

WS17 Name

Matrikelnr.....

**Spektroskopie 2 (NMR)
WS 2017 Klausur**

19.12.2017

Bei Erklärungen bitte stichpunktartig antworten (event. mit Skizze) – ohne lange Romane.

Frage 1: (17 Punkte)

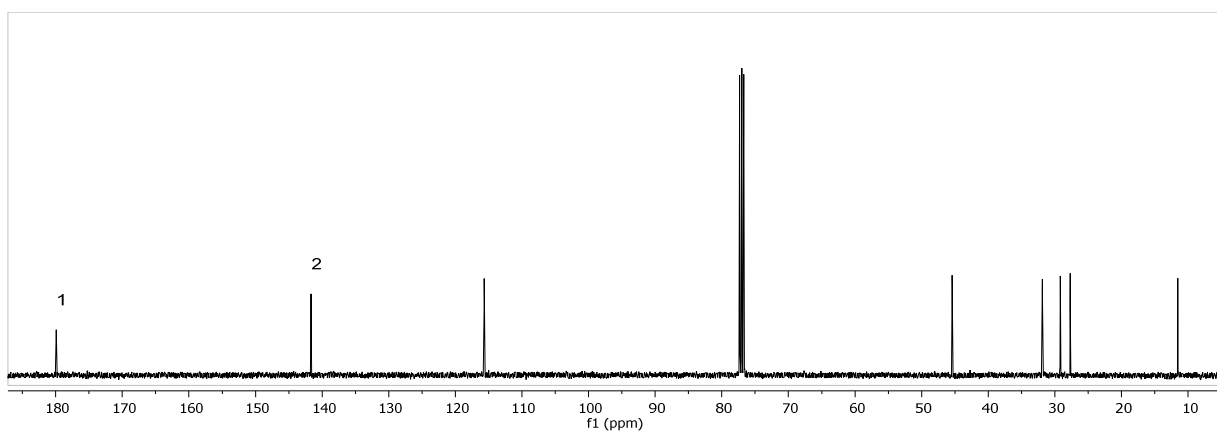
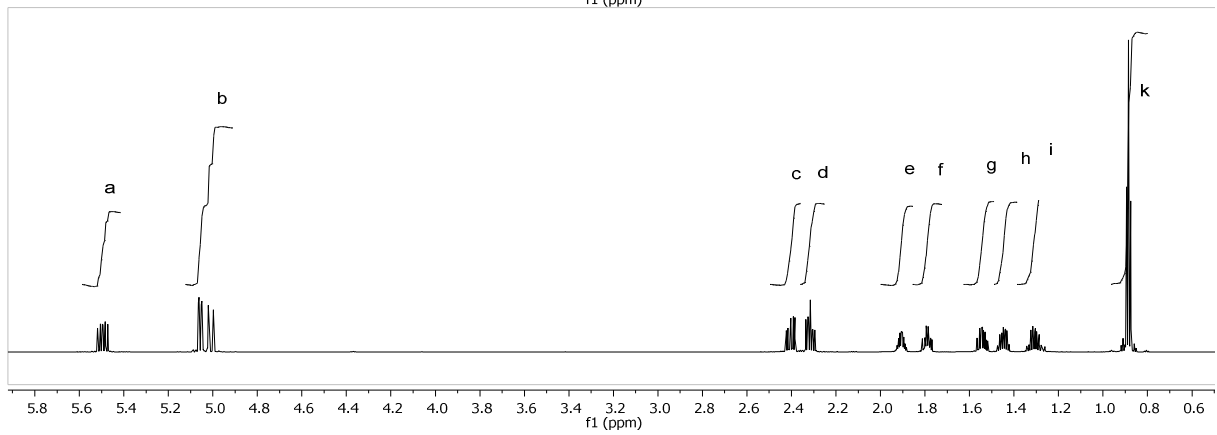
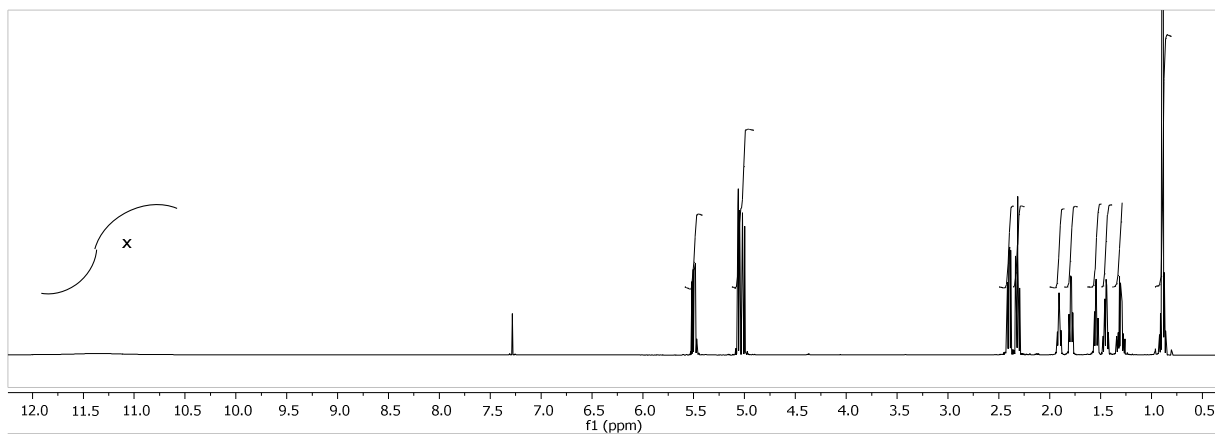
Auf Seite 2 ff sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_8H_{14}O_2$.

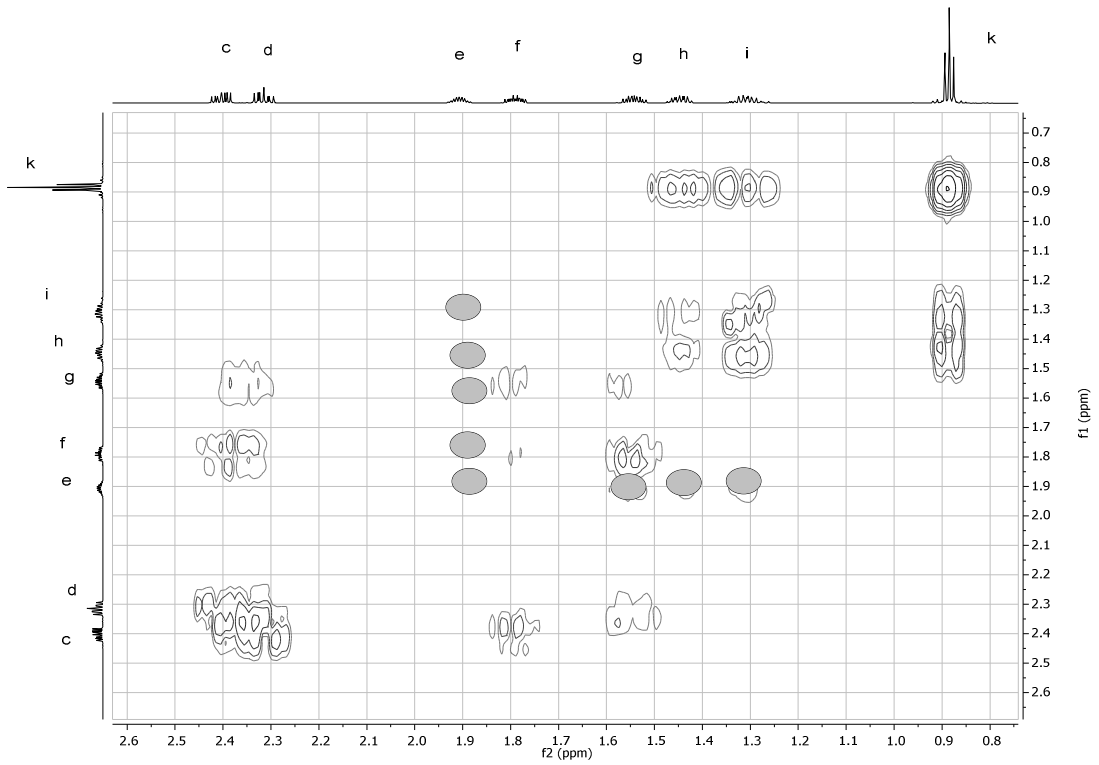
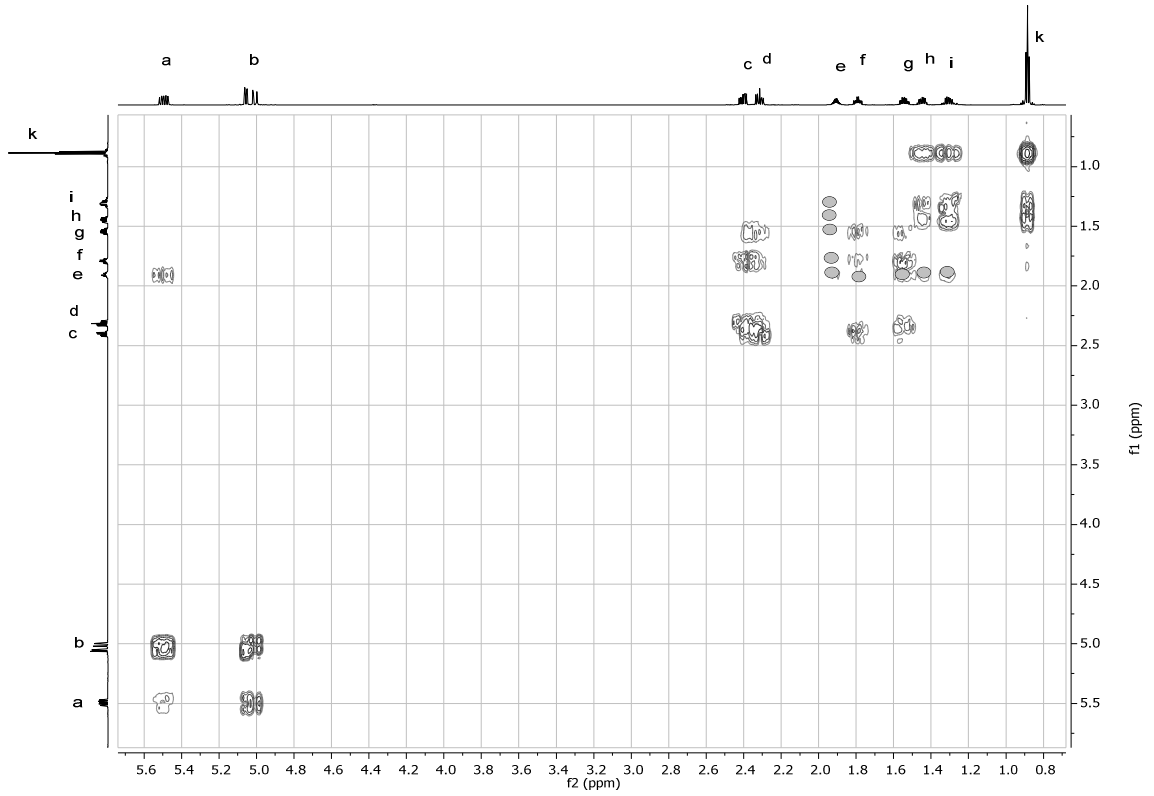
1. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. Schreiben Sie stichpunktartig auf die Rückseite, wie Sie auf die Struktur gekommen sind. (Nur allgemeiner Verweis auf Spektren zählt nicht !)
(9 P)

2. Ordnen Sie C 1 und 2 und alle Protonen zu. Zeichnen Sie von C-Atomen 1 und 2 die im HMBC sichtbaren Kopplungen in Ihr Molekül ein. Machen Sie für diese beiden C-Atome eine Tabelle wie in der Übung.
(4 P)

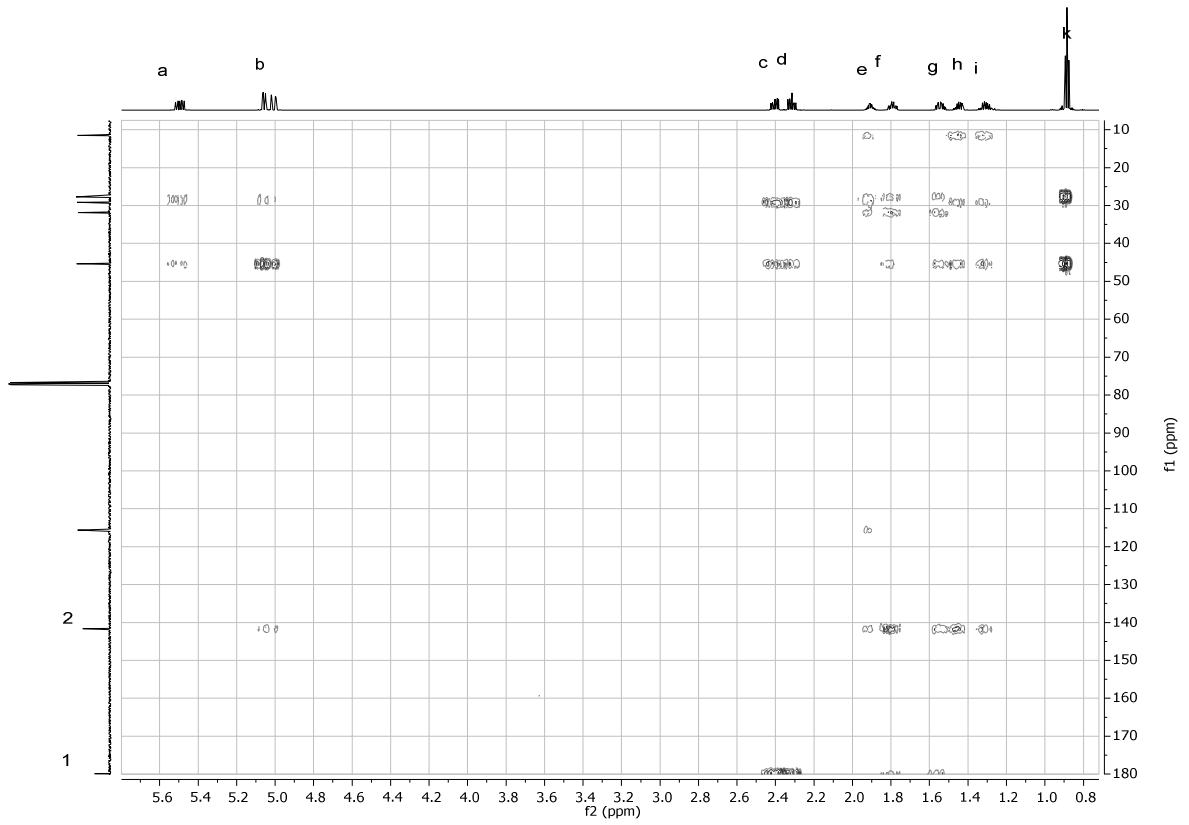
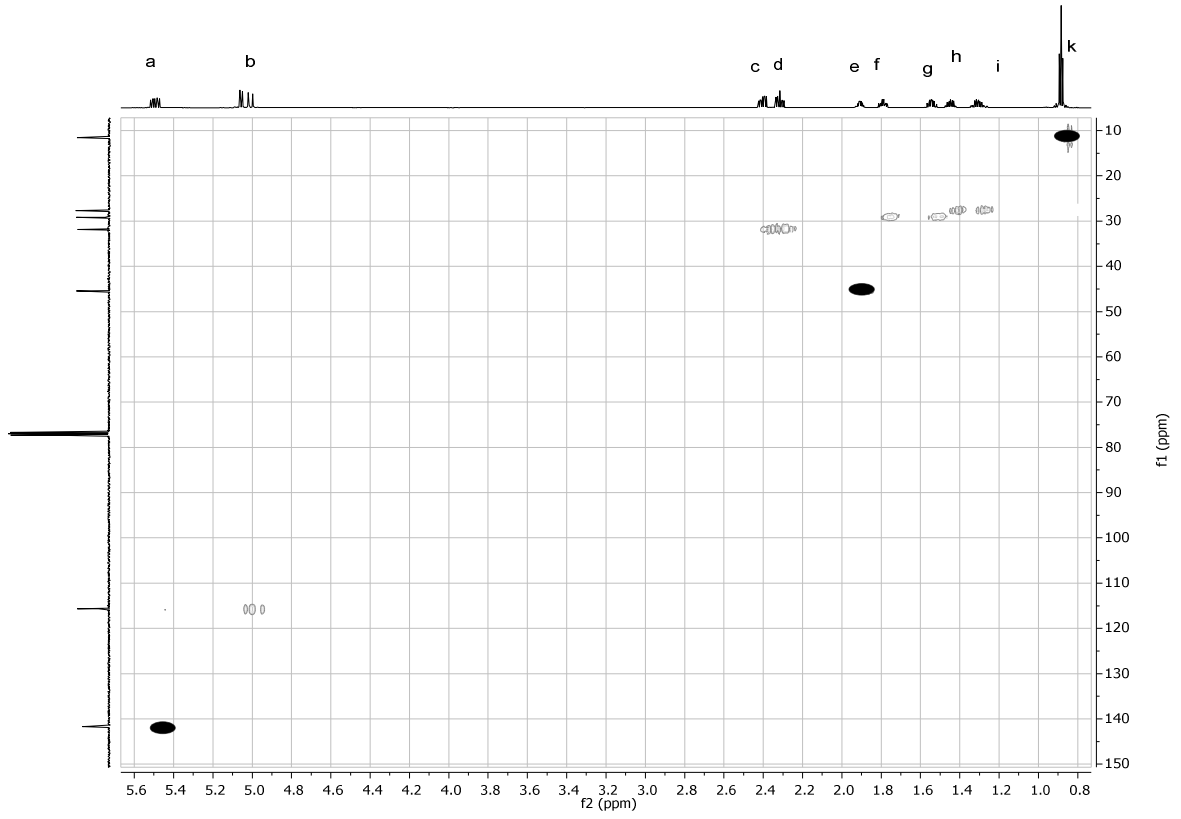
3. Bestimmen Sie das Spinsystem
(1 P)

4. Das 1H -Spektrum von dieser Substanz wurde auf 2 verschiedenen Maschinen aufgenommen. (Siehe Seite 5). Welches Spektrum ist bei höherer Frequenz aufgenommen? Begründen Sie.
(3 P)

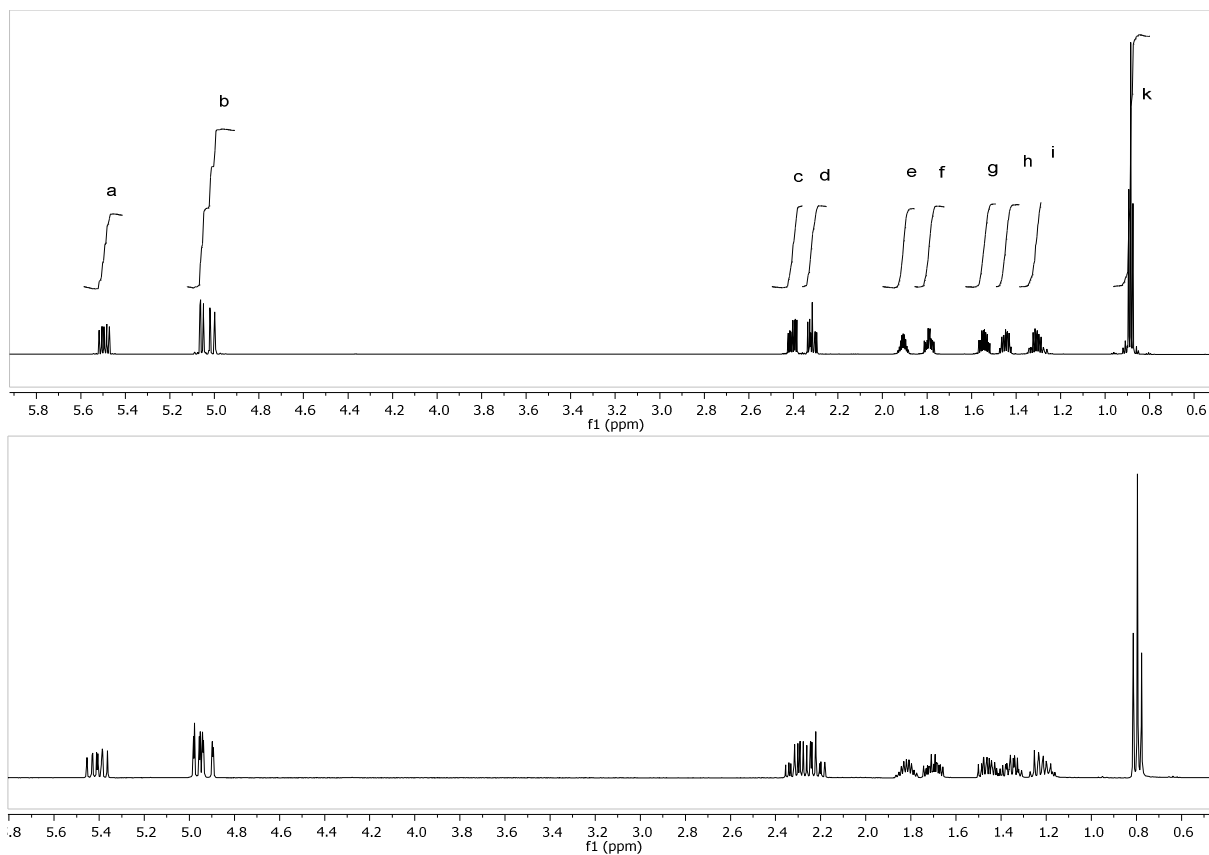




Vergrößerung Cosy



Zu Frage 5:

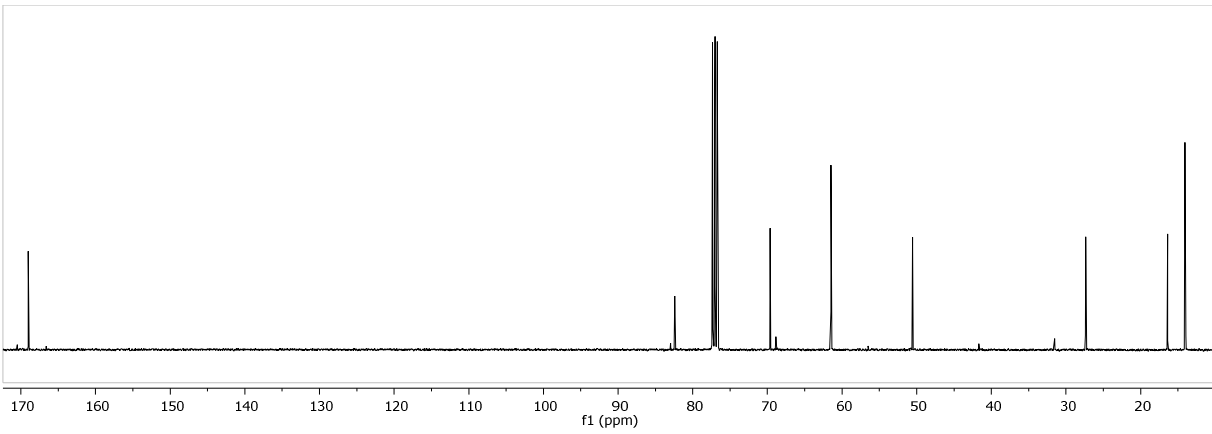
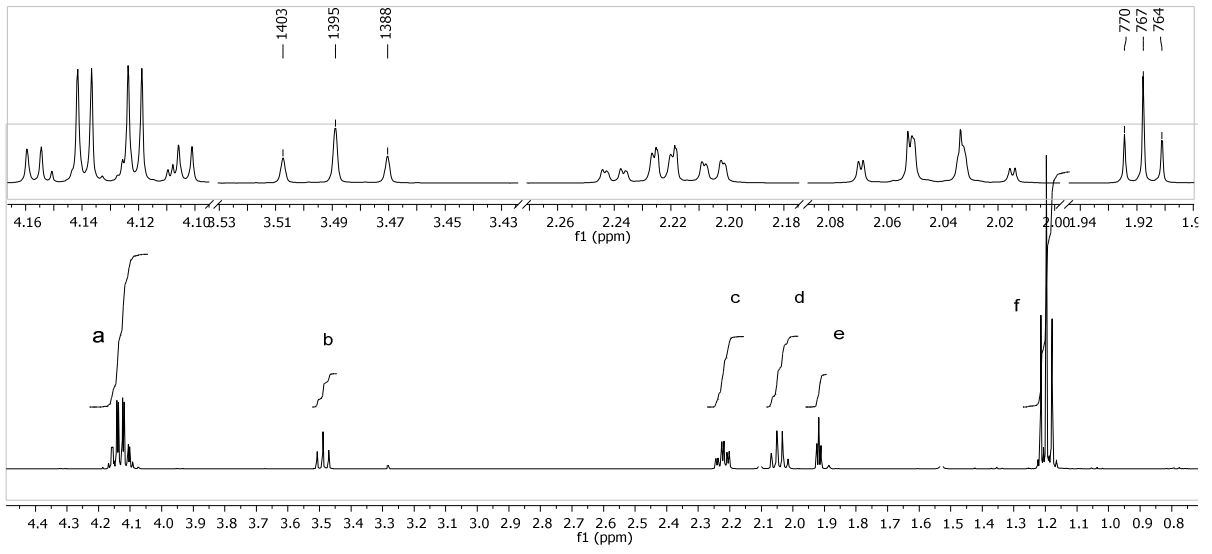


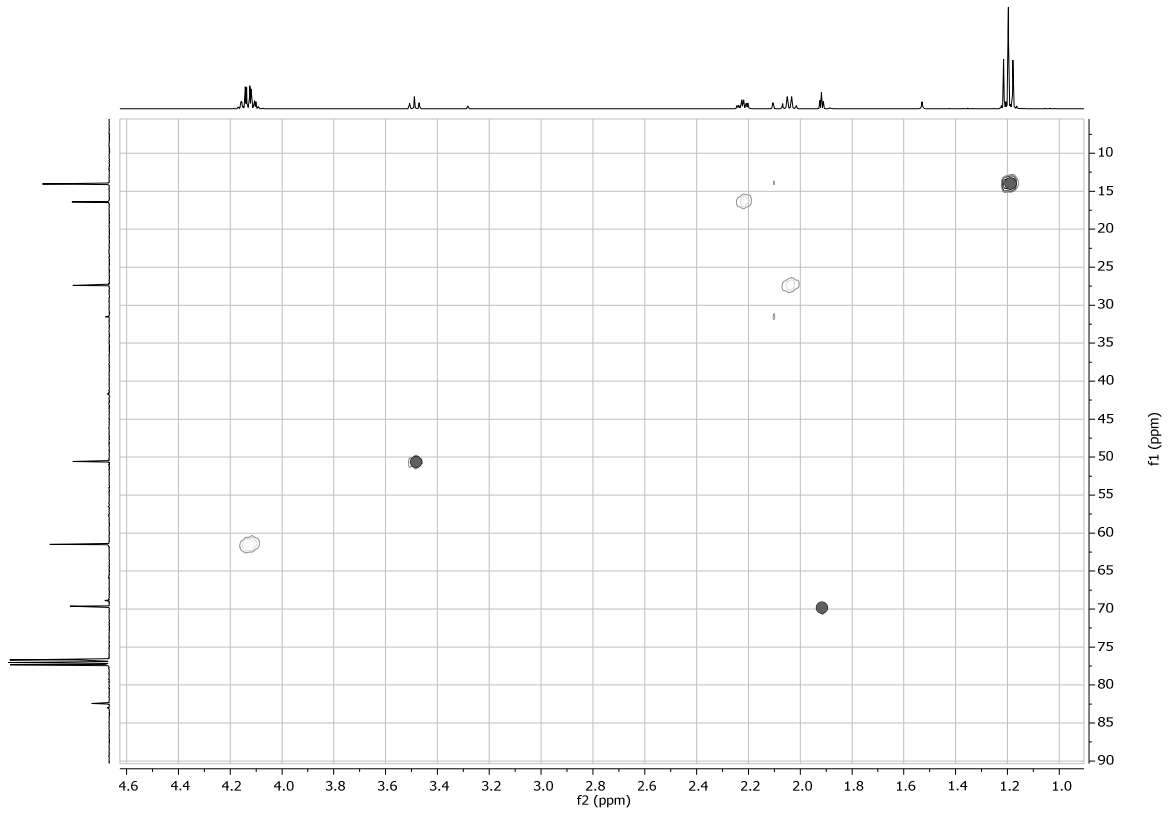
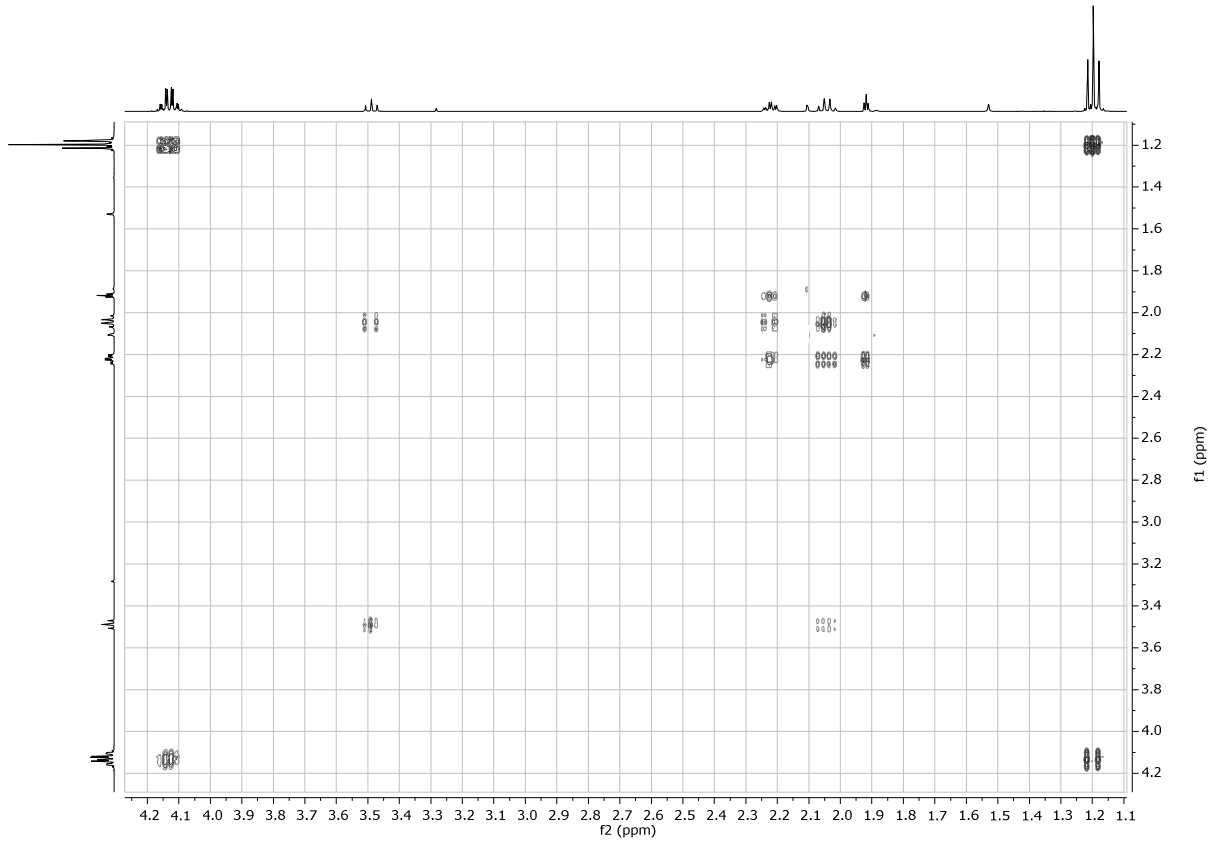
Frage 2: (9 Punkte)

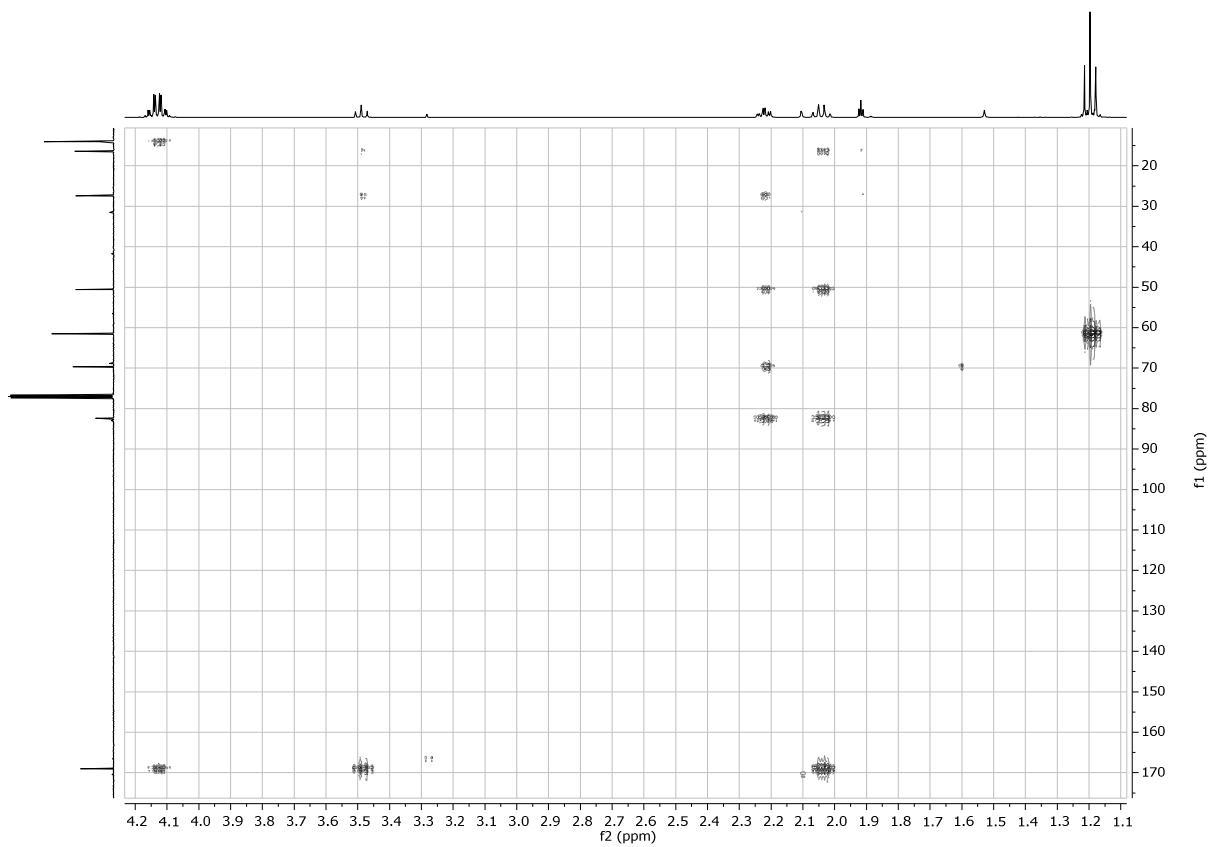
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{11}H_{16}O_4$.

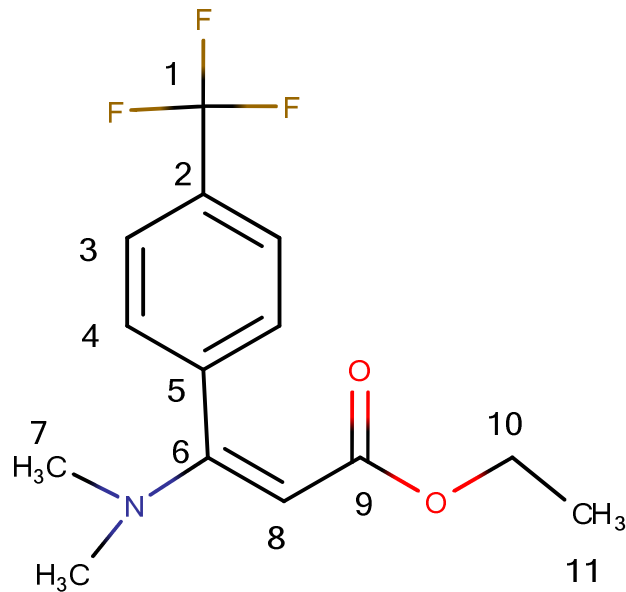
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (5 P)
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
3. Bestimmen Sie das Spinsystem und schreiben Sie die Buchstaben auch ins Molekül. (3 P)

Die kleinen Signale bei diesem Quartett
nicht beachten !





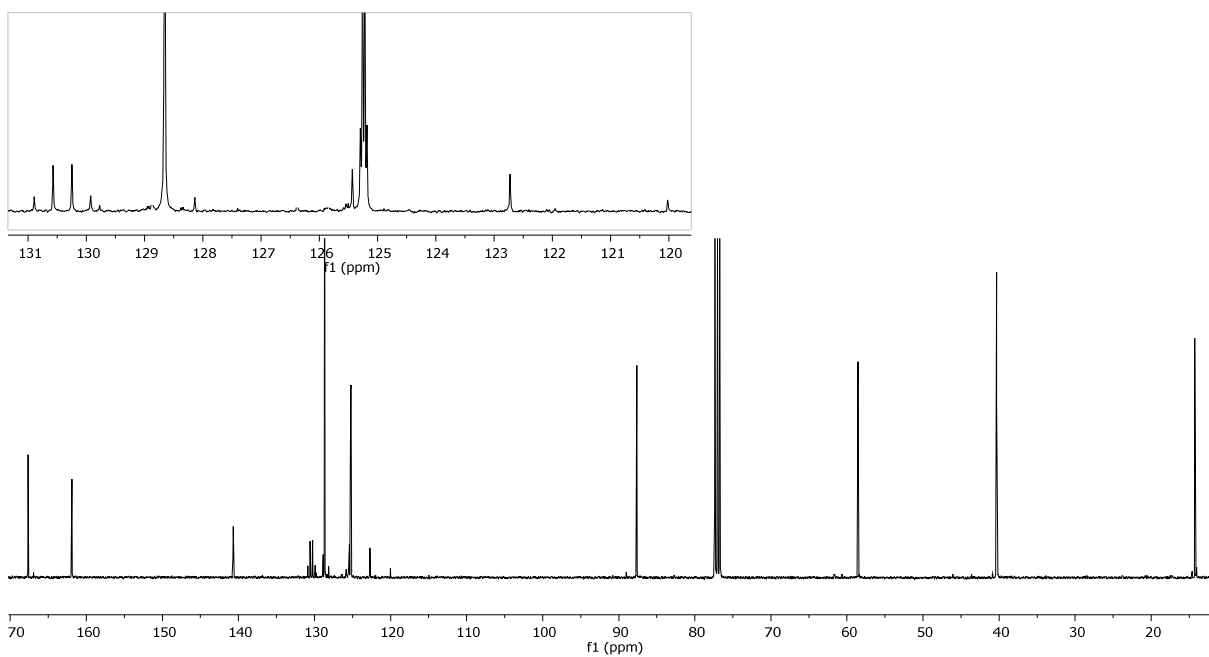
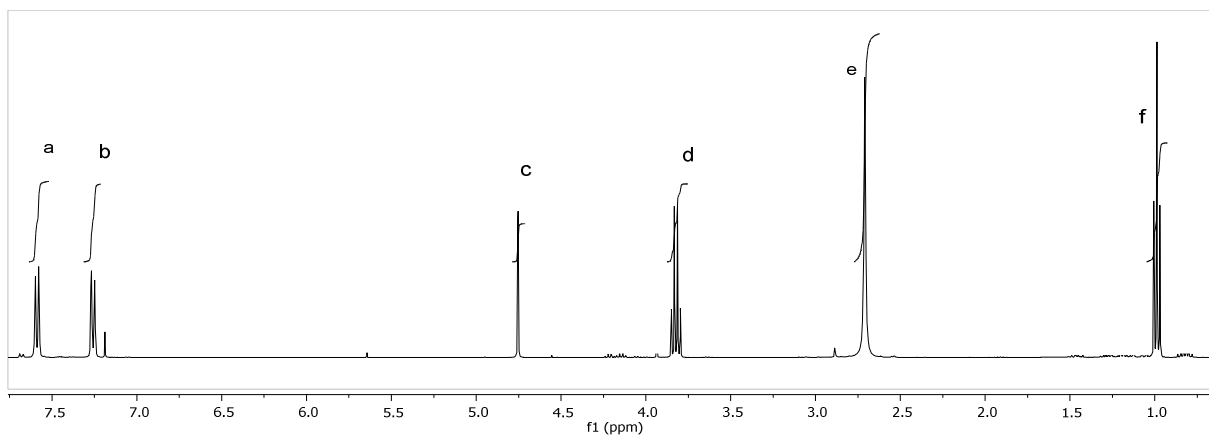


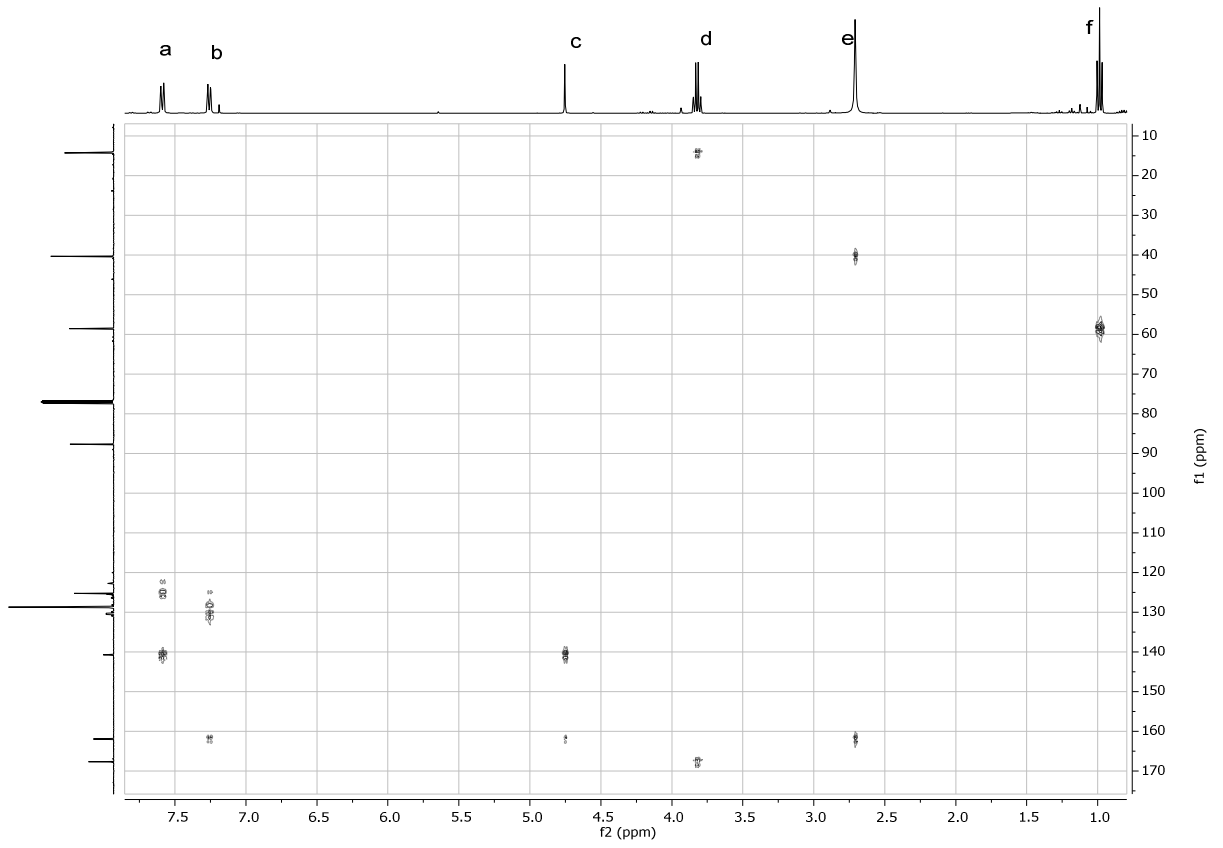
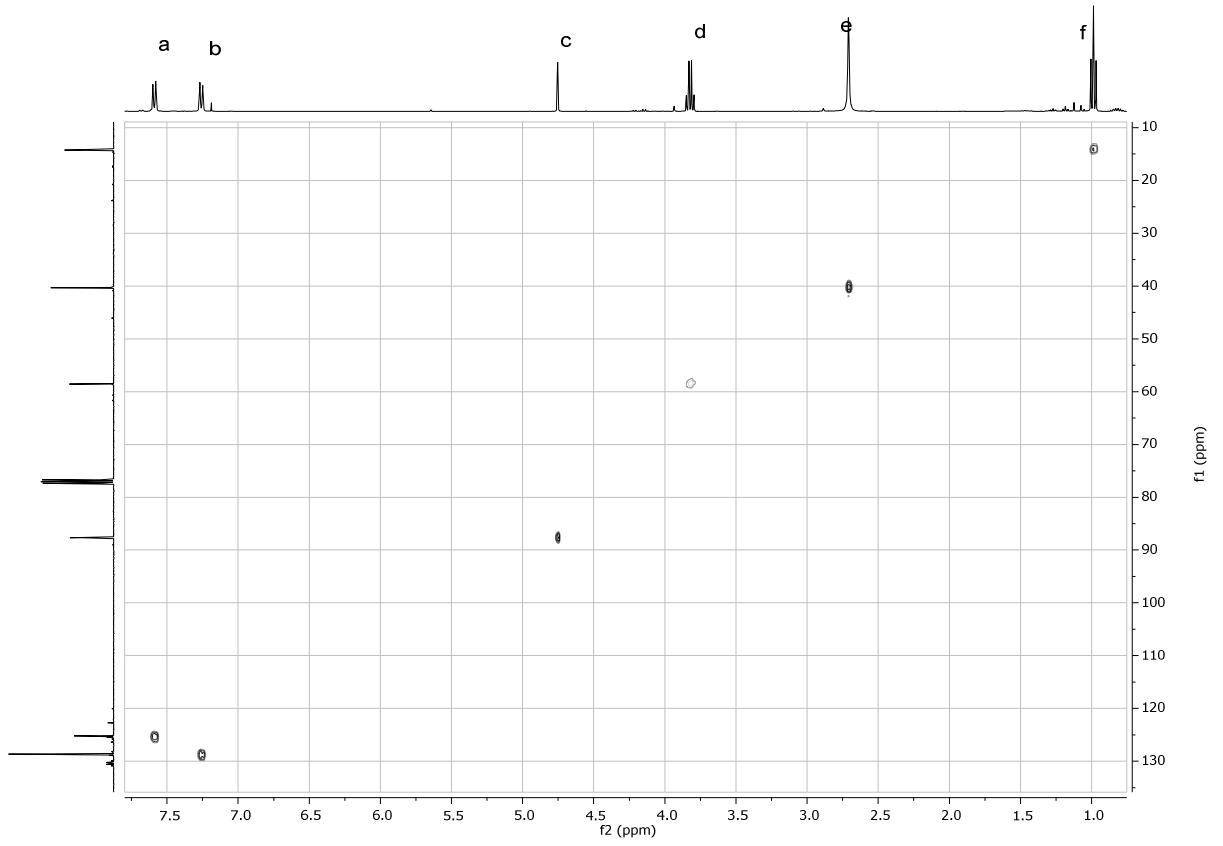
Frage 3: (14 Punkte)

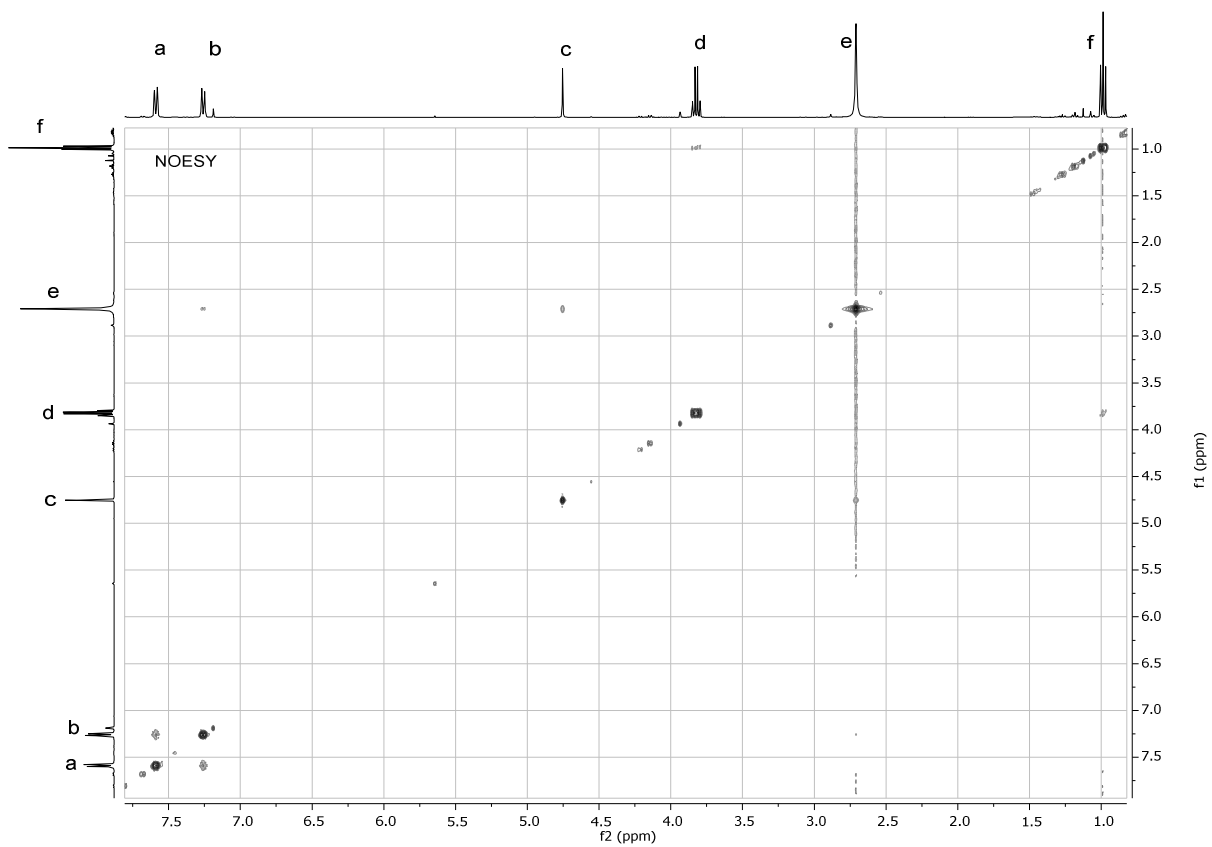
1. Ordnen Sie alle Signale zu. (9 P)
¹H: schreiben Sie die Buchstaben a – f in obiges Molekül.
¹³C: schreiben Sie die Zahlen 1 – 11 in das ¹³C-Spektrum.

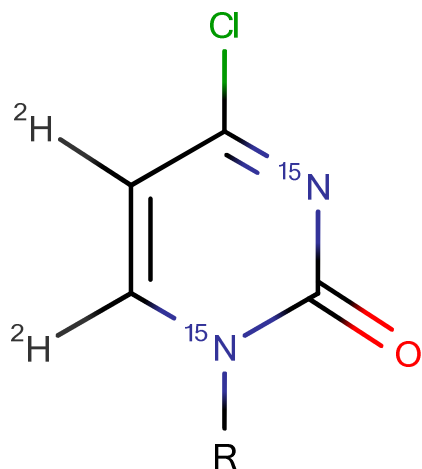
2. Welches Lösungsmittel wurde hier verwendet.
 Erklären Sie die Aufspaltung im ¹³C-Spektrum. Warum sind alle 3 Signale gleich groß? (2 P)

3. Wie ist die Stereochemie an der Doppelbindung? Stimmt die Struktur so?
 (Wenn nein: schreiben Sie die genaue Struktur auf.)
 Begründen Sie Ihre Entscheidung auf jeden Fall.. (3 P)







Frage 4: (14 Punkte)

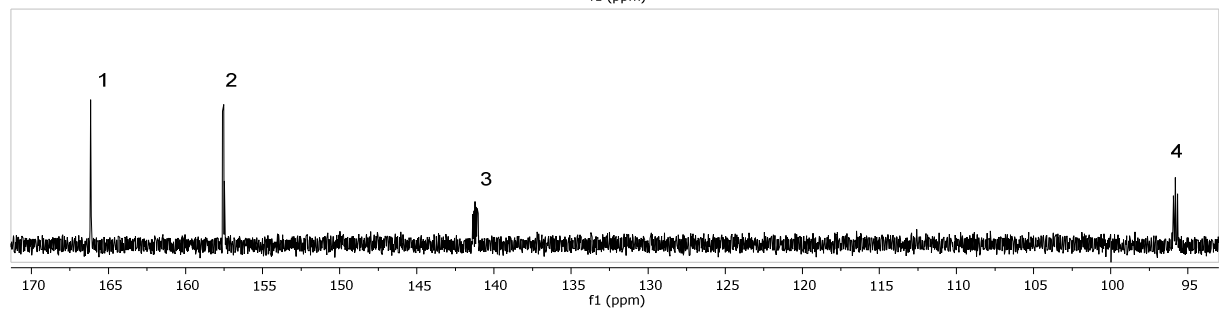
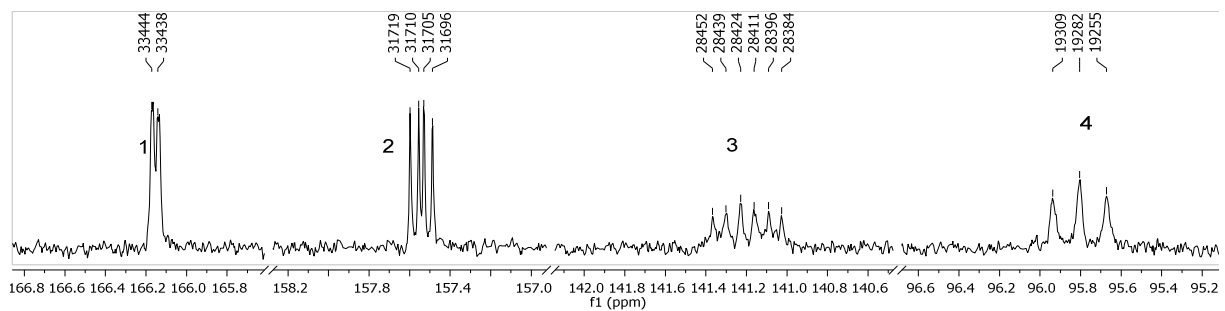
Hinweis: Die Substanz ist ^{15}N - und Deuterium-gelabeled.

1. Ordnen Sie die 4 Kohlenstoff-Signale des oberen Ringes zu. (4 P)

2. Erklären Sie die jeweilige Aufspaltung (4 P)

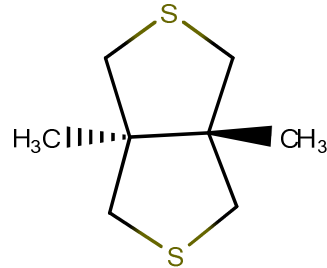
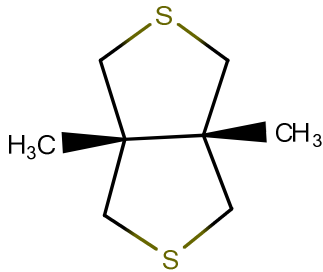
$$I(^{15}\text{N}) = \frac{1}{2}$$

3. Bestimmen Sie alle vorhandenen Kopplungskonstanten für diese 4 Cs. (6 P)

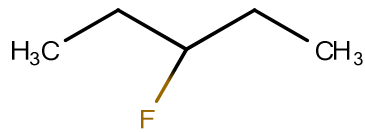
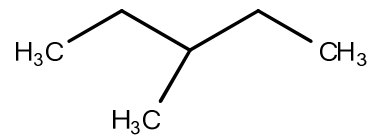
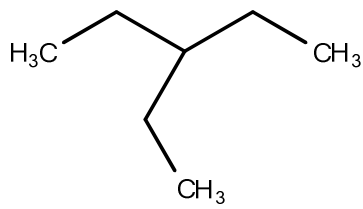


Frage 5: Theorie (16 Punkte)

1. Wieviele Signale sehen Sie von folgenden Substanzen im ^1H -Spektrum (5 P)



Zur Vereinfachung: Nehmen Sie an, die Ringe sind planar !



2. Welche Aussagen sind richtig, welche falsch ? (mit kurzer Begründung) (9 P)
Erklären Sie dabei auch den unterstrichenen Begriff.

Je mehr Substanz gelöst ist,

desto stärker ist der NOE-Effekt

umso schneller geht die Messung (bei gleichem Signal zu Rausch-Verhältnis)

desto größer ist der Dacheffekt im Spektrum.

desto größer ist das magnetogyrisches Verhältnis

desto kleiner wird die Larmor-Frequenz

3. Wovon hängt die Larmor-frequenz ab?

(2 P)