

WS12/13

Name

Matrikelnr.....

Bonuspunkte:

Spektroskopie 2 (NMR) WS 2012/13 Klausur

18.12.2012

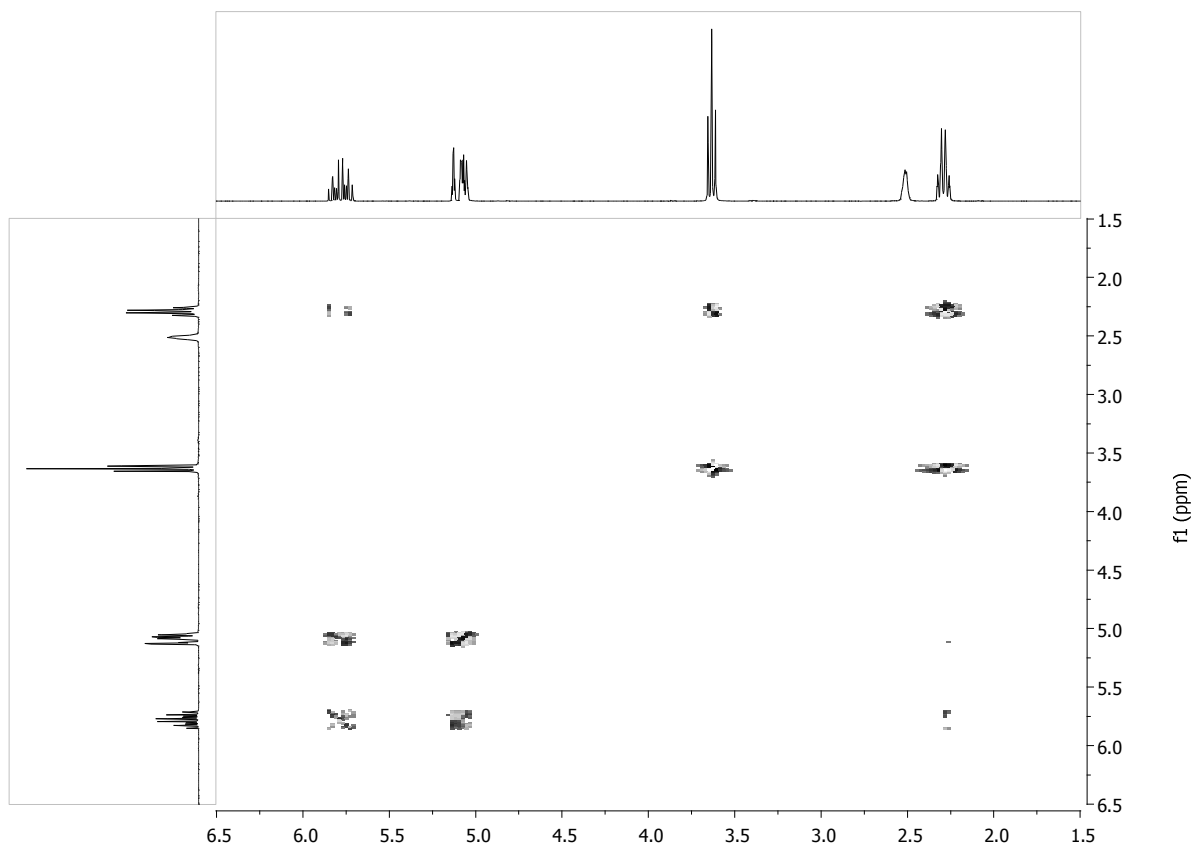
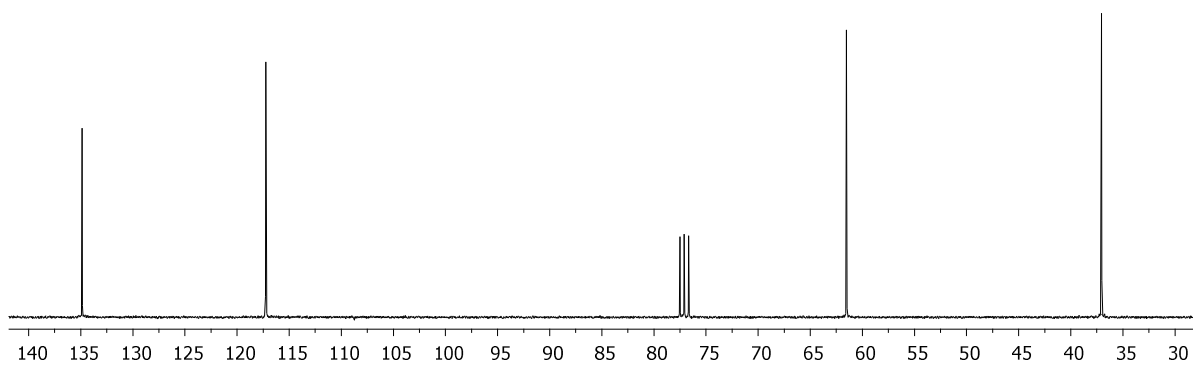
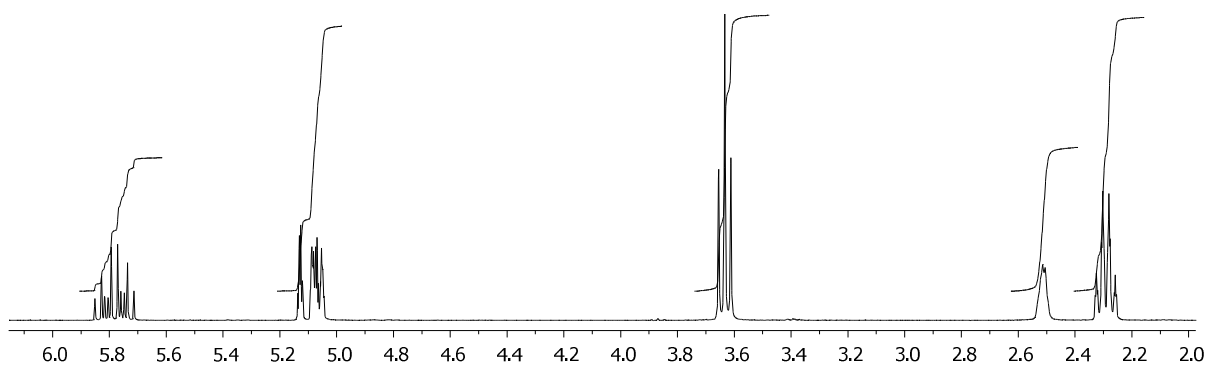
Frage 1: (8 Punkte)

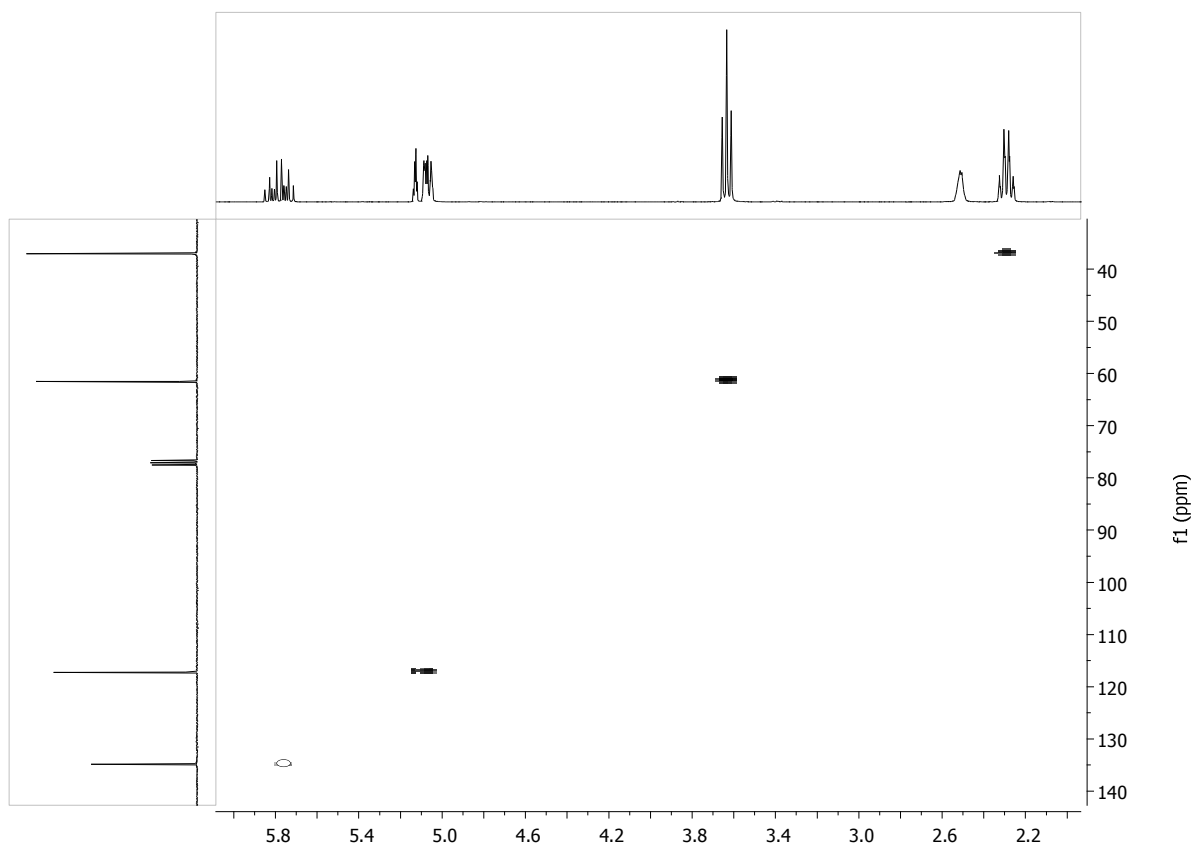
Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C_4H_8O .

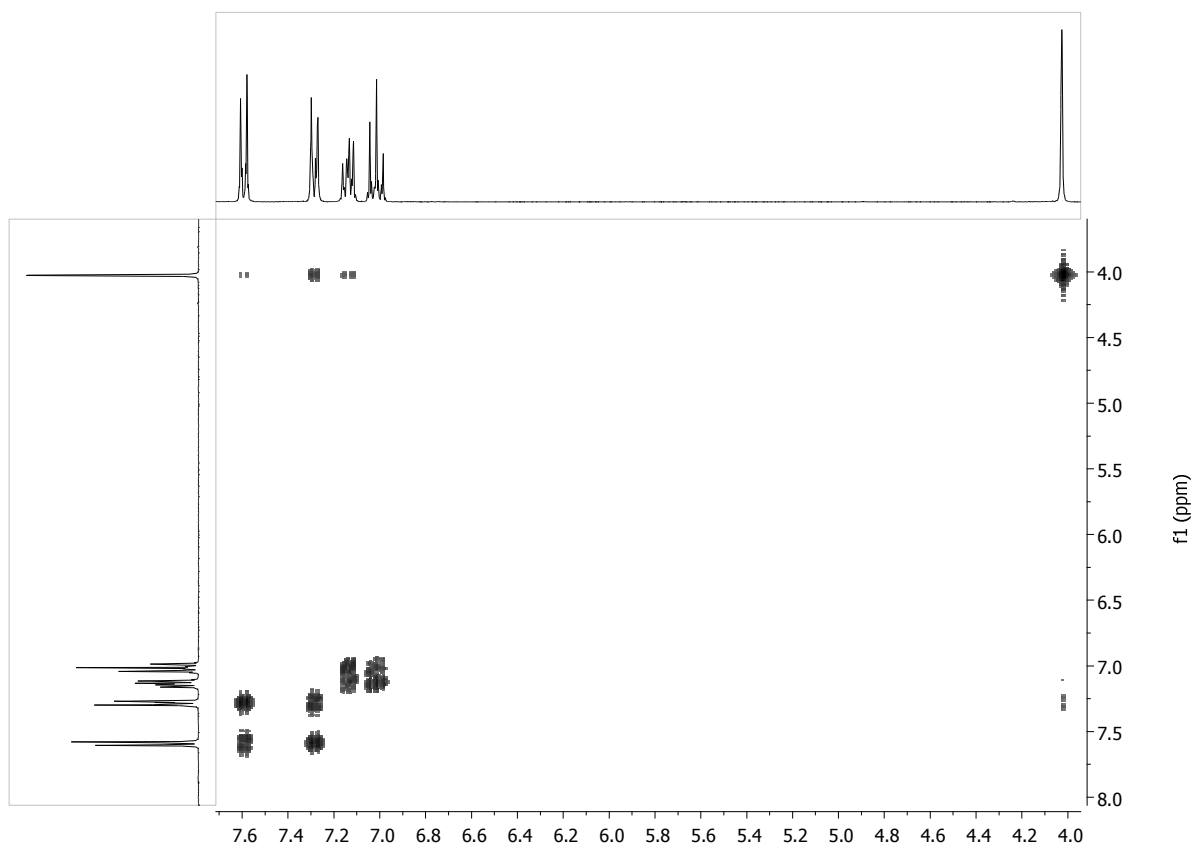
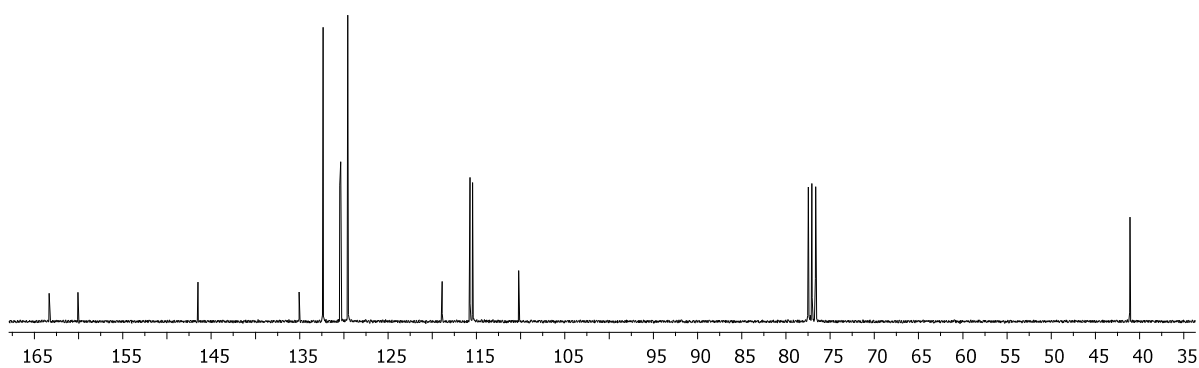
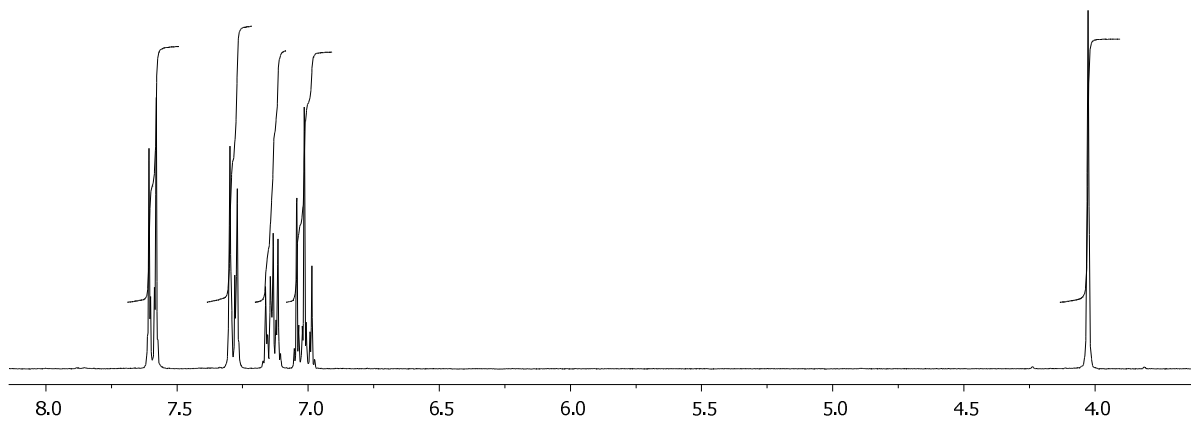
1. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an? (5 P)

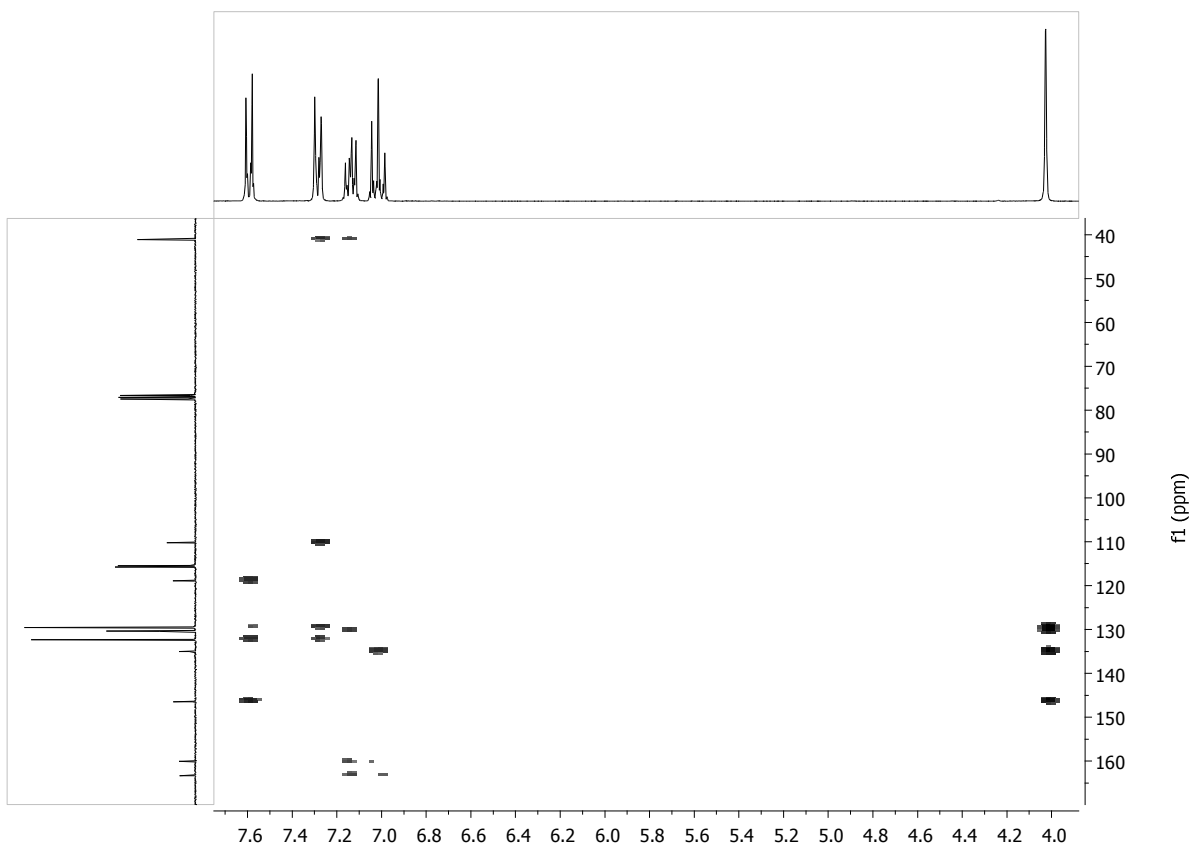
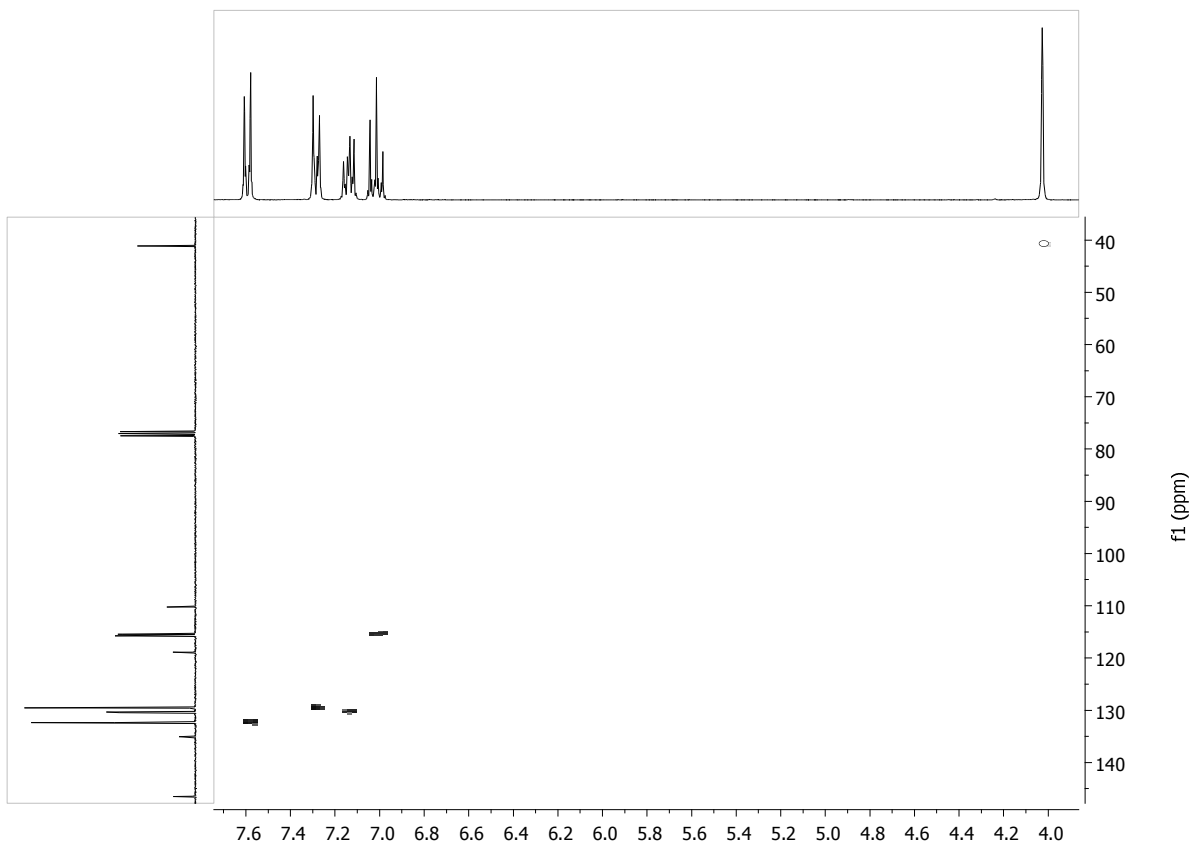
2. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)

3. In welchem Lösungsmittel wurde die Probe gelöst?
Erklären Sie das Aufspaltungsmuster des Lsgmittels im ^{13}C -Spektrum. (2 P)









Frage 3: (15 Punkte)

Auf Seite 8 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C_5H_9I .

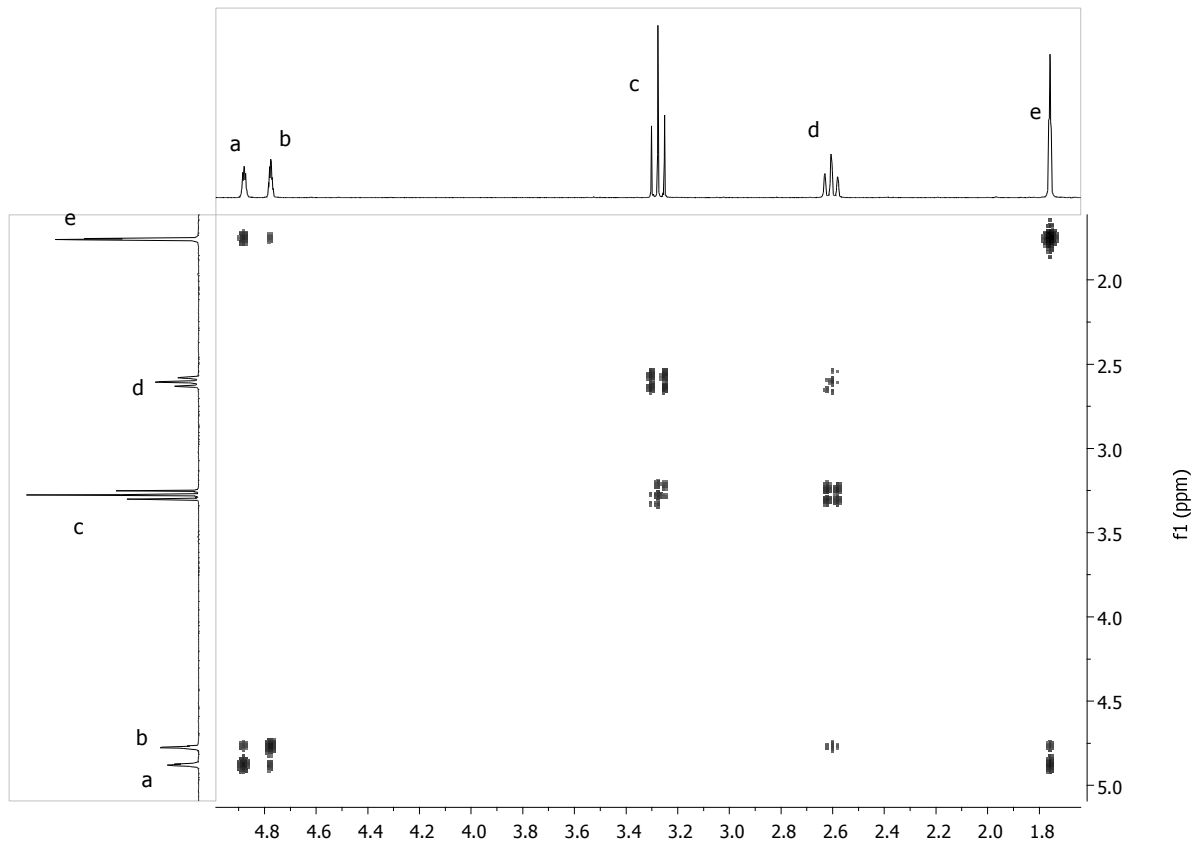
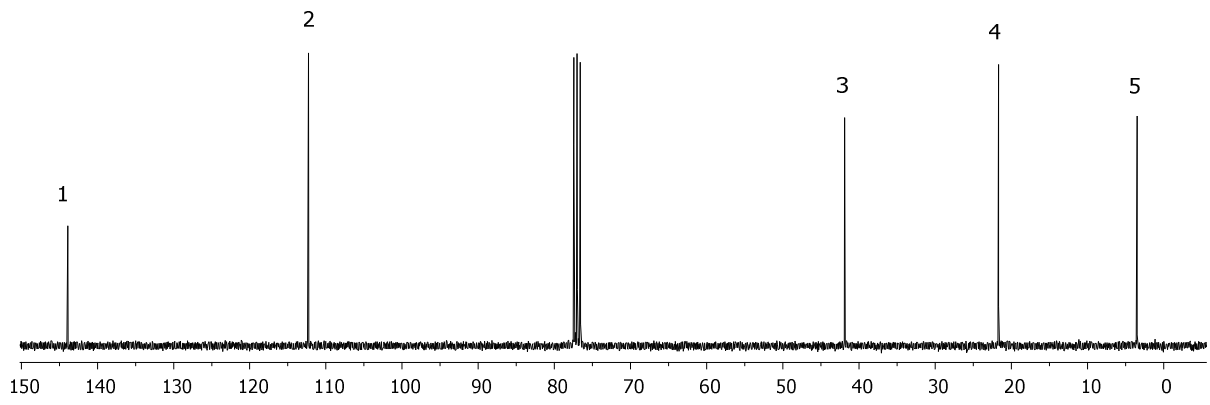
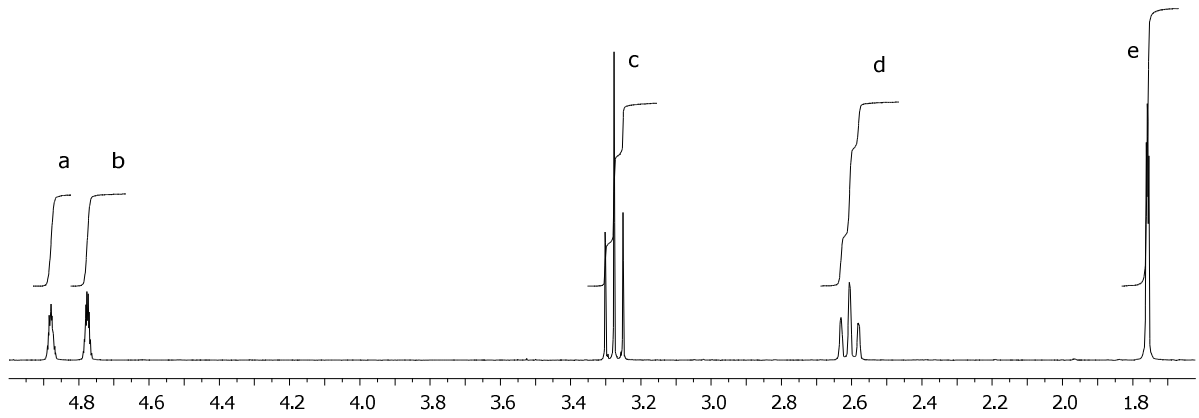
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (5 P)

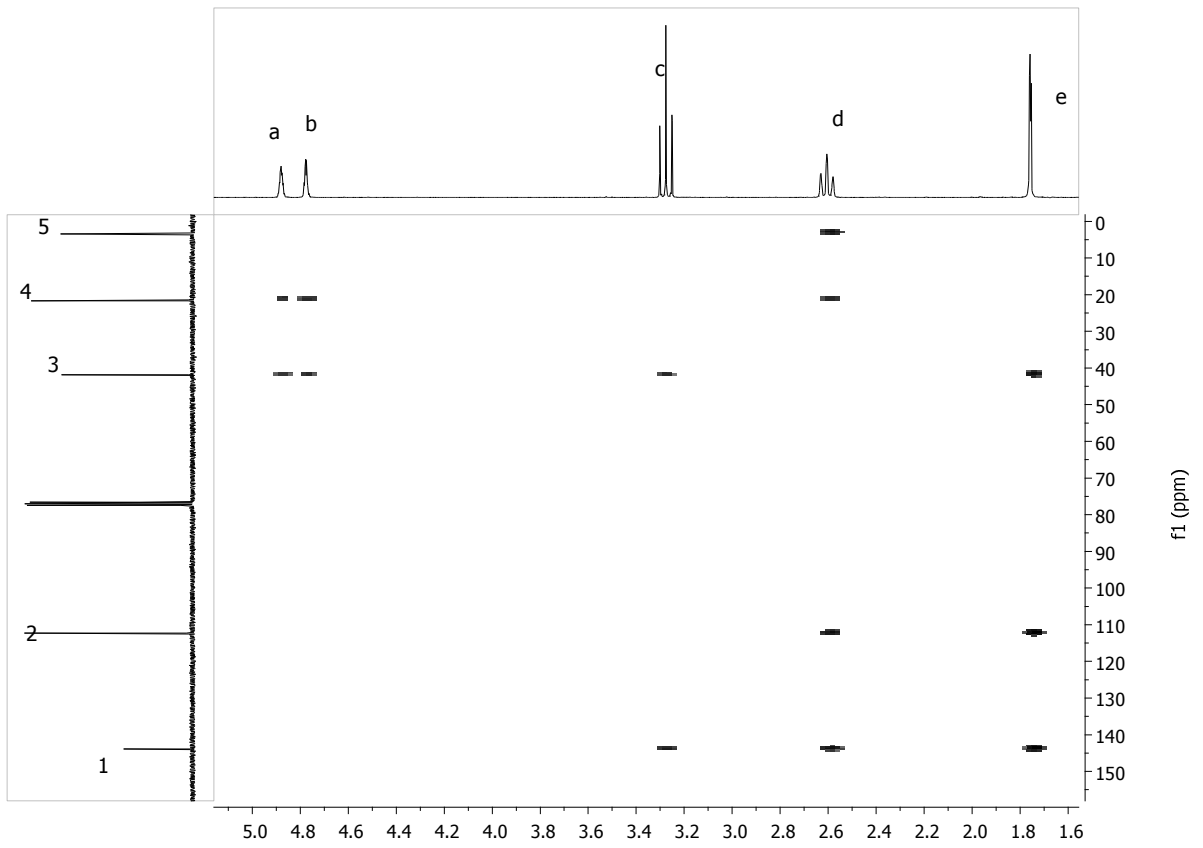
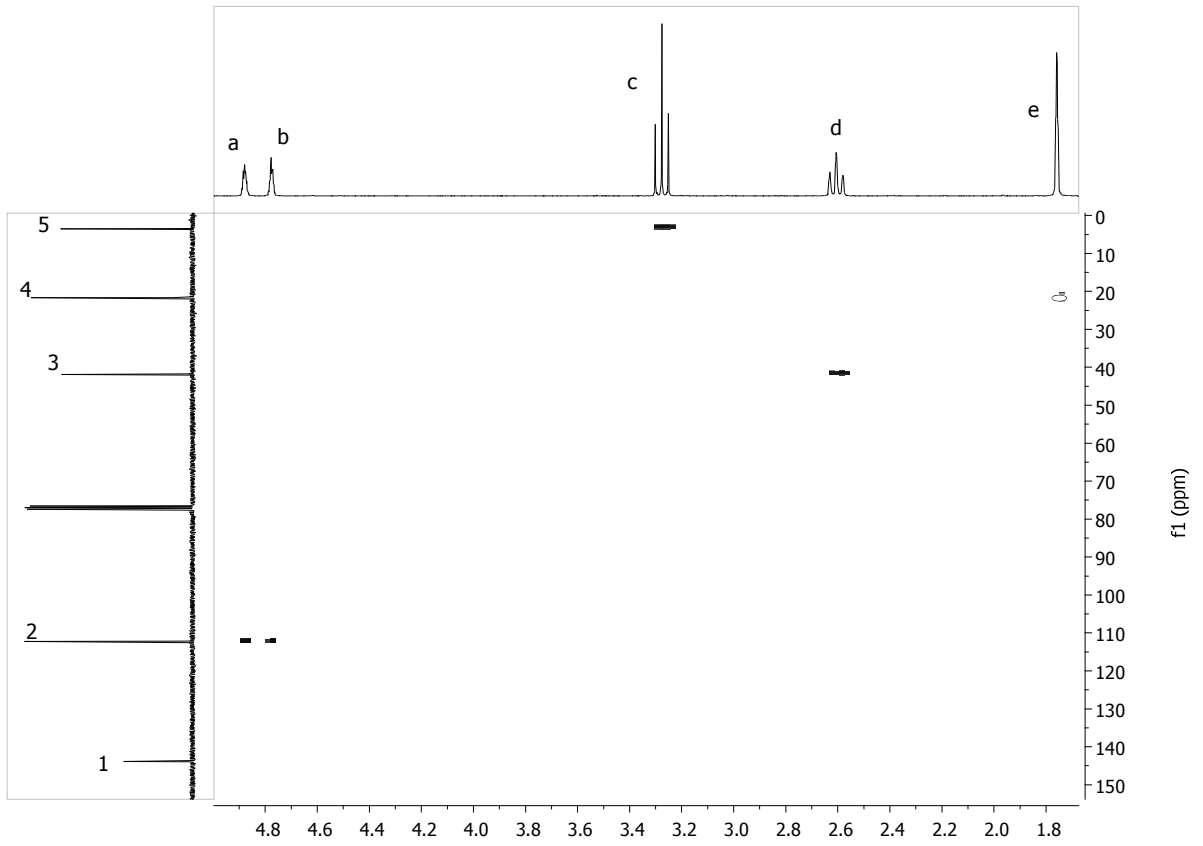
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

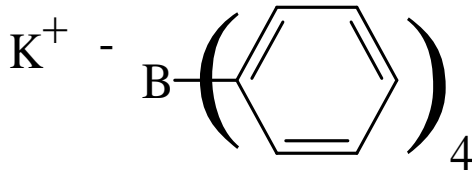
3. Ordnen Sie alle Signale zu. (5 P)

4. Berechnen Sie die Inkremente für C-Atom 1 und 3 (2 P)

5. Warum sind die Signale von Proton c und d unterschiedlich hoch, obwohl sie beide ein Integral von 2 haben? (2 P)

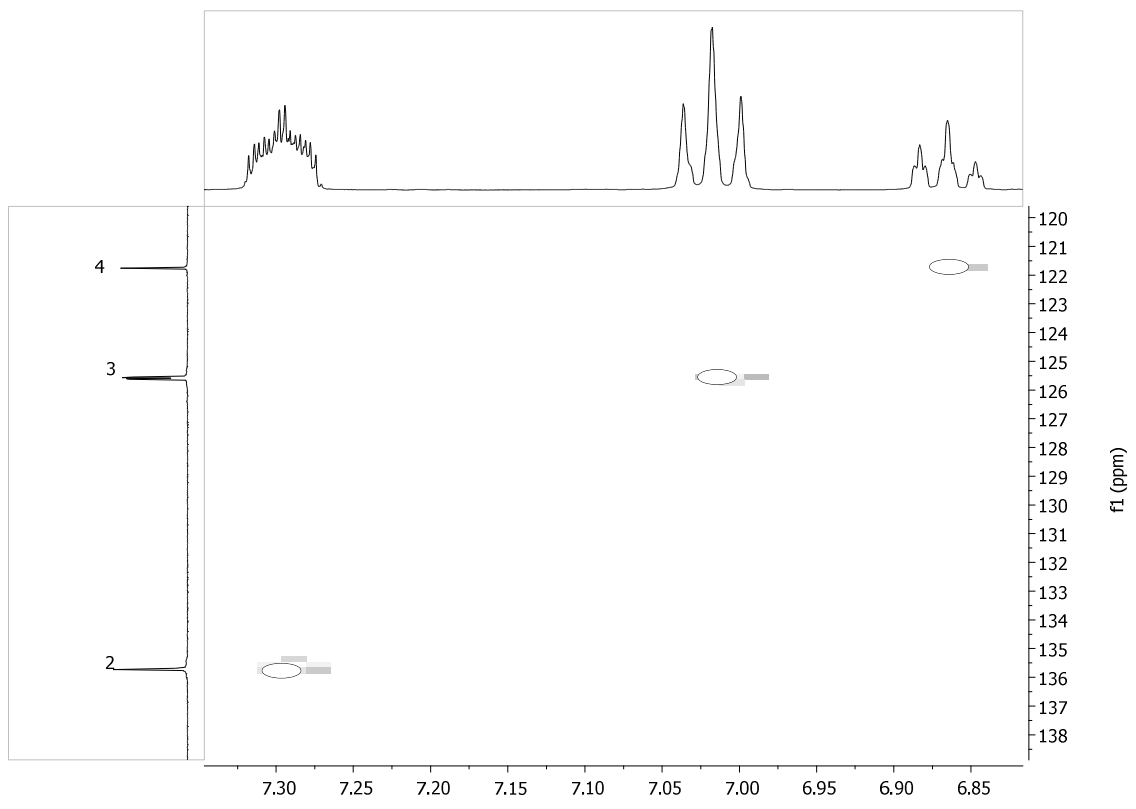
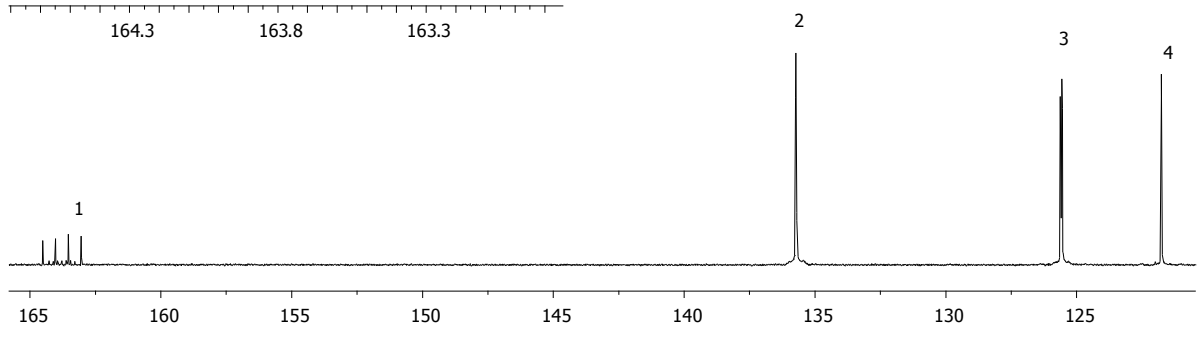
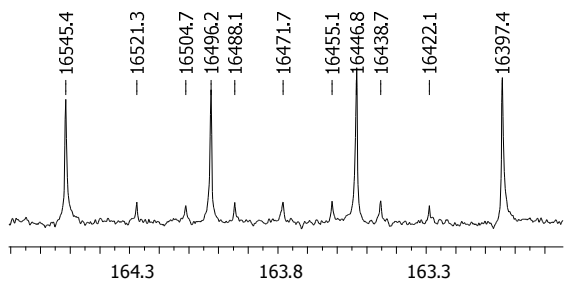
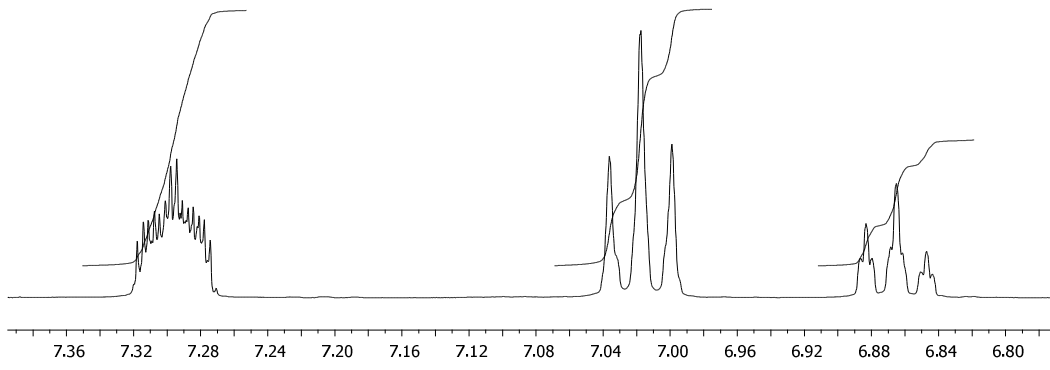




Frage 4: (20 Punkte)
 $^{10}\text{B}: I = 3 \quad (20 \%)$
 $^{11}\text{B}: I = 3/2 \quad (80 \%)$
 $^2J_{\text{BC}}: \text{ca. } 0 \text{ Hz}$
 $^3J_{\text{BC}}: \text{ca. } 2 \text{ Hz}$

1. Ordnen Sie die C-Atome zu. (4 P)
2. Erklären Sie die Aufspaltung von C_1 . (4 P)
3. Welche Kopplungskonstante(n) können Sie aus diesem Signal rauslesen?
Bestimmen Sie diese Konstanten. (2 P)
4. Auf welchem Gerät wurde das C-Spektrum aufgenommen? (300/400/600 MHz) (1 P)
5. Kann man von Bor ein Spektrum messen (mit Begründung) (1 P)
6. Was bedeutet die Prozentzahl in Klammern? Wie könnte man sie in einem NMR-Spektrum genauer bestimmen
 $^{10}\text{B}: I = 3 \quad (20 \%)$
 $^{11}\text{B}: I = 3/2 \quad (80 \%)$ (2 P)

7. Wie sehen die Bor-Spektren aus? (Nur Aufspaltung!) (4 P)
- a. ^{10}B -Spektrum (protonen-entkoppelt)
 - b. ^{10}B -Spektrum (protonen-gekoppelt)
 - c. ^{11}B -Spektrum (protonen-entkoppelt)
 - d. ^{11}B -Spektrum (protonen-gekoppelt)
8. Wie ist das C_2 und C_3 –Atom (^{13}C , protonen-entkoppelt) aufgespalten? Beachten Sie die Kopplungskonstanten oben rechts (2 P)

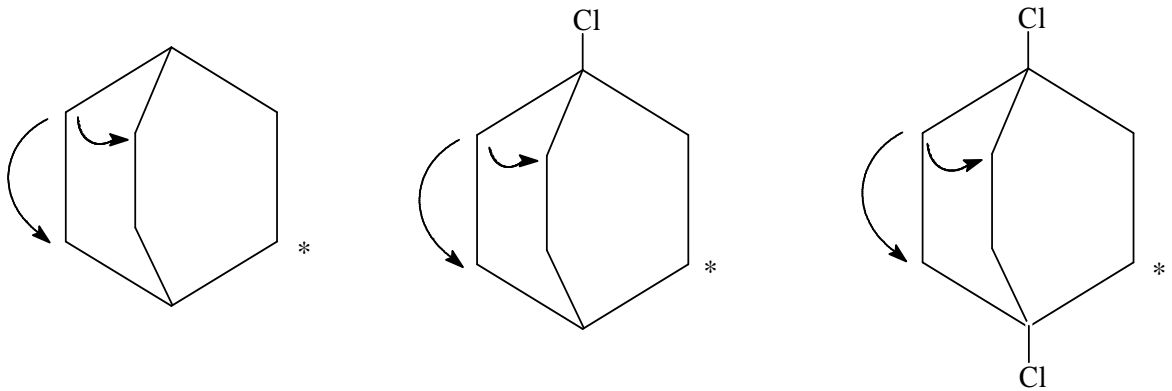


Frage 5: Theorie (18 Punkte)

1. Bestimmen Sie, ob die Protonen der mit * gekennzeichneten CH₂-Gruppen homotop, enantiotop oder diastereotop sind.
Bestimmen Sie, ob die mit Pfeil gekennzeichneten Gruppen homotop, enantiotop oder diastereotop sind. (6 P)

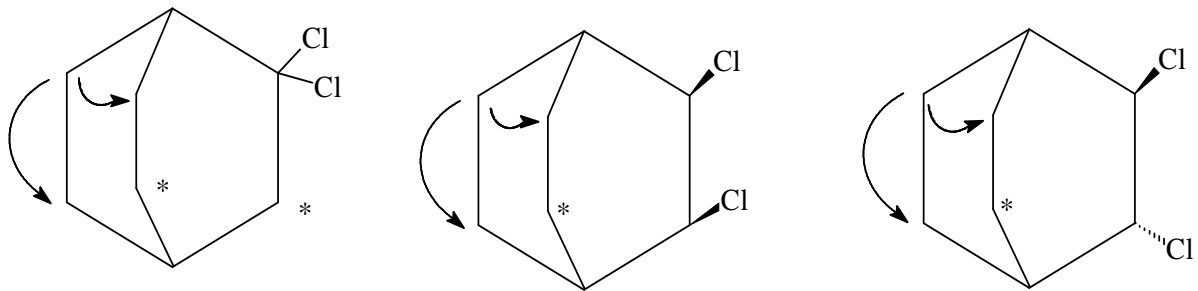
Wieviele Signale erwarten Sie im

- a. ¹H-Spektrum (3 P)
b. ¹³C-Spektrum (3 P)



¹H-Signale:

¹³C-Signale:



¹H-Signale:

¹³C-Signale:

2. Zeichnen Sie ein Spektrum für ein ABC-Spinsystem.
Geben Sie ein Beispiel an und beschriften Sie darin die Protonen A, B, C.
- a) mit $J_{AB}>0$, $J_{AC}>0$, $J_{BC}>0$ (2 P)
- b) mit $J_{AB}>0$, $J_{AC}>0$, $J_{BC}=0$ (2 P)
- c) mit $J_{AB}>0$, $J_{AC}=0$, $J_{BC}=0$ (2 P)