

Spektroskopie und Beugung I (NMR)
SS 2009 Klausur

28.7.2009

Frage 1: (10 Punkte)

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_6H_{12}O_2$.

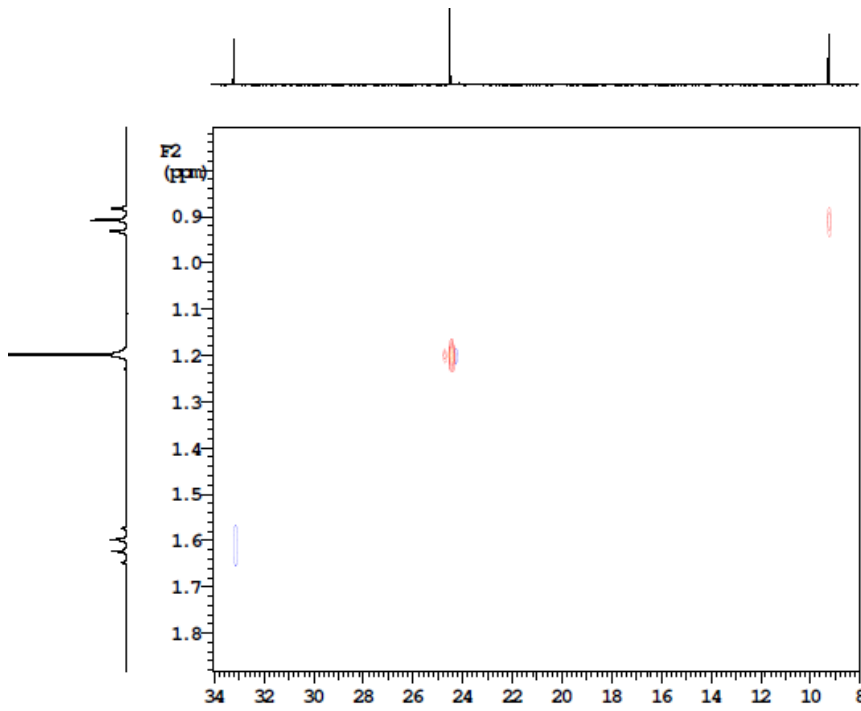
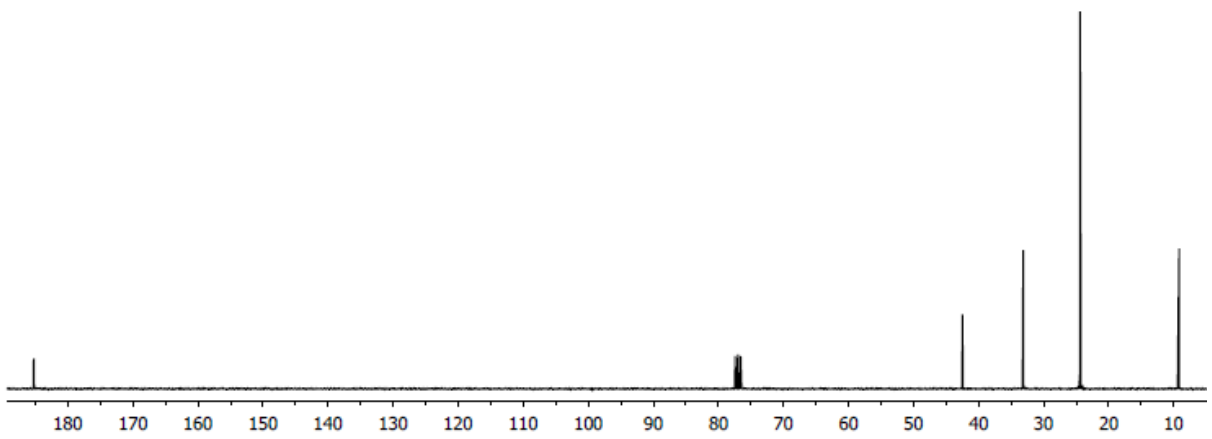
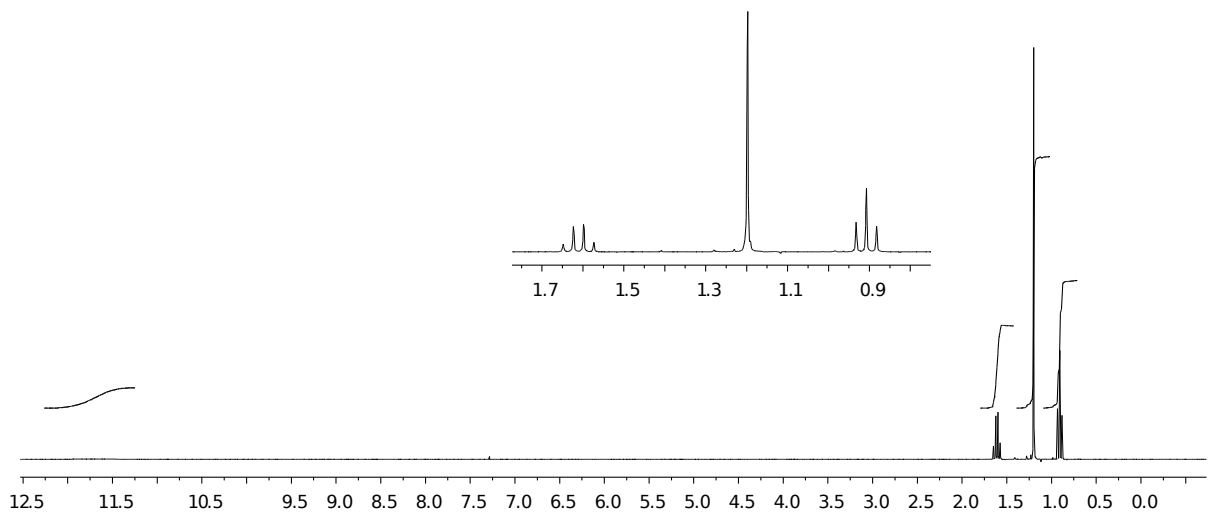
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des 1H - und ^{13}C -Spektren? (3 P)

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

3. Ordnen Sie die ^{13}C -Signale zu (1 P)

4. Berechnen Sie die Verschiebungen der aliphatischen C-Atome mit Hilfe der Inkrementen-Tabelle (Rechenweg muss ersichtlich sein). (4 P)

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



Frage 2: (14 Punkte)

Auf Seite 5 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{15}H_{22}O_3$.

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

Hilfestellungen:

Schauen Sie im COSY, welche Protonen miteinander koppeln.

Schauen Sie im HSQC, welche Protonen zu welchen Cs gehören.

Welche C-Atome gehören zum Aromaten. Warum ist eines dieser C-Atome so stark Hochfeld-verschoben? (siehe Inkremententabelle)

2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, um Frage 3 beantworten zu können.

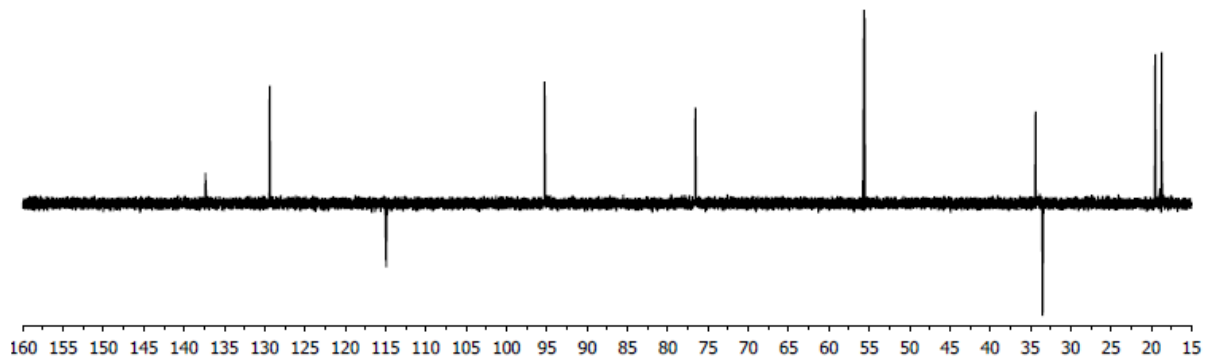
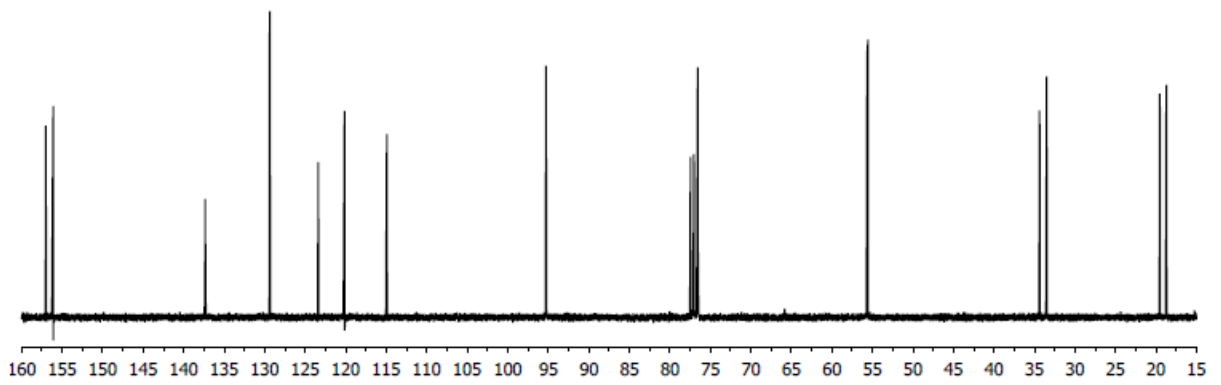
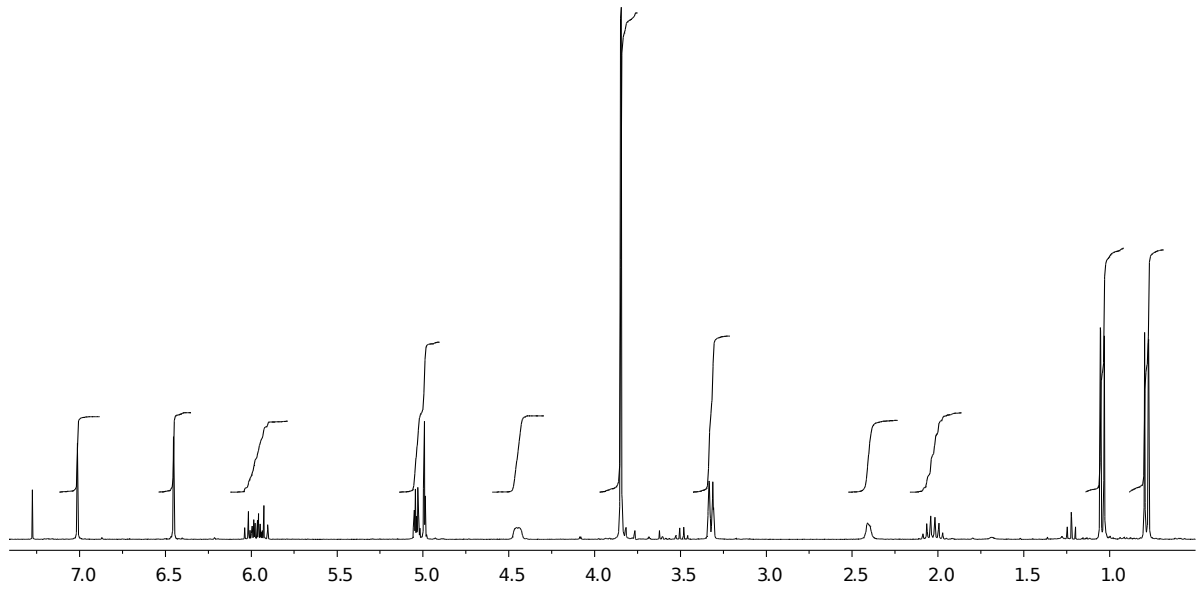
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

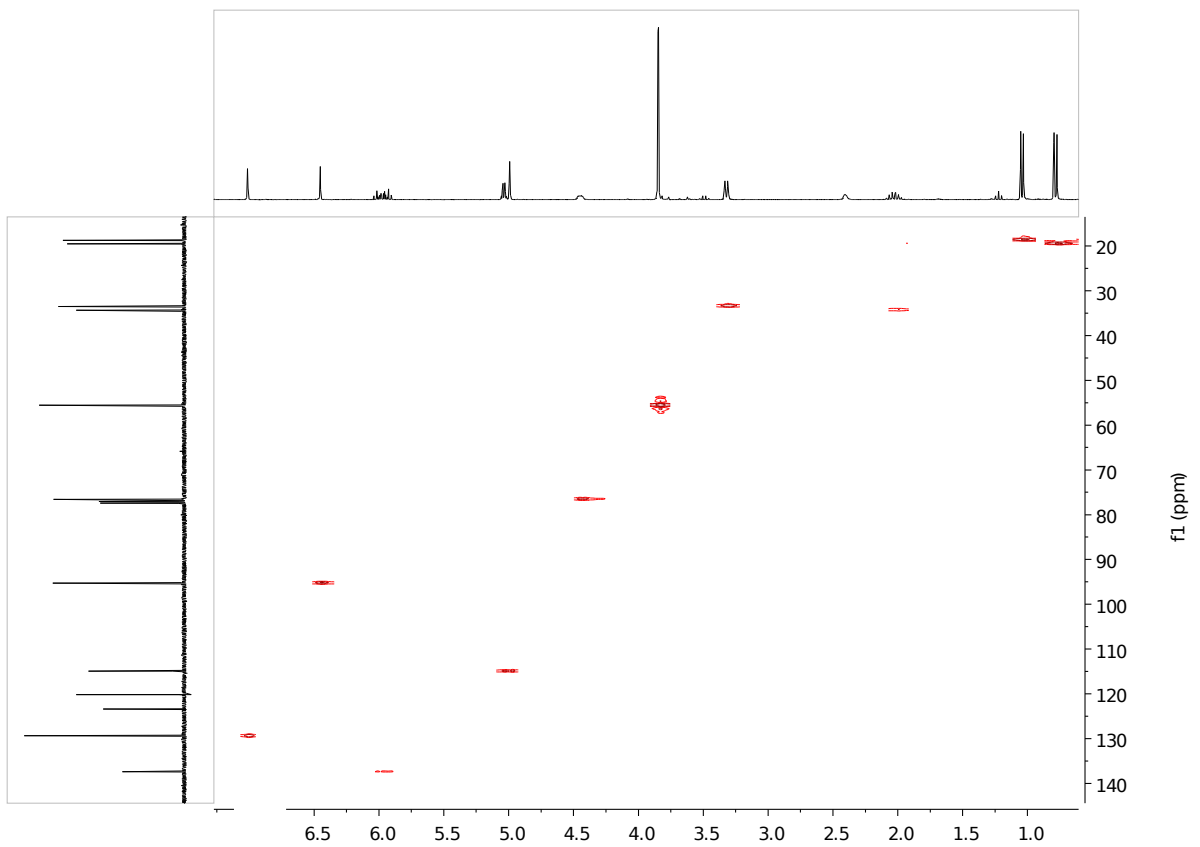
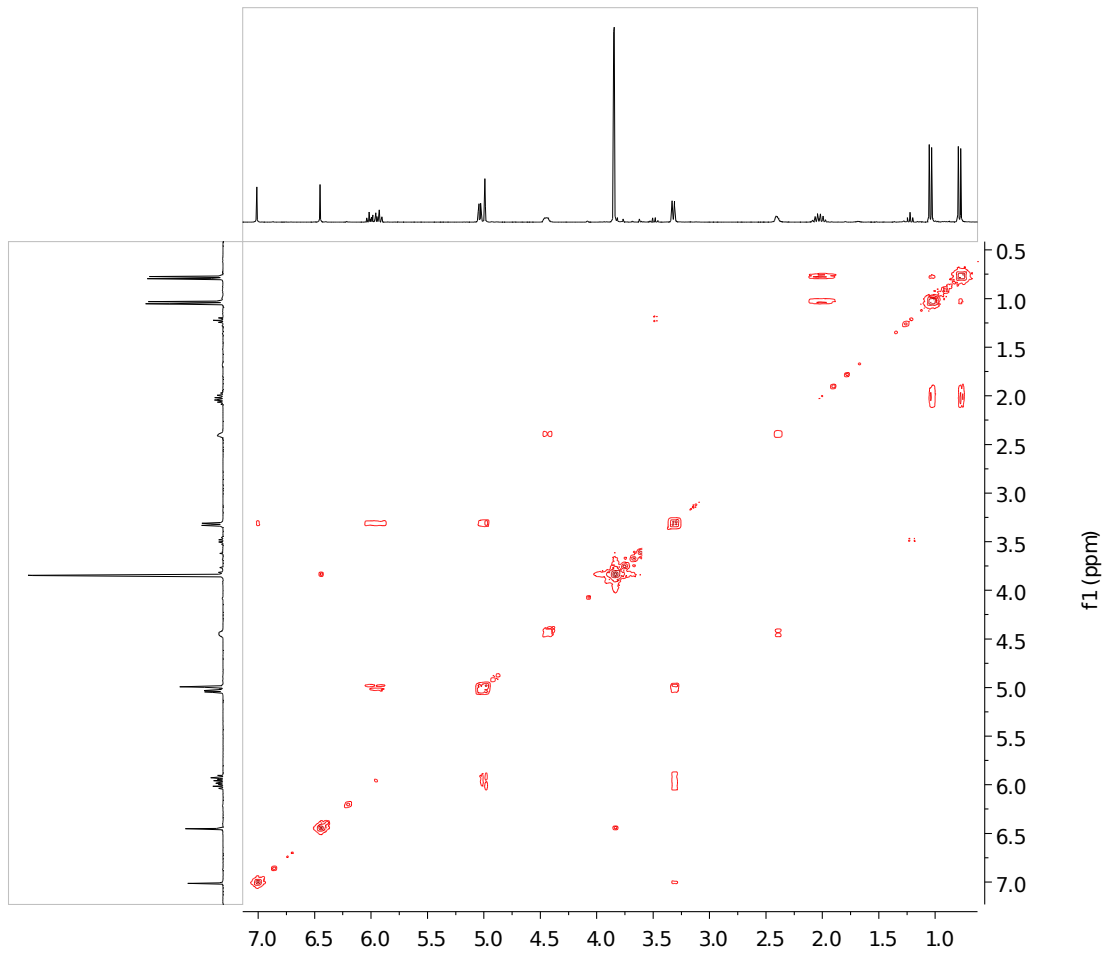
4. Ordnen Sie alle Signale zu. (7 P)

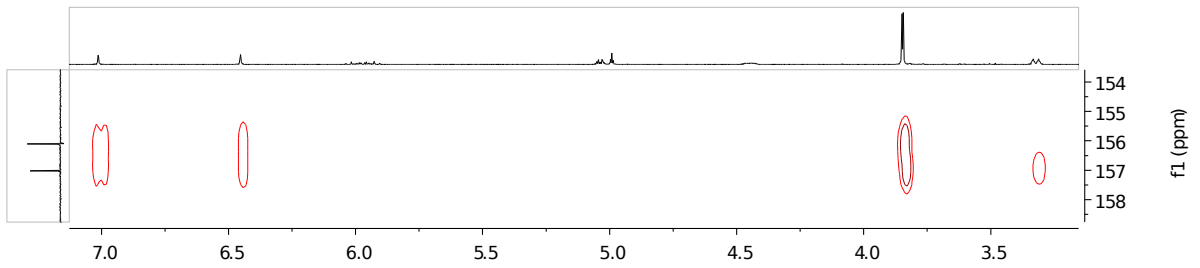
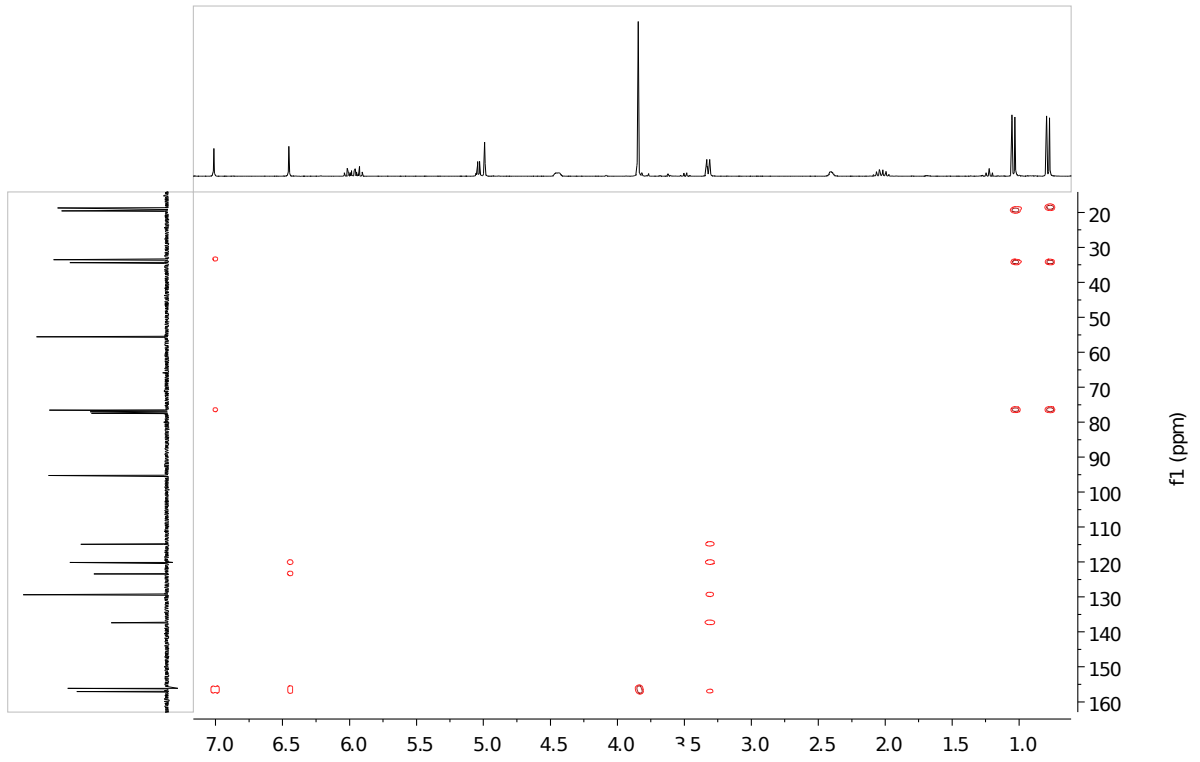
5. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbare Kopplung der C-Atome 1, 2, 5 und 6 in Ihr gefundenes Molekül ein. Verwenden Sie Farbstifte. Füllen Sie nachstehende Tabelle aus. (2 P)

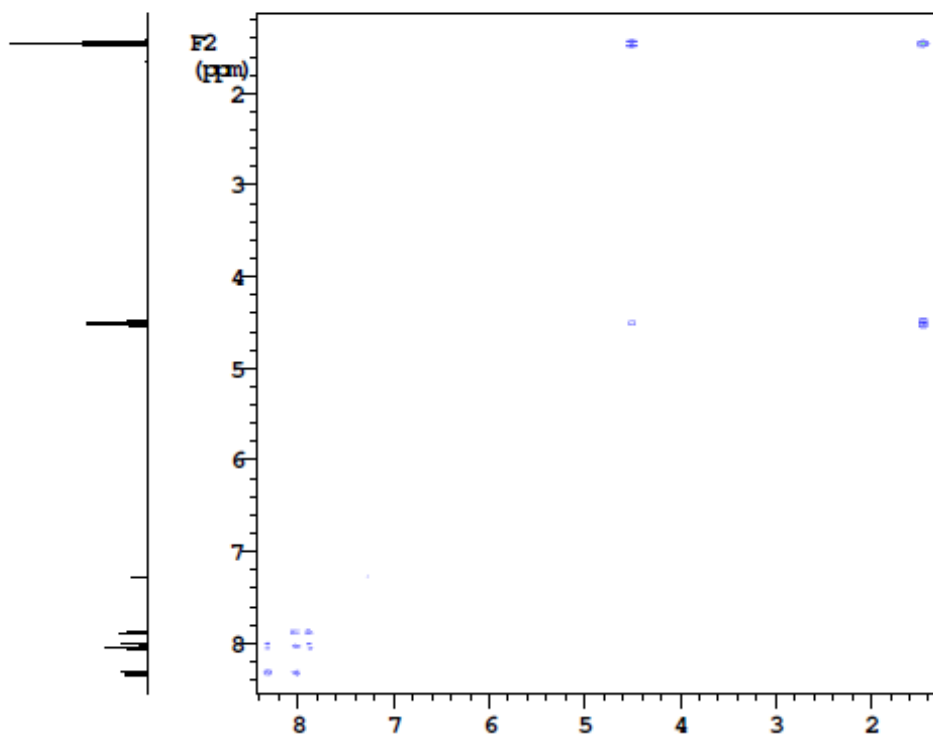
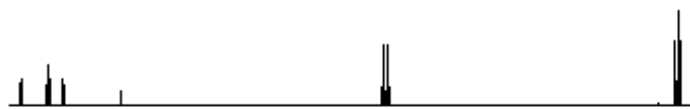
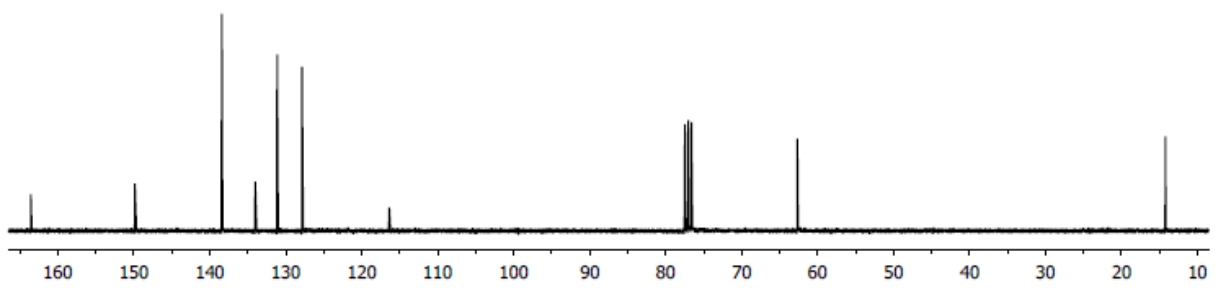
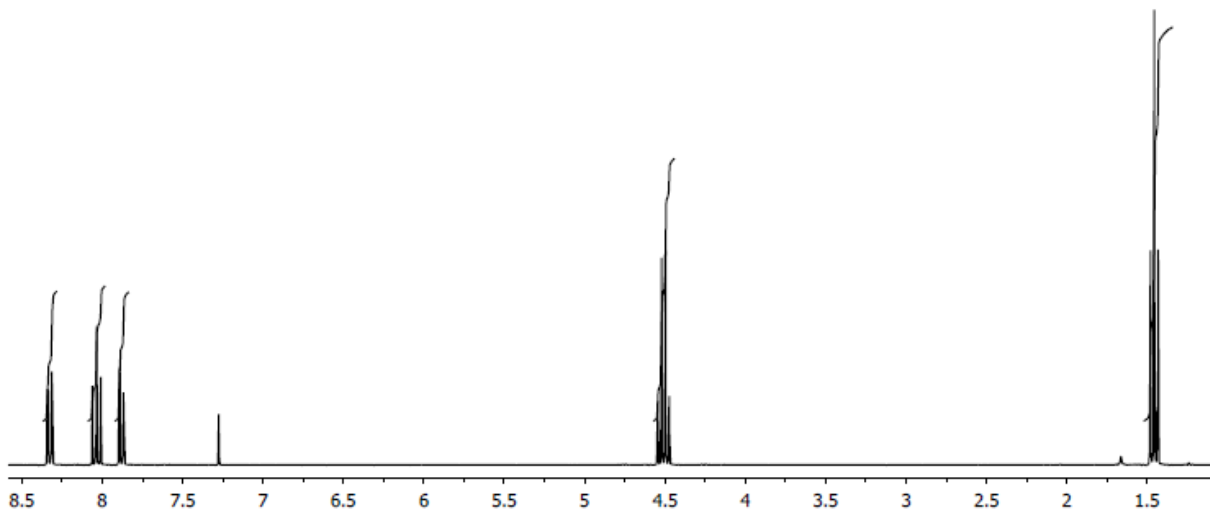
^{13}C	1H	J(C,H)
1		3 J

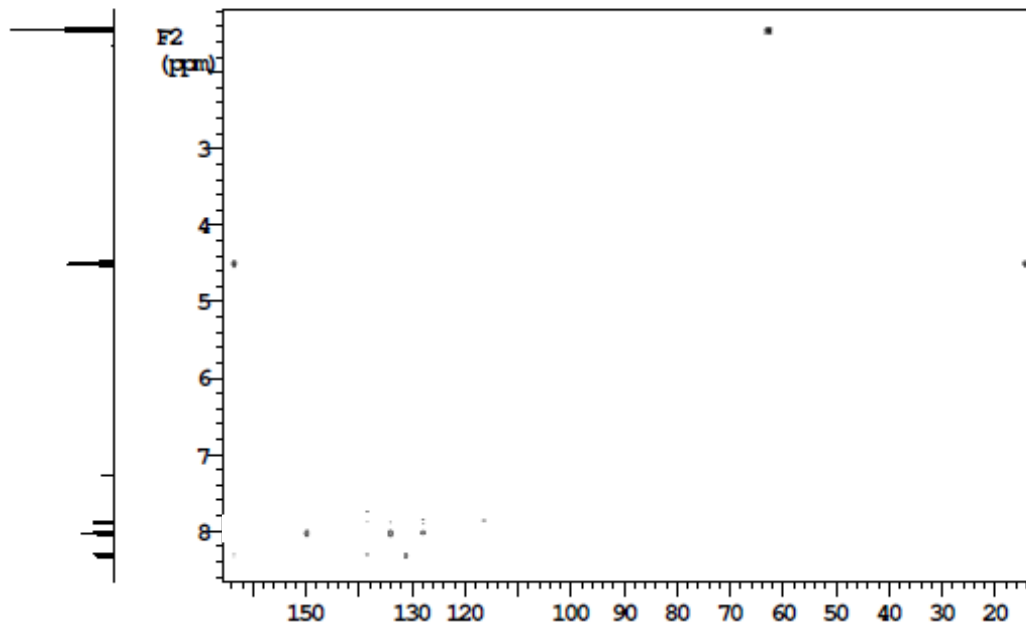
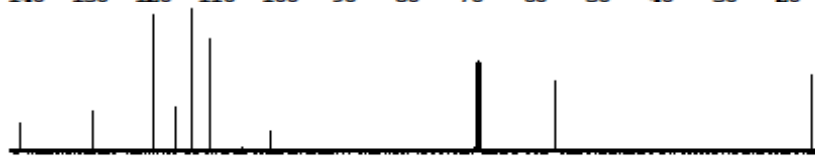
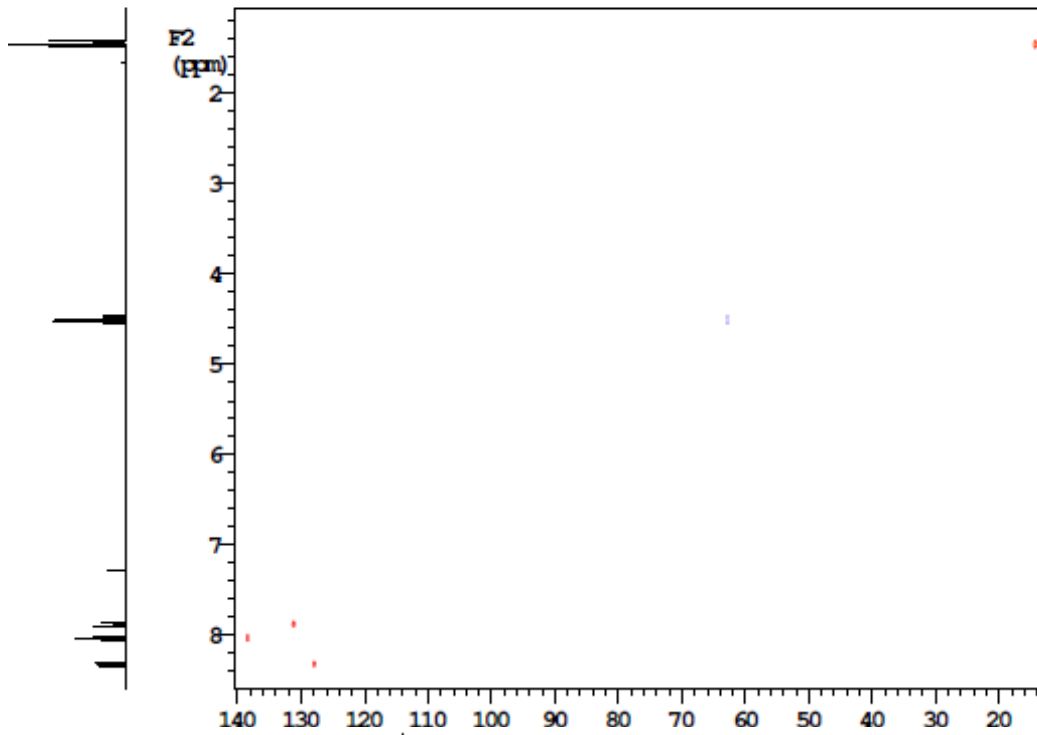
usw.

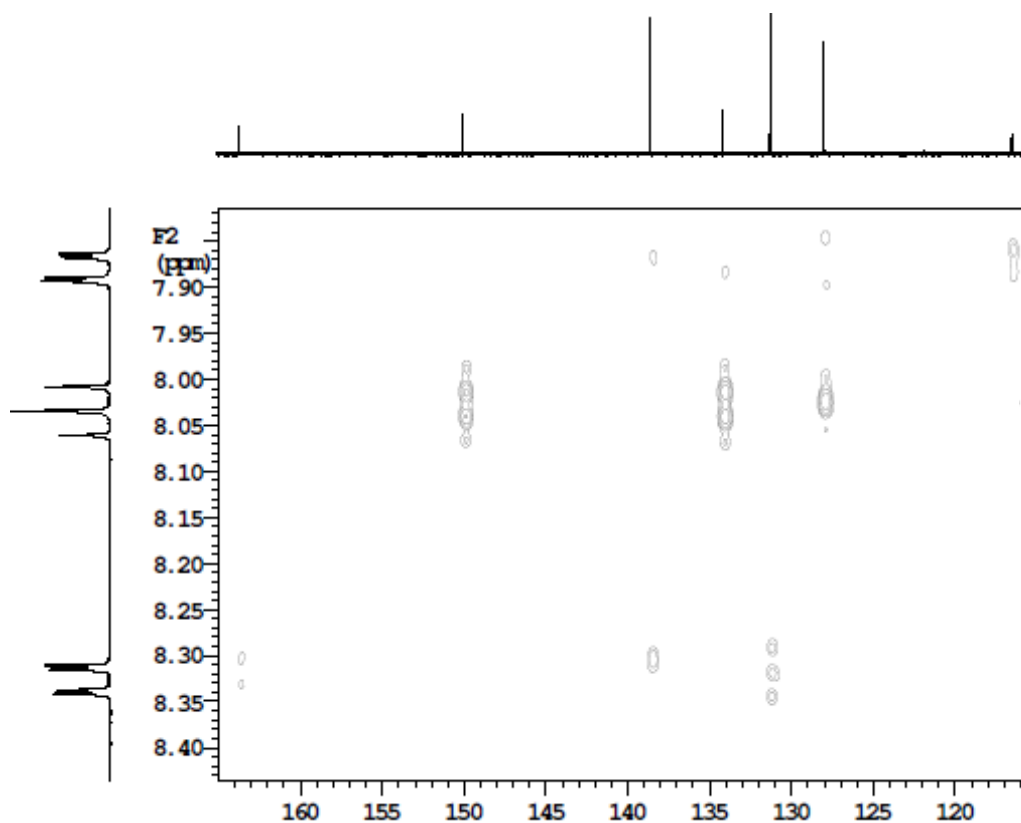


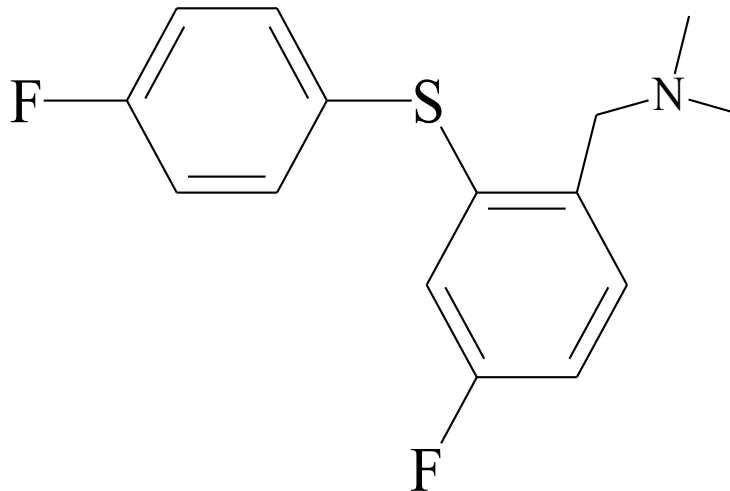
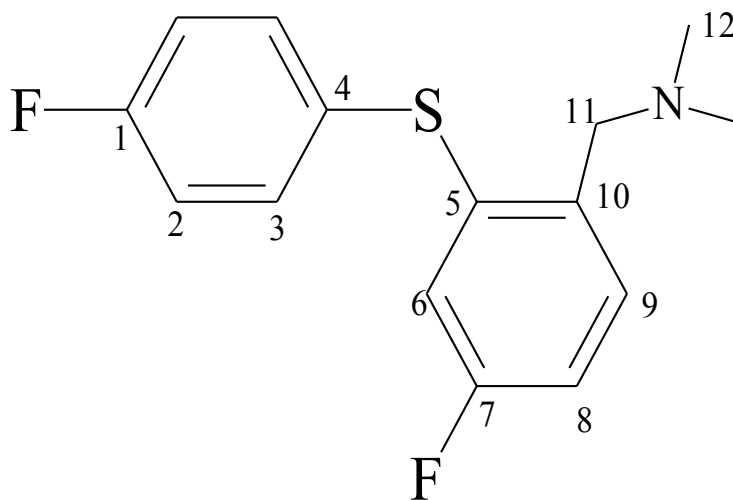




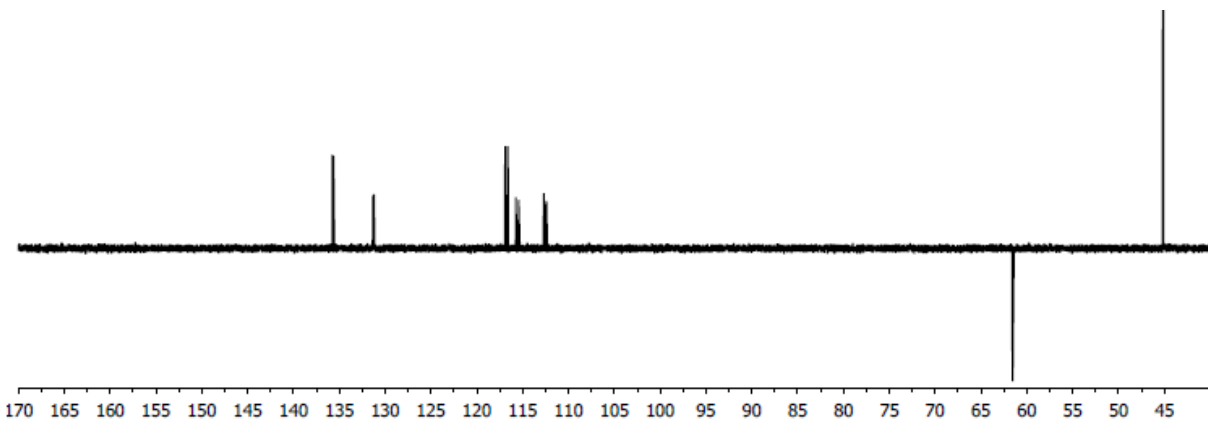
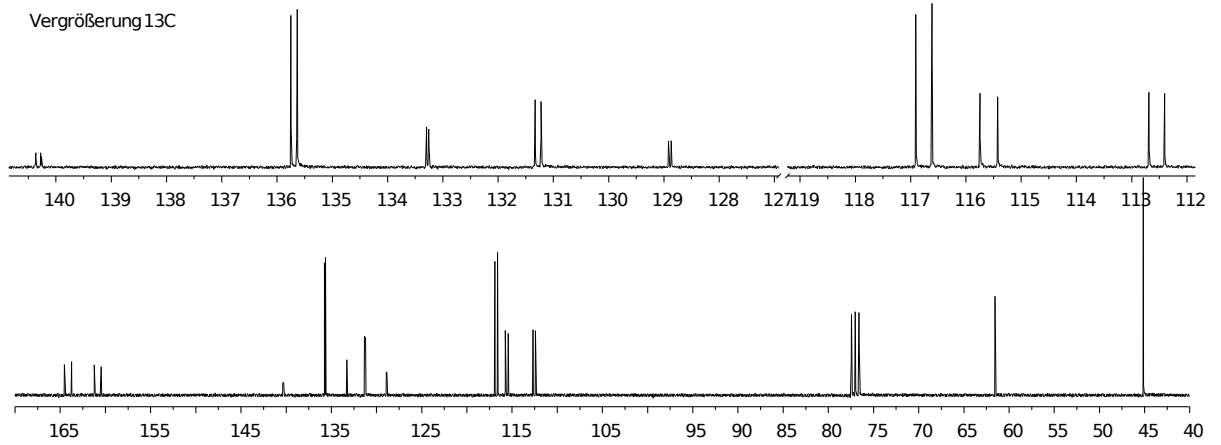
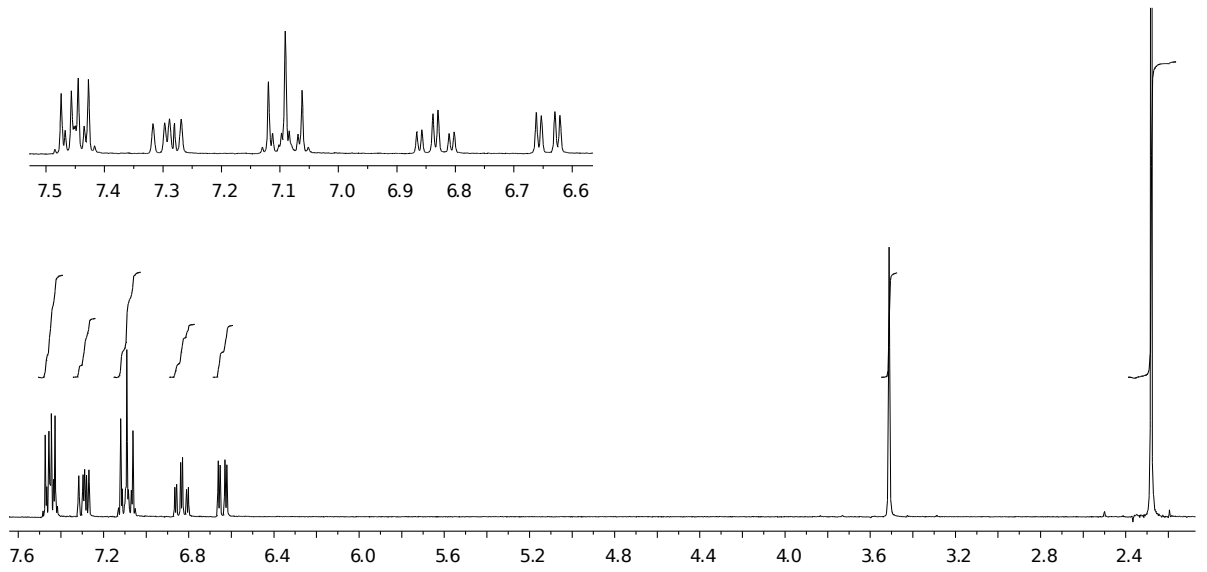


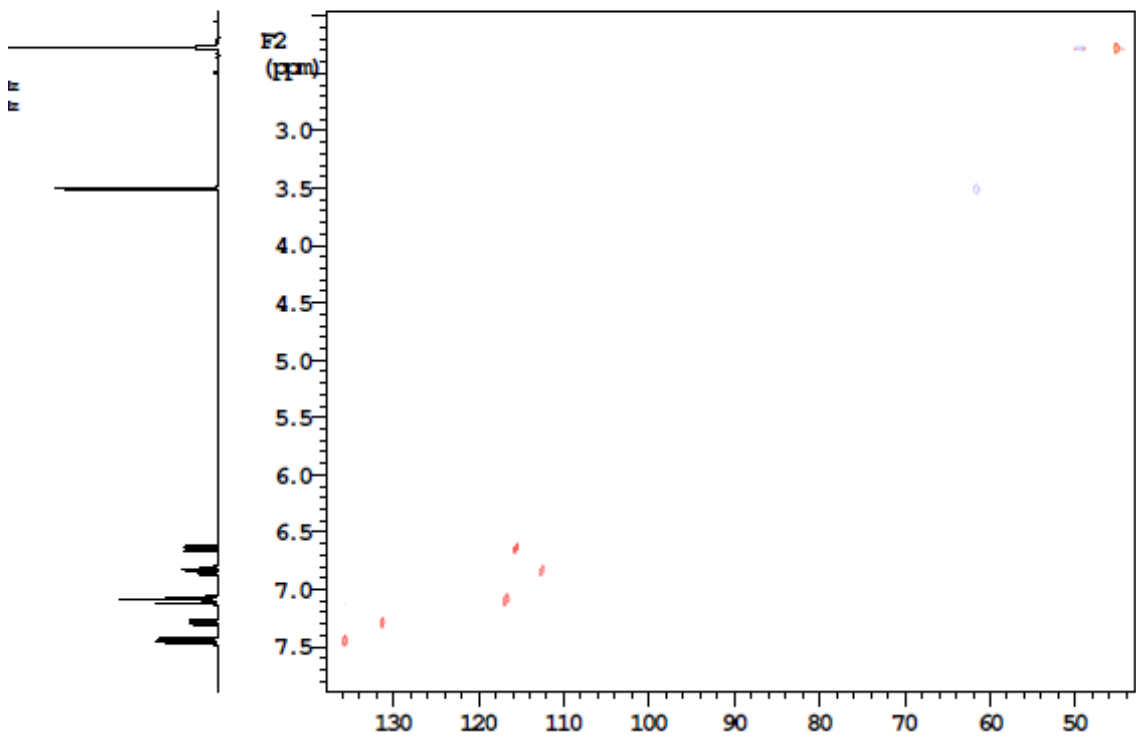
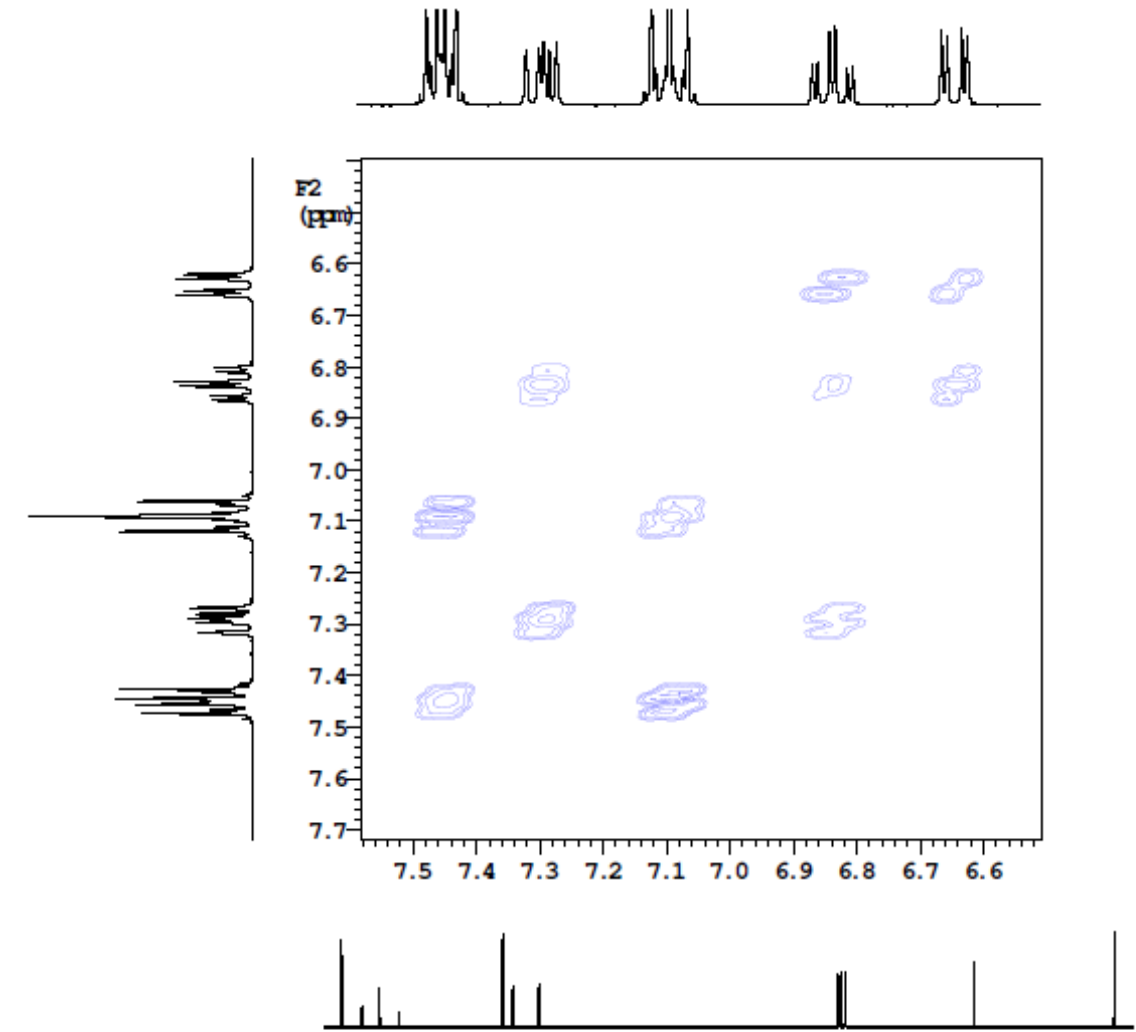


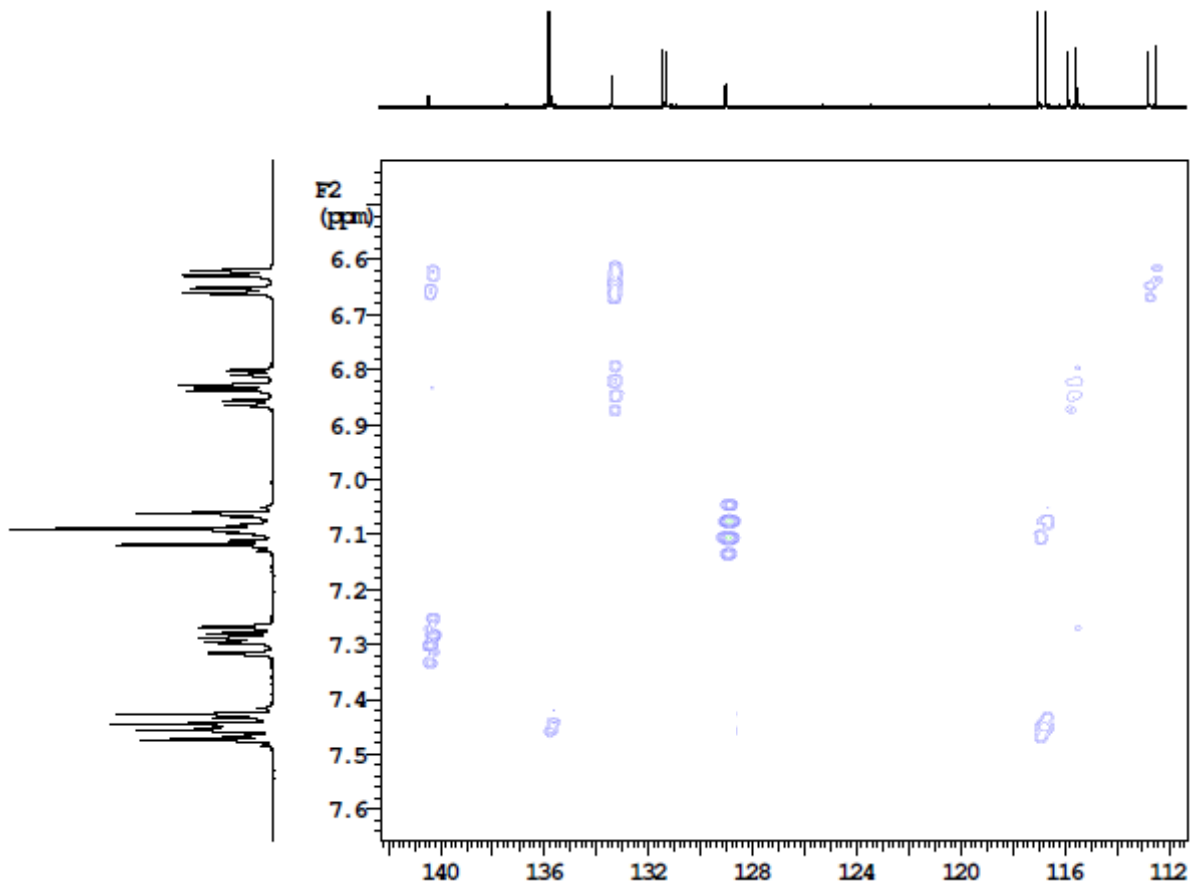
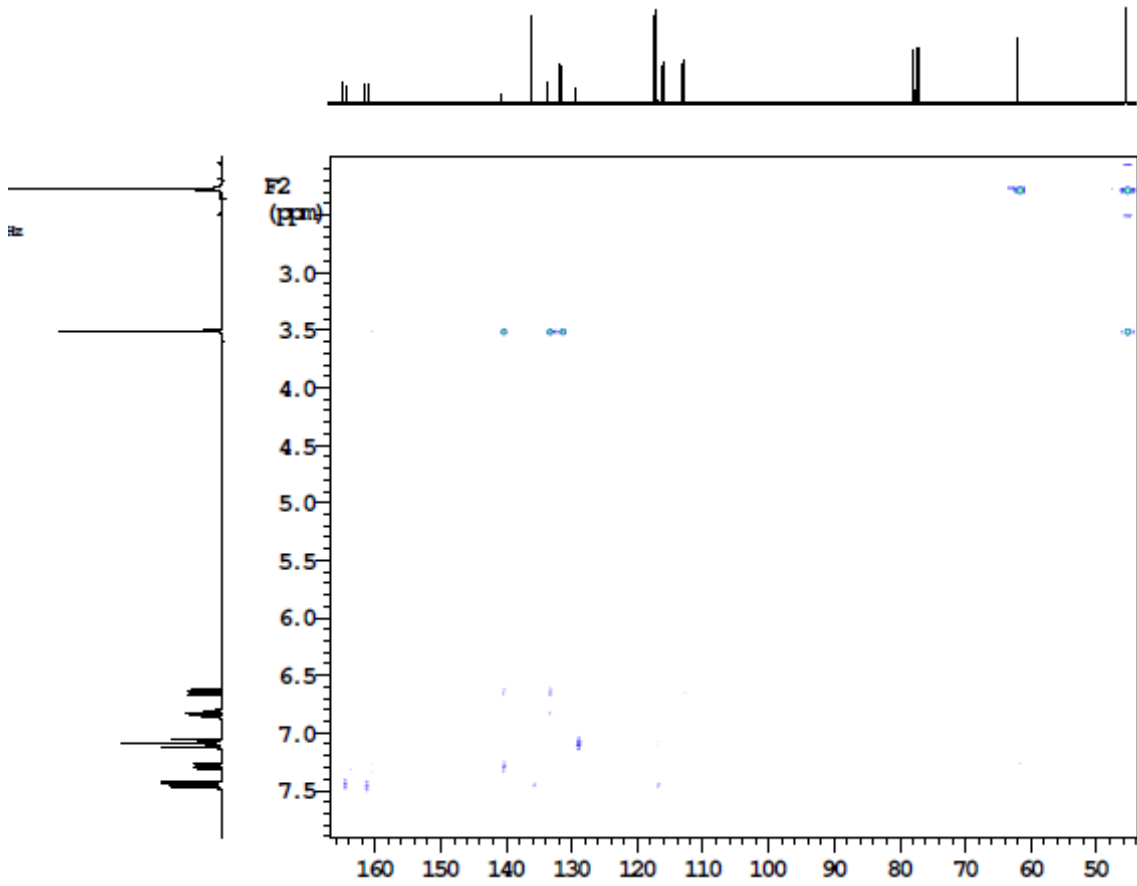


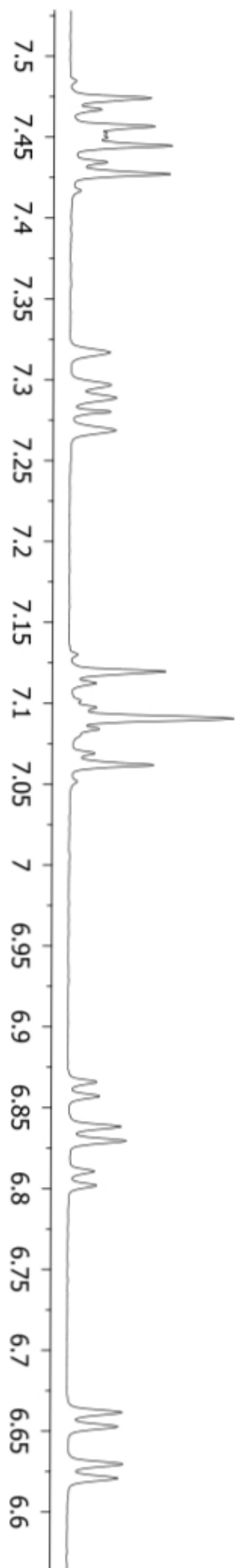
Frage 4: (9 Punkte)

1. Ordnen Sie alle Signale zu.
Für die ^{13}C -Signale tragen Sie obige Zahlen in das ^{13}C -Spektrum ein.
Für die ^1H -Signale tragen Sie wie üblich die Buchstaben in obiger Struktur ein. (6 P)
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die drei Protonen des rechten Aromaten.
(Seite 15). (3 P)



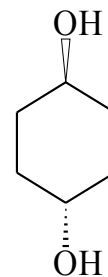
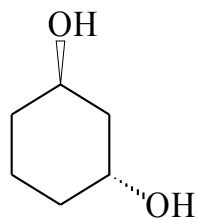
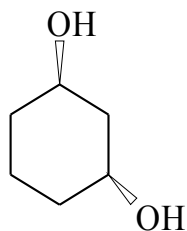
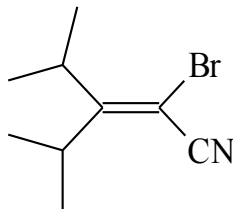
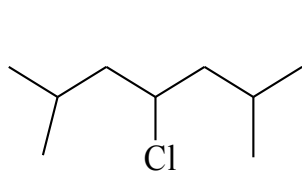






Frage 5: Theorie (10 Punkte)

1. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (5 P)



2. Larmor-Frequenz (3 P)
a) Erklären Sie kurz, was man unter Larmor-Frequenz versteht.

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

die Larmorfrequenz

- ist für unterschiedliche H-Atom in einem Molekül verschieden
 - ist abhängig von der Protonenfrequenz der Maschine (600 MHz, 400 MHz, 300 MHz, 200 MHz)
 - ist für ^1H und ^{13}C bei gleicher Feldstärke gleich
 - hängt von der Konzentration der Probe ab
3. Wenn Sie ein 2-dimensionales Spektrum vor sich haben, auf der einen Achse ein ^1H - auf der 2. Achse ein ^{13}C -Spektrum. Wie können Sie entscheiden, ob es sich um ein HSQC oder HMBC handelt? Ist die Entscheidung eindeutig? Begründen Sie (2 P)