

SS16 Name .....

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

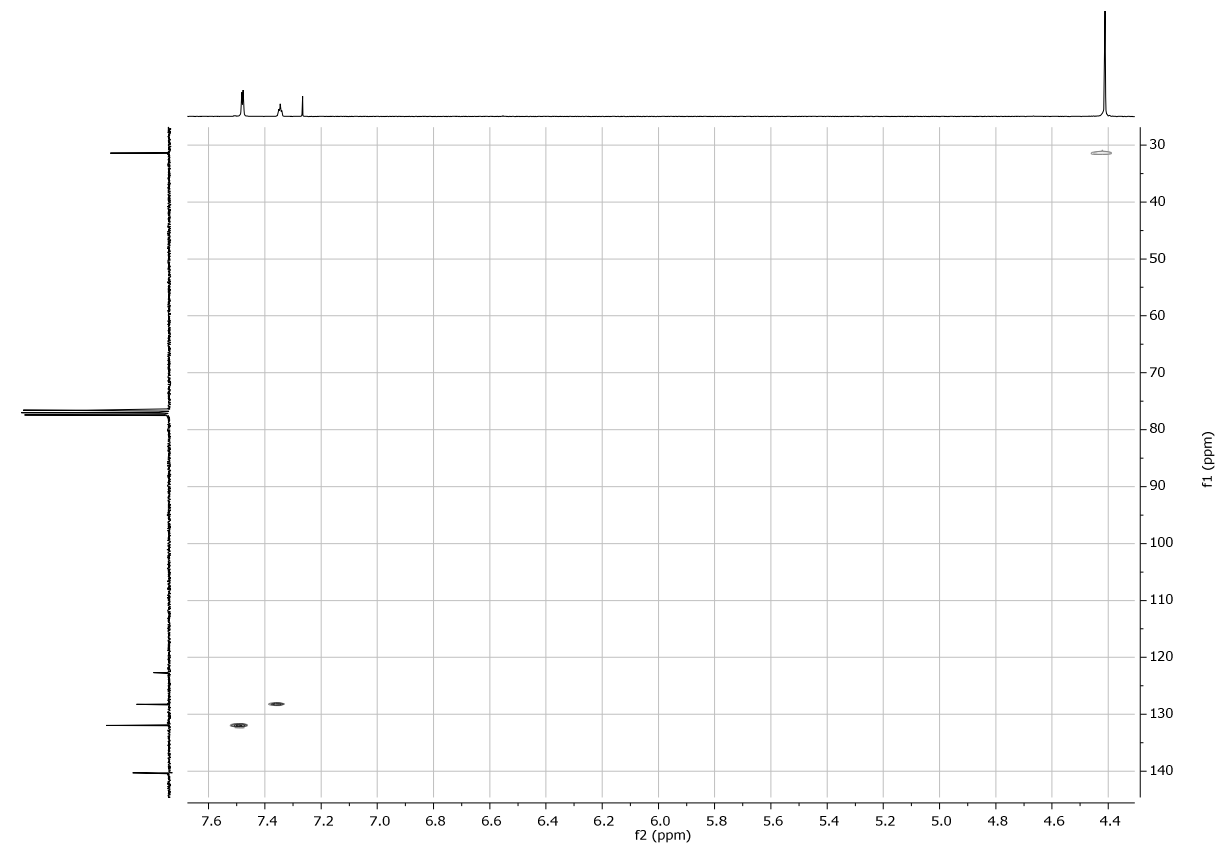
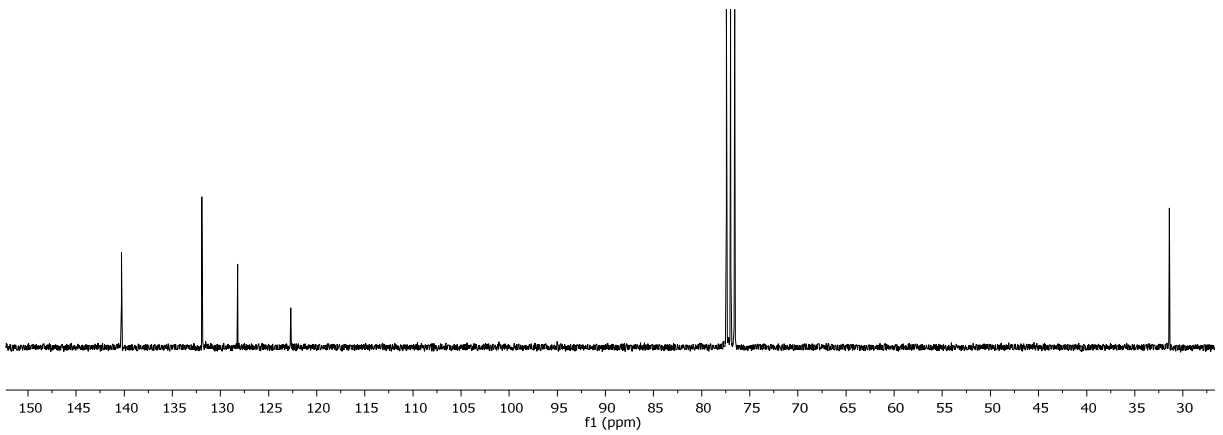
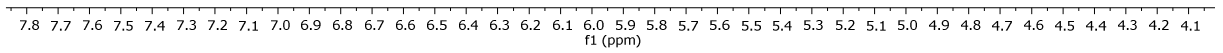
## Spektroskopie 2 (NMR) SS 2016 Klausur

20.7.2016

### Frage 1: (10 Punkte)

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_8H_7Br_3$  .

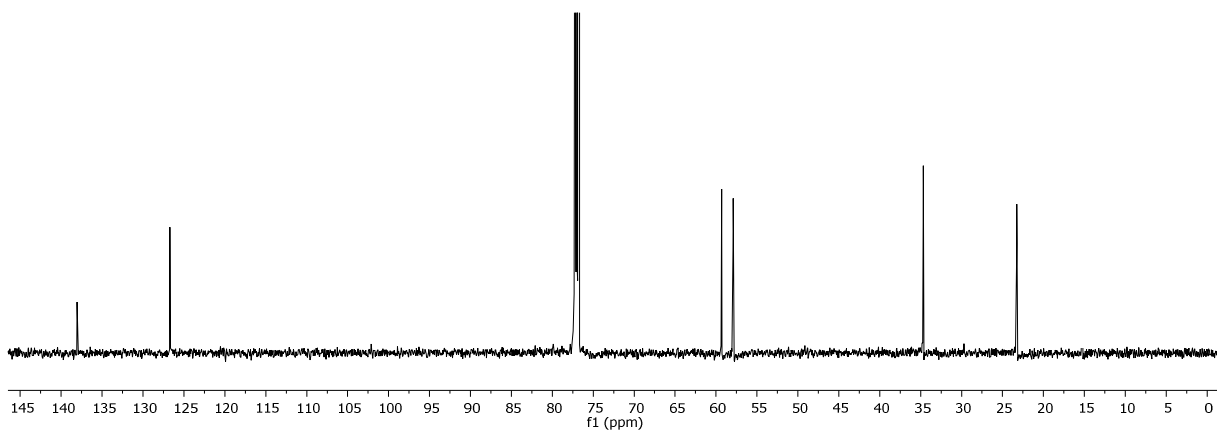
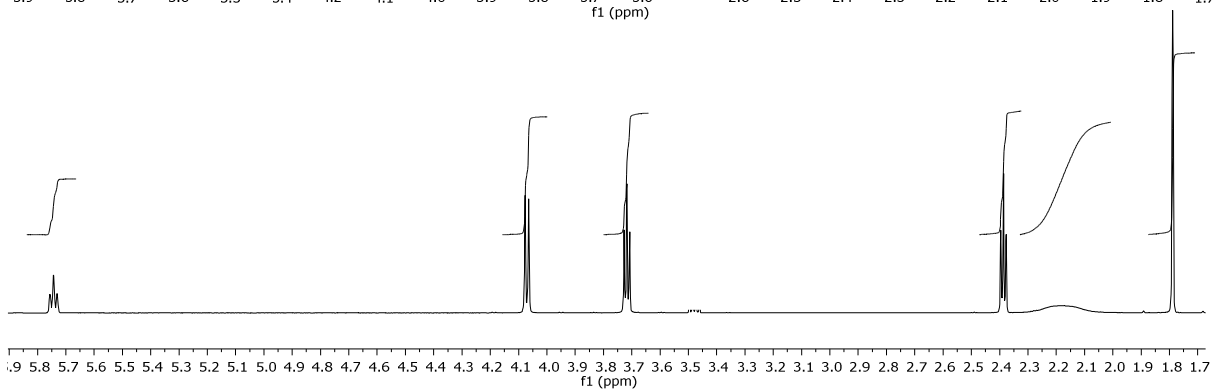
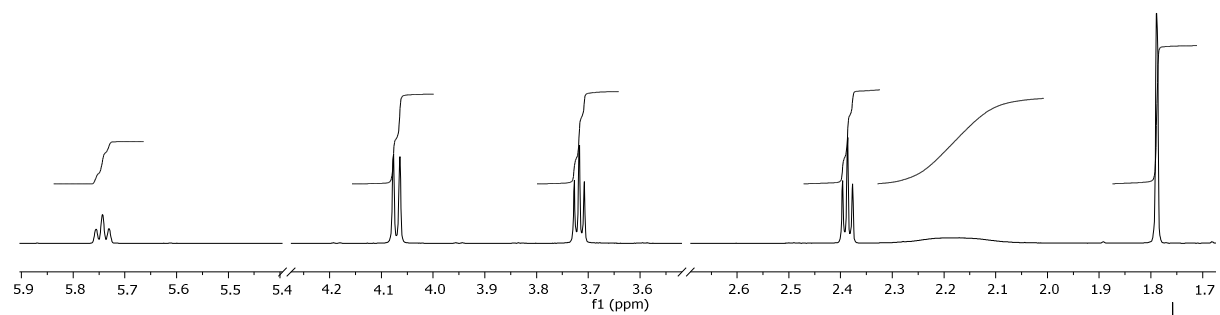
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der  $^1H$ - und  $^{13}C$ -Spektren? (2 P)
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
3. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen. (1 P)
4. Markieren Sie die Signale des Lösungsmittels. Welches Lösungsmittel ist es? Erklären Sie die Aufspaltung des Signals im  $^1H$  und  $^{13}C$ -Spektrum. (3 P)
5. Warum verwendet man deuterierte Lösungsmittel? Geben Sie zwei Gründe an und erklären Sie kurz. (4 P)

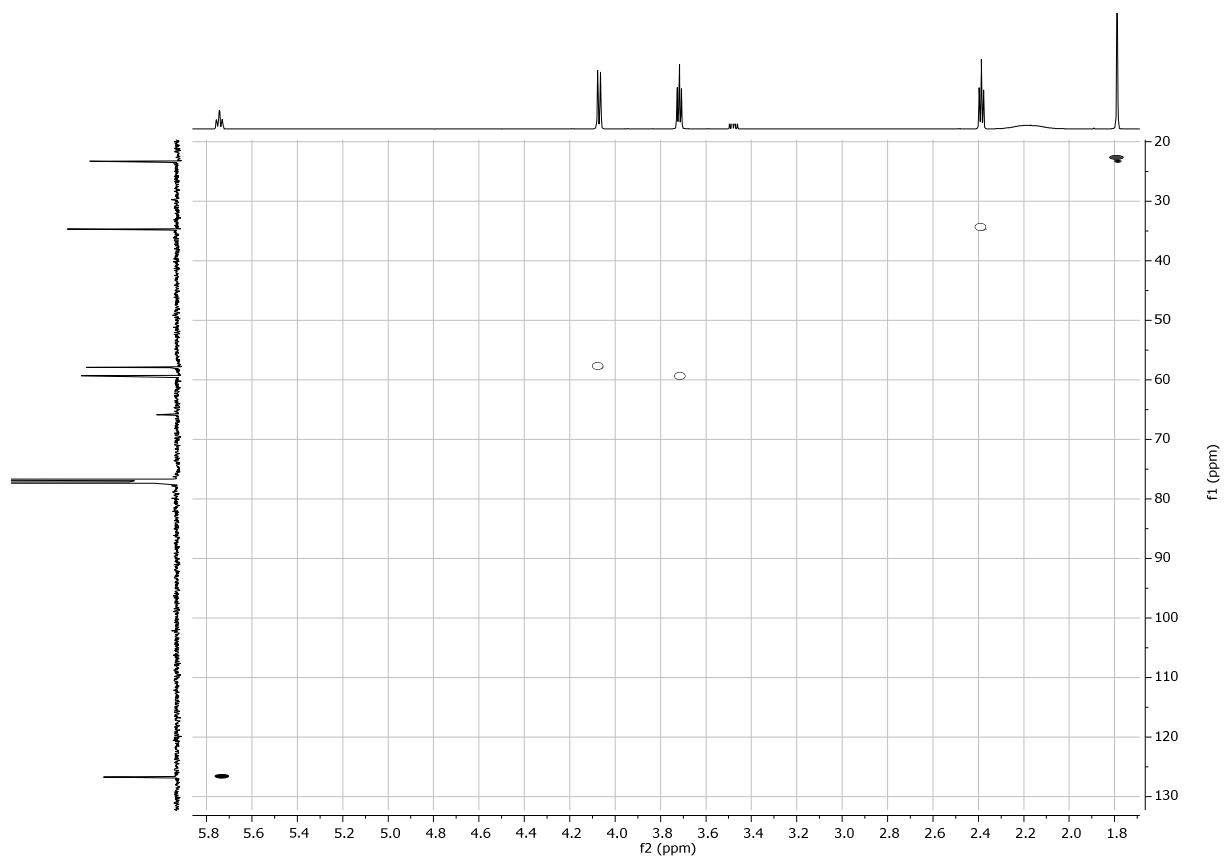
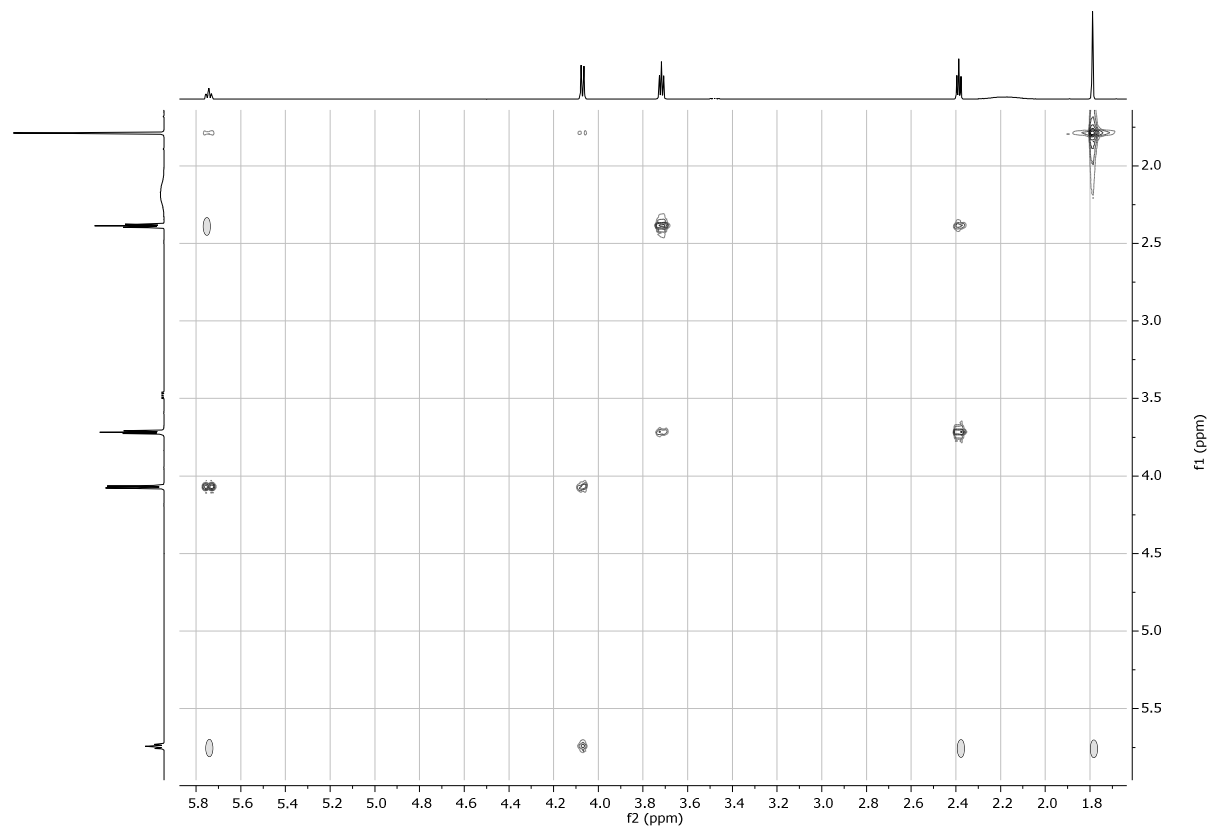


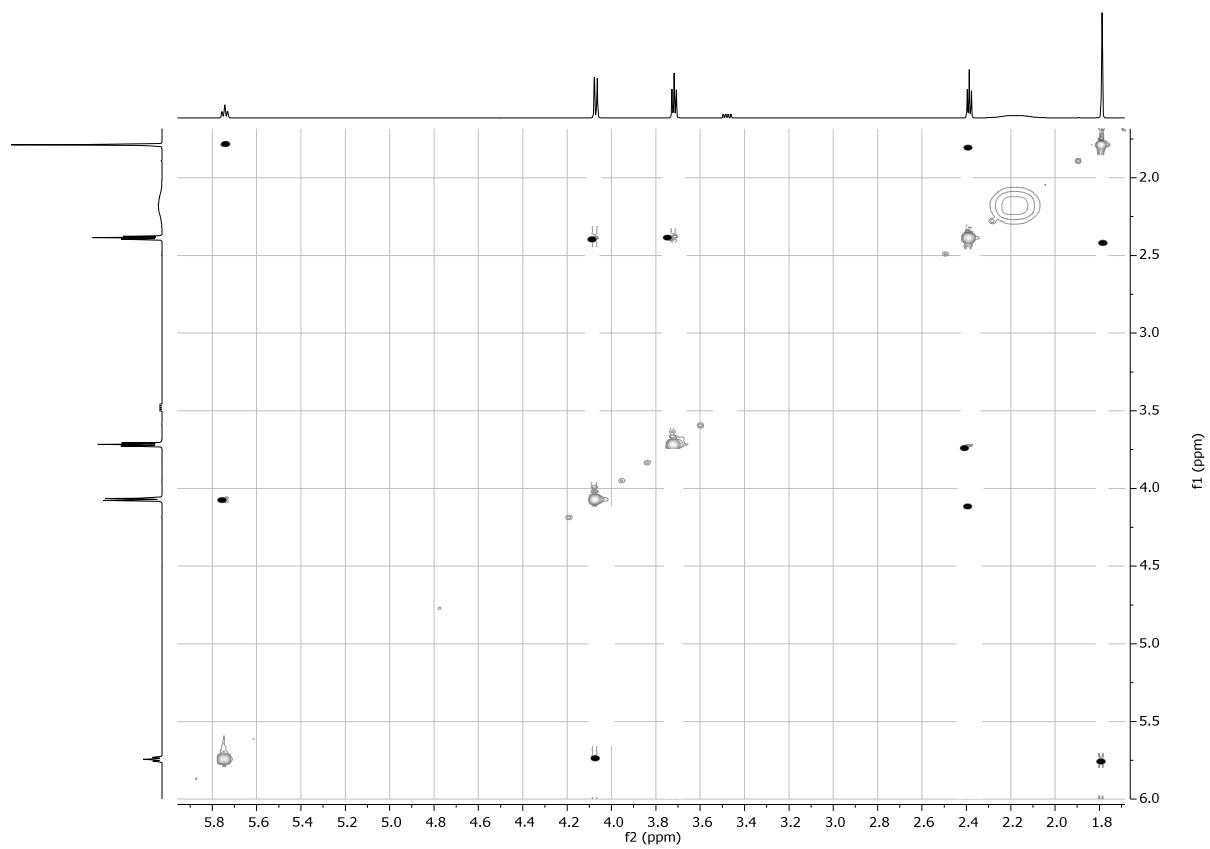
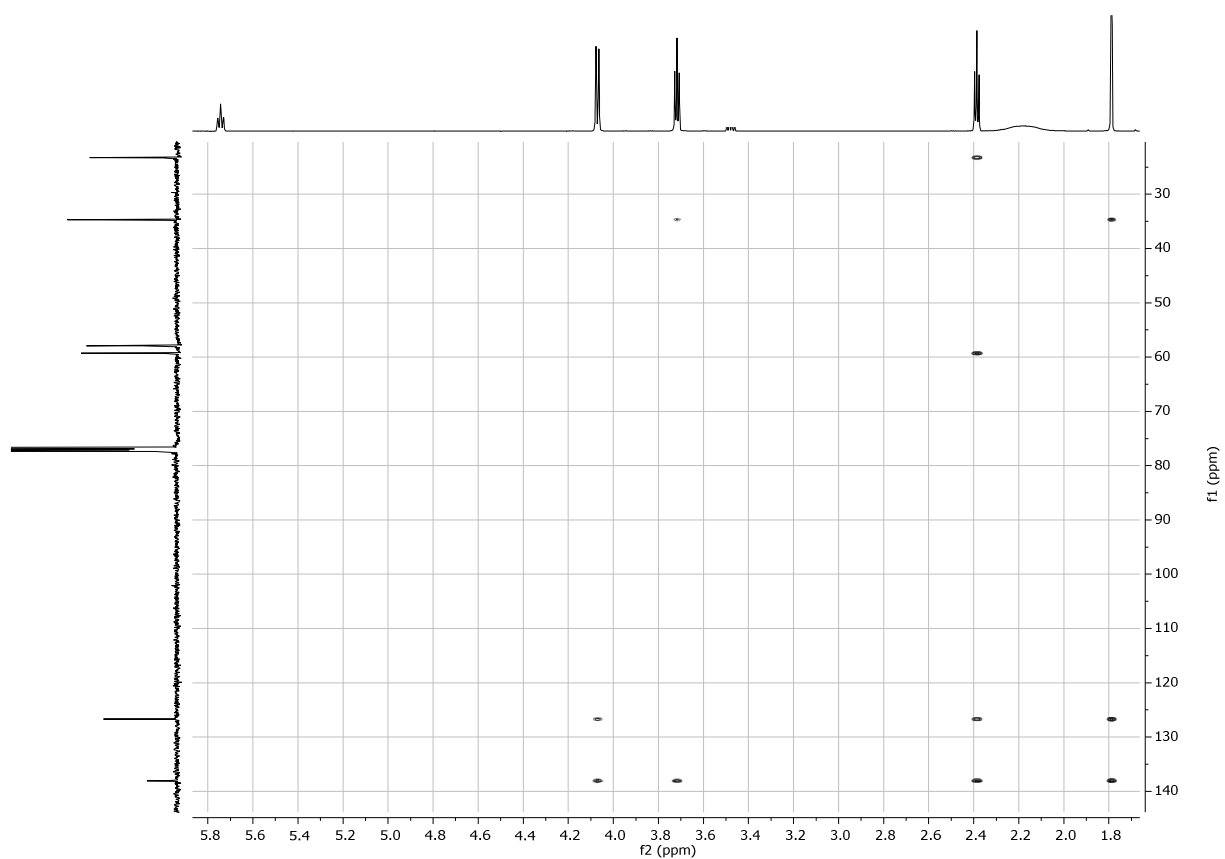
**Frage 2: (9 Punkte)**

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub> .

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
2. Geben Sie eine genaue Struktur an. Achten Sie auf die Stellung der Substituenten und begründen Sie diese Stellung. (3 P)
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
3. Im COSY sehen Sie mehrere Kopplungen. Woran erkennen Sie generell, welches Nah- bzw. Fernkopplungen sind? (2 P)





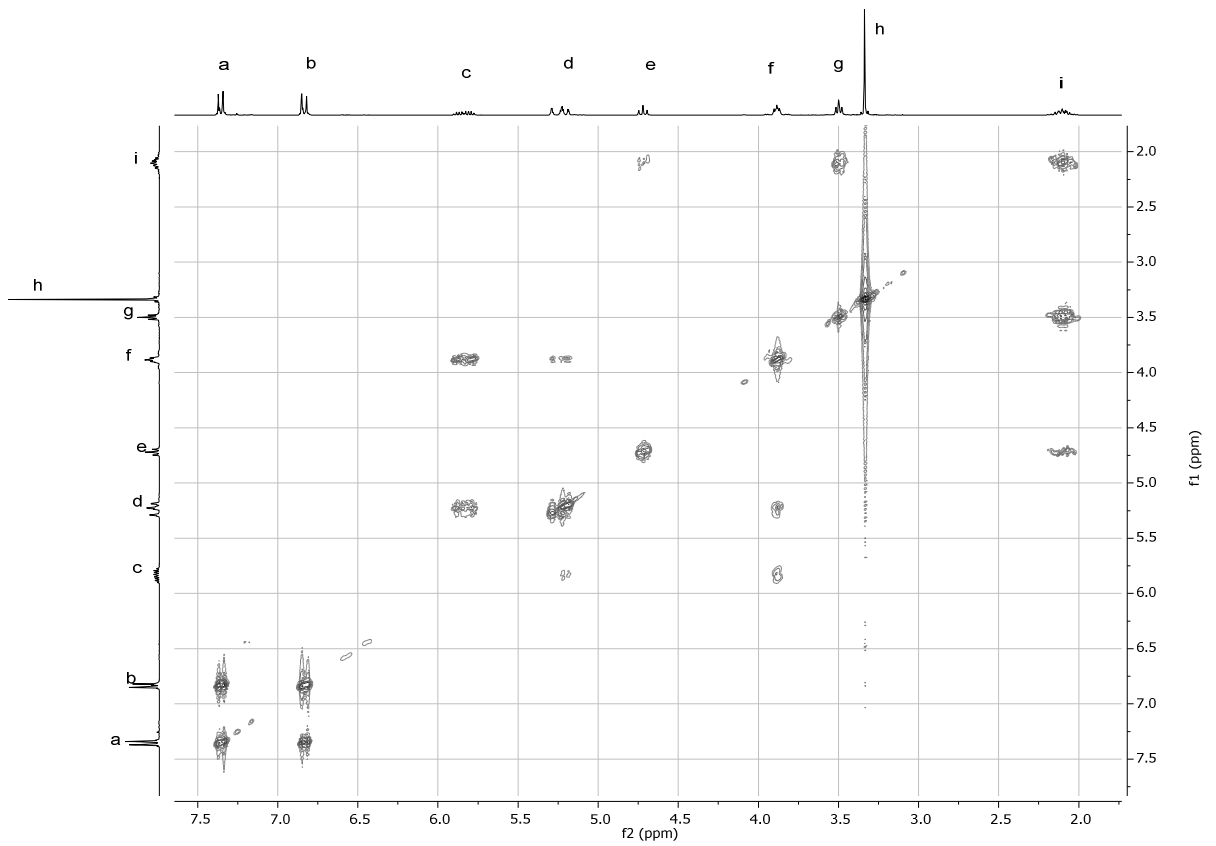
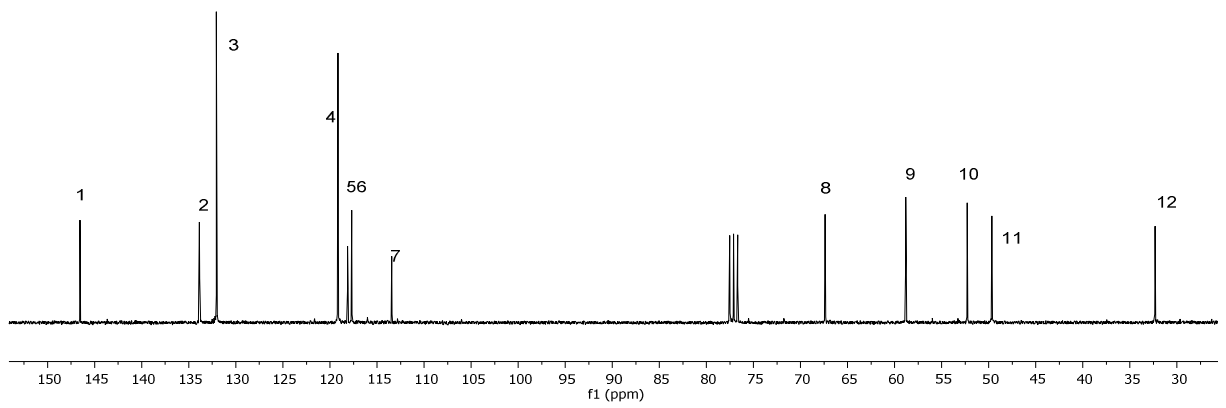
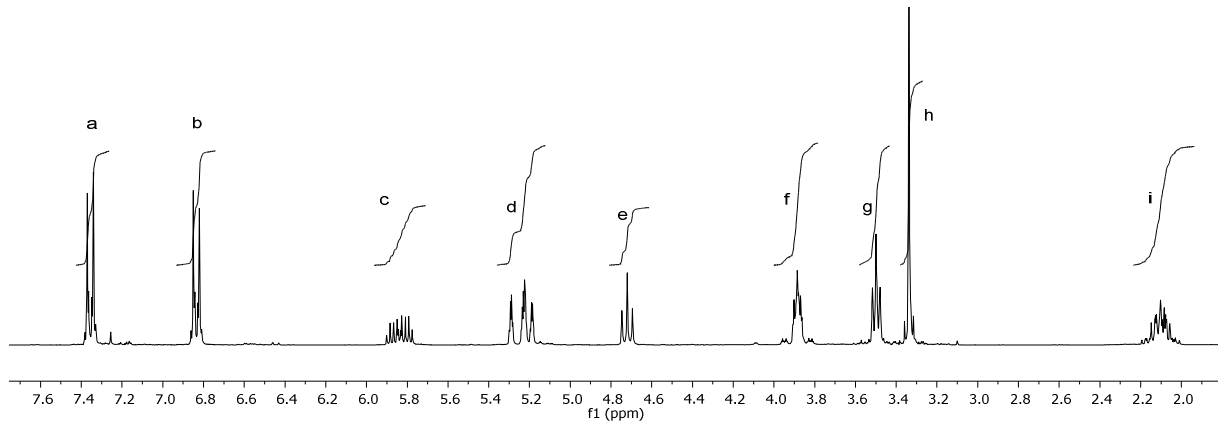


### Frage 3: (19 Punkte)

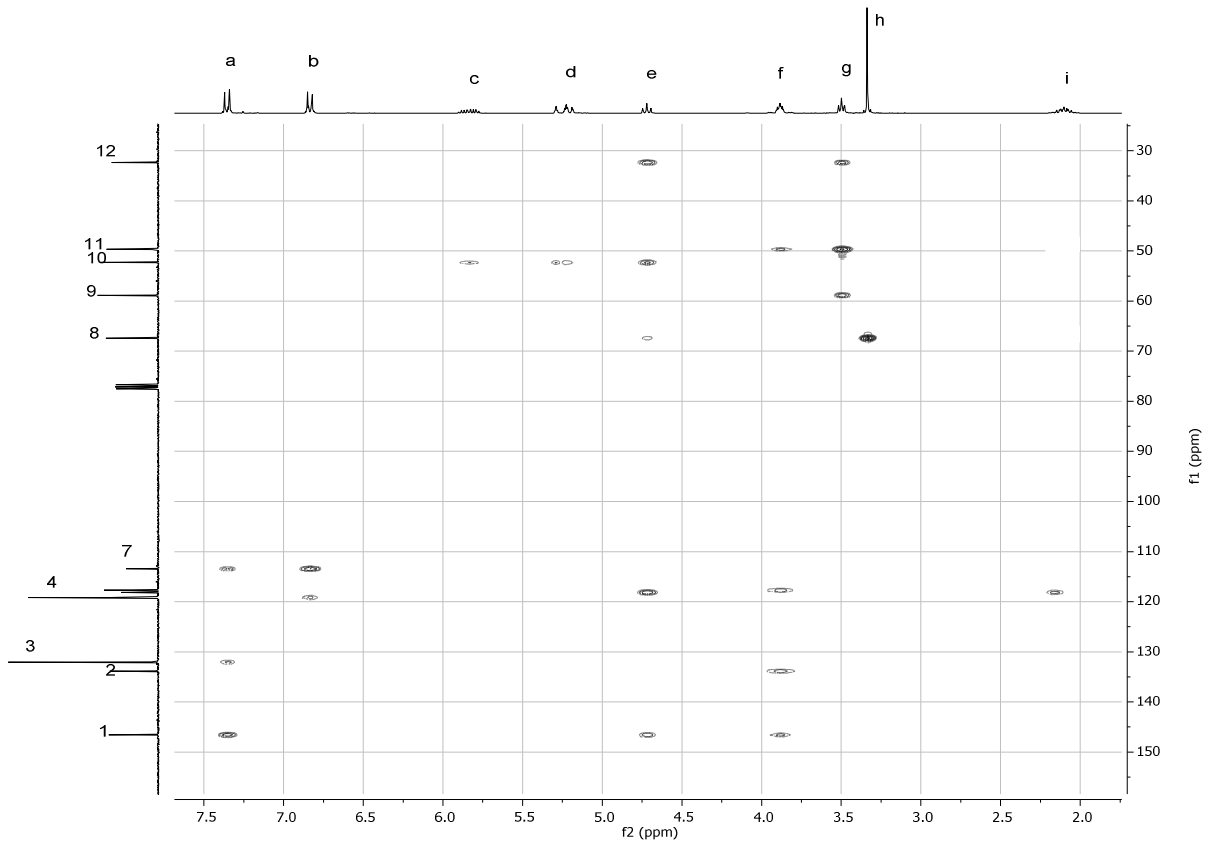
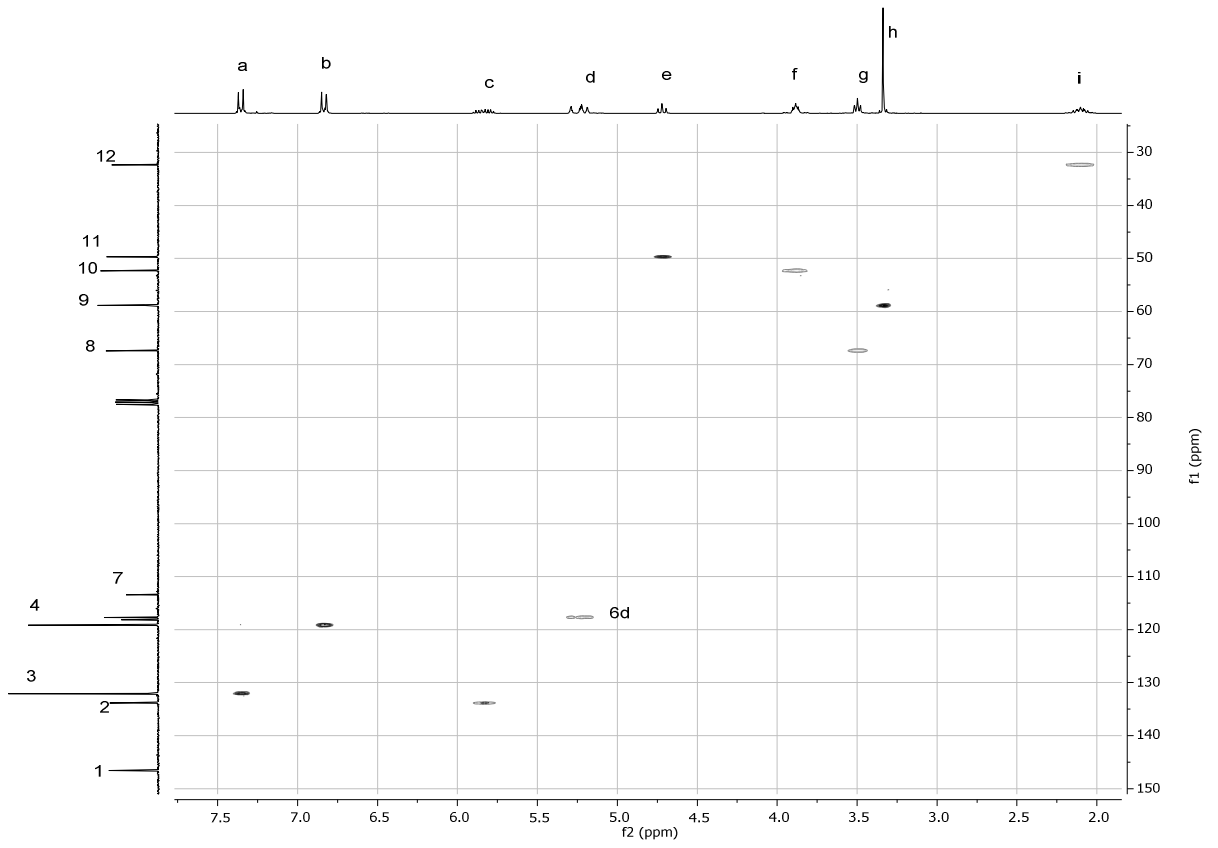
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren eines tertiärenamins mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{14}H_{17}BrN_2O$ .

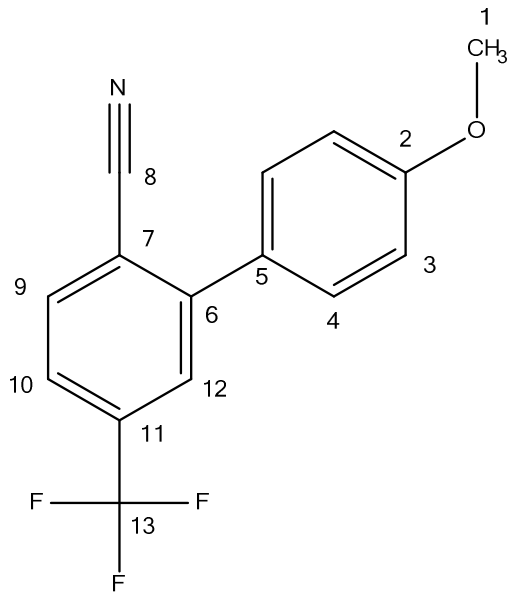
Hinweis: Es ist eine OMe- und eine CN-Gruppe enthalten.

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (5 P)
  
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu. (5 P)
  
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (3 P)
  
4. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbaren Kopplungen von C-Atom 1, 5, 6, 8 und 11 in Ihr Molekül ein. Verwenden Sie Farbstifte. Um welche Kopplung handelt es sich ( ${}^xJ_{CH}$ ) (5 P)

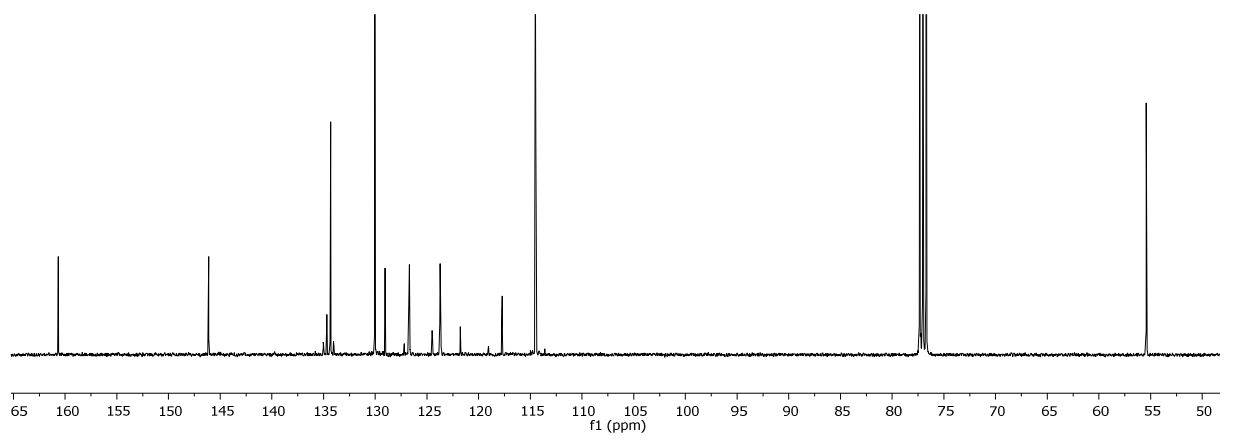
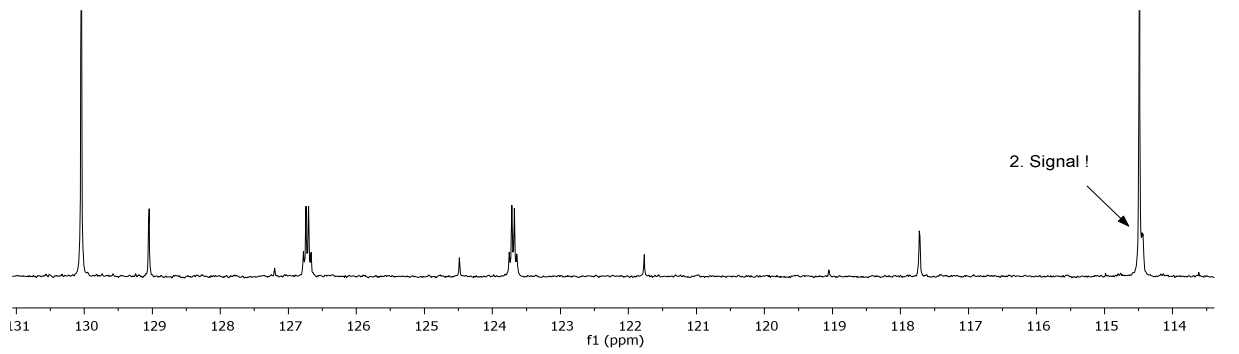
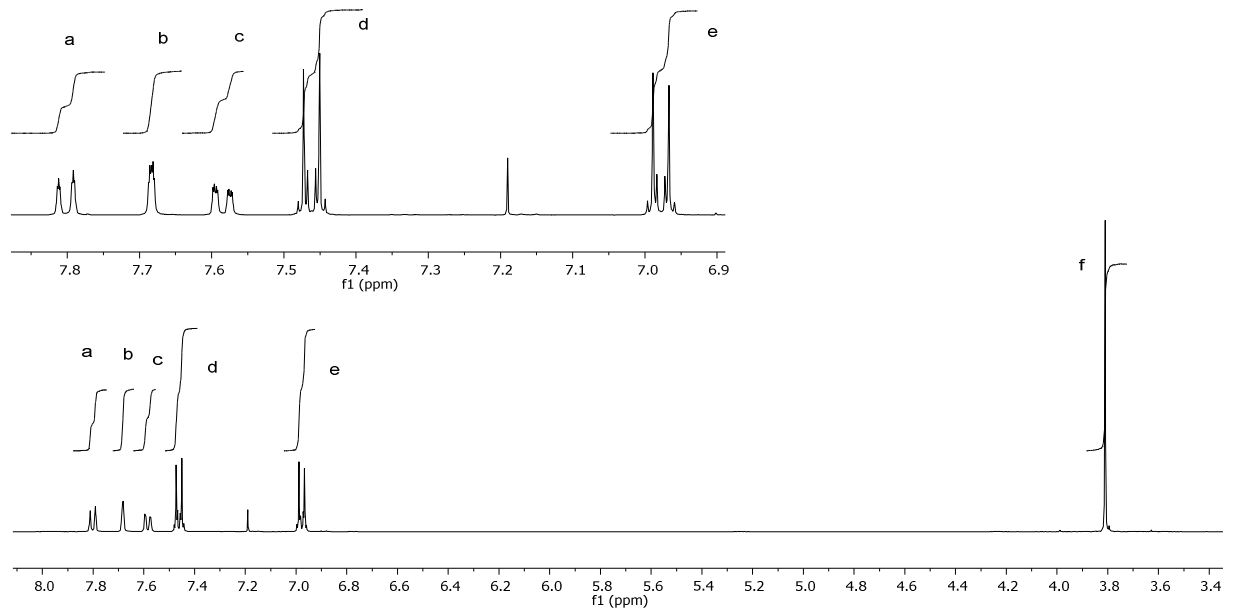


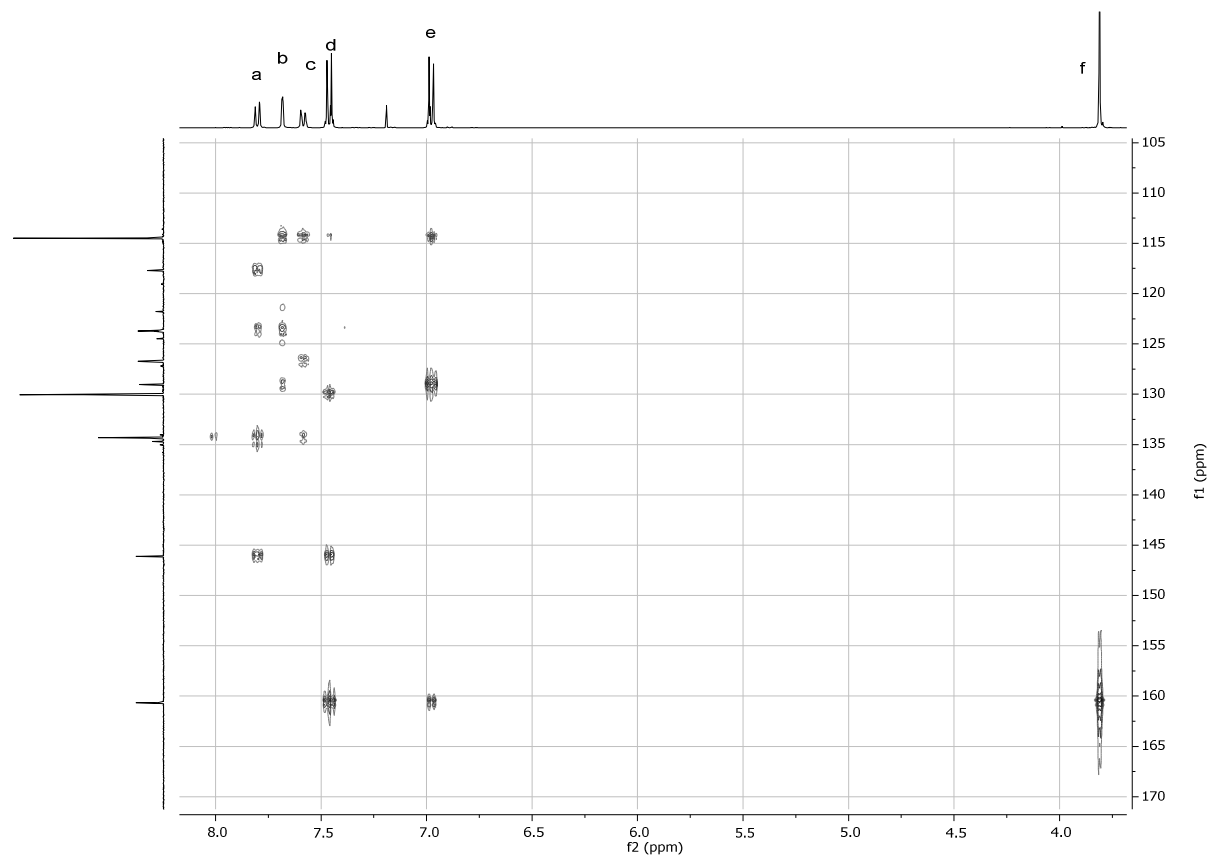
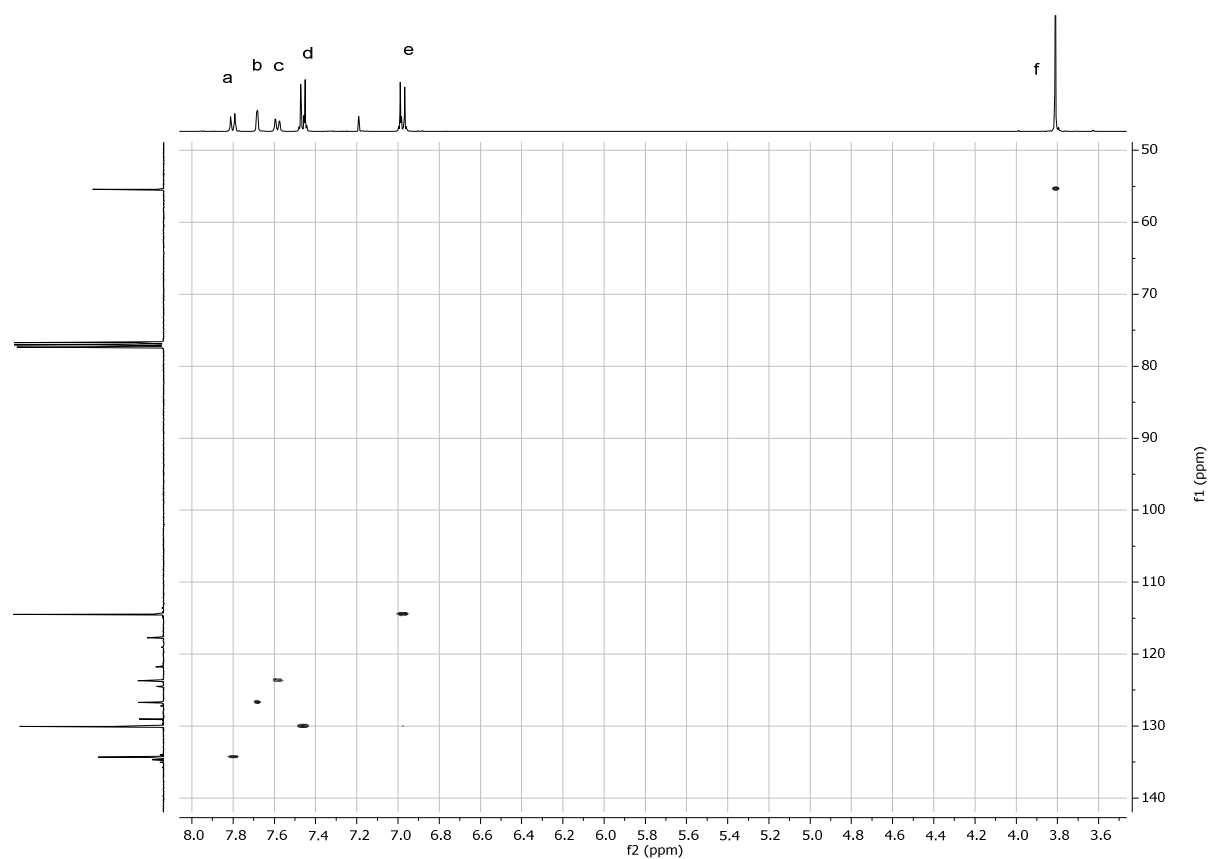


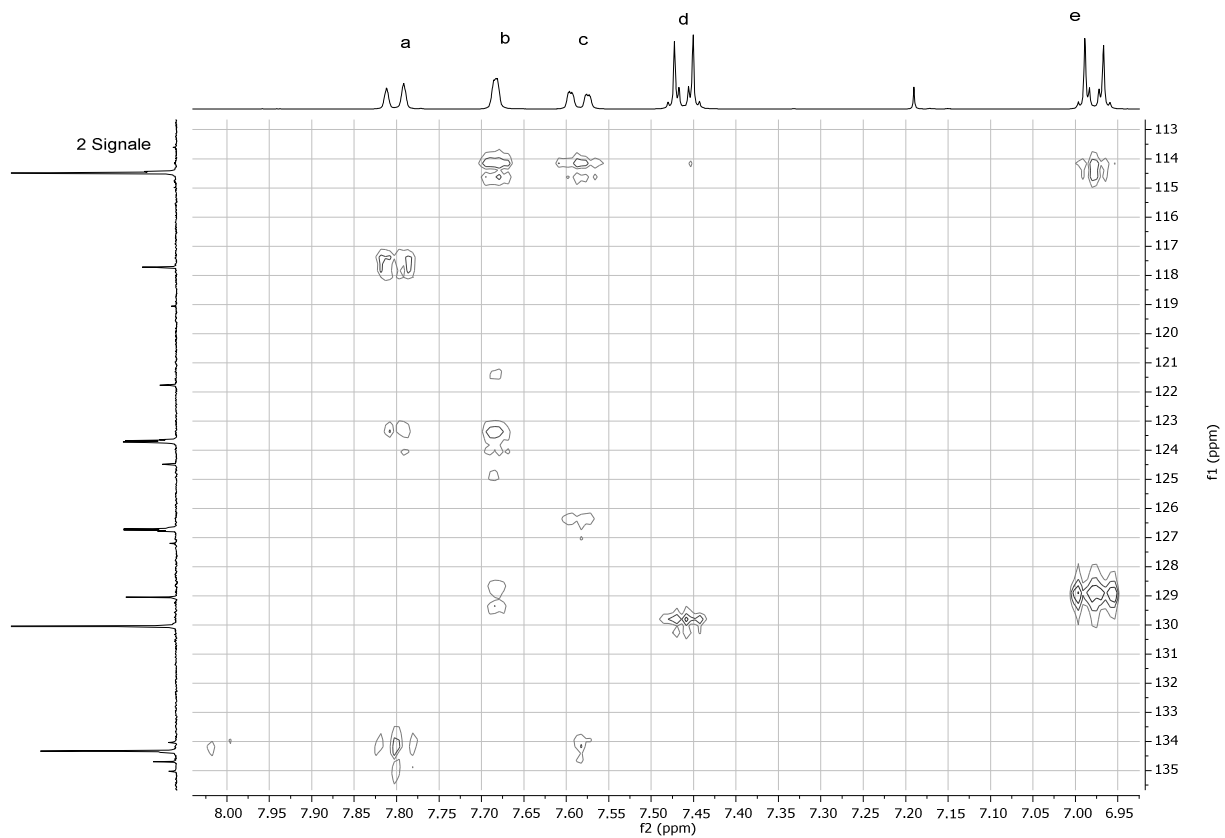


**Frage 4: (17 Punkte)**

1. Ordnen Sie alle Signale zu. (13 P)
2. Begründen Sie Ihre Zuordnung für die C-Atome 5,7,8 und 11 (4 P)







**Frage 5: Theorie (15 Punkte)**

1. Beim Ausdruck von 2D-Spektren werden an den Seiten die gemessenen  $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$ -Spektren eingefügt, weil die internen Spektren sehr unschön sind. Warum sind die internen Spektren so schlecht aufgelöst? Gehen Sie dabei auch darauf ein, wie 2D-Spektren entstehen. (5 P)

2. Das Signal einer Methylgruppe kommt auf einem 300 MHz-Gerät bei einer Verschiebung  $\delta = 1,5$  ppm. Füllen Sie untere 3 Felder aus. (1.5P)

$$\delta (300 \text{ MHz}) = \quad \text{Hz}$$

$$\delta (400 \text{ MHz}) = \quad \text{ppm}$$

$$\delta (400 \text{ MHz}) = \quad \text{Hz}$$

3. Um das Signal-Rausch-Verhältnis eines Spektrums zu verbessern, kann man länger messen. Was bedeutet das? Ändert sich dadurch das Pulsprogramm oder wie kann ich die Messung verlängern? Erklären Sie genau. (3 P)

4. Warum ist es notwendig, das NMR-Röhrchen auf eine bestimmte Höhe zu füllen. Nennen Sie je einen Grund, warum man nicht zu viel bzw. zu wenig Lösungsmittel verwenden sollte. (2 P)
5. Ein Proton sitzt in der Nähe einer  $e^-$ -ziehenden Gruppe und kommt darum weiter links im Spektrum. Warum? Erklären Sie. (3,5 P)