

WS18 Name .....

Matrikelnr.....

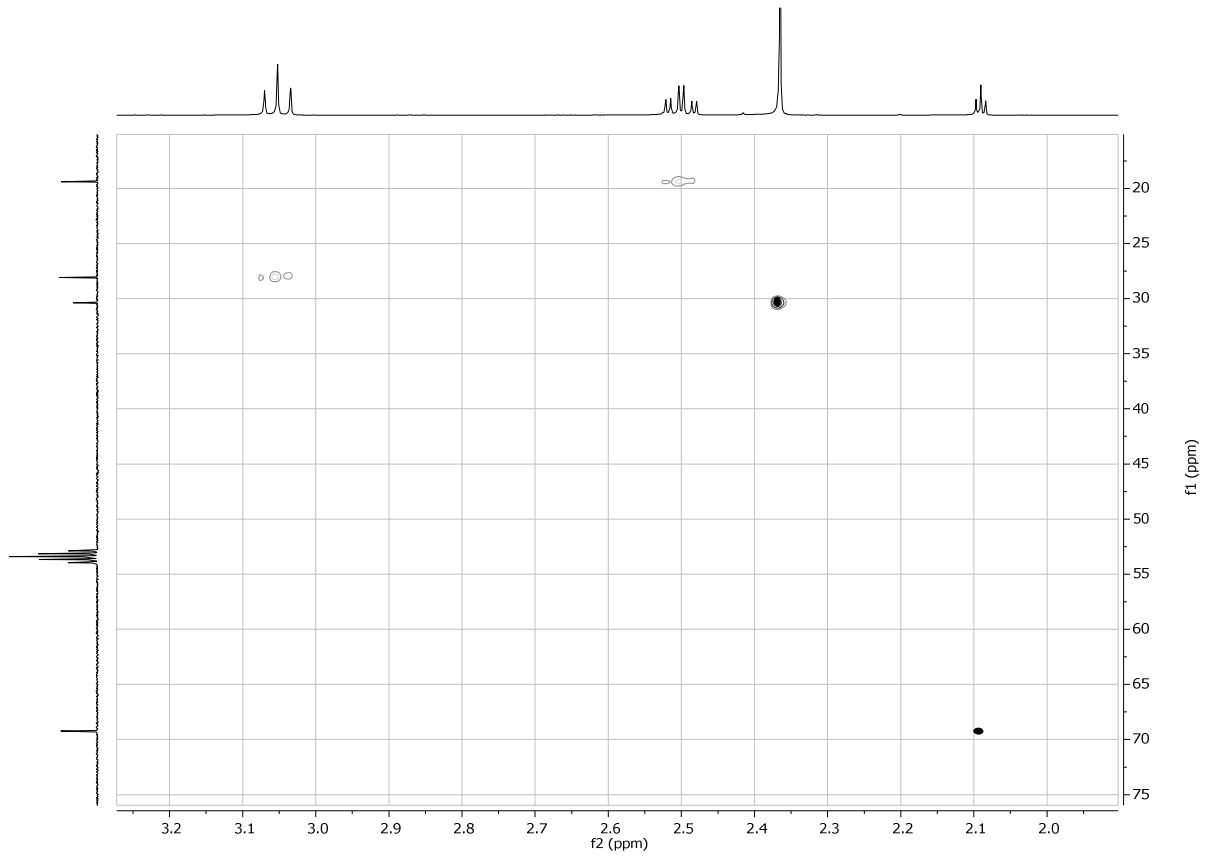
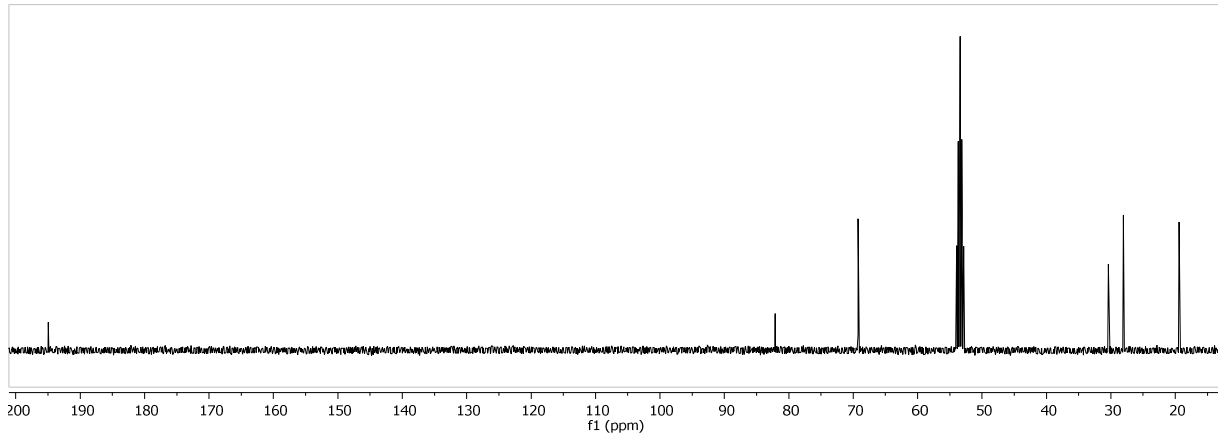
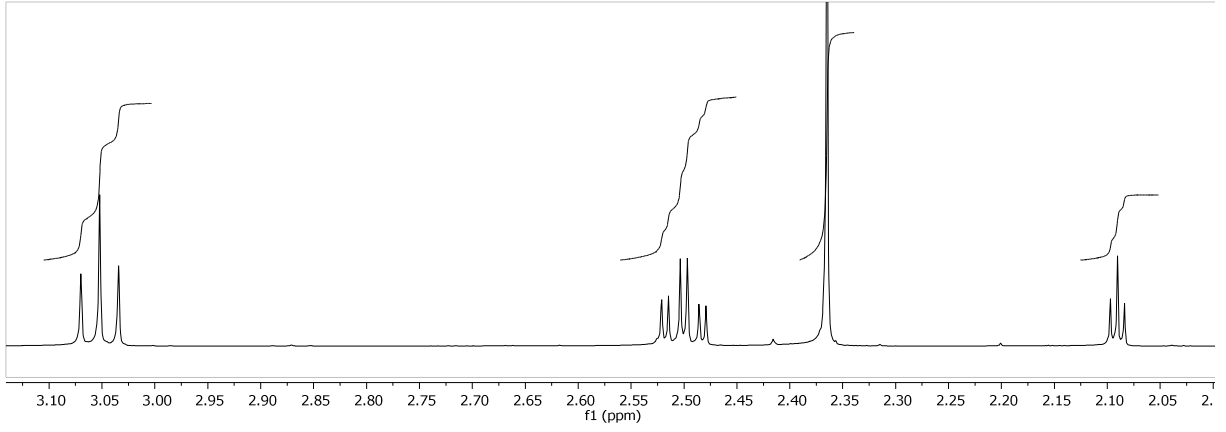
**Spektroskopie 2 (NMR)  
WS 2018 Klausur**

18.12.2018

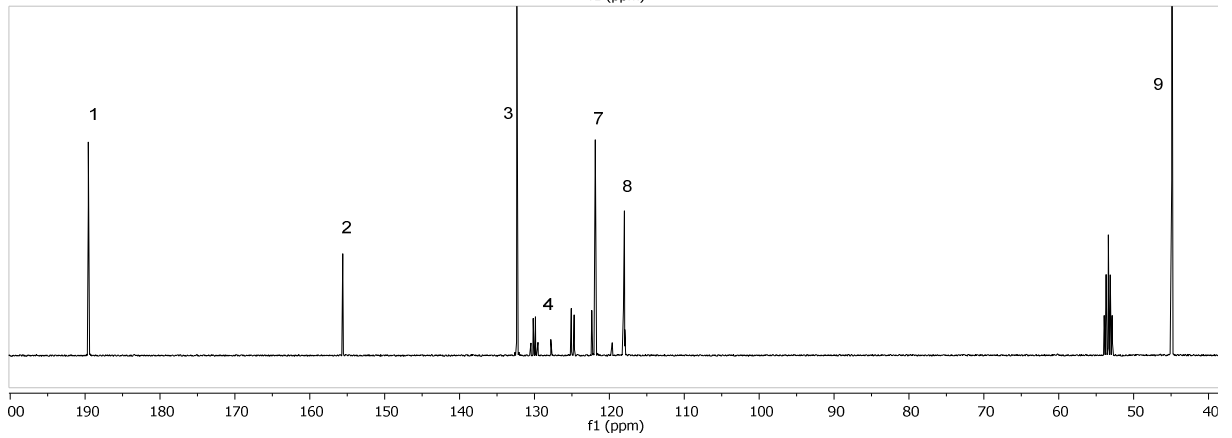
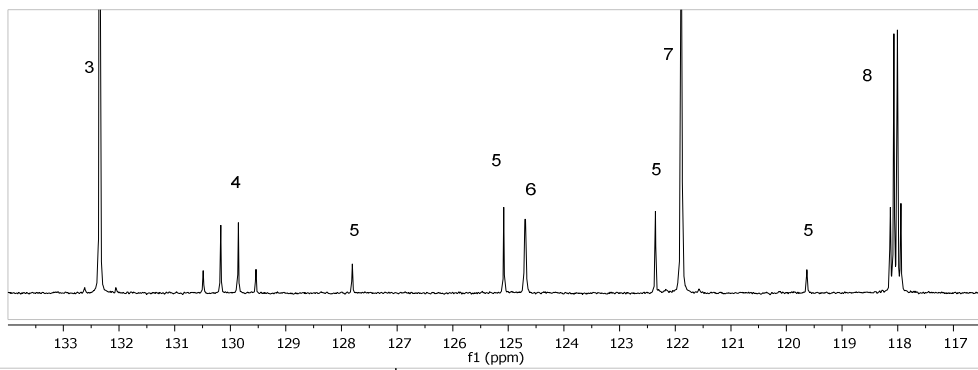
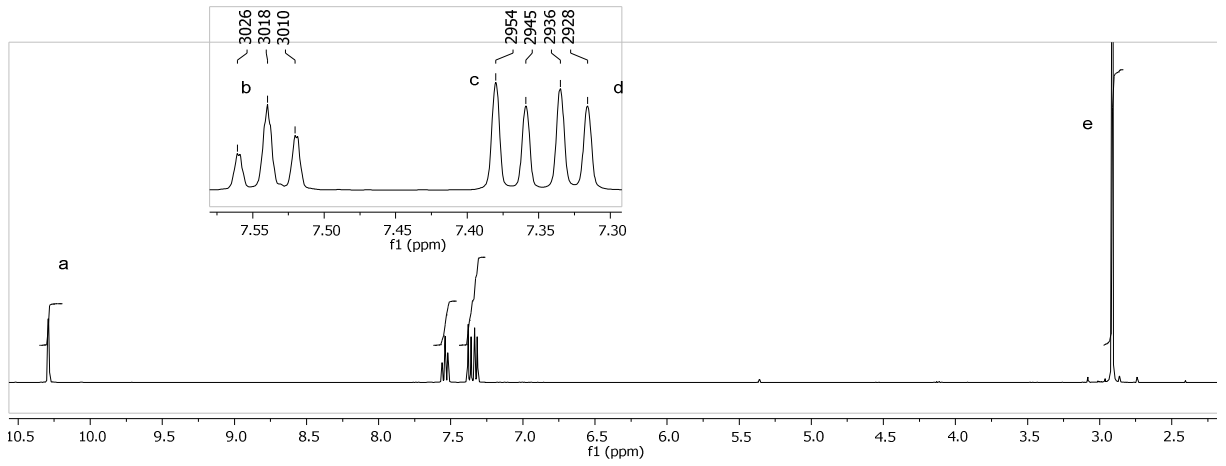
**Frage 1: (9 Punkte)**

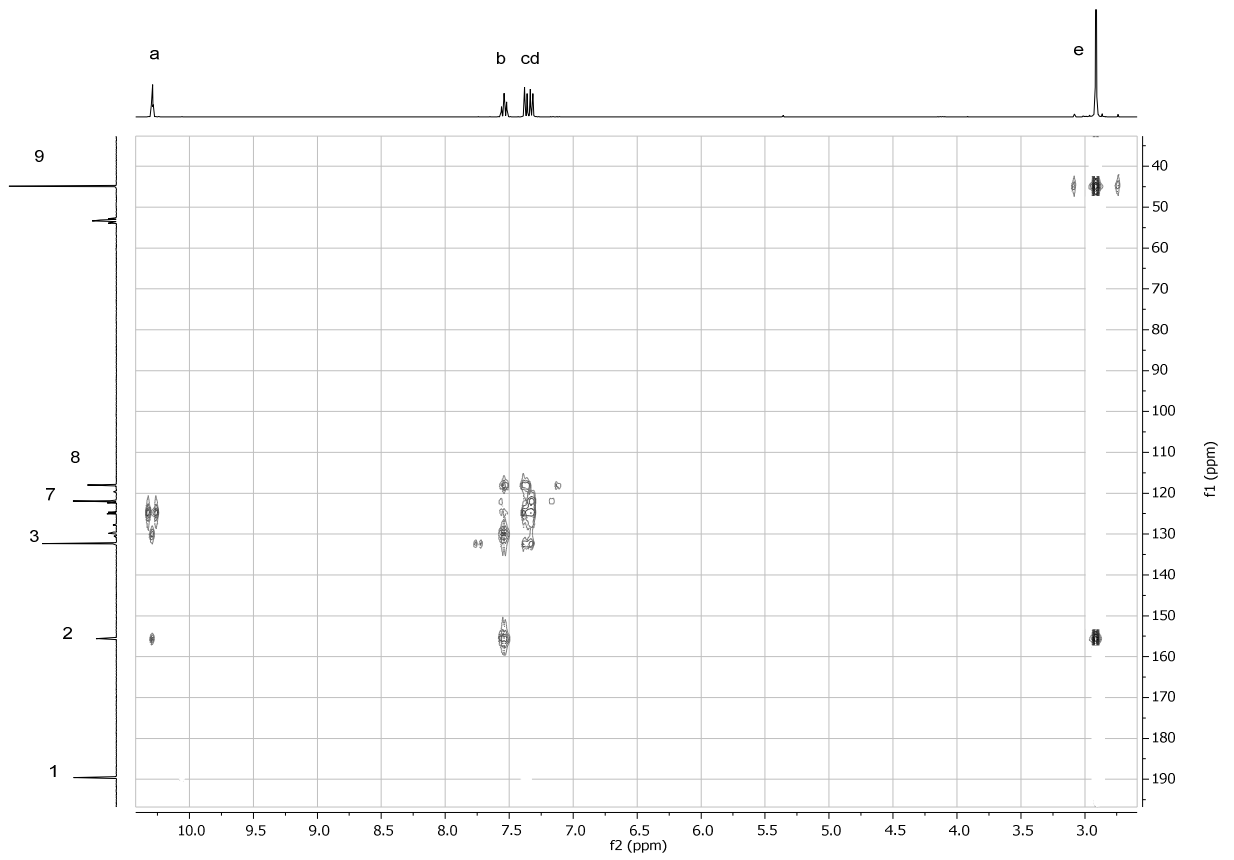
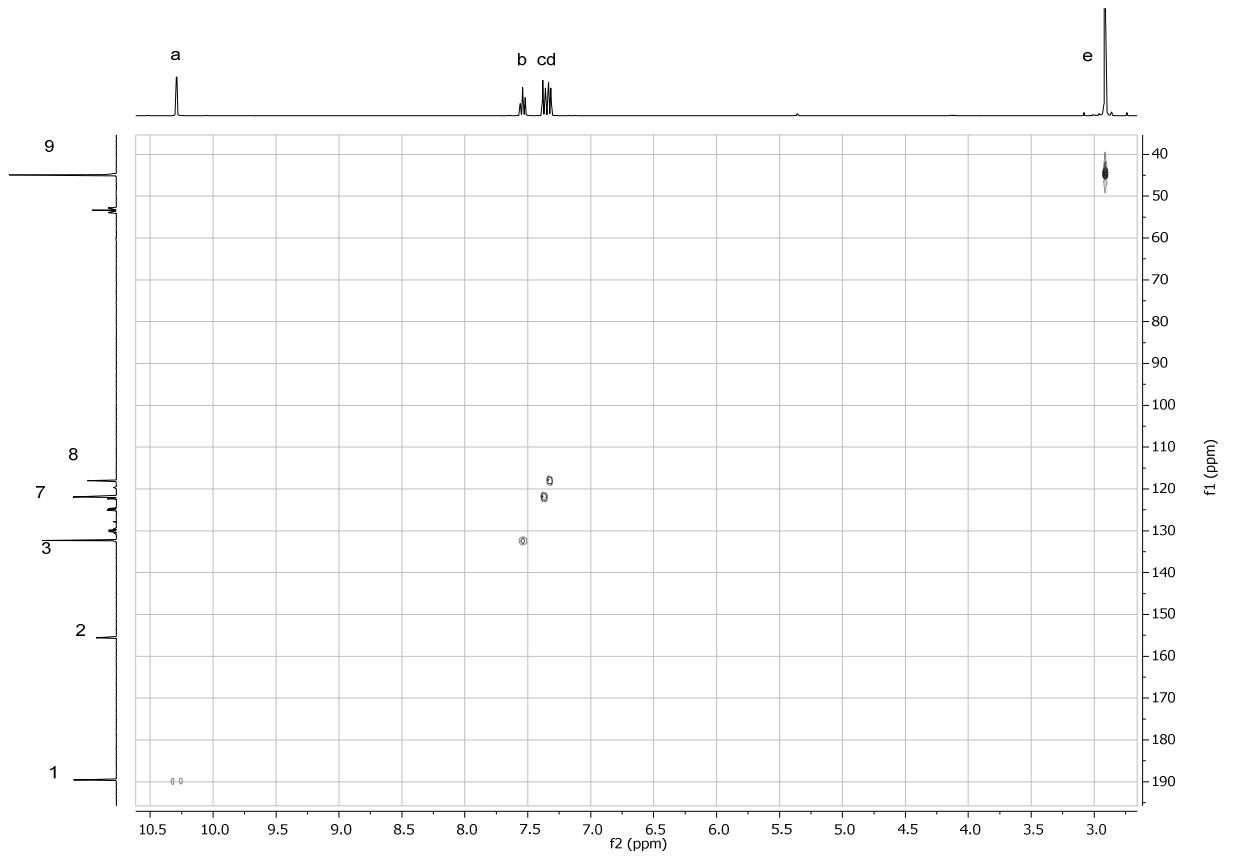
Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_6H_8O$ .

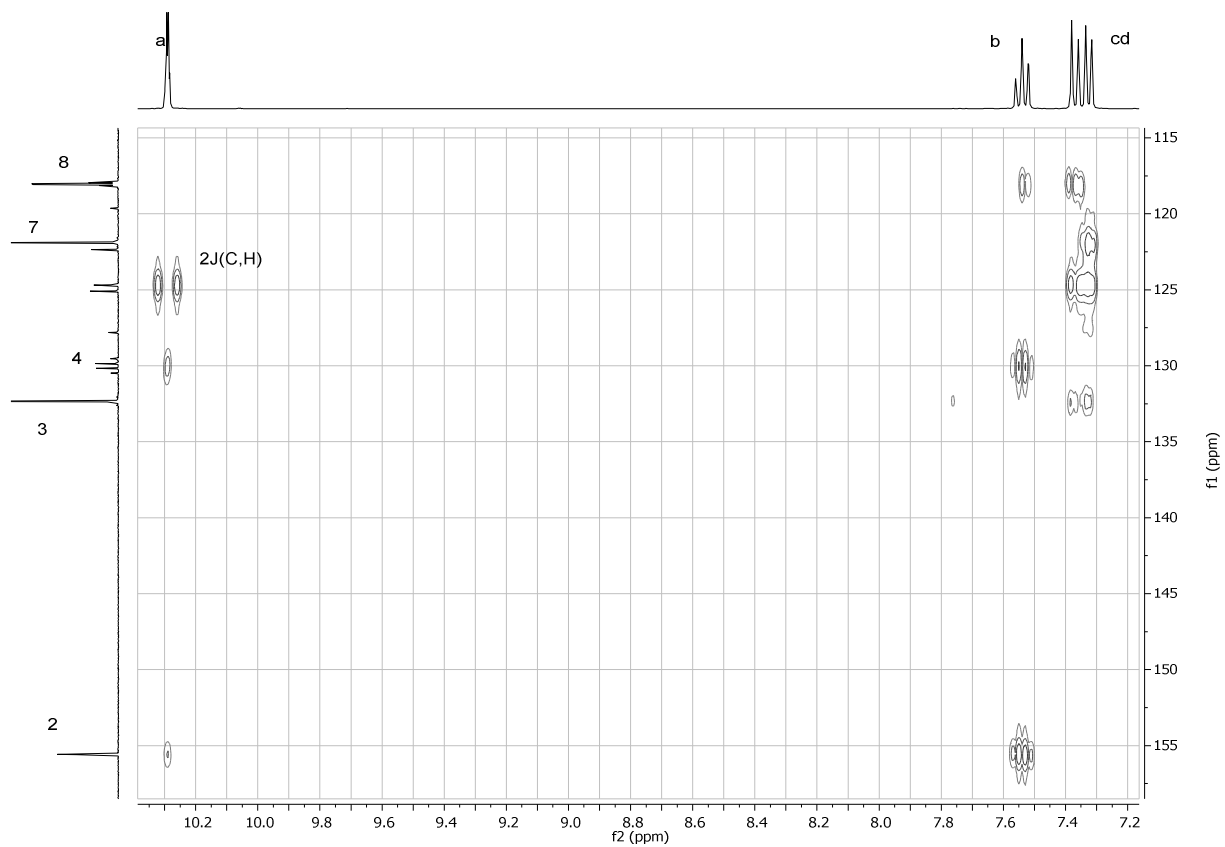
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des  $^1H$ - und  $^{13}C$ -Spektren? (4 P)
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
3. Bestimmen Sie das Spinsystem (1 P)
4. Das Lösungsmittel ist  $CD_2Cl_2$ . Markieren Sie das Lösungsmittel im  $^{13}C$ -Spektrum und erklären Sie die Aufspaltung. (3 P)







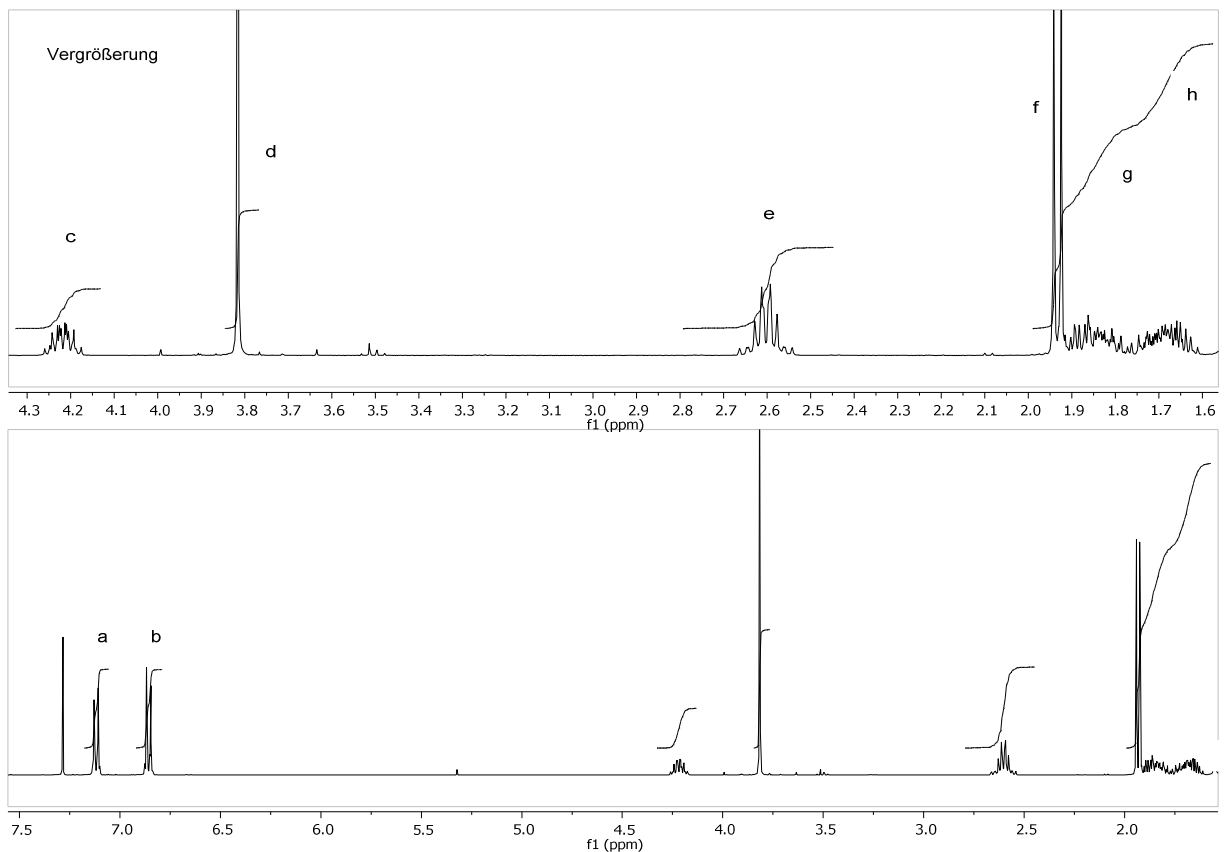


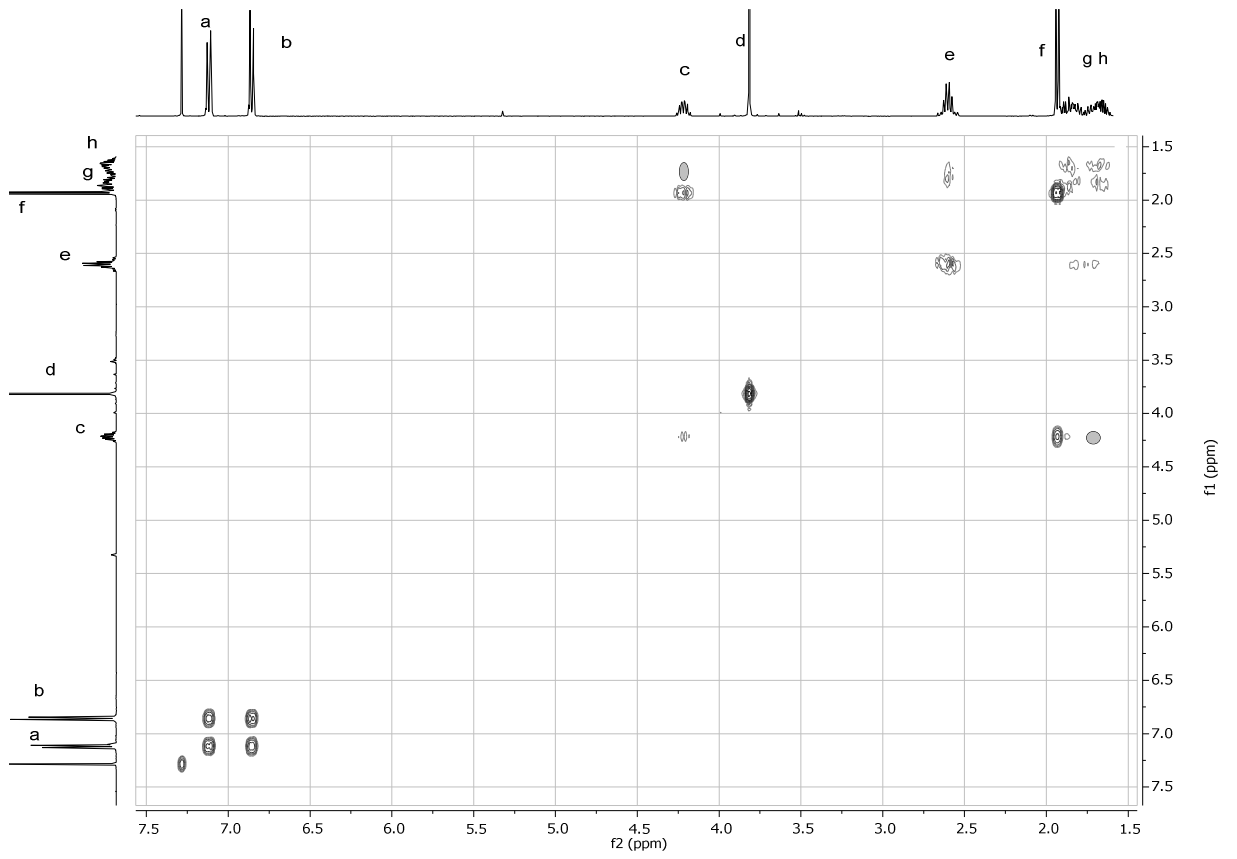
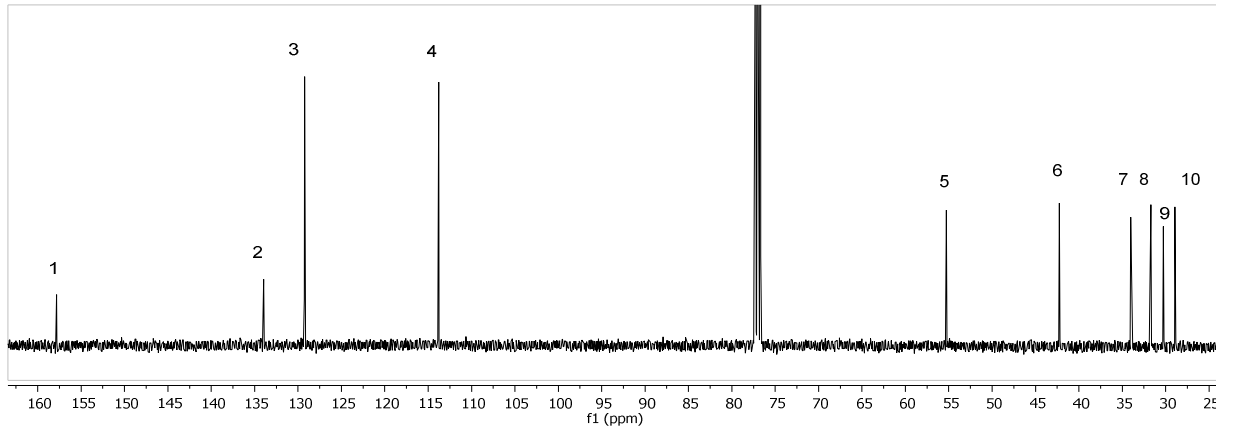


**Frage 3: (13 Punkte)**

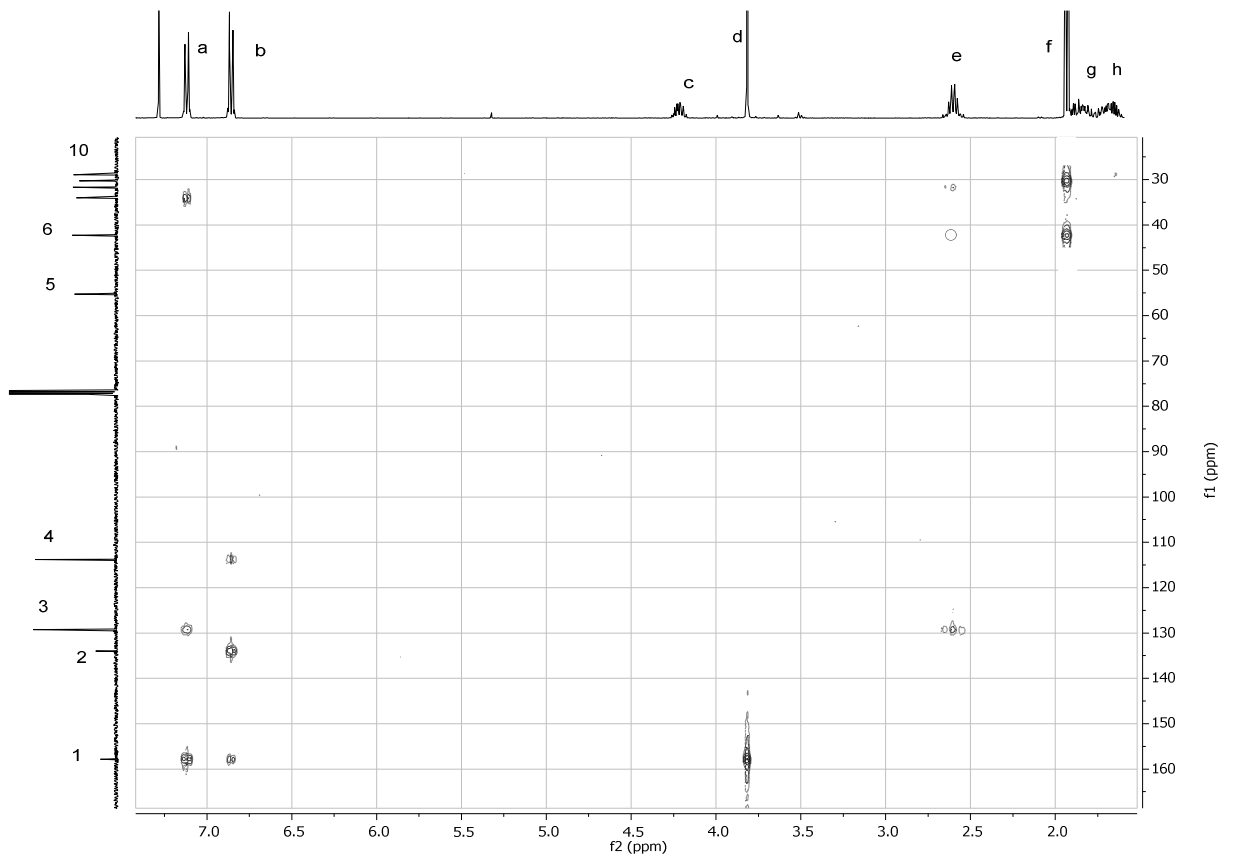
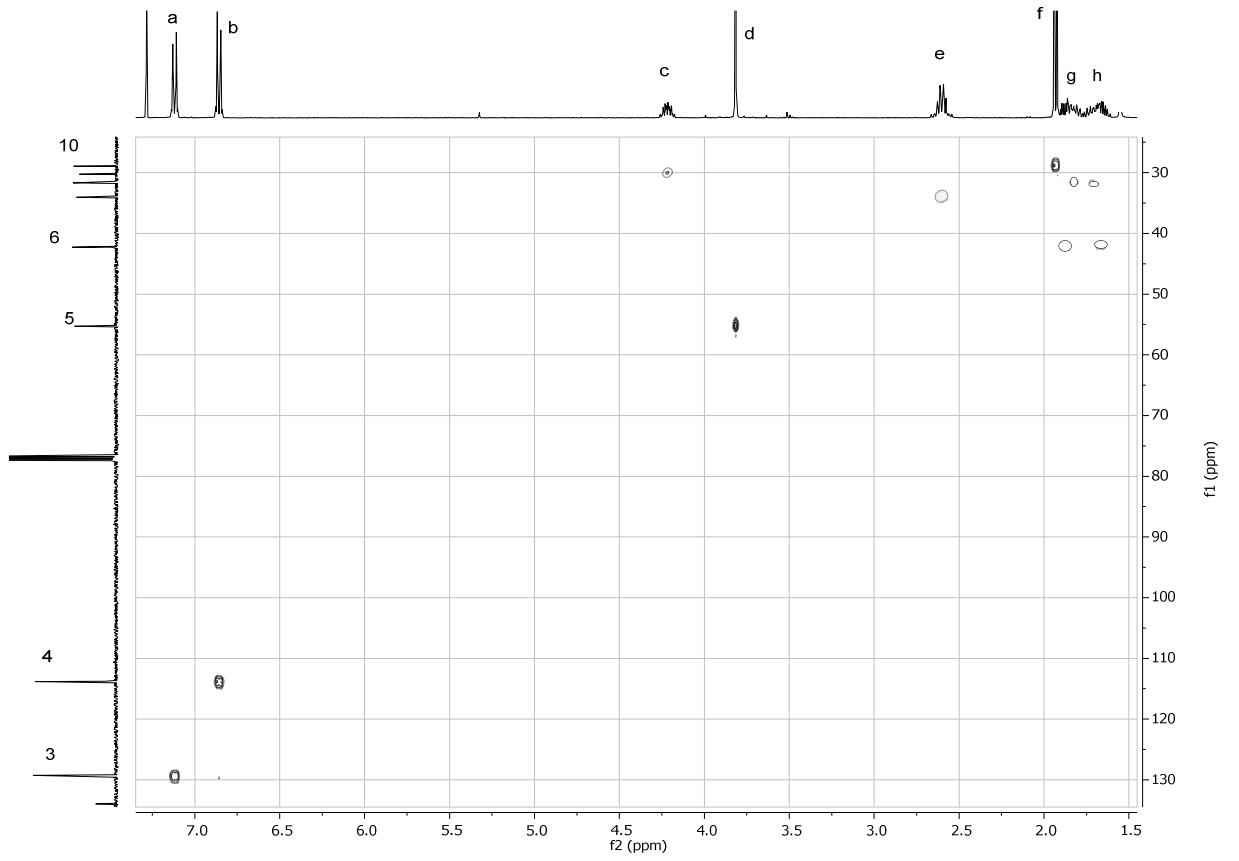
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{12}H_{17}IO$ .

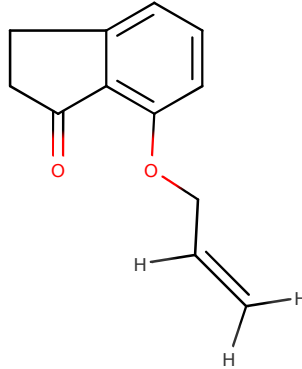
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4 P)
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)
3. Ordnen Sie die Signale in der Aliphaten-Kette zu. (3 P)
4. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen? (1 P)
5. Berechnen Sie die Verschiebung der beiden C-Atome, an denen das I und die OMe-Gruppe sitzen und geben Sie die Nummer an. (4 P)







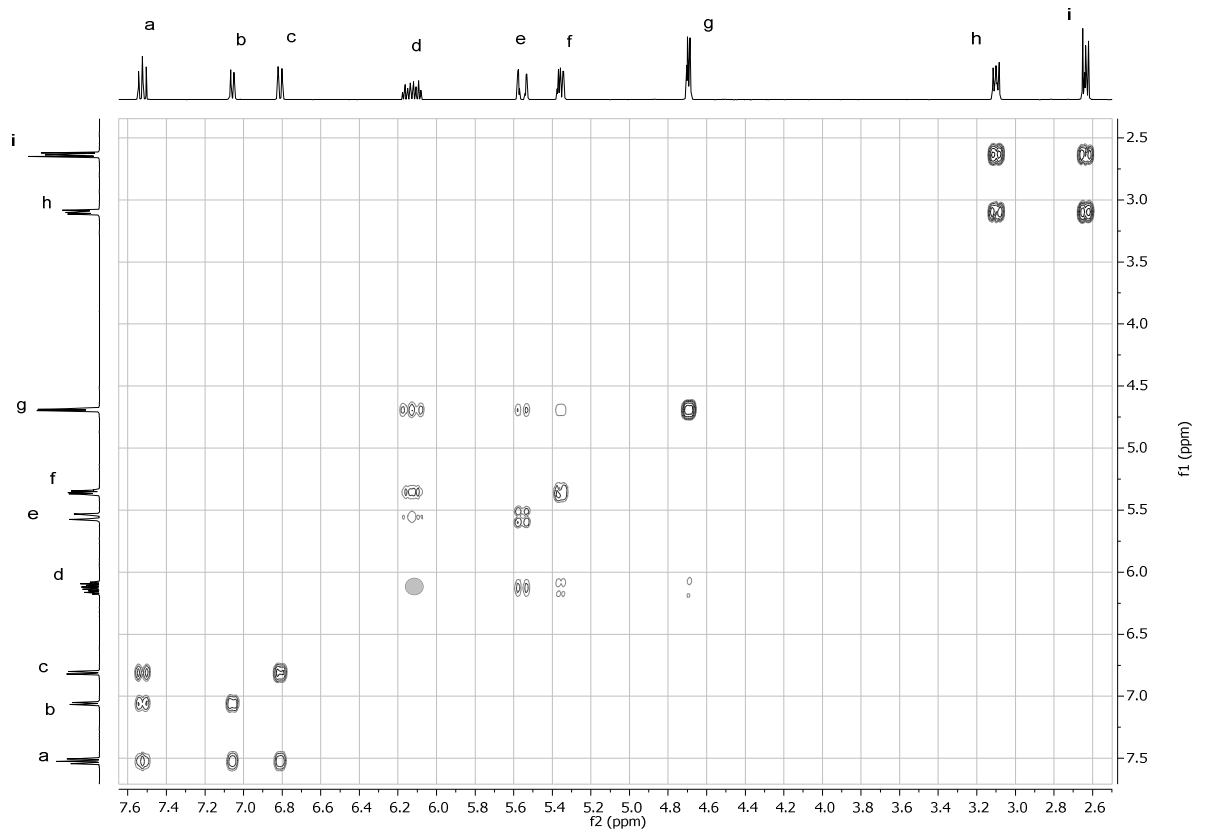
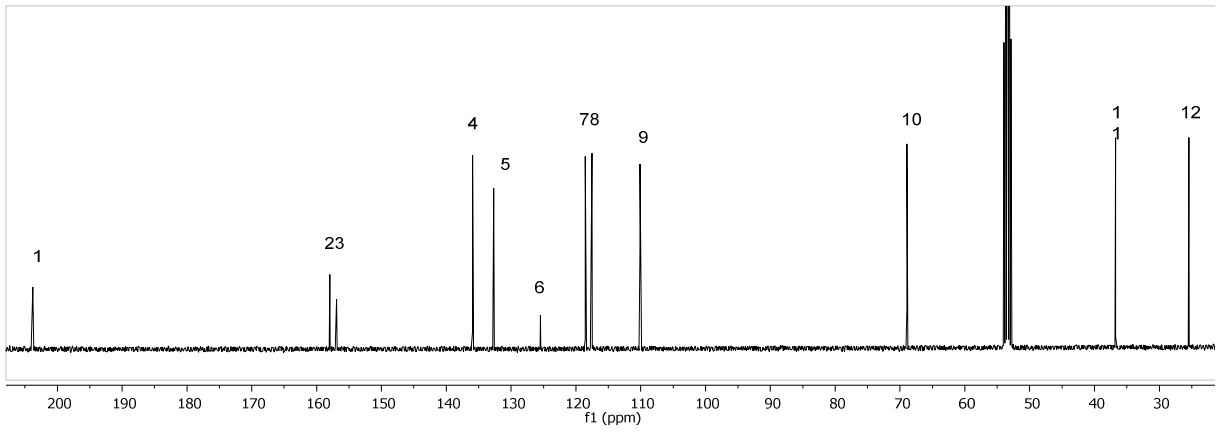
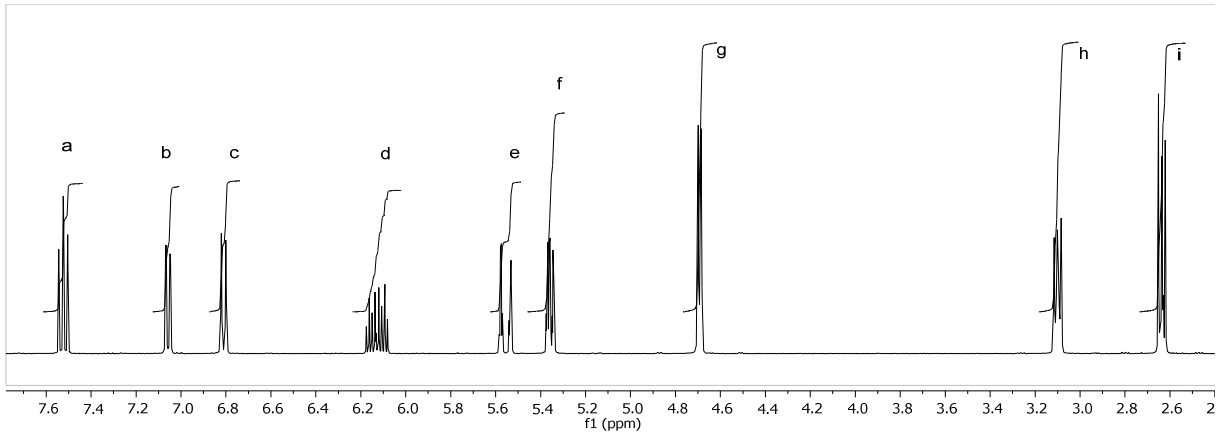


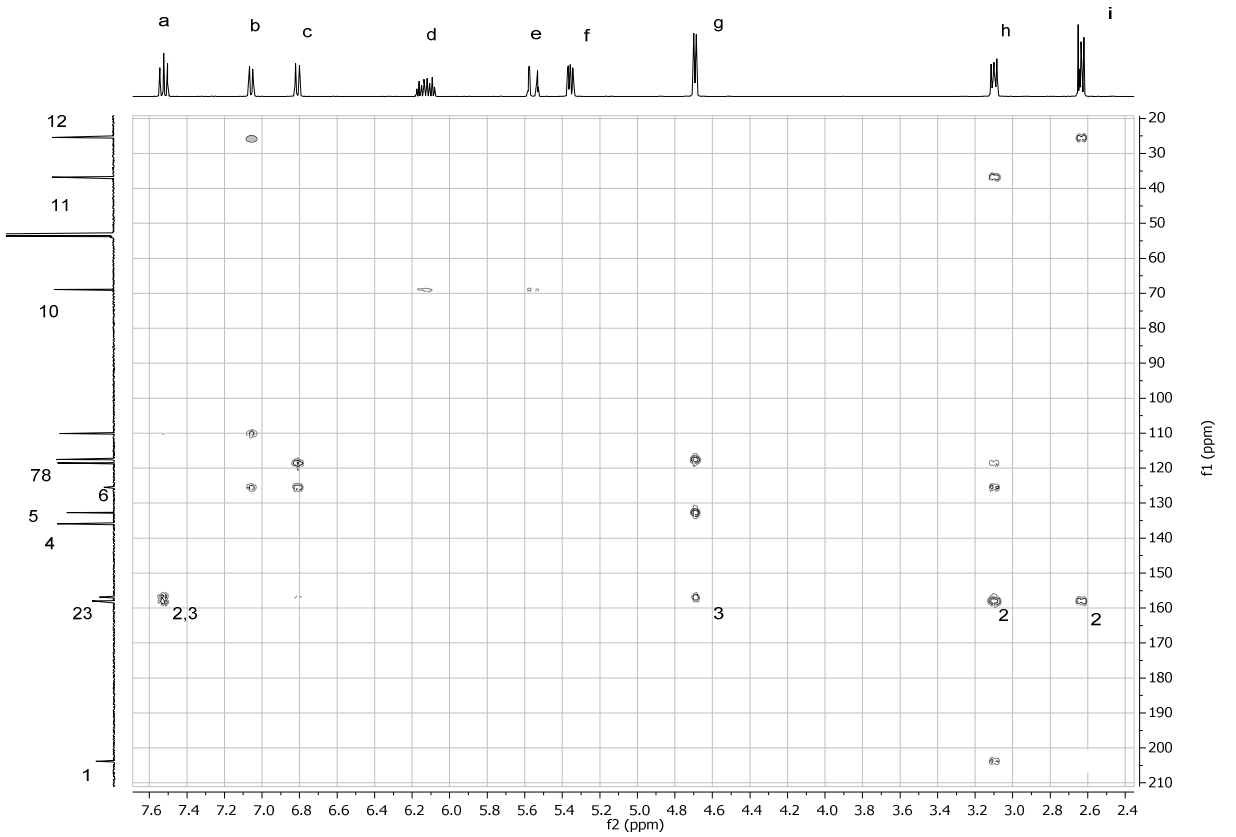
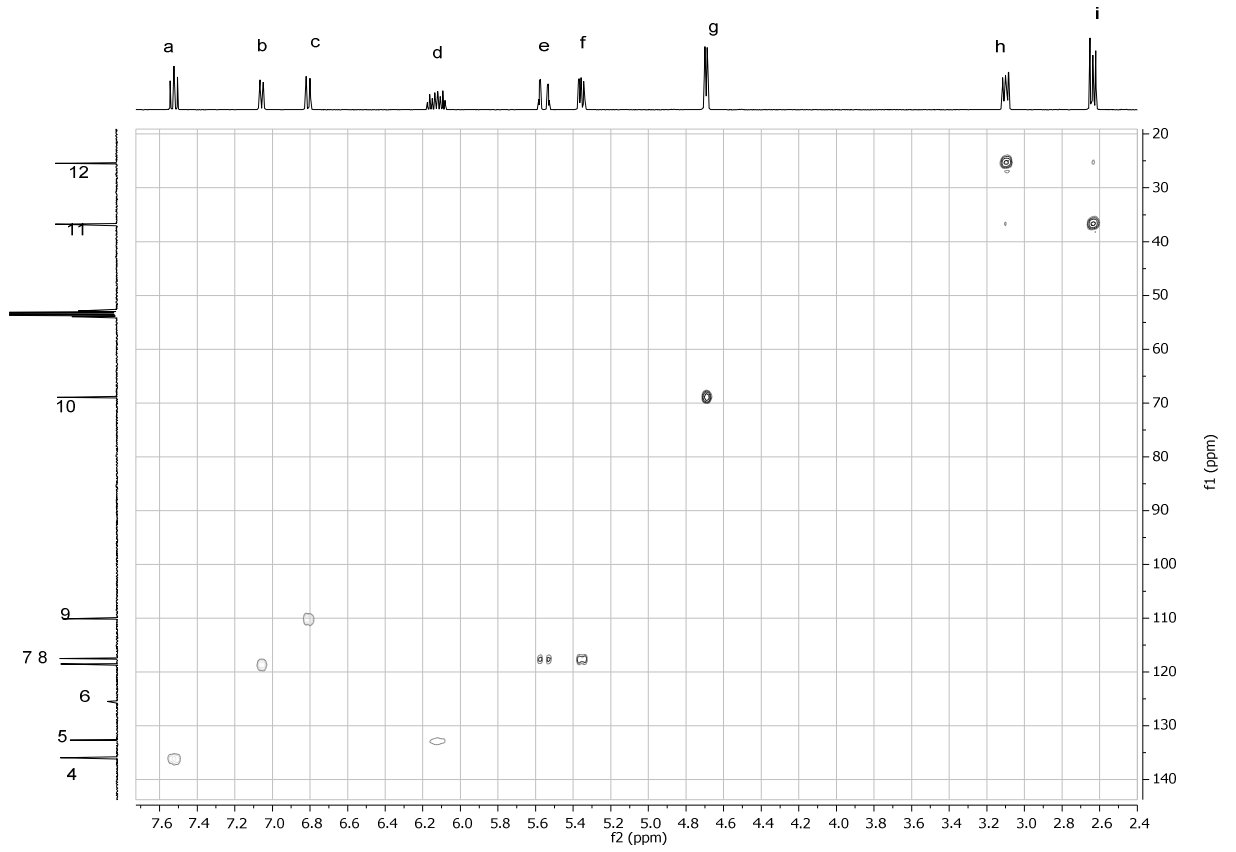
**Frage 4: (18 Punkte)**Hinweis: unter dem Signal f liegt das Lösungsmittel CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>

1. Ordnen Sie alle Signale zu. (6 P)
2. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie im HMBC für die C-Atome 2 und 3 sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül einzeichnen. (4 P)  
HMBC: Füllen Sie für diese C-Atome folgende Tabelle aus.

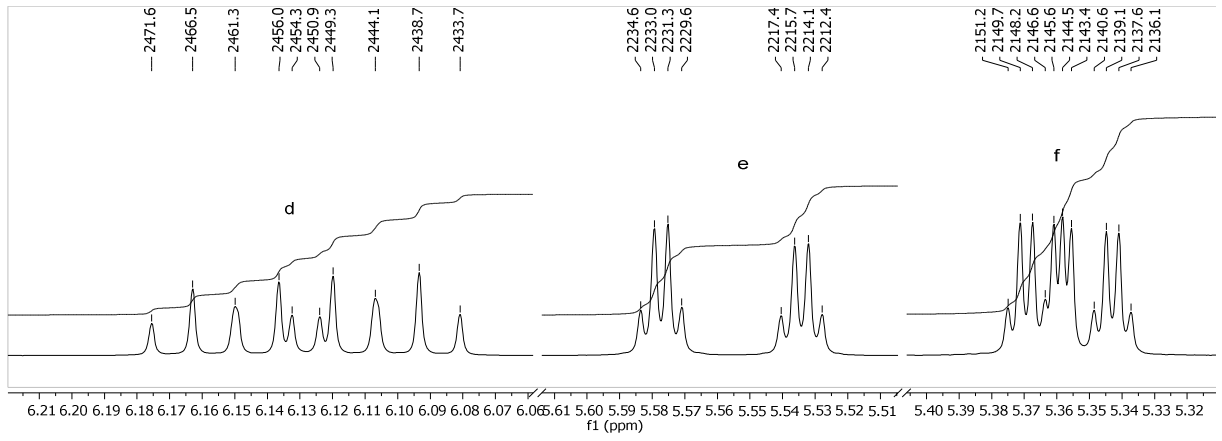
<sup>13</sup> C	<sup>1</sup> H	<sup>n</sup> J <sub>CH</sub>
2		<sup>3</sup> J <sub>CH</sub>

3. Zeichnen Sie für Signal d, e und f den Splittingschlüssel mit Angabe der Kopplungskonstante. (Vorsicht: Im Signal f liegt das Lösungsmittel) (auf Seite 14) (6 P)
4. Welche Peaks im Signal f gehören zum Lösungsmittel? Erklären Sie die Aufspaltung. (2 P)





Zahlen im Spektrum für genaue Zuordnung!



**Frage 5: Theorie (18 Punkte)**

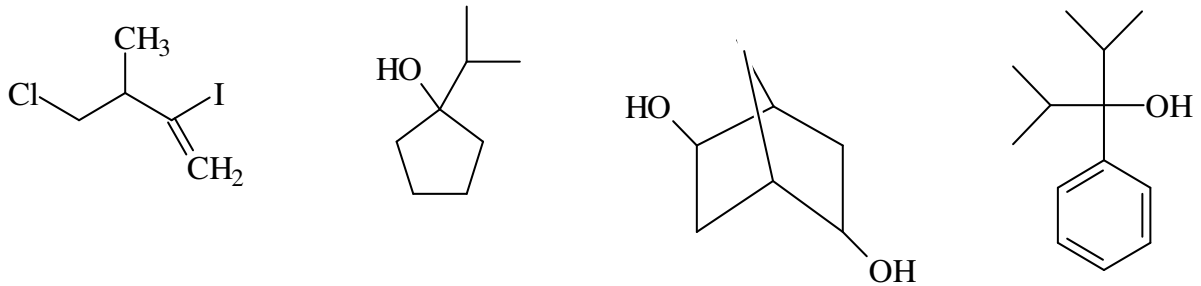
1. a. Ein 2D Spektrum wird durch das Aufnehmen verschiedener FIDs erhalten. Wie unterscheiden sich diese voneinander und wie kommt das Prozessieren von einzelnen FIDs zur chemischen Verschiebung in der indirekten Dimension? Erklären Sie unter Nennung der wichtigsten Konzepte. (event. mit grafischer Darstellung)

2. a. Eine  $J$ -Kopplung von 15 Hz scheint in Spektren, die am 300 MHz Spektrometer aufgenommen wurden, weit größer, als wenn das Spektrum am 500 MHz Spektrometer aufgenommen wird. Erklären Sie, wie der Unterschied zustande kommt.

b. Außerdem: Wie entsteht eine  $J$ -Kopplung? (event. mit grafischer Darstellung)

3. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen.

(6 P)



Geben Sie an, ob die  $\text{CH}_2$ -Gruppen homotop, enantiotop oder diastereotop sind.