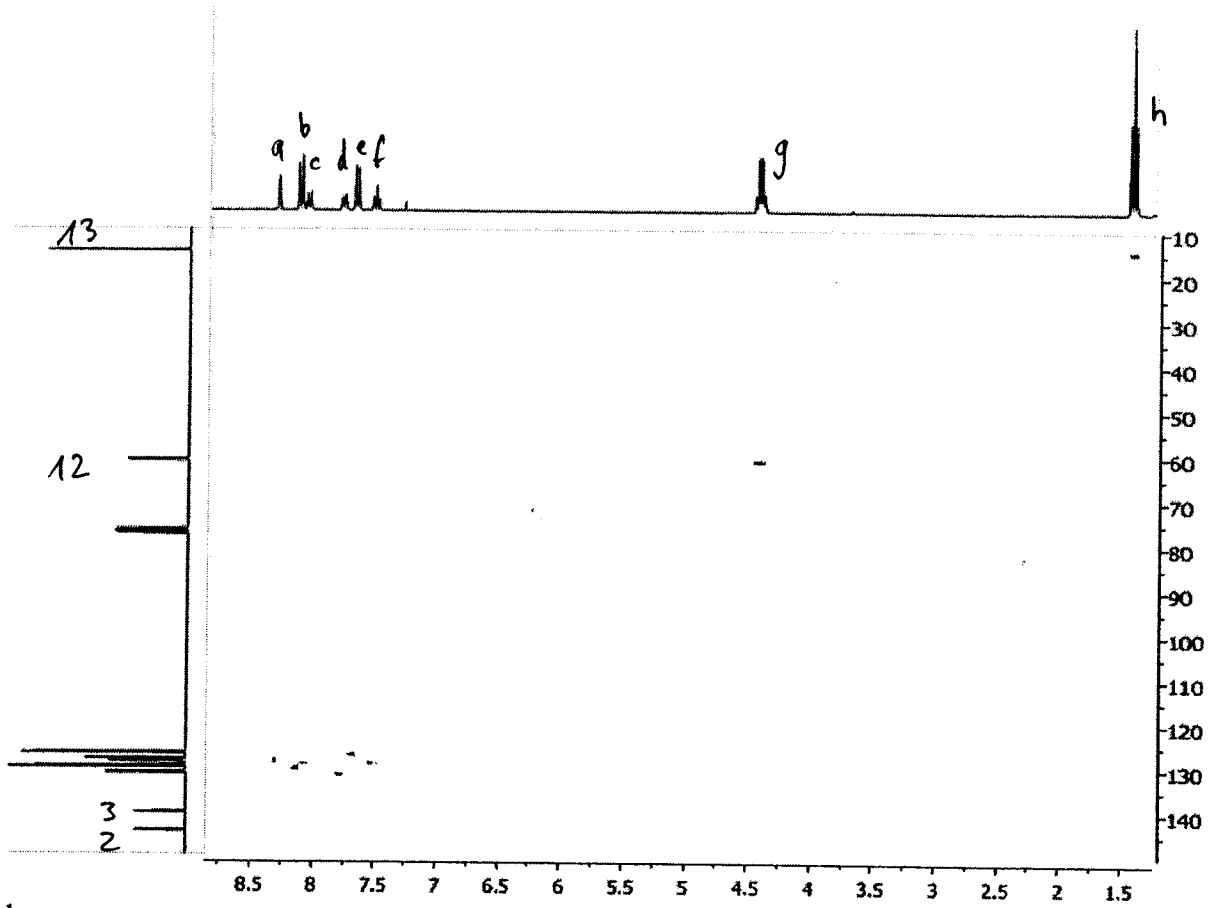


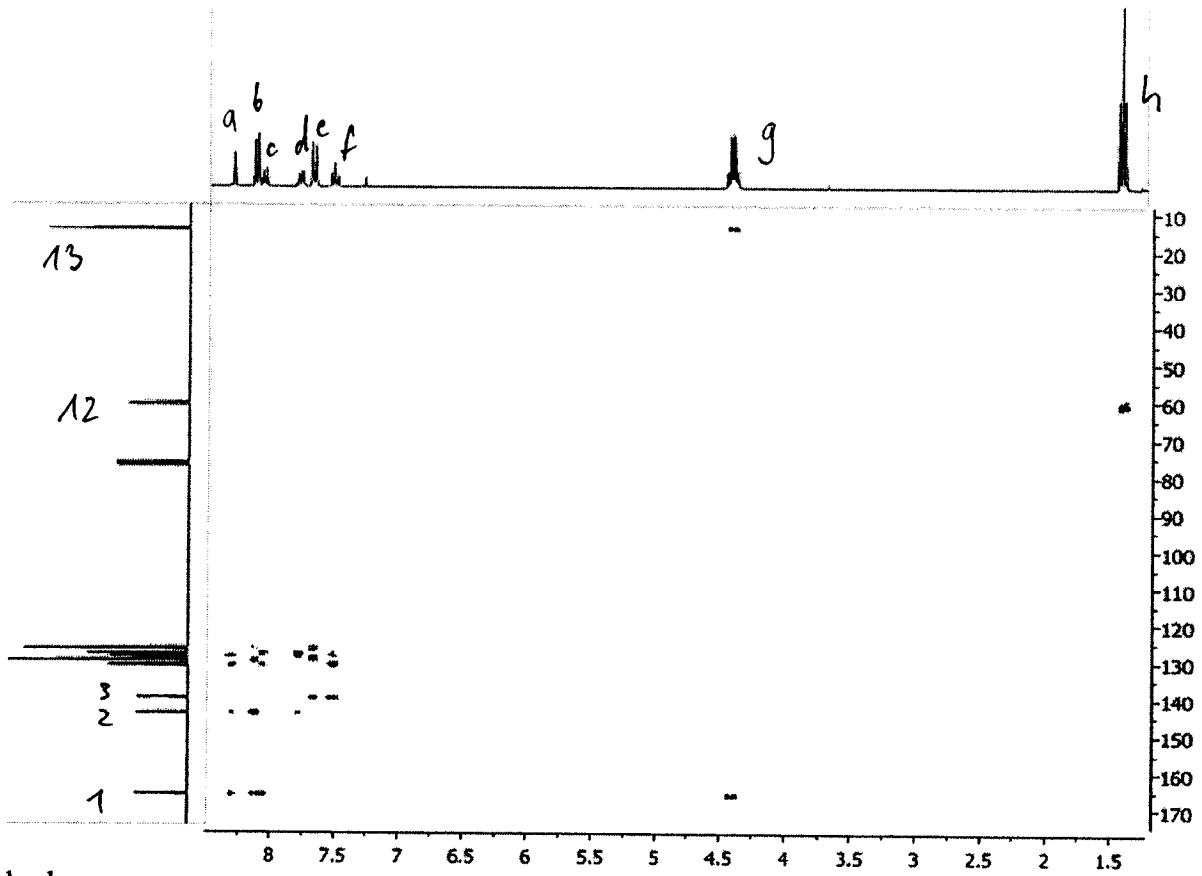
4. Ordnen Sie die ^{13}C -Signale 1, 2 und 3 zu und zeichnen Sie die im HMBC-Spektrum sichtbaren Kopplungen in Ihr Molekül ein (3 P)
(wenn möglich mit 3 verschiedenen Farben)

1 → a, c | b
2 → b | a, d
3 → e | f

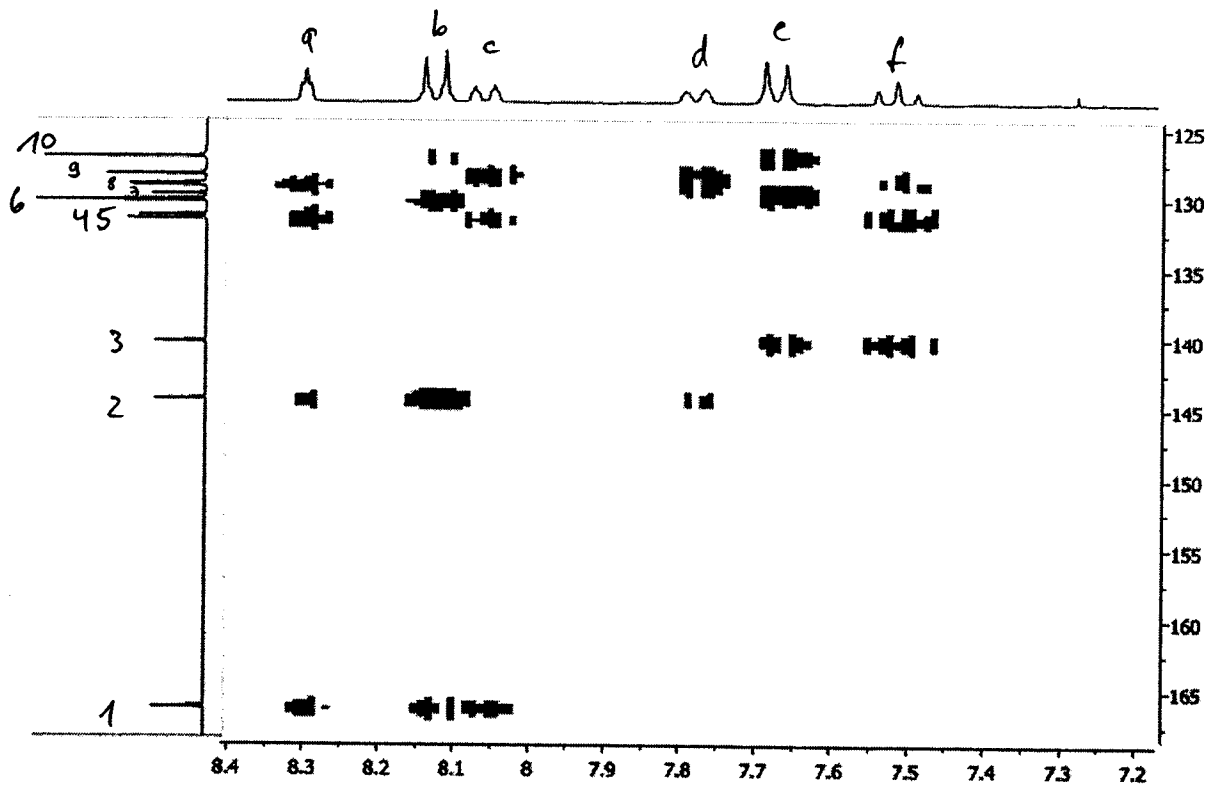








hmbc

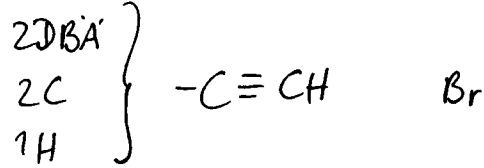
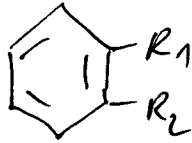


Frage 4: (5 Punkte)

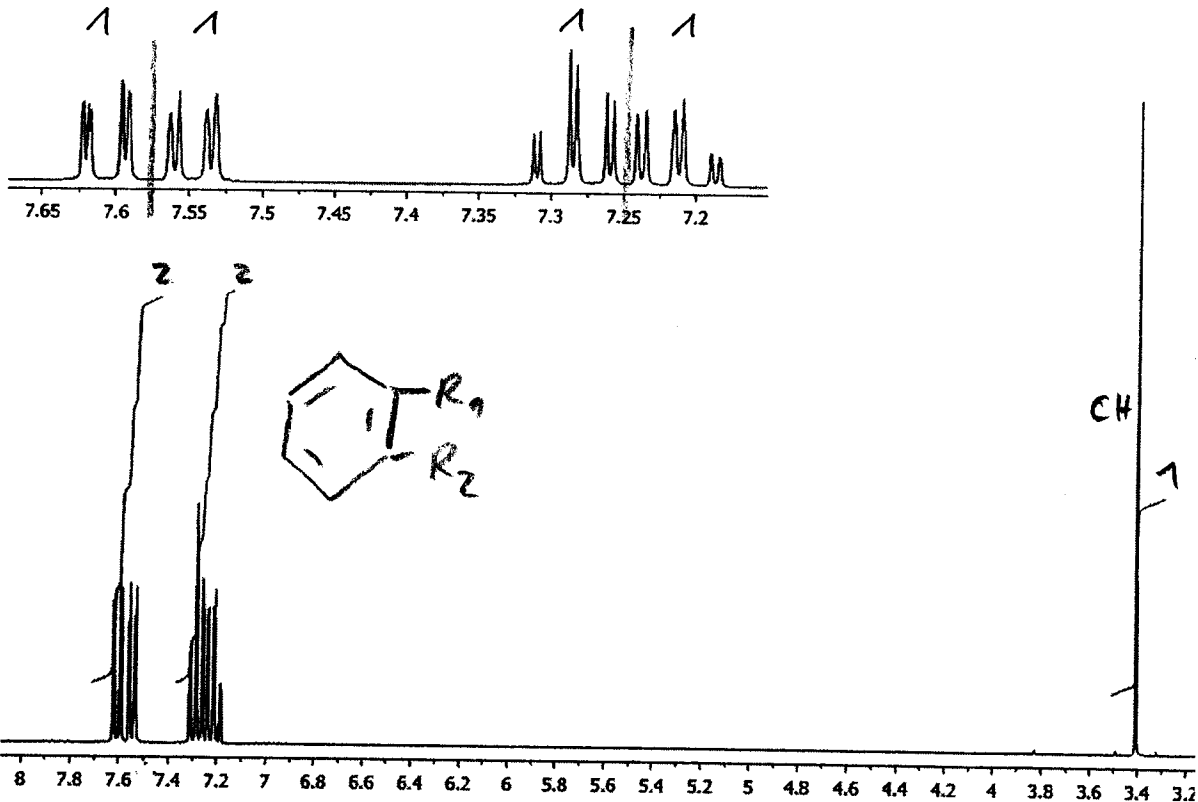
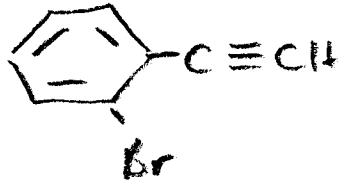
Auf Seite 11 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C_8H_5Br .

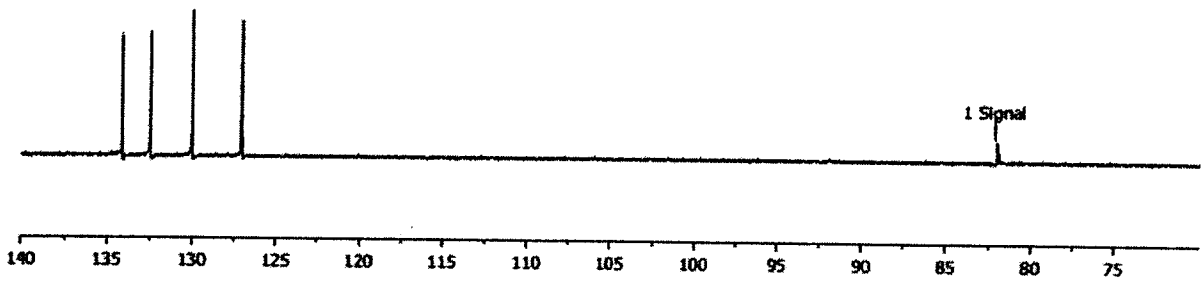
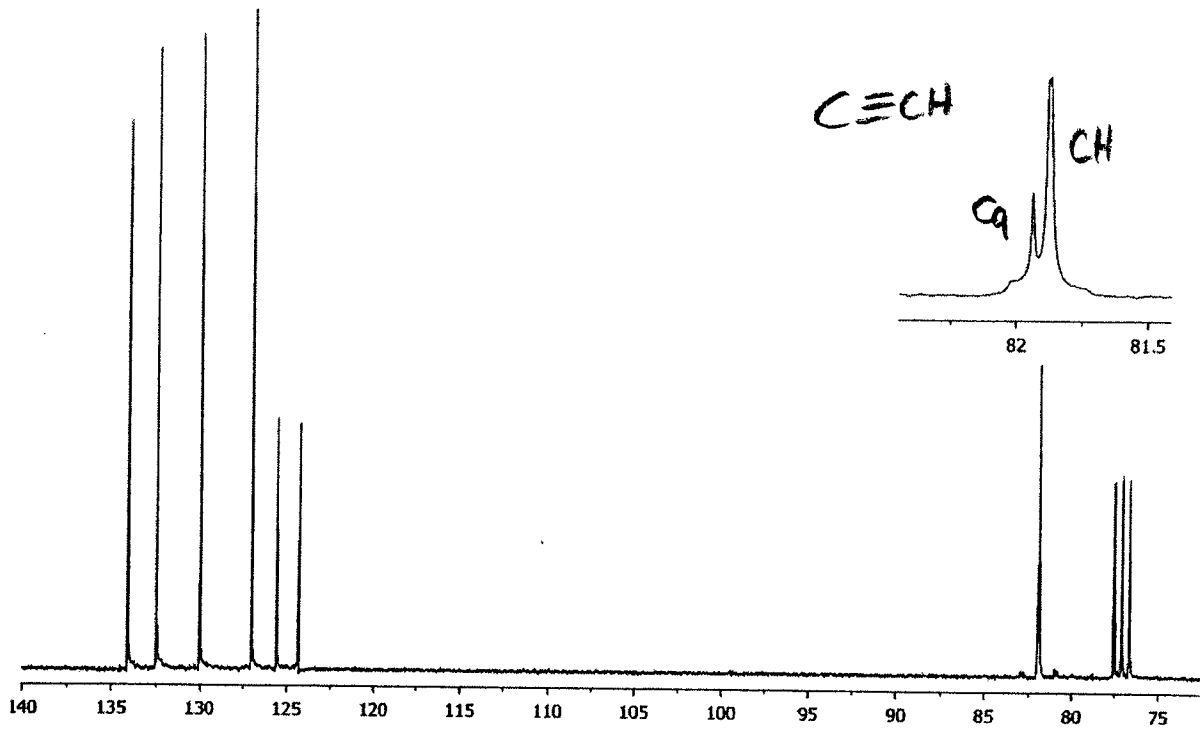
$$DBA' = 1 + \frac{1}{2}(16 - 6) = \underline{\underline{6}}$$

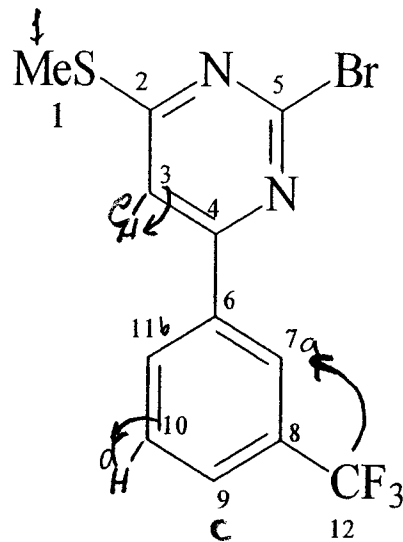
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4P)



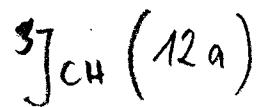
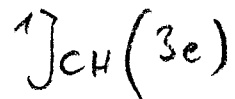
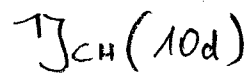
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1P)

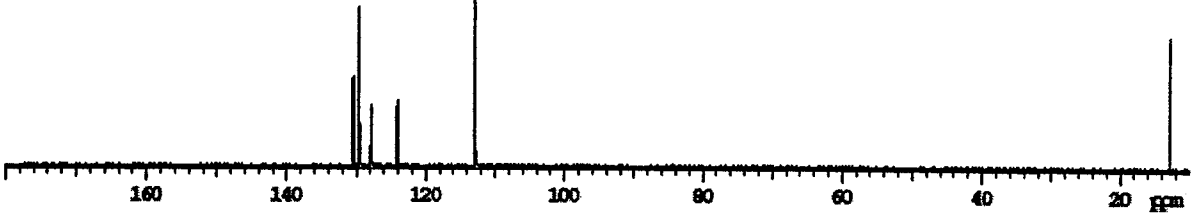
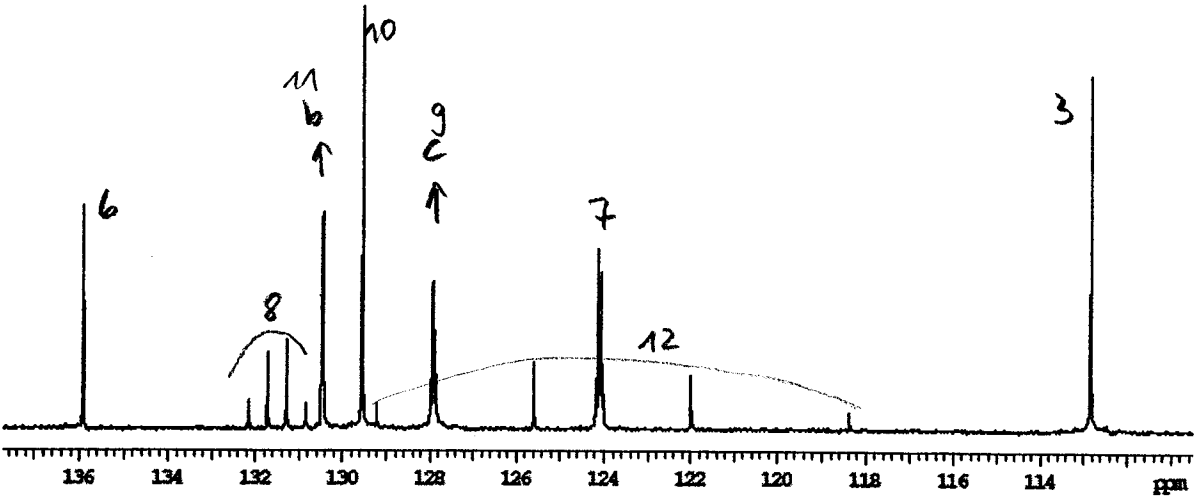
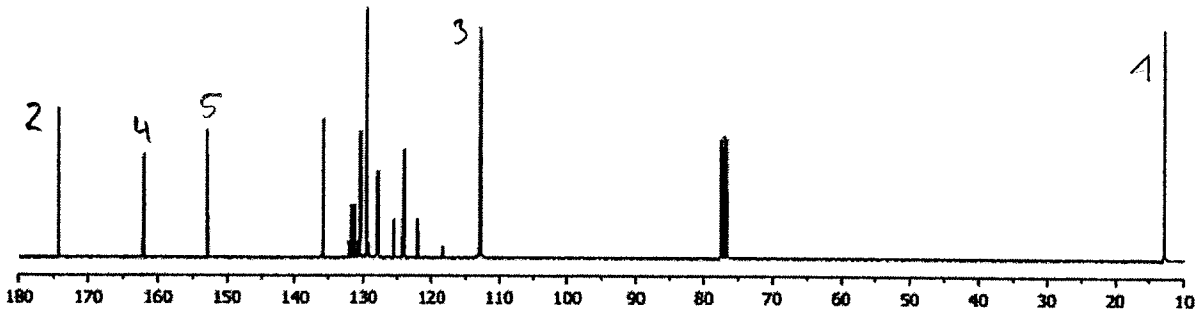
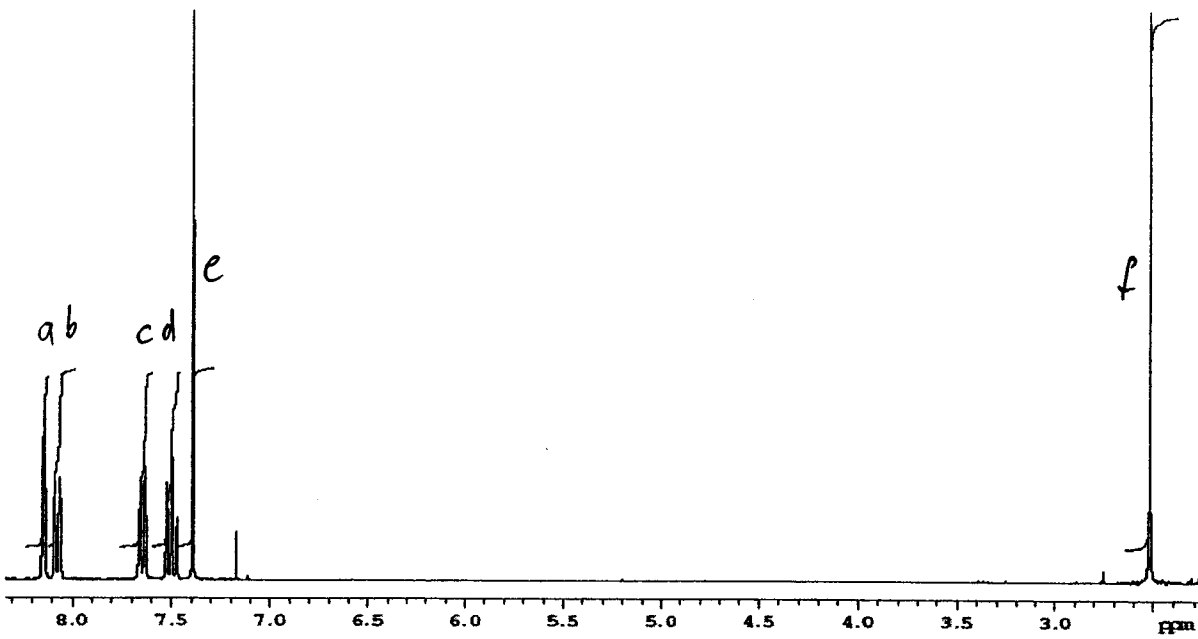


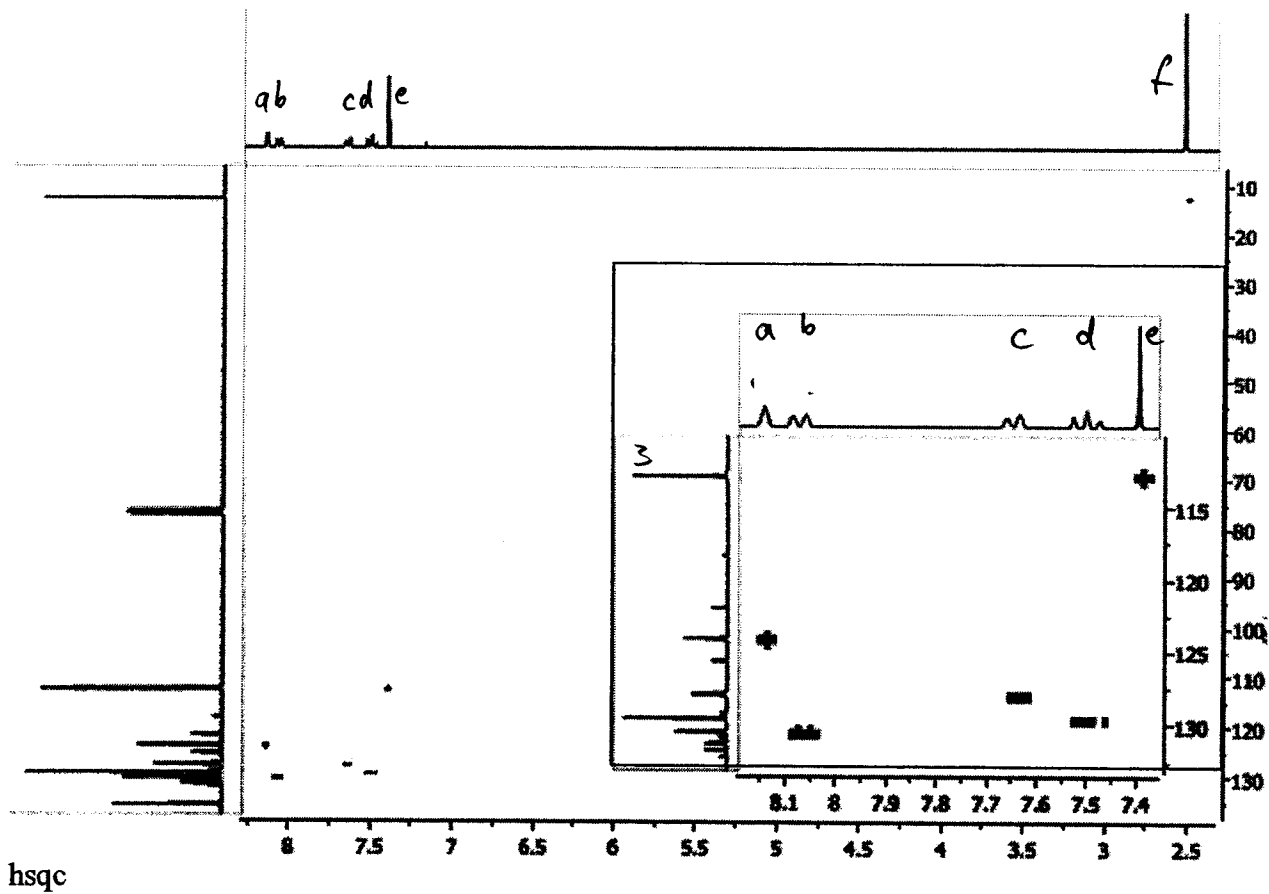
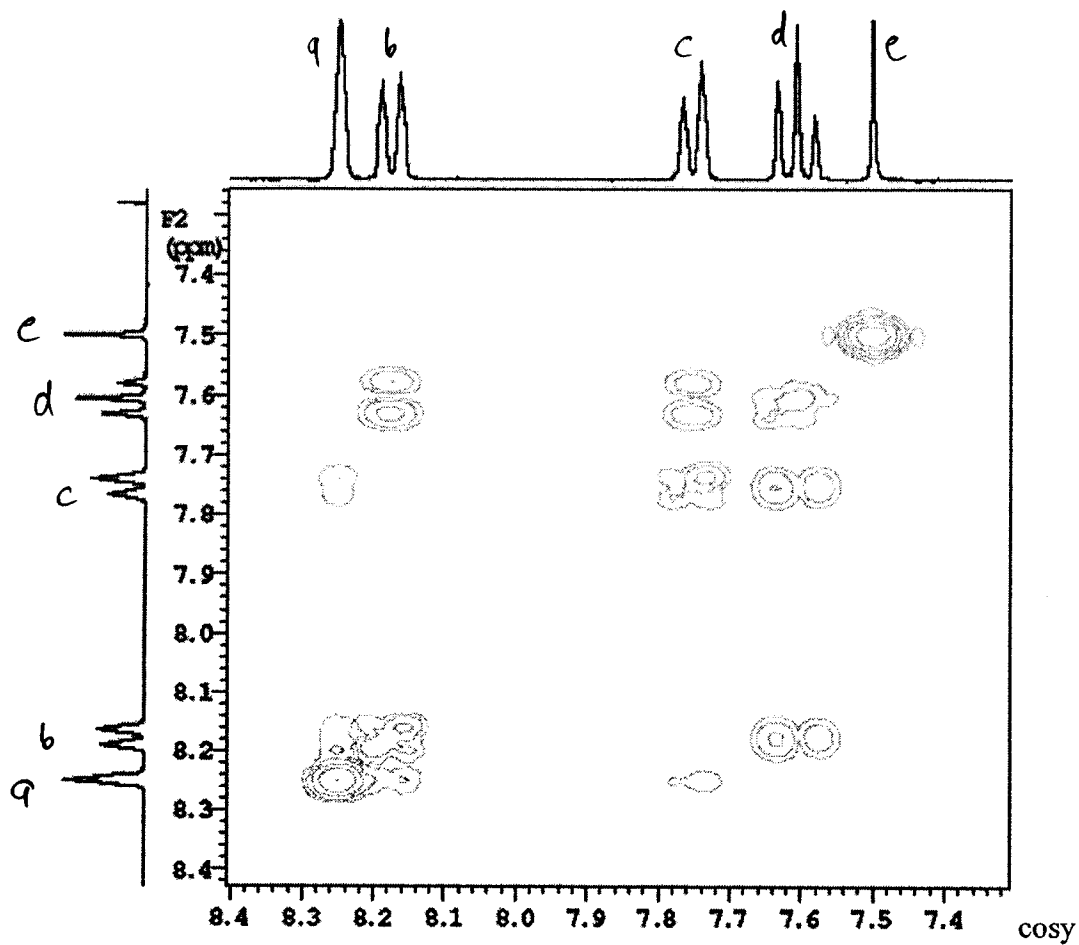


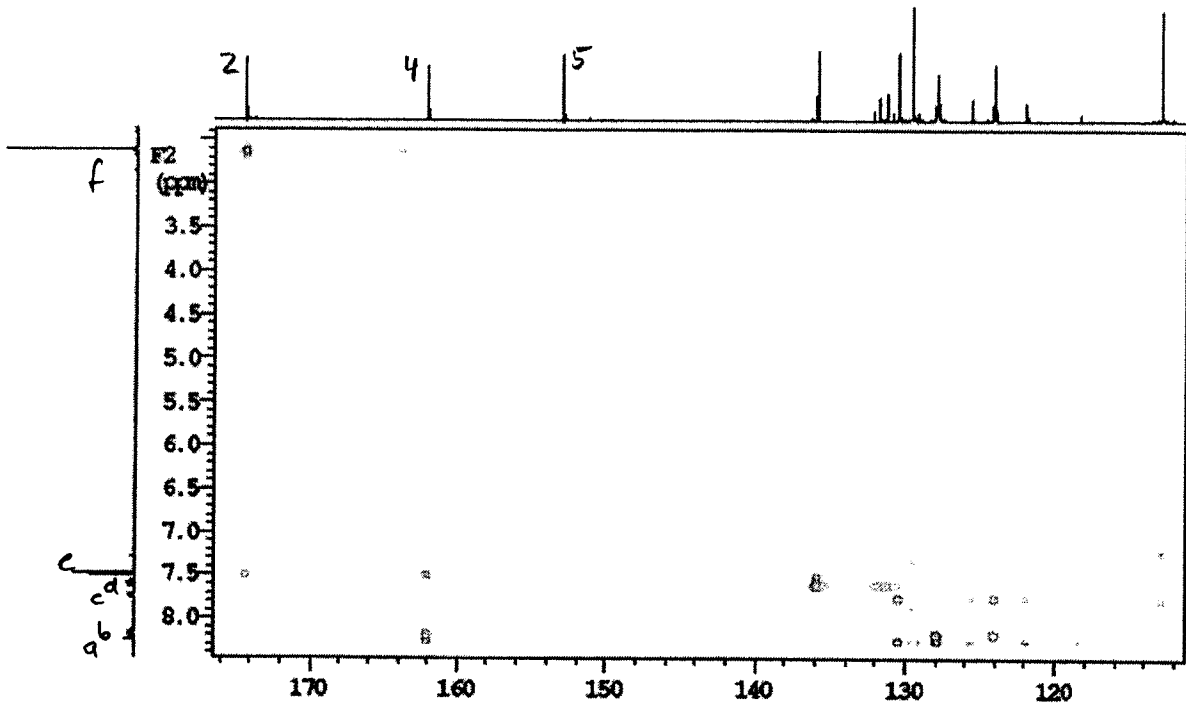
Frage 5: (15 Punkte)

1. Ordnen Sie alle ^{13}C -Signale zu, indem Sie die Nummer aus obigem Molekül in das ^{13}C -Spektrum auf der nächsten Seite eintragen. (12 P)
2. Erklären Sie die im HMBC-Spektrum mit Kreisen gekennzeichnete Signale. Verwenden Sie Farbstifte. (3 P)

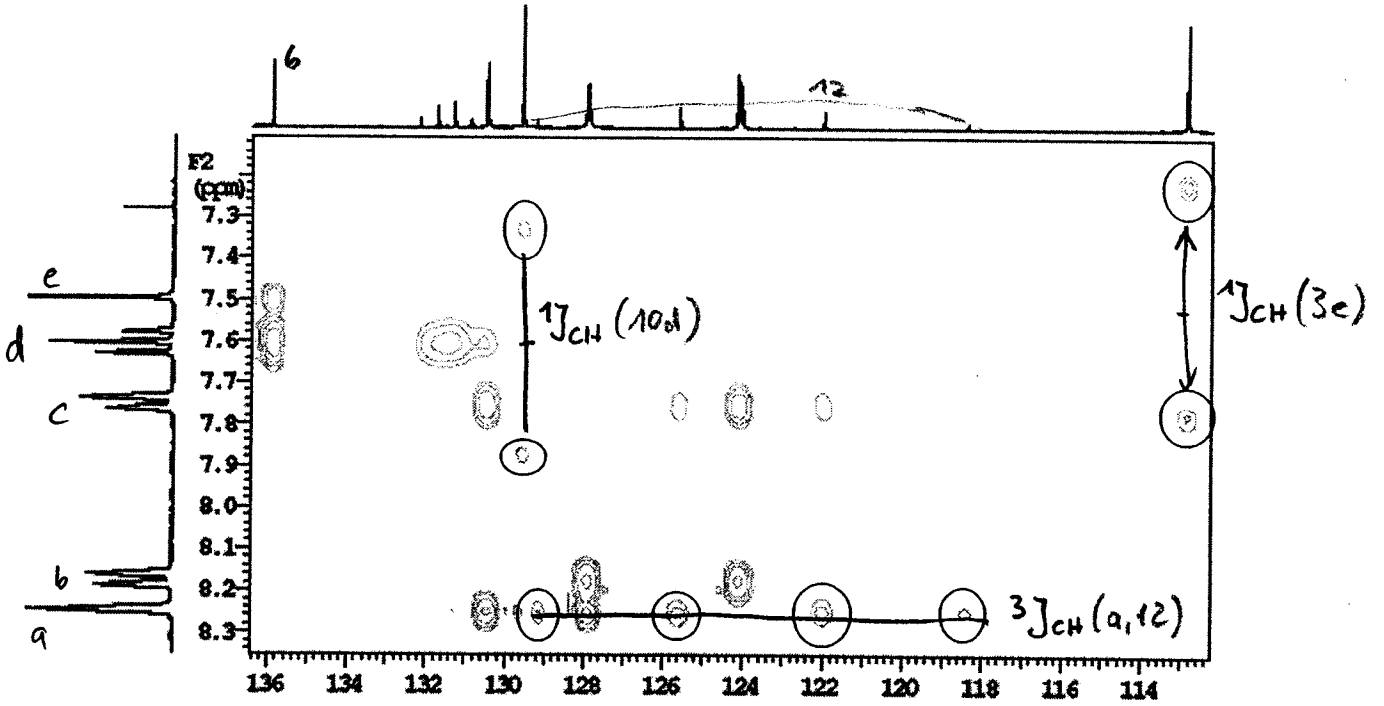








hmbc



Frage 6: Theorie (9 Punkte)

1. Welche Aussagen sind richtig? (Jeweils mit kurzer Erklärung) (3 P)

Je mehr Substanz gelöst ist,

umso besser ist das Signal zu Rausch-Verhältnis (bei gleicher Messdauer)

richtig

desto stärker ist der NOE-Effekt

falsch

umso schneller geht die Messung (bei gleichem Signal zu Rausch-Verhältnis)

richtig

desto größer ist der Dacheffekt im Spektrum.

falsch

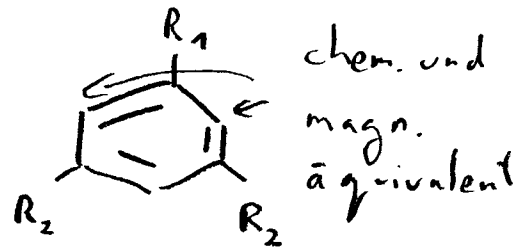
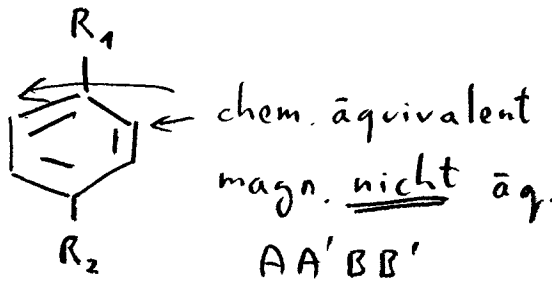
desto größer ist die magnetogyrisches Verhältnis

falsch

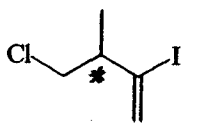
desto kleiner wird die Larmor-Frequenz

falsch

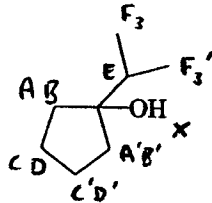
2. Was bedeutet die Bezeichnung ,chemisch äquivalent' im Unterschied zu ,magnetisch äquivalent'. Erklären Sie an Hand von Beispielen (2 P)



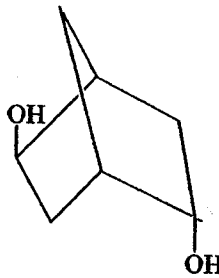
3. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen(4 P)



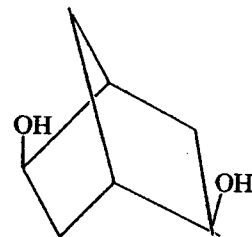
ABCD₃EF



AA'BB'CC'DD'
EF₃F₃'X



ABCDEFGHIKXY



AA'BB'CC'DD'
EE'XX'