

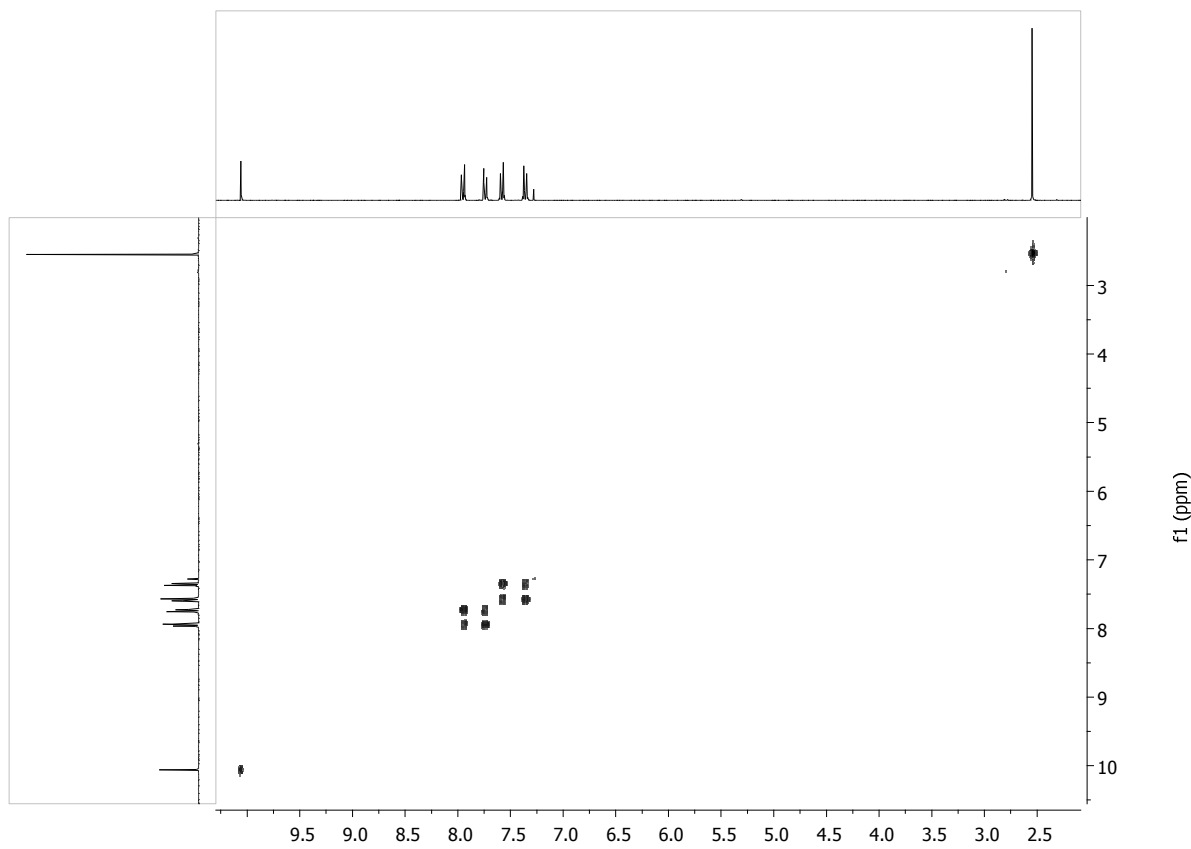
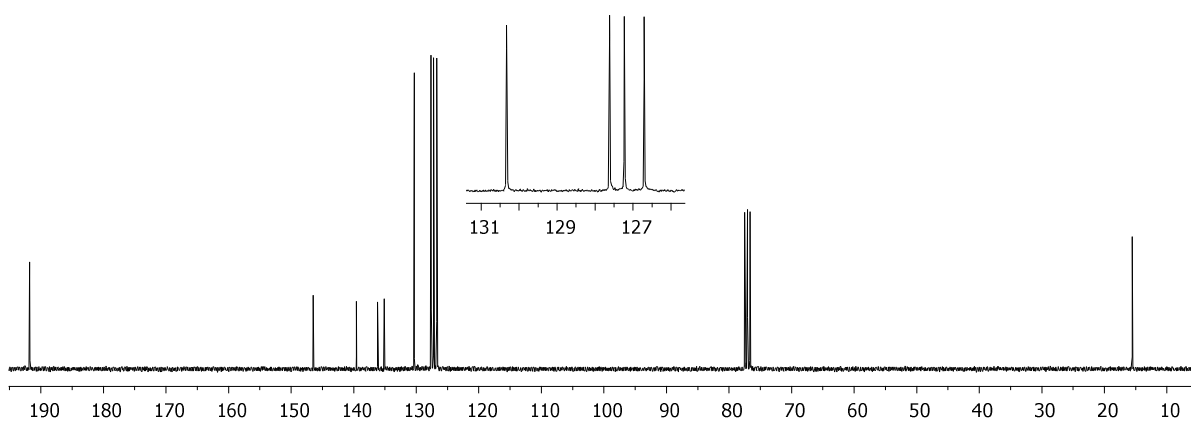
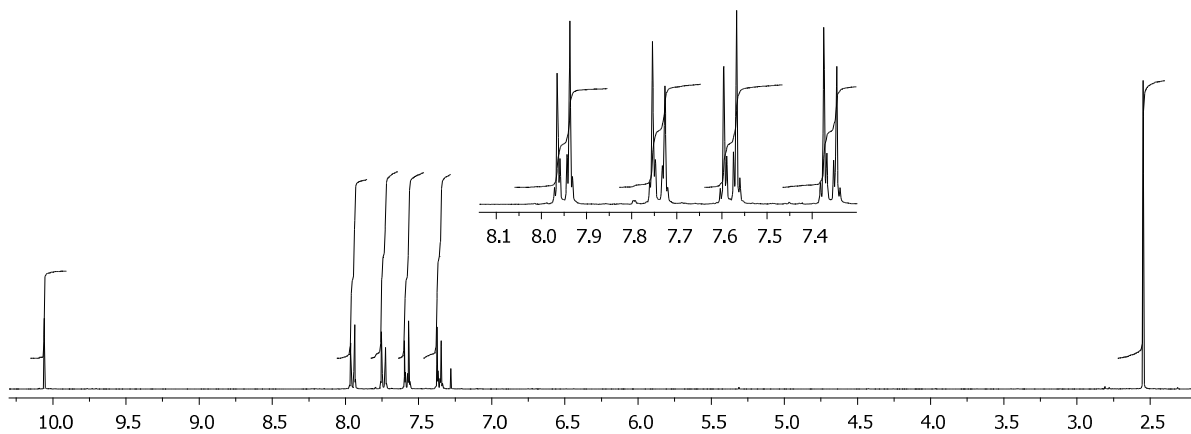
**Spektroskopie II (NMR)  
SS 2013 Klausur**

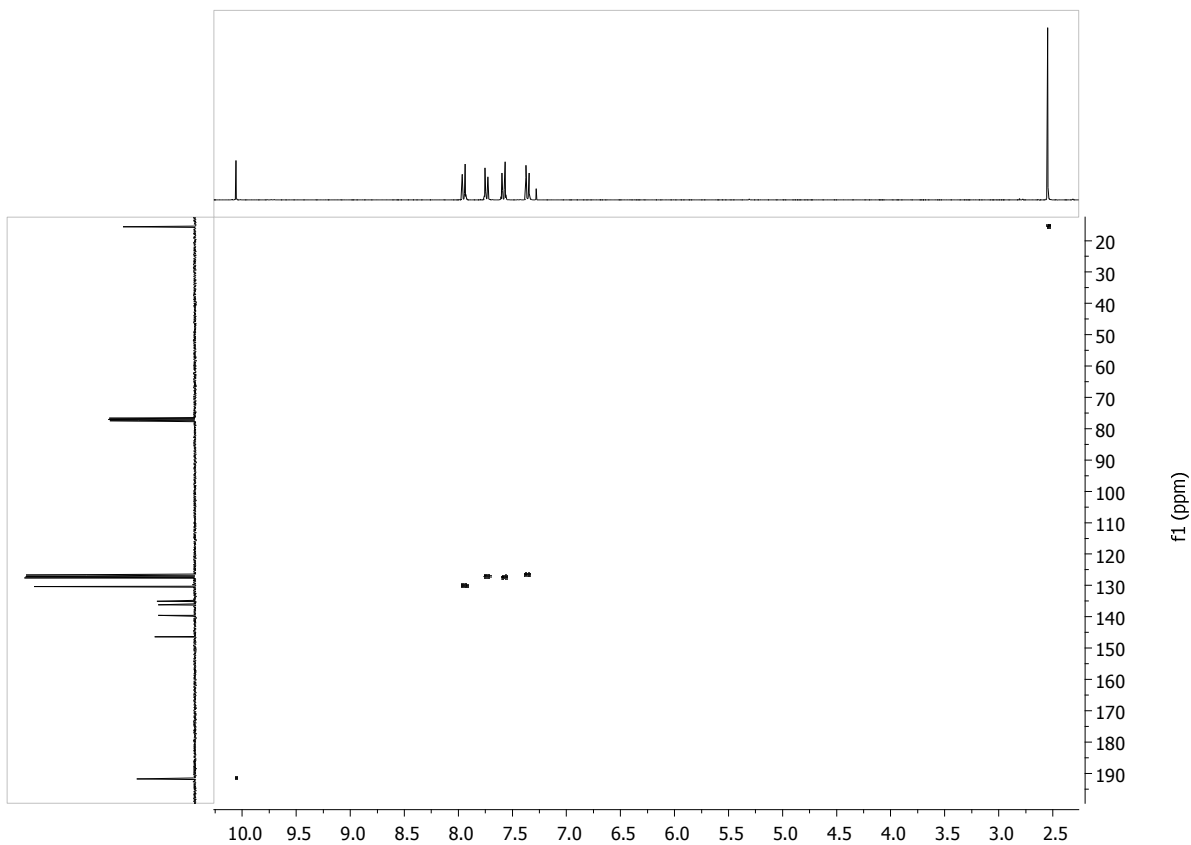
5.8.2013

**Frage 1: (9 Punkte)**

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{14}H_{12}SO$ .

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des  $^1H$ - und  $^{13}C$ -Spektren? (5 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
3. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
4. Die Substanz wurde in  $CDCl_3$  (99,9%) gelöst. Markieren Sie die Lösungsmittelsignale und erklären Sie die Aufspaltung. (2 P)



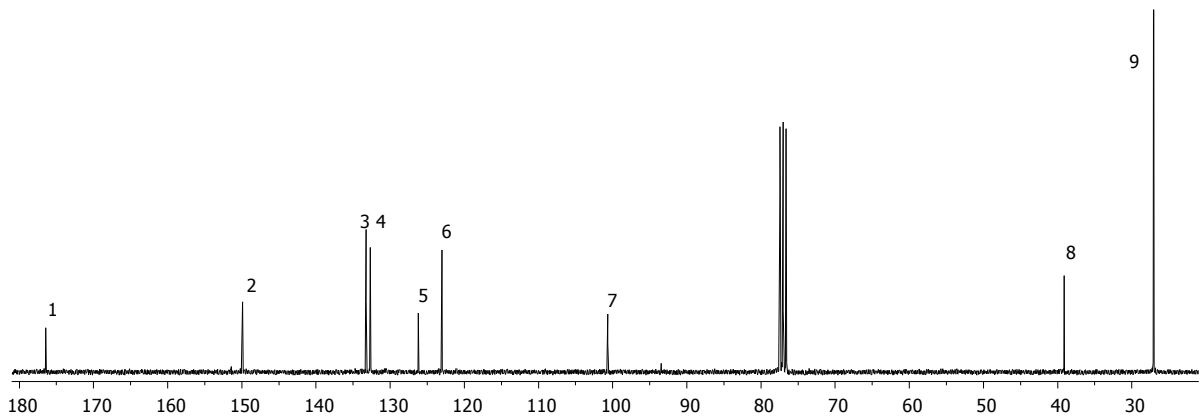
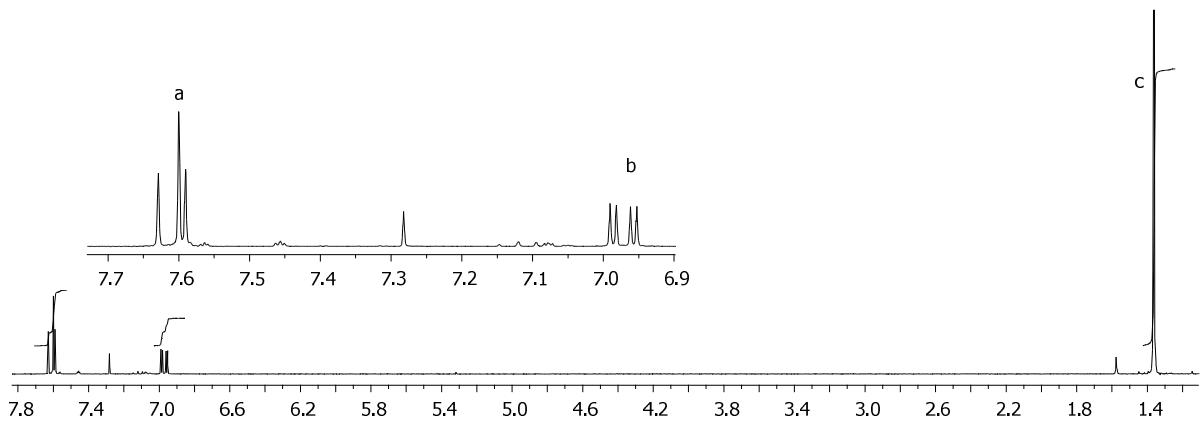
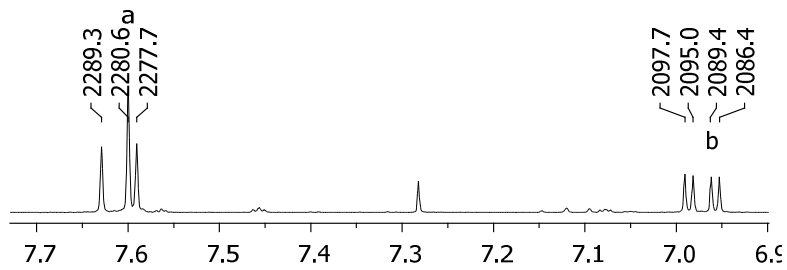


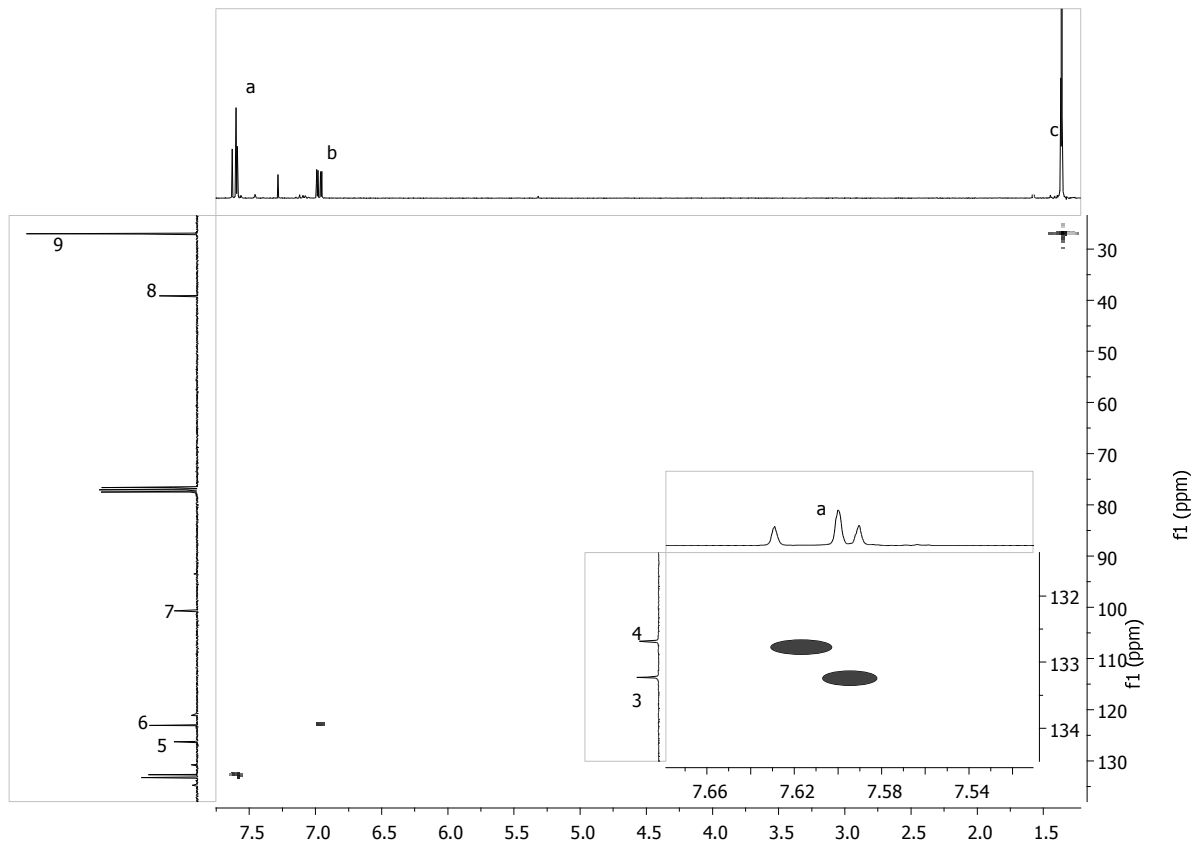
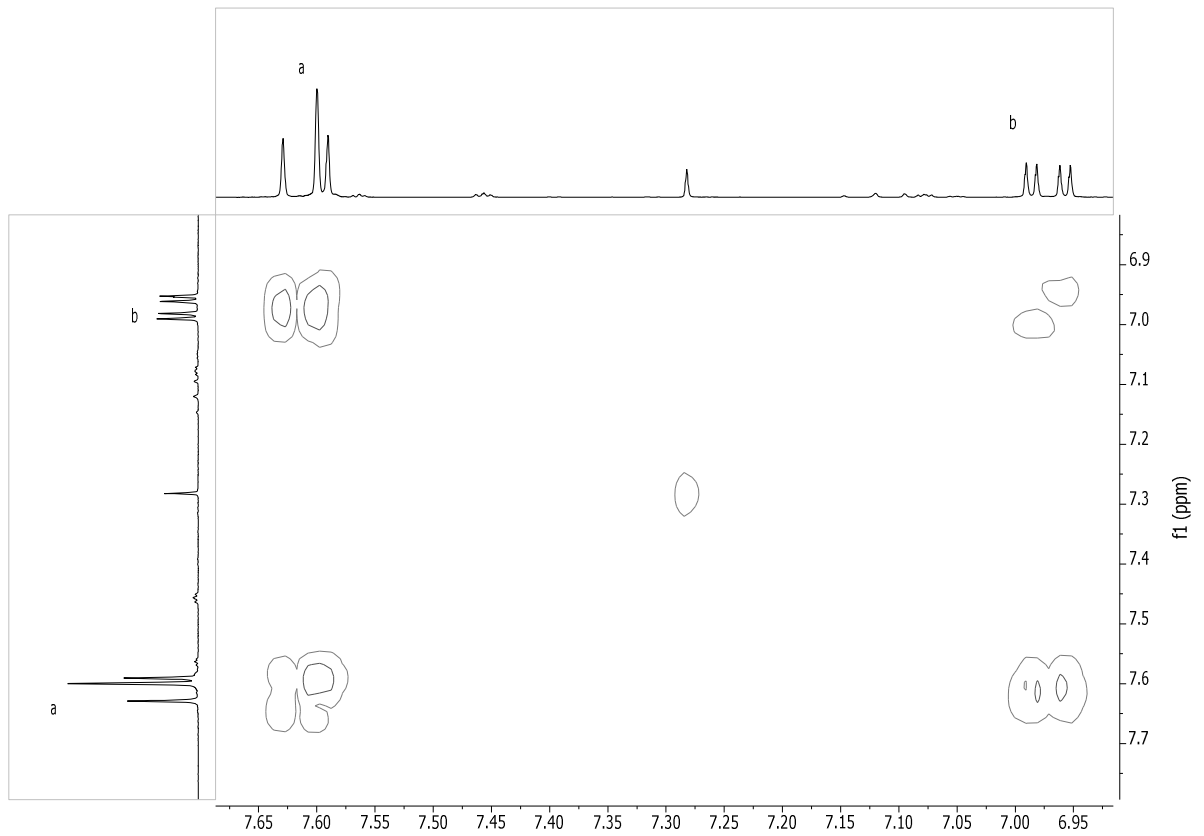
**Frage 2: (22 Punkte)**

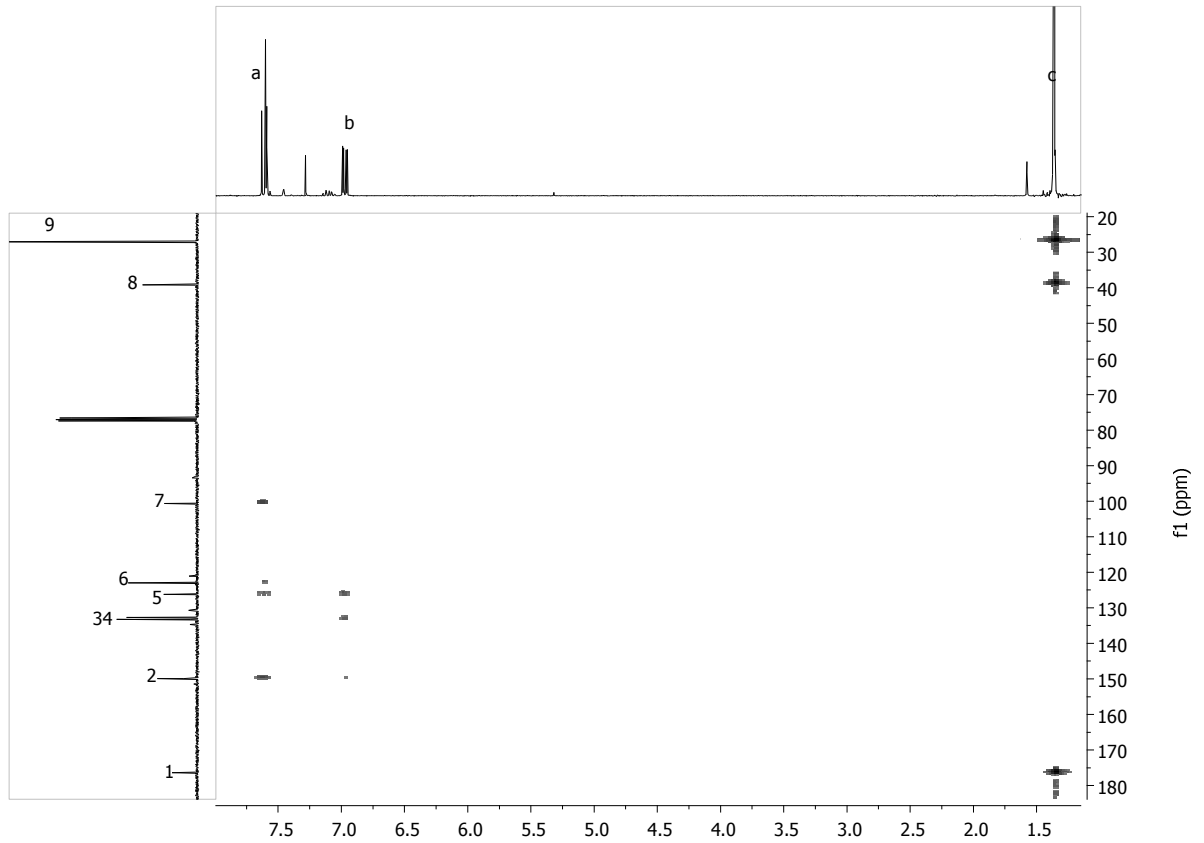
Auf den nächsten Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{11}H_{12}O_2BrI$  .

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu.
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
4. Ordnen Sie alle Signale zu. (9 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
5. Zeichnen Sie die wichtigen Kopplungen aus dem HMBC, die die Anordnung der Substituenten beweisen, in Ihr Molekül ein.(mit Tabelle: z. B.  $1 - a \quad 3J_{CH}$ ) Event. brauchen Sie zur genauen Strukturbestimmung auch die Inkrementen-Rechnung. Wenn ja, dann schreiben Sie die Rechnung zum Beweis Ihrer Struktur mit auf. (5 P)

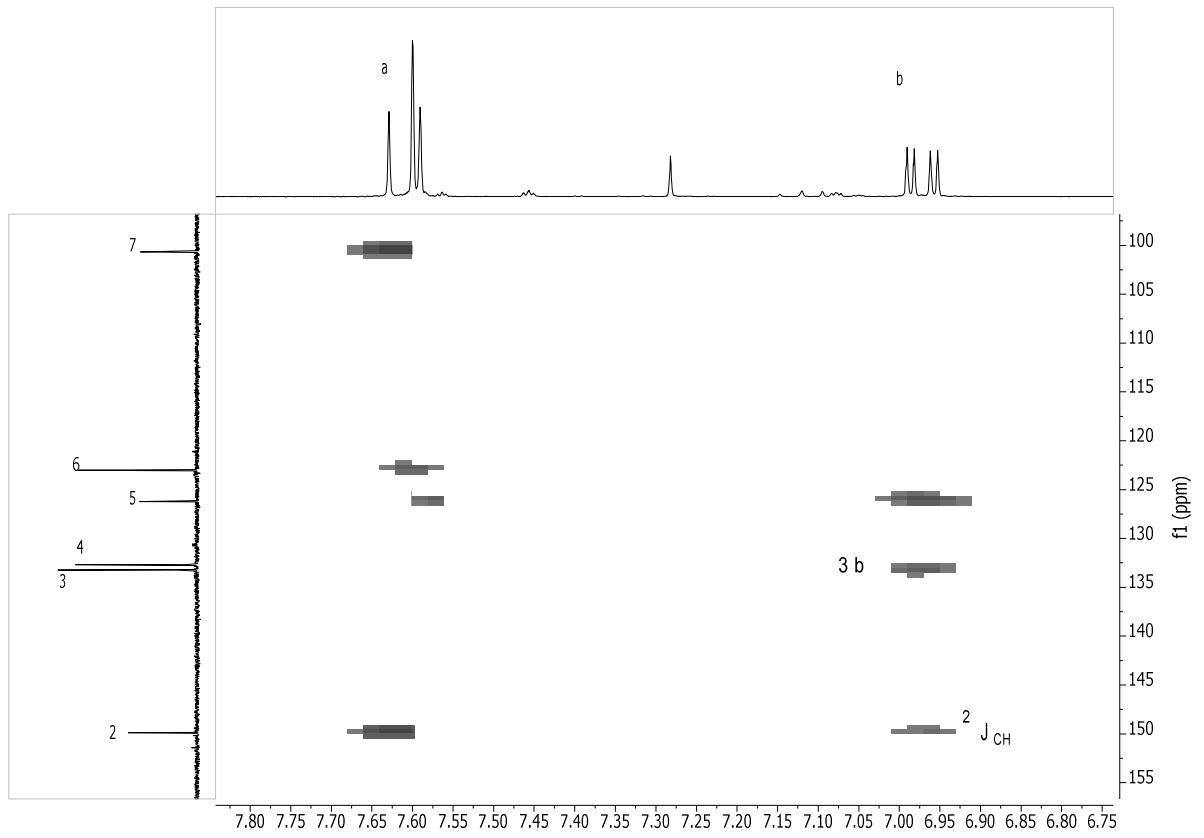
6. Erklären Sie die Aufspaltung die aromatischen Protonen, indem Sie einen Splittingschlüssel incl. den Kopplungskonstanten über das Spektrum zeichnen. (1Hz = 1mm) (3 P)

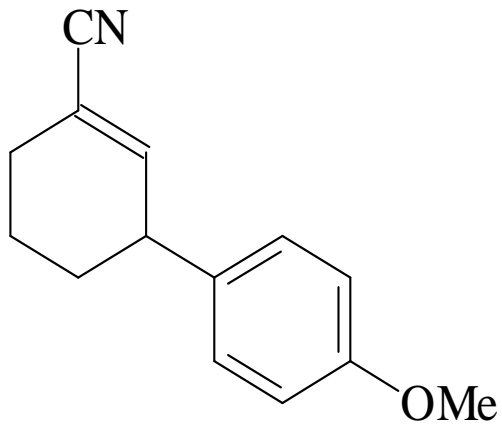






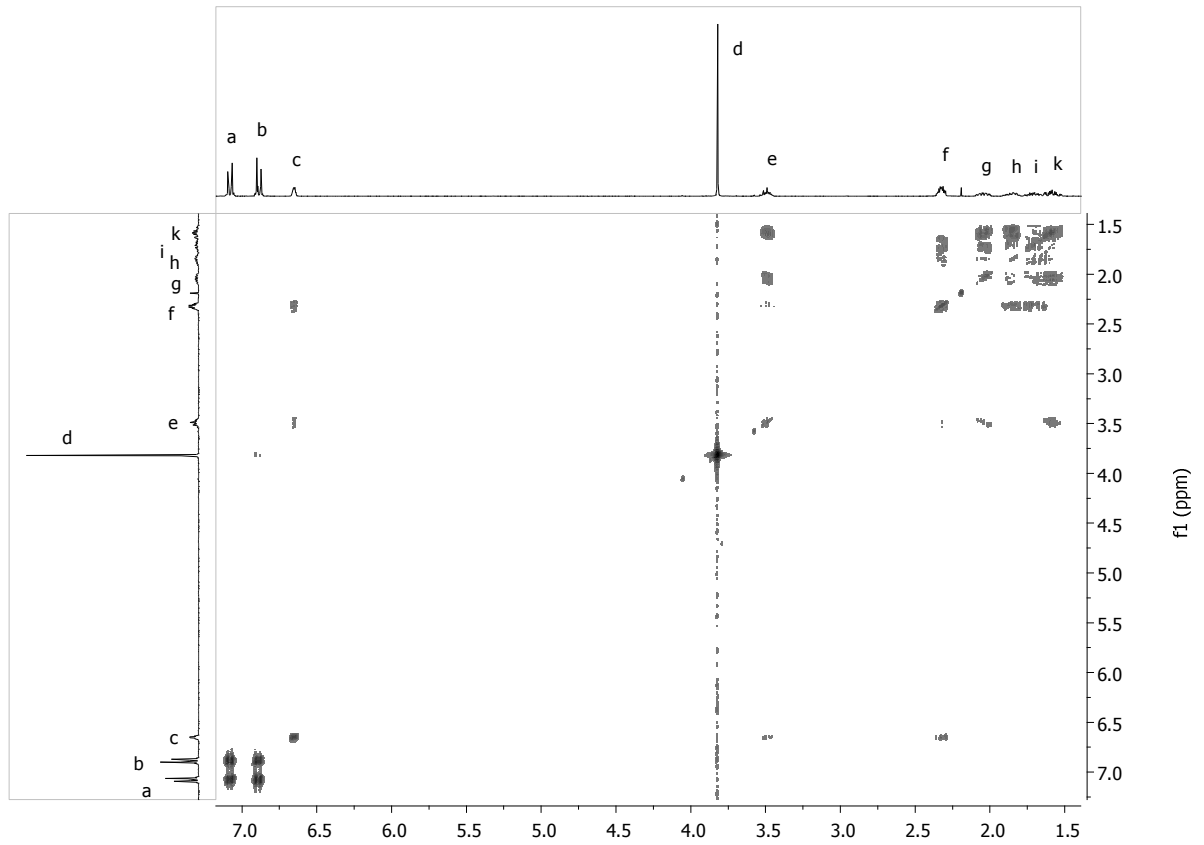
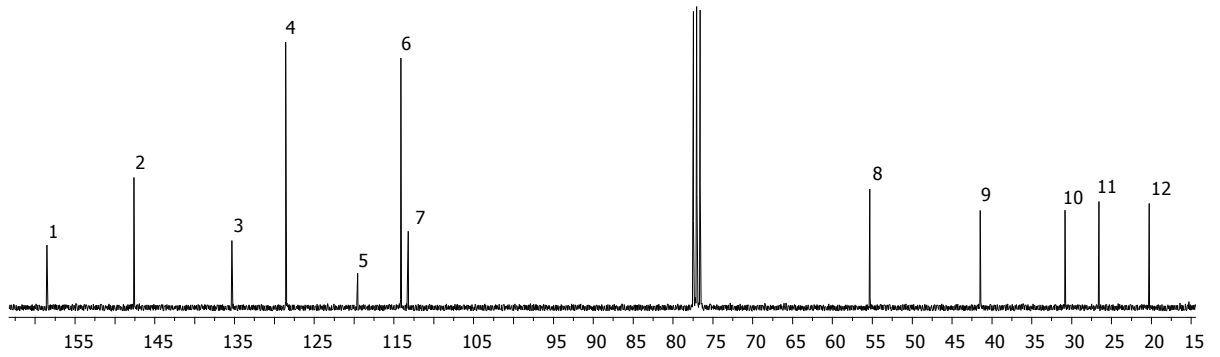
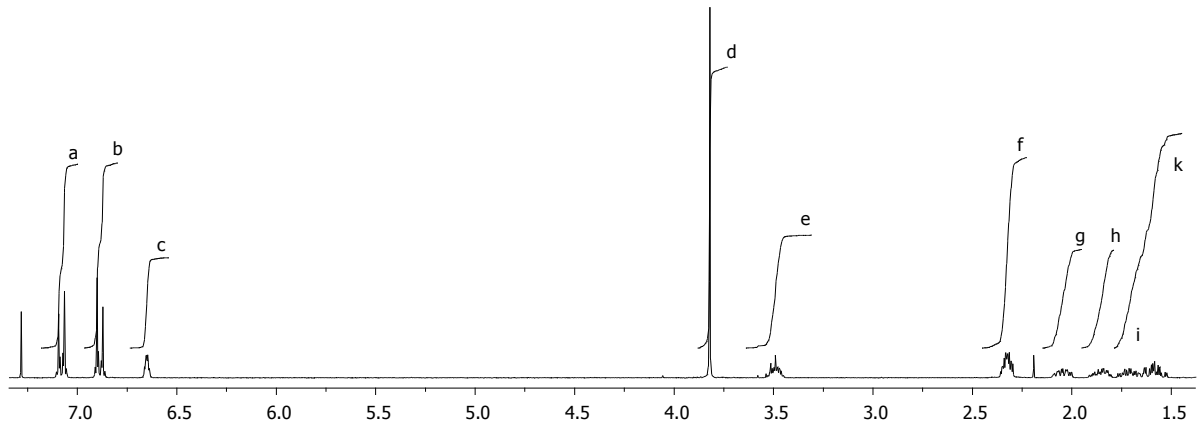
Vergößerung unten

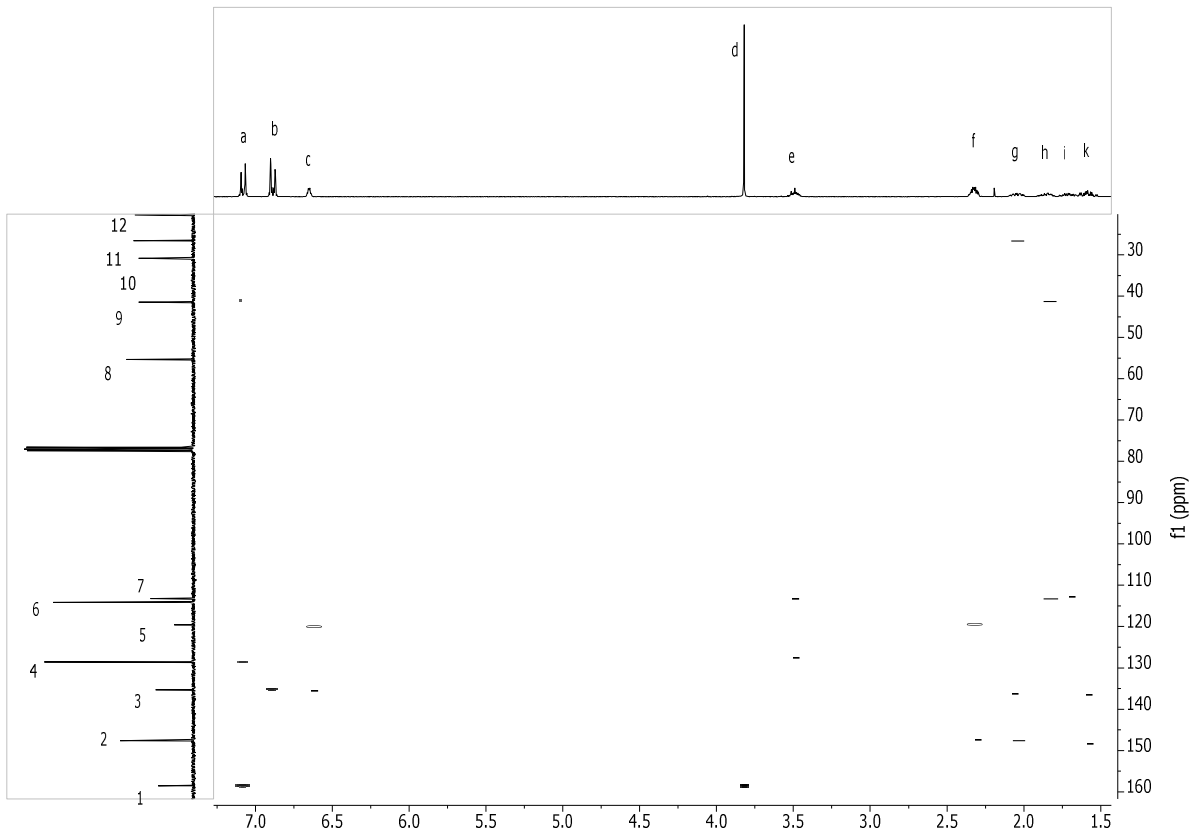
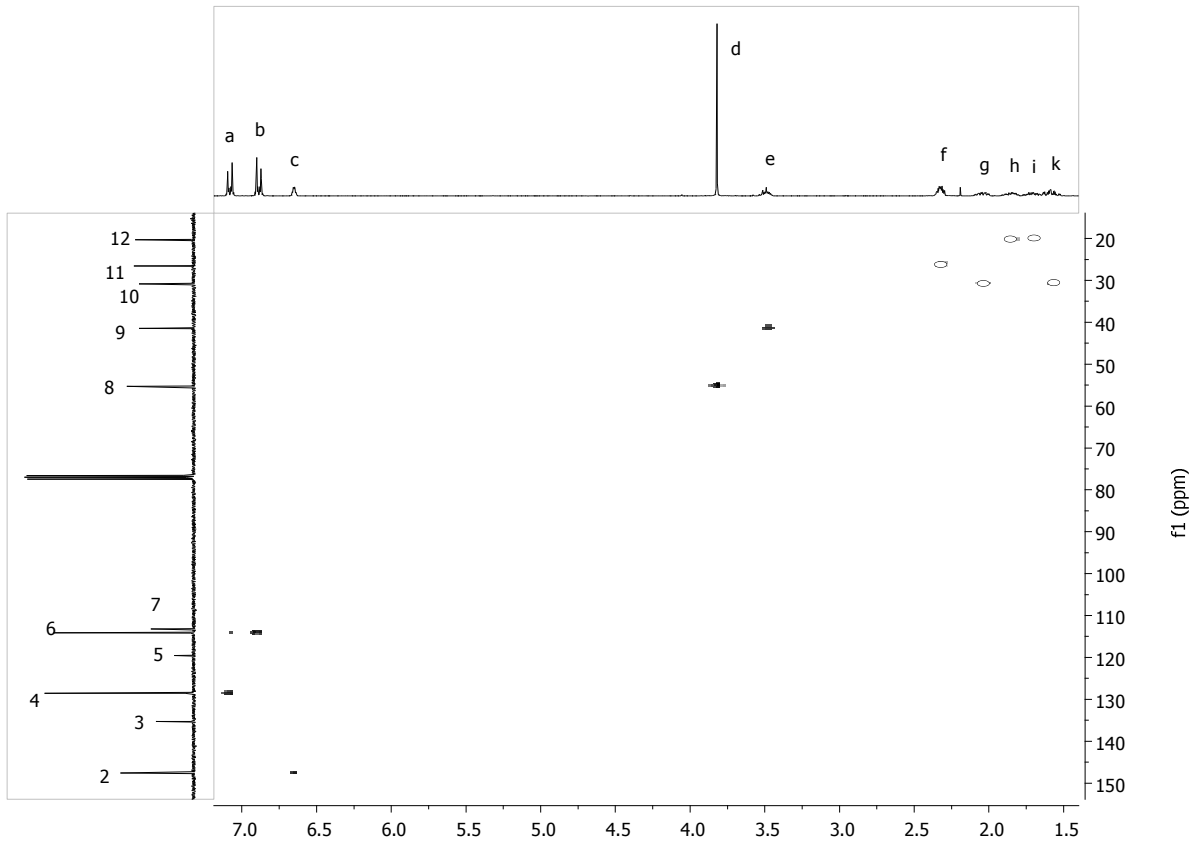


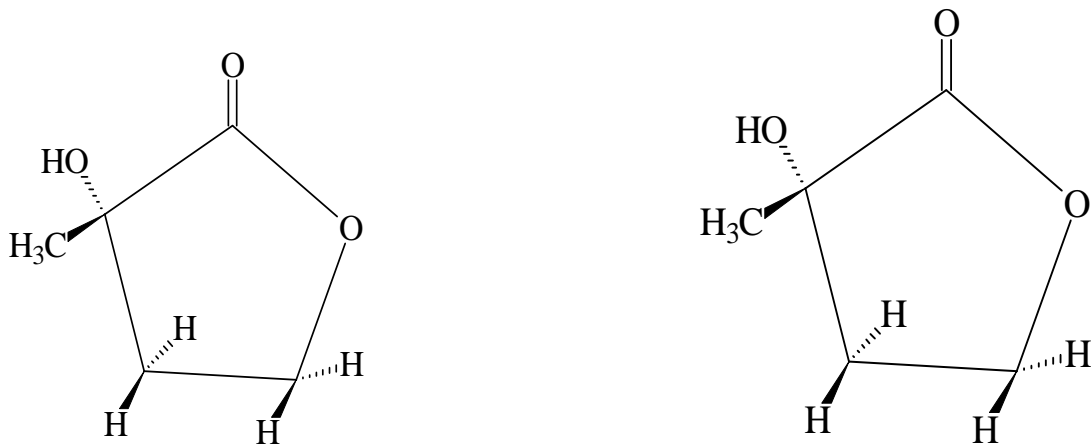
**Frage 3: (13 Punkte)**

1. Ordnen Sie die alle Signale zu. (12 P)
2. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen ( 1 P)







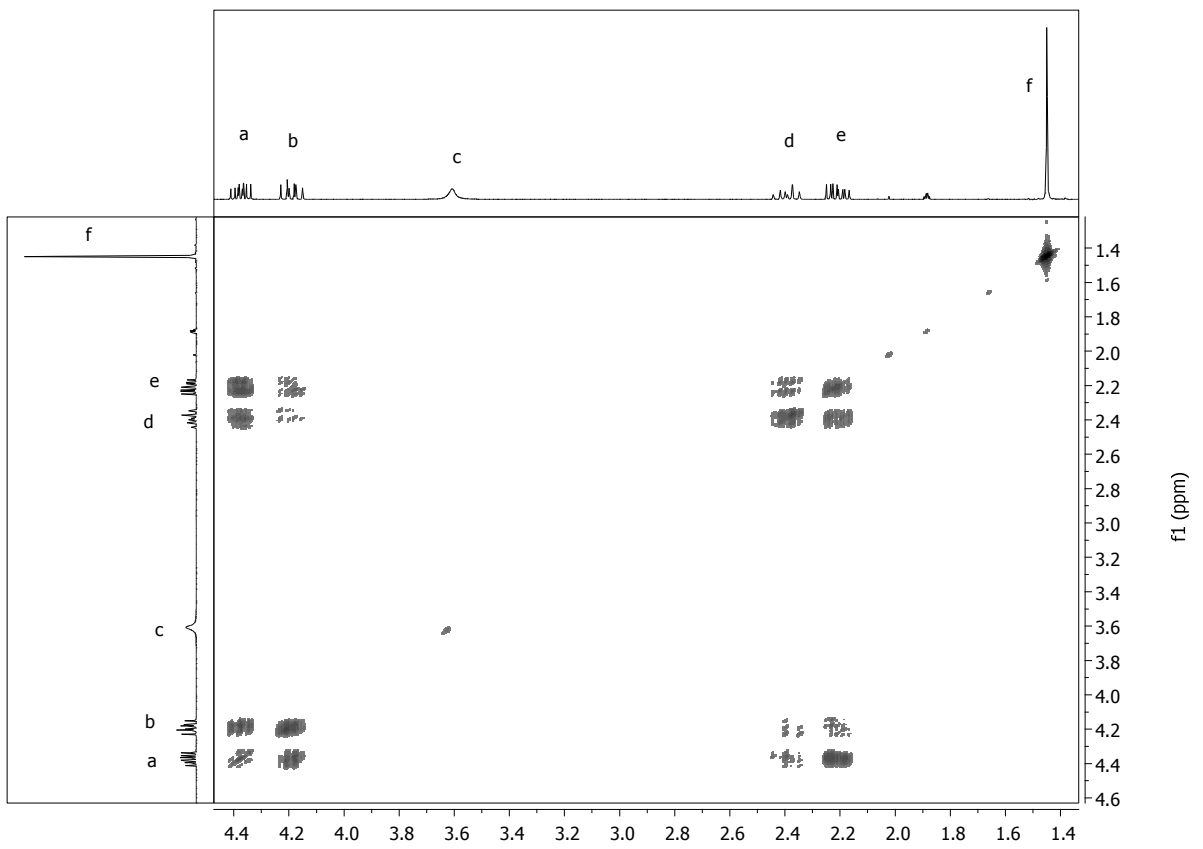
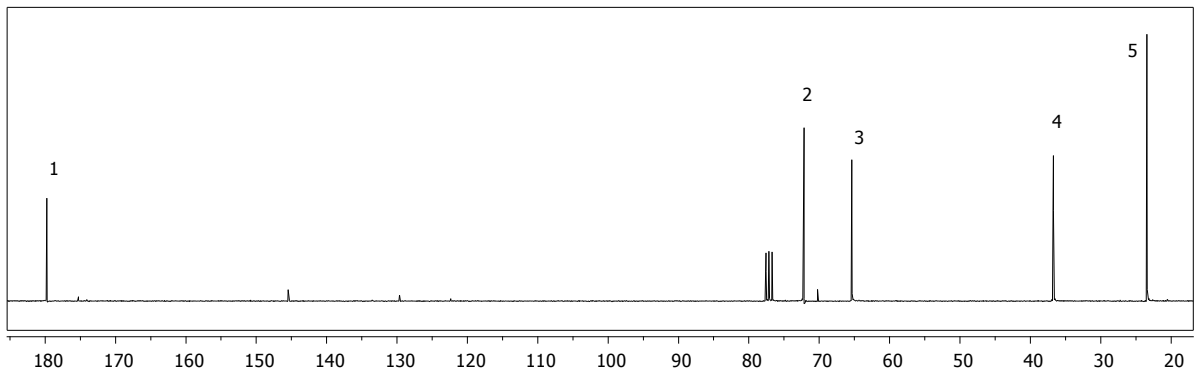
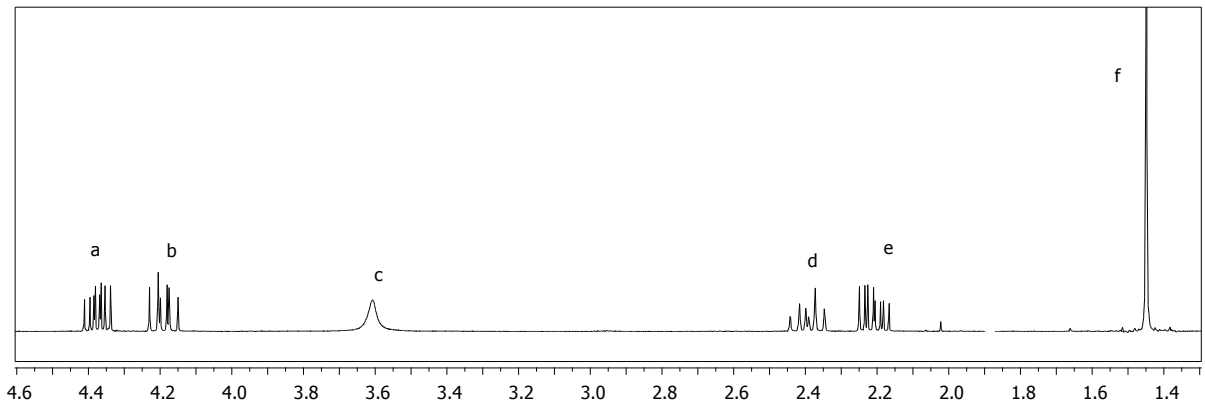
**Frage 4: (14 Punkte)**

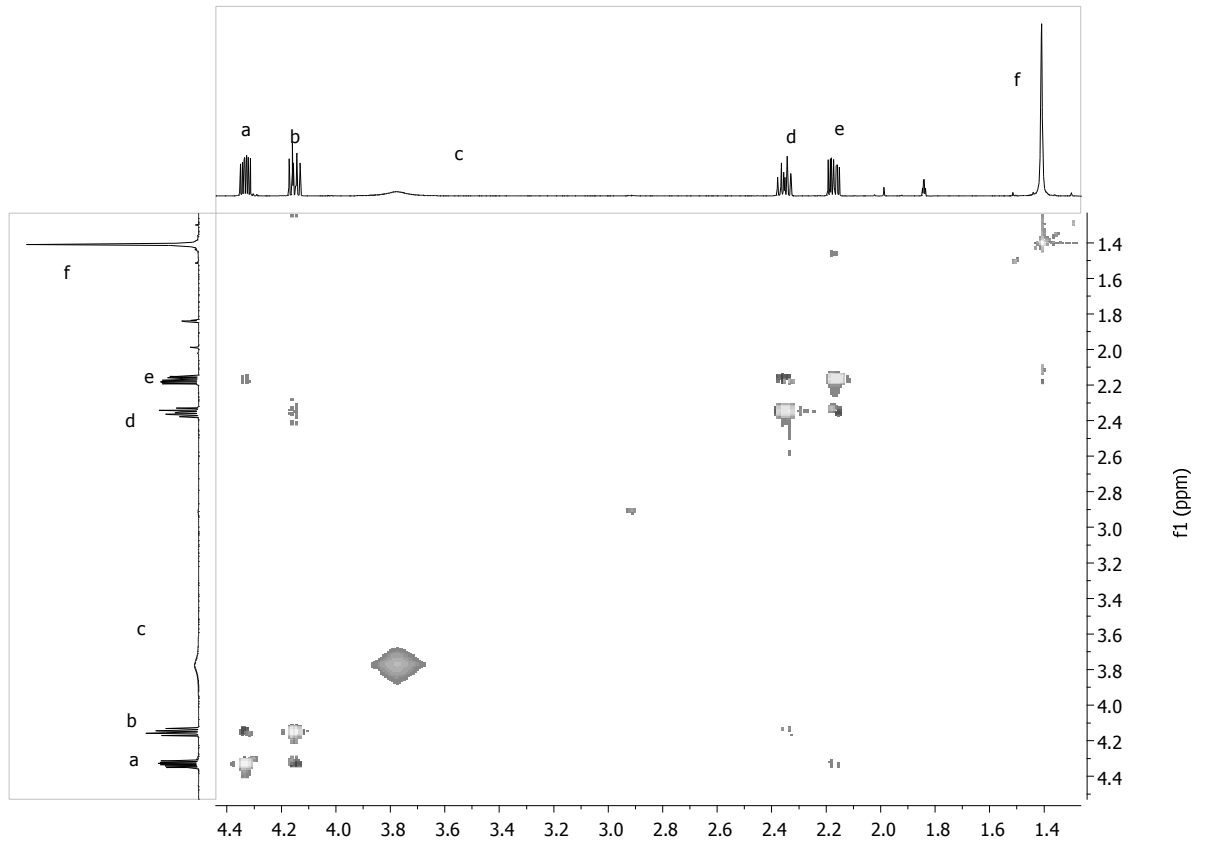
1. Ordnen Sie alle Signale genau zu. (vor/hinter der Papierebene?) (5 P)
2. Bestimmen Sie das Spinsystem (1 P)
3. Ich habe das  $^1\text{H}$ -Spektrum auf zwei verschiedenen Maschinen gemessen. (Seite 14)
  - auf welchen ? (mit Berechnung) (2 P)

- Welche Unterschiede gibt es, was bleibt gleich. (2 P)

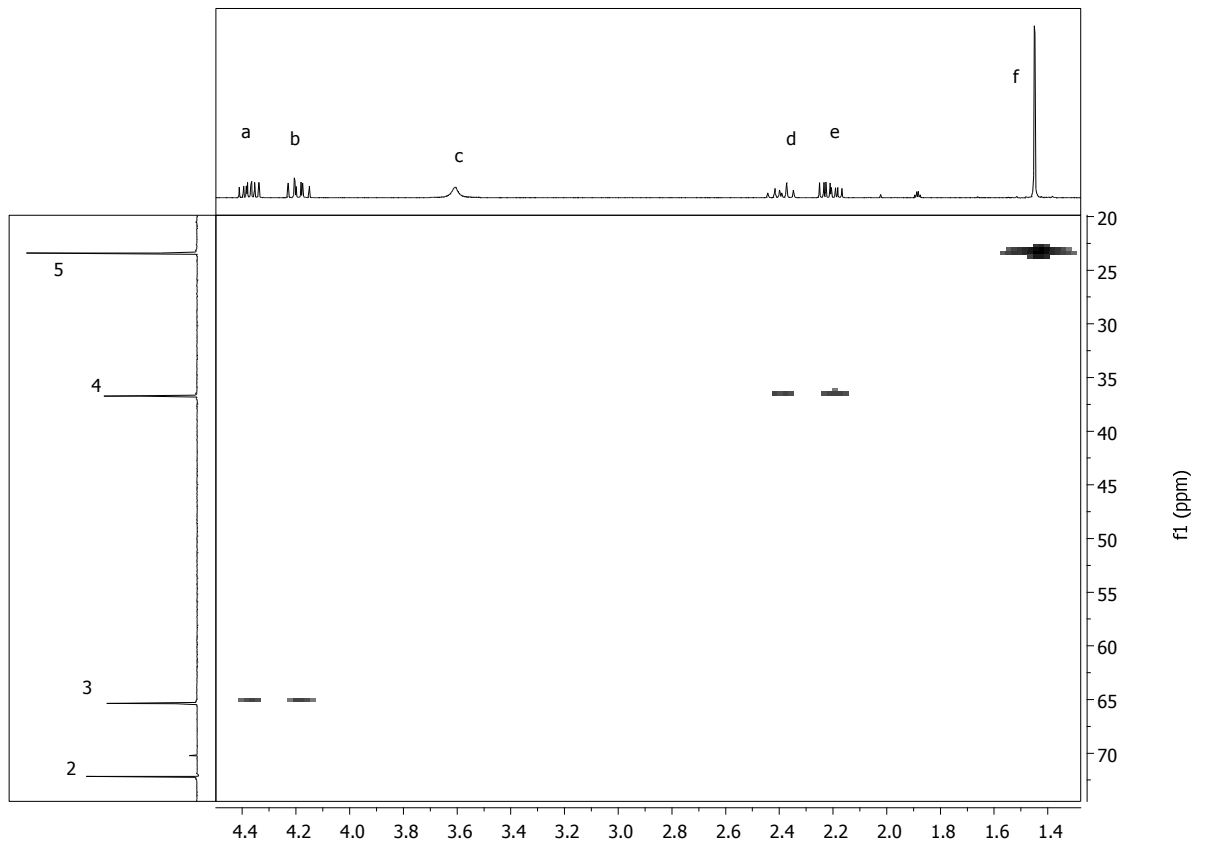
- Warum sind die Multipletts im 2. Spektrum schmaler als im 1. Spektrum? (2 P)

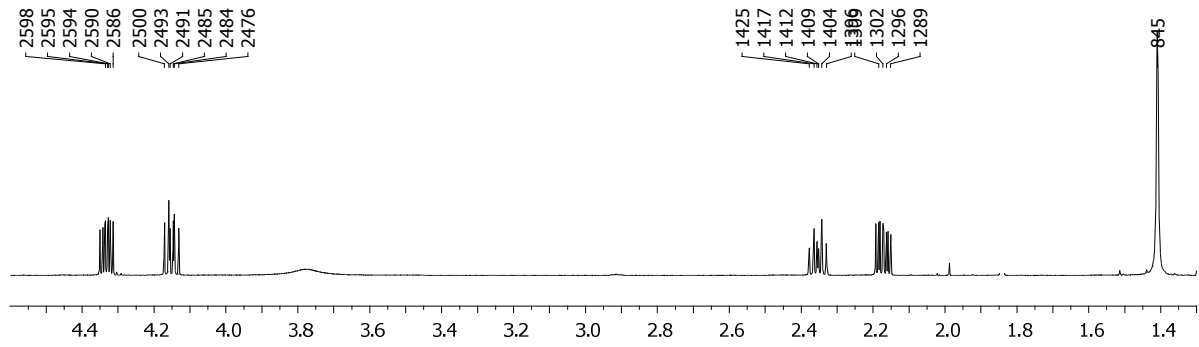
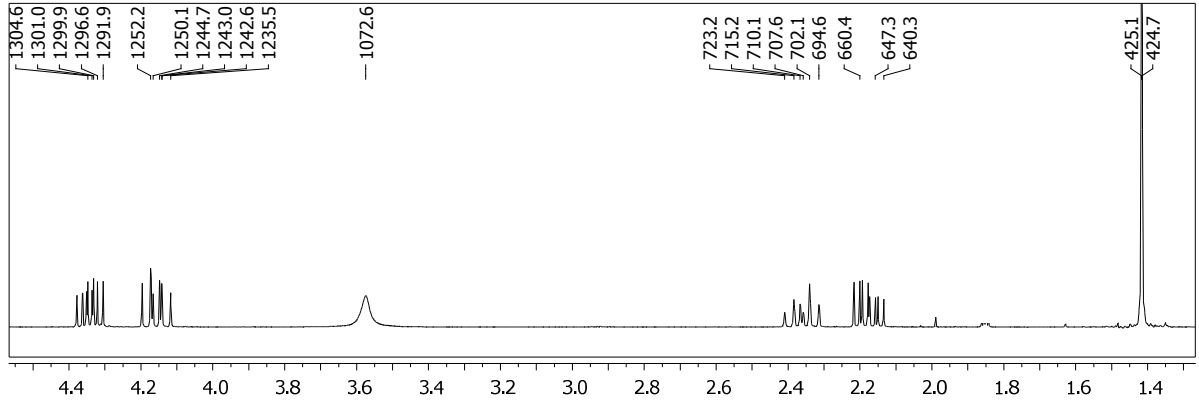
- Welche Vorteile/Nachteile haben die beiden Maschinen (2 P)





NOESY





**Frage 5: Theorie (12 Punkte)**

1. 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)

2. Was ist der FID? Was bedeutet die Abkürzung? Wie schaut er aus? Was kann ich mit ihm machen? ( 2 P)

3. In unserer 1. Übung haben Sie die Protonen-Spektren der 4 isomeren Butanole zugeordnet.  
Bestimmen Sie jetzt das Spinsystem dieser 4 Butanole (4 P)