

SS 14 Name

Matrikelnr.....Bonuspunkte:.....

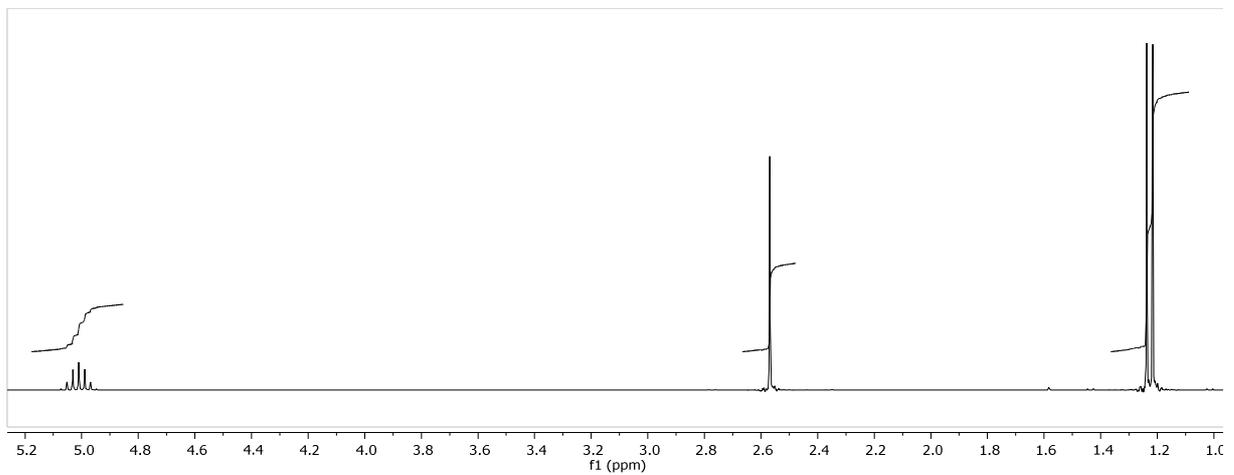
Spektroskopie 2 (NMR) SS 2014 Klausur (Zusatz)

8.9.2014

Frage 1: (9 Punkte)

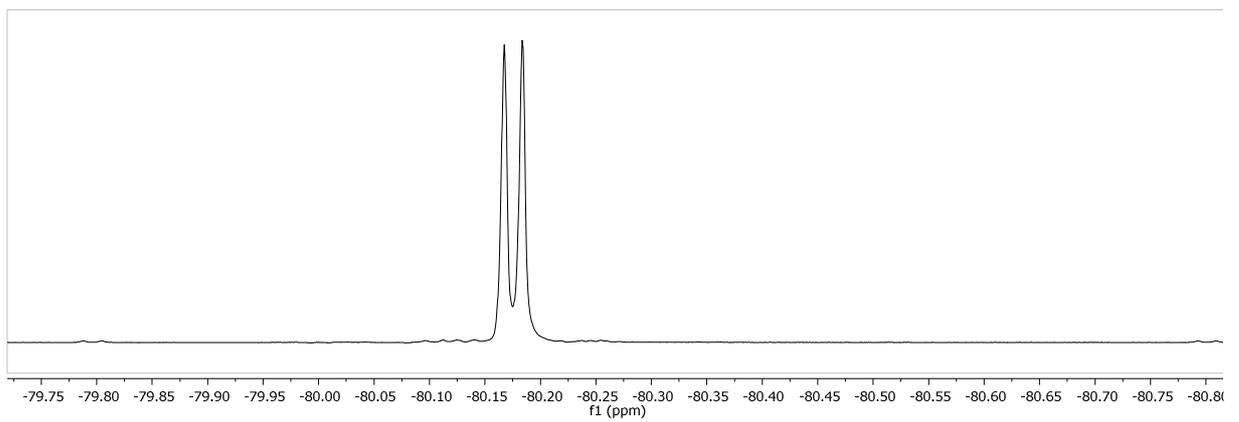
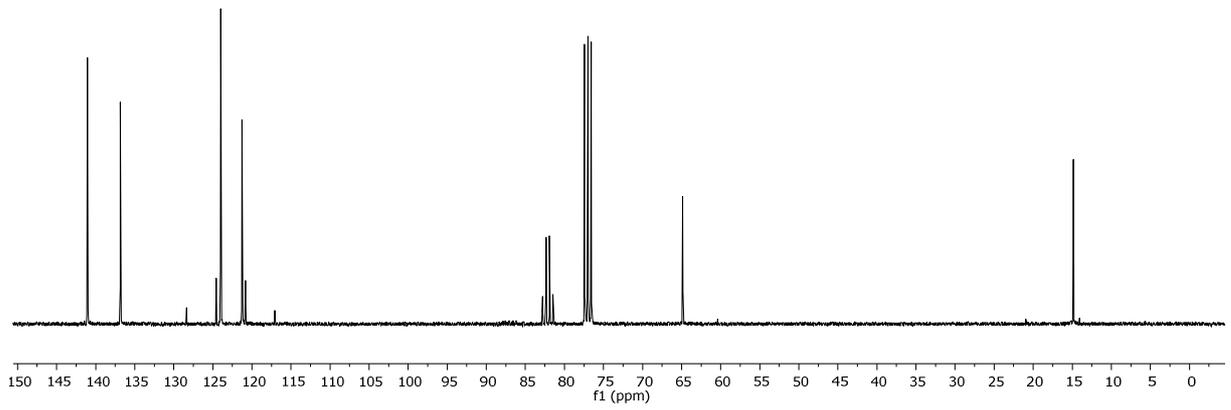
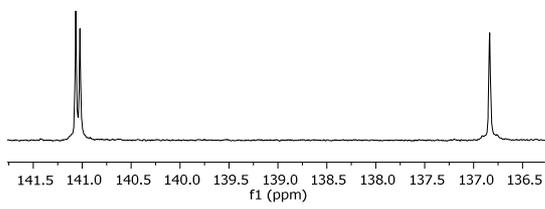
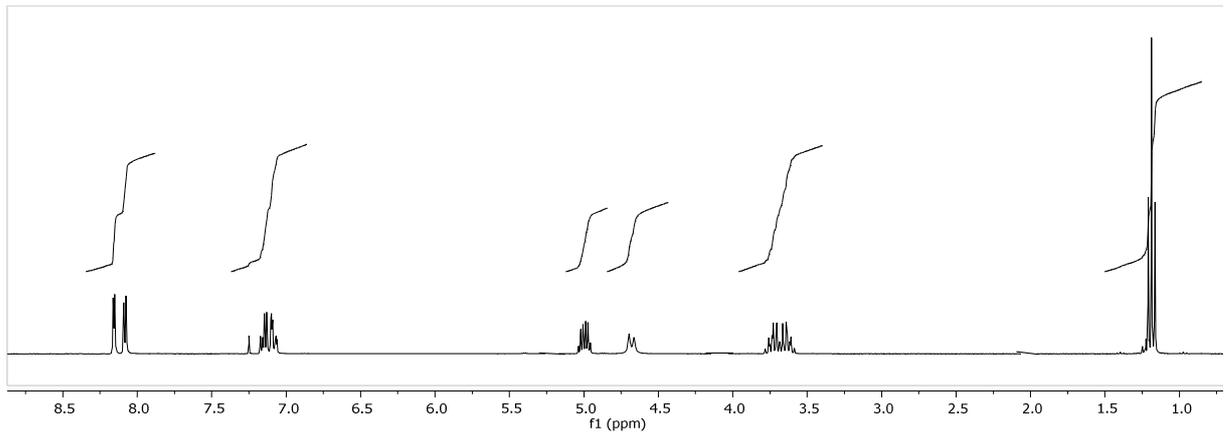
Unten ist ein ^1H -Spektrum einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:
 $\text{C}_{10}\text{H}_{18}\text{O}_4$.

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des ^1H -Spektrums? (2 P)

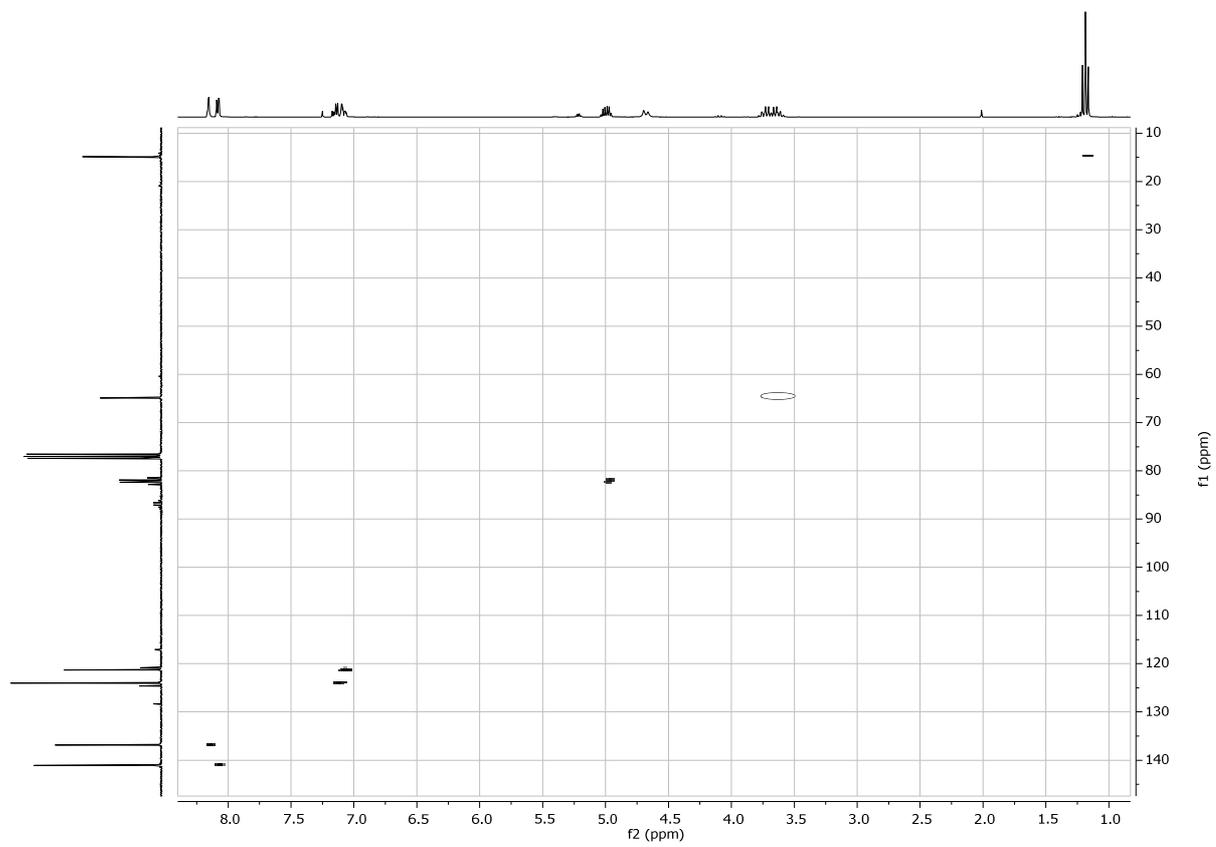
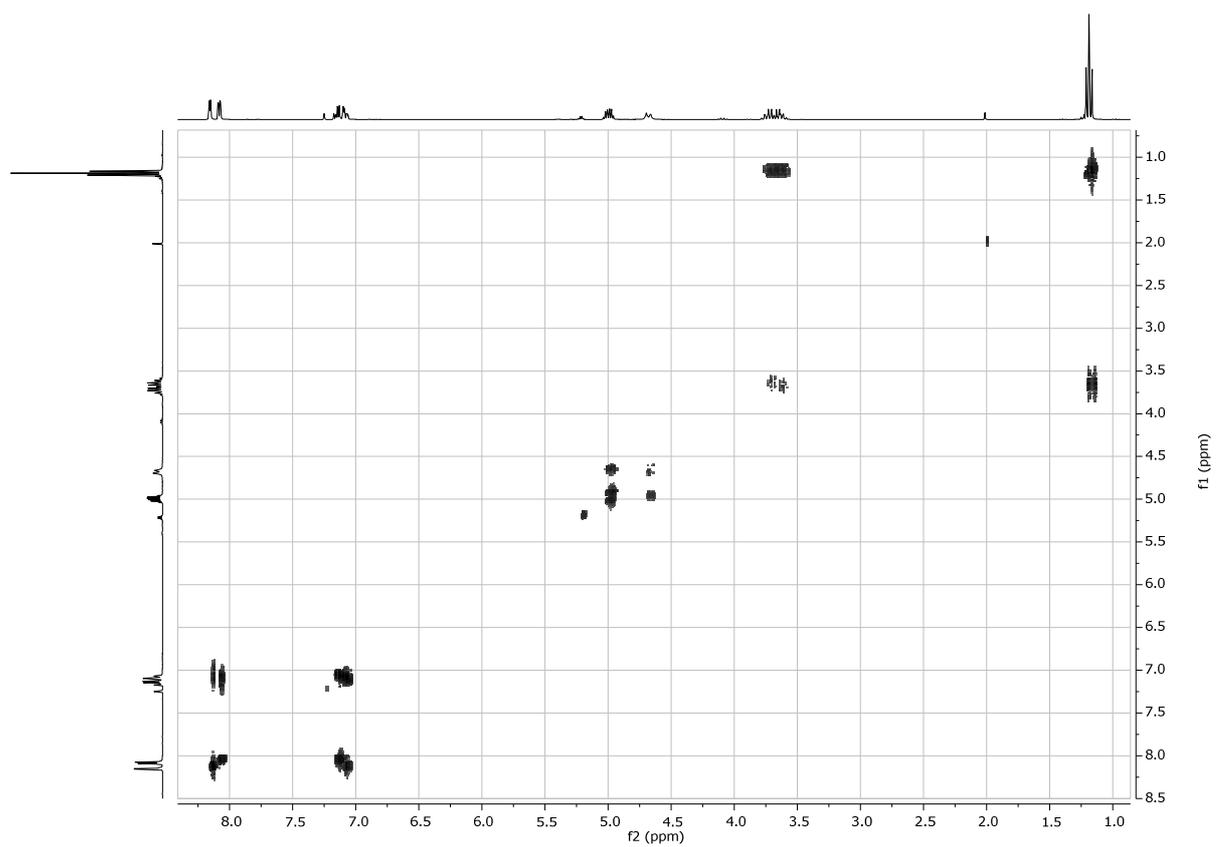


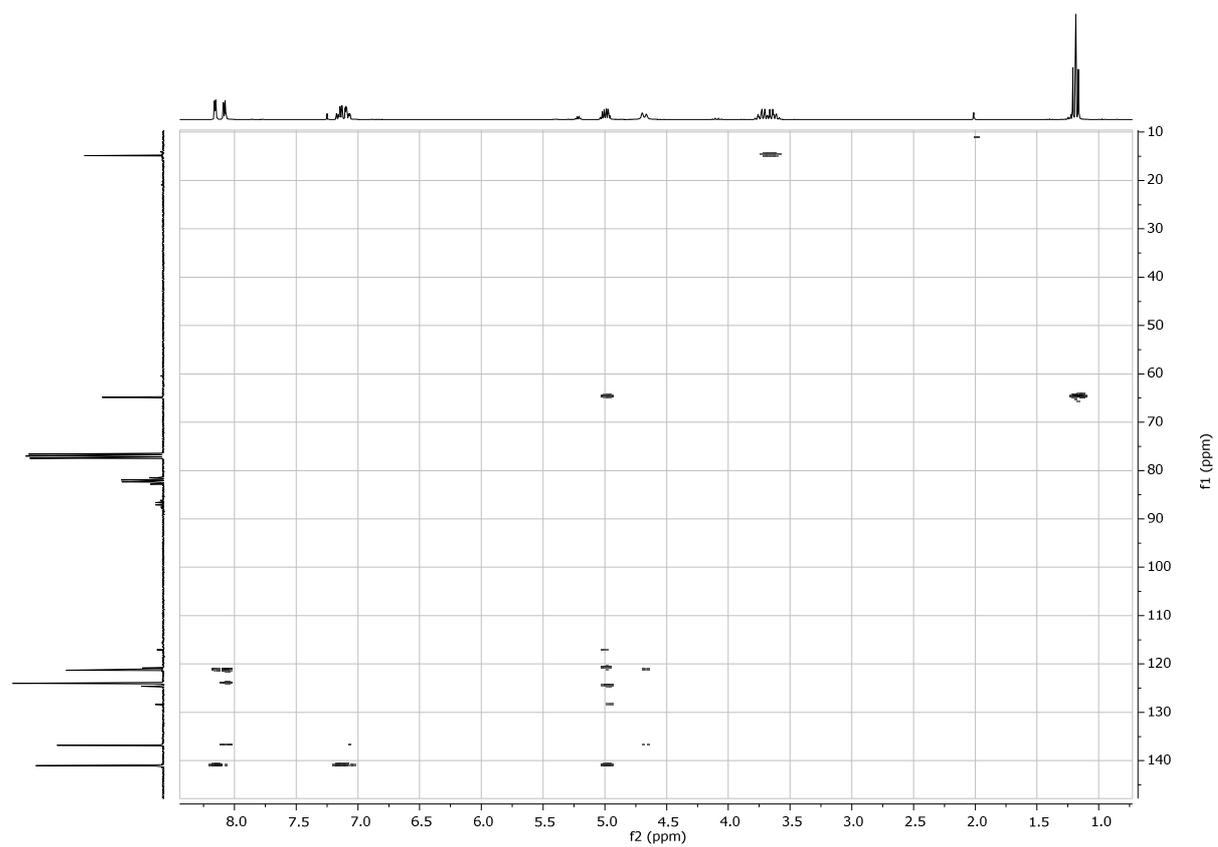
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

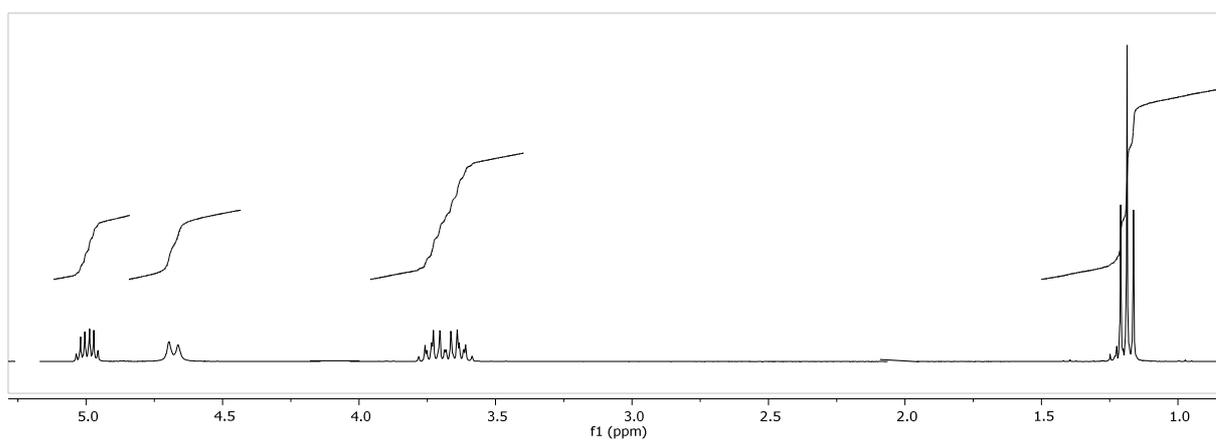
3. Berechnen Sie die ^{13}C -Verschiebung von dem C, an dem das Proton bei 5 ppm sitzt. (1 P)
4. Das ^{13}C -Spektrum wurde leider nicht gemessen. Wie würde es aussehen? Zeichnen Sie es mit ungefähren Verschiebungen. (2 P)
5. Das Protonenspektrum hat ein gutes Signal zu Rausch-Verhältnis. Wovon ist das abhängig. Nennen Sie 3 Gründe. (2 P)

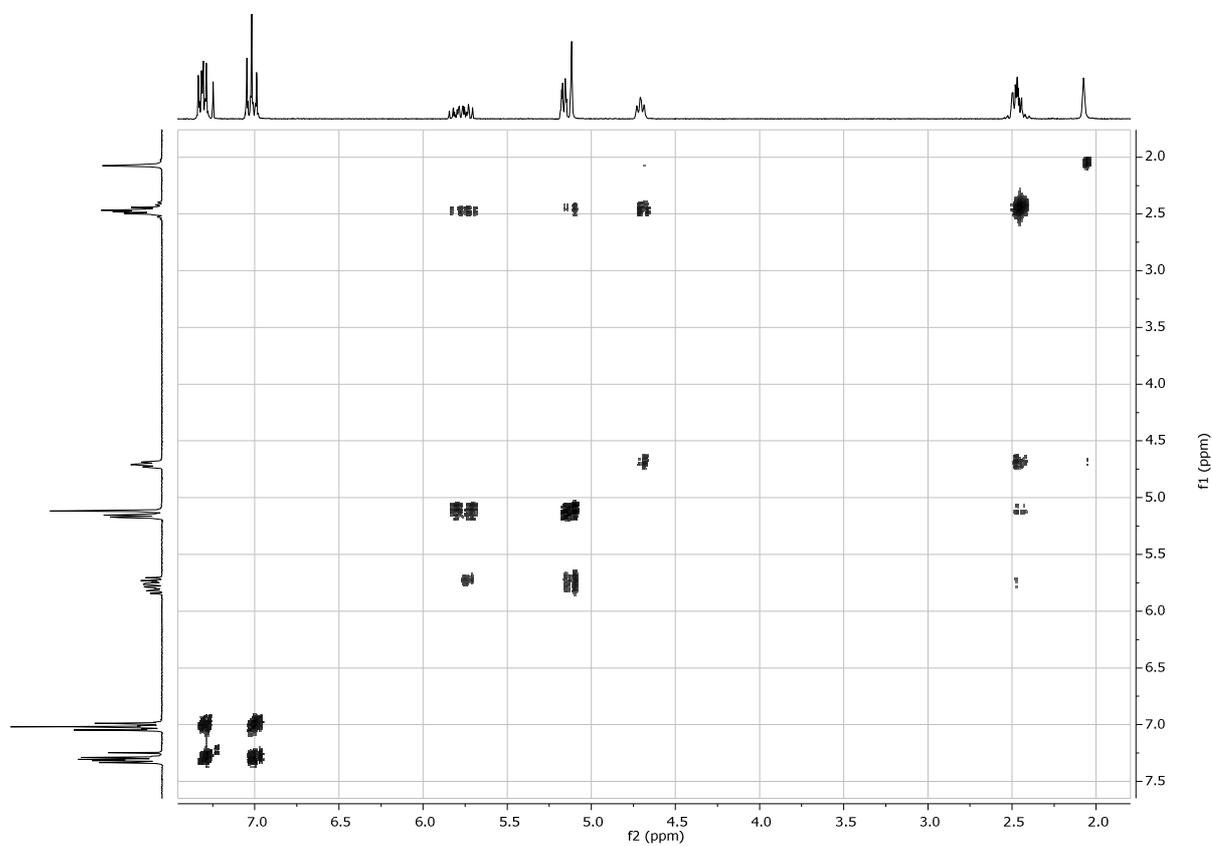
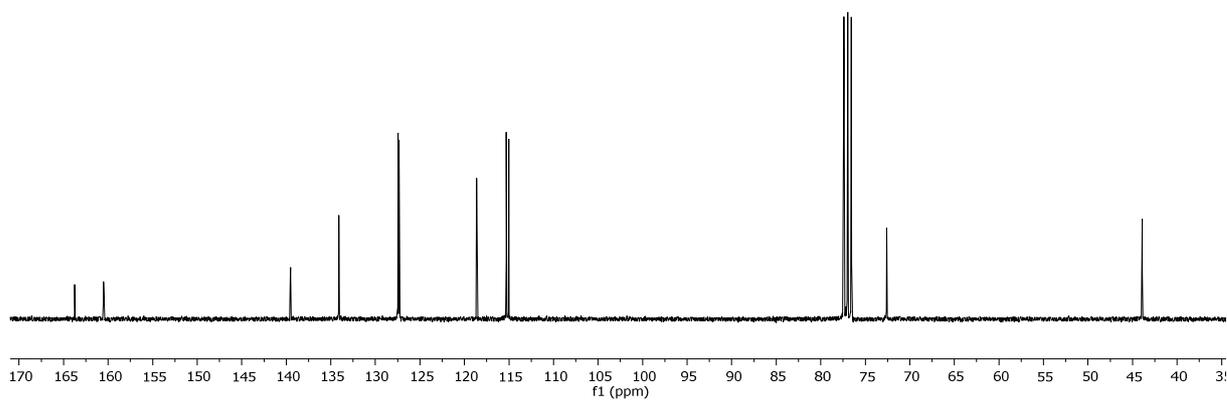
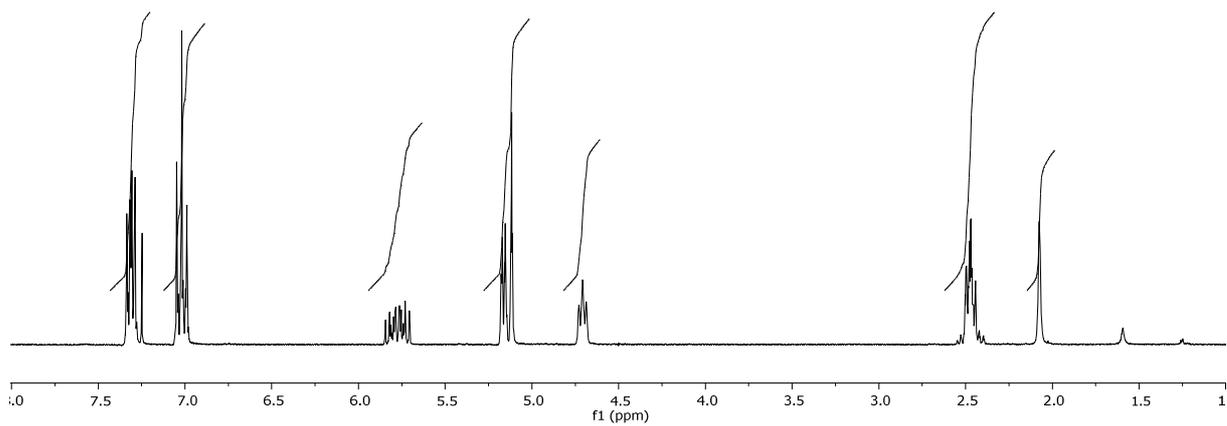


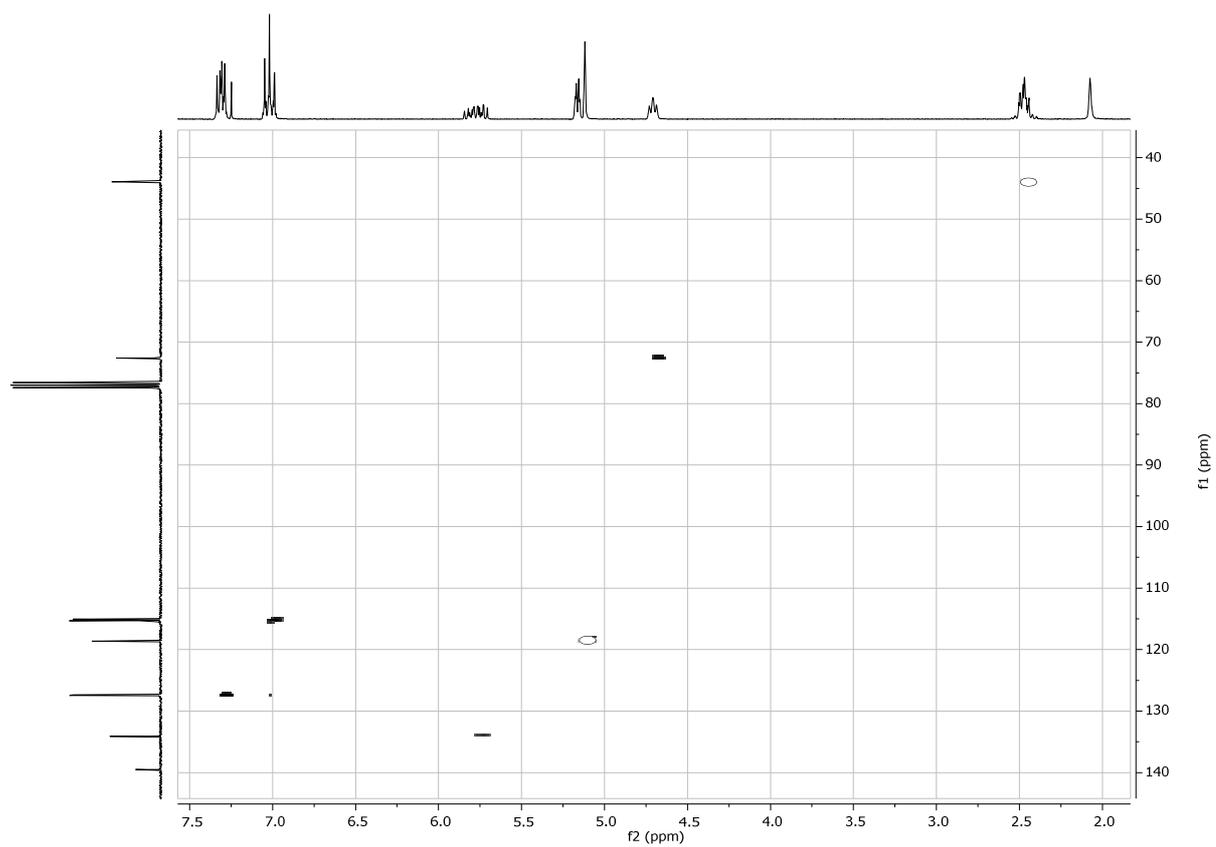
¹⁹F-Spektrum











Frage 4: (14 Punkte)

Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_8H_{15}O_3Br$.

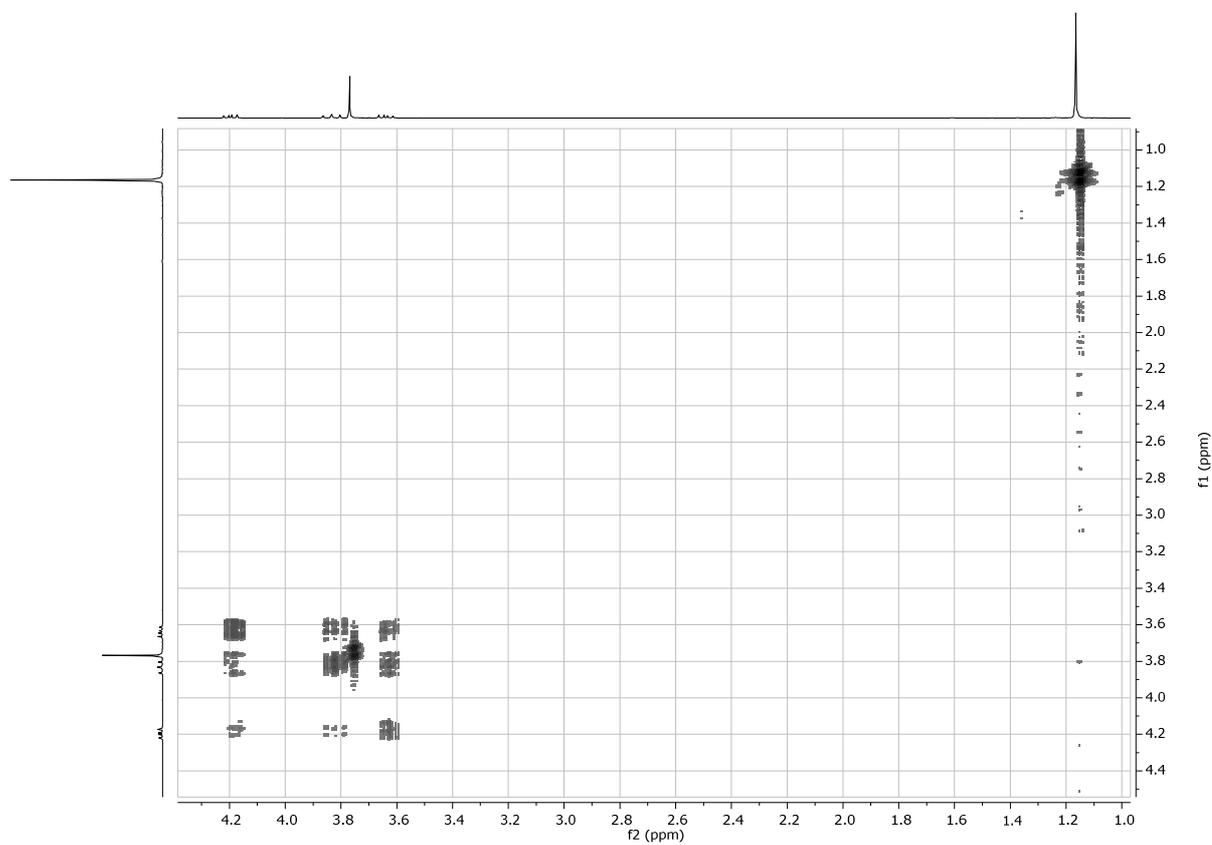
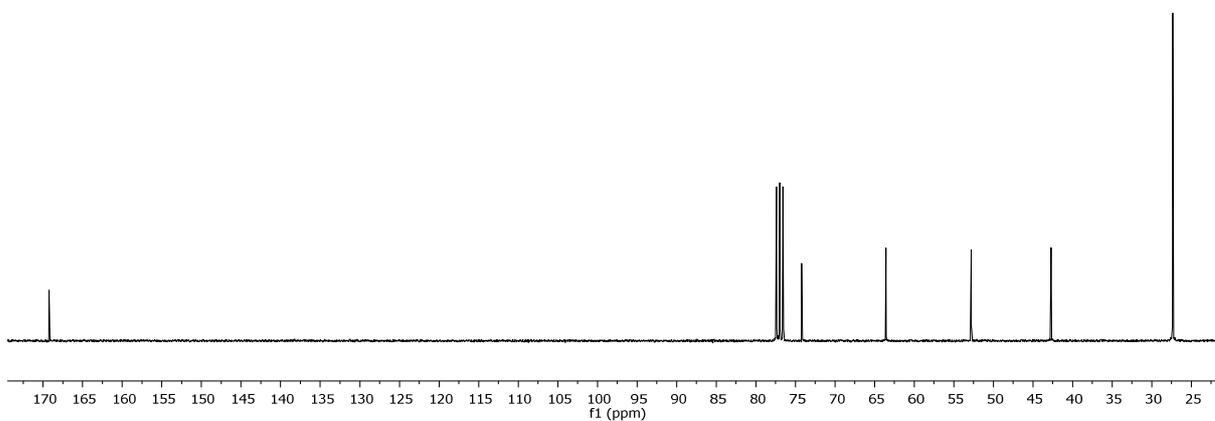
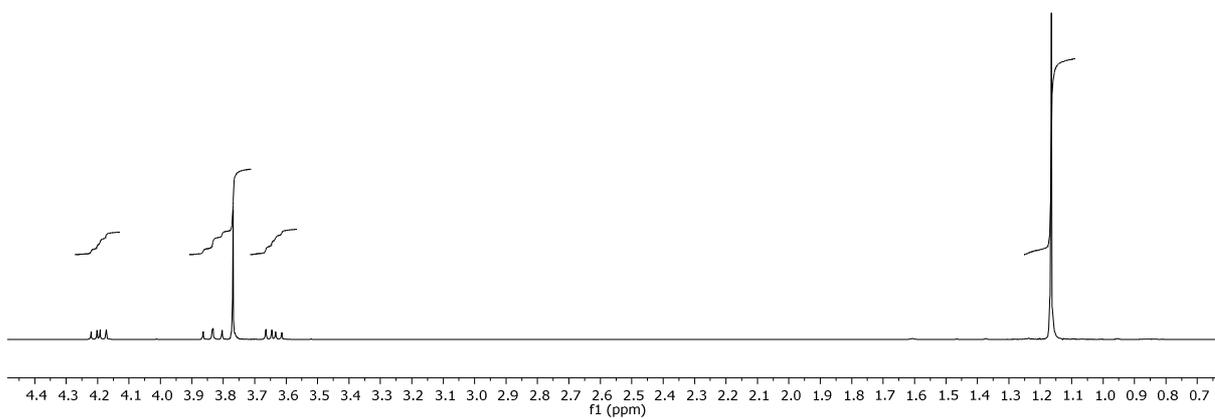
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4 P)

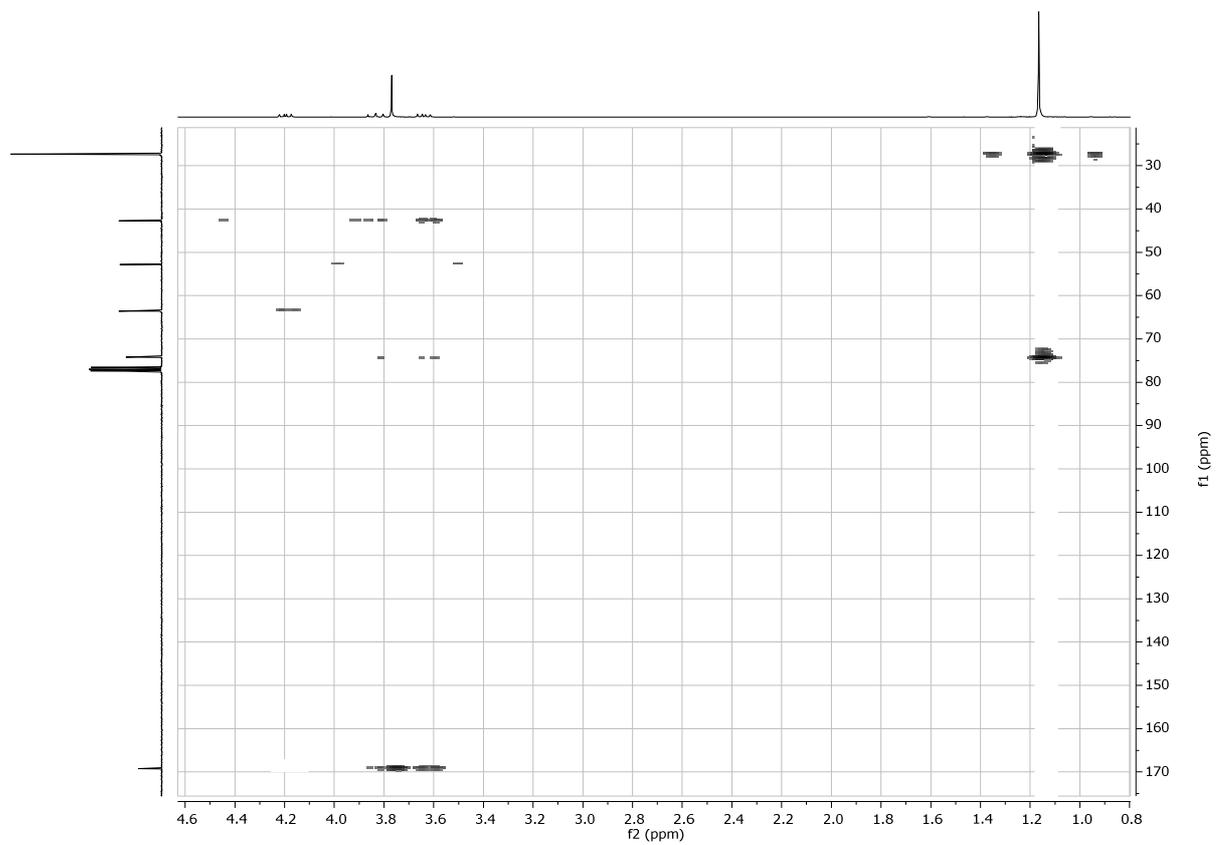
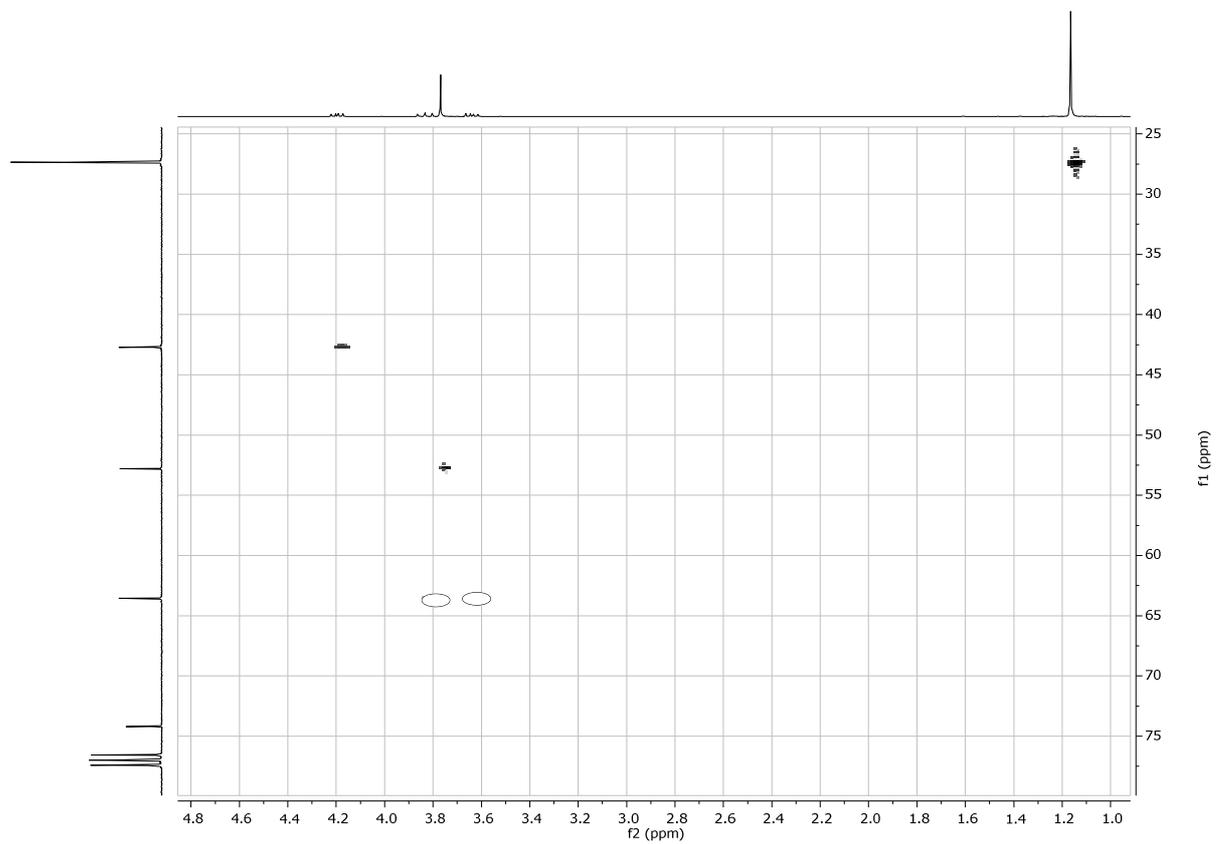
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

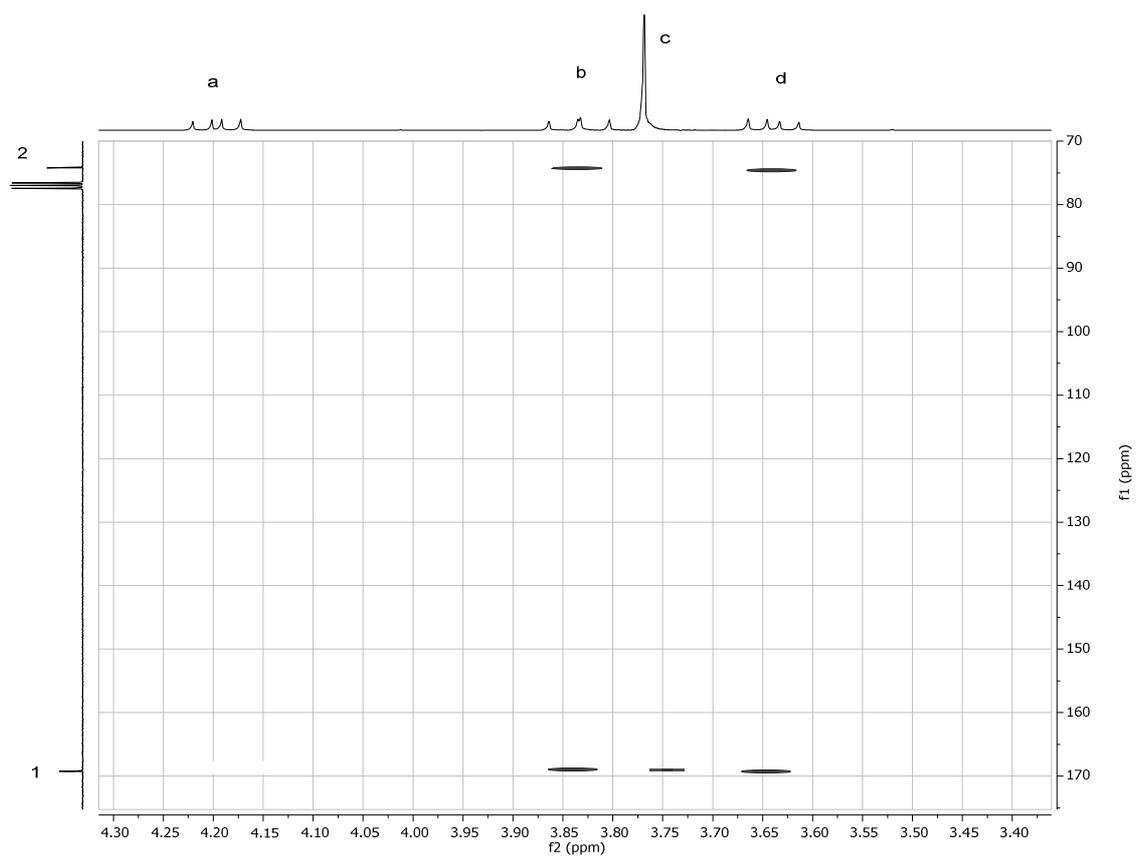
3. Ordnen Sie die in der Vergrößerung des HMBCs (Seite 15) sichtbaren Cs und Hs zu. (3 P)

4. Zeichnen Sie die in der Vergrößerung des HMBCs sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül ein und geben Sie in einer Tabelle an, um welche Kopplung es sich handelt. (3 P)

5. Was versteht man unter diastereotopen Protonen. Geben Sie ein Beispiel an. (2 P)







Frage 5: Theorie (16 Punkte)

1. Was bedeutet „präzedieren“? Erklären Sie genau (4 P)

2. Zeichnen Sie das Pulsprogramm für eine Protonenmessung und erklären Sie, was dabei passiert. (4 P)

3. Nennen Sie von 4 Elementen die Spinquantenzahl. Wofür ist sie wichtig? (3 P)

4. In der Literatur finden Sie folgende Angabe:

$^1\text{H-NMR}$ (400MHz, CDCl_3) $\delta = 0.93(\text{t}, J=7.0\text{Hz}, 3\text{H}, \text{CH}_2\text{CH}_3)$,
 $1.17(\text{d}, J=7.0\text{Hz}, 3\text{H}, \text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3)$, $1.36(\text{dq}, J=13.0\text{Hz}, J=7.0\text{Hz}, J=5.5\text{Hz}, 1\text{H}, \text{CH}_2\text{CH}_3)$, $1.50(\text{dq}, J=13.0\text{Hz}, J=7.0\text{Hz}, J=5.5\text{Hz}, 1\text{H}, \text{CH}_2\text{CH}_3)$, $2.51(\text{s}, 1\text{H}, \text{OH})$, $3.69(\text{qt}, J=7.0\text{Hz}, J=5.5\text{Hz}, 1\text{H}, \text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3)$.

a. Zeichnen Sie das zugehörige ^1H -Spektrum mit Integralen (2 P)

b. Um welche Substanz handelt es sich? (1 P)

5. Bestimmen Sie das Spinsystem: (2 P)

