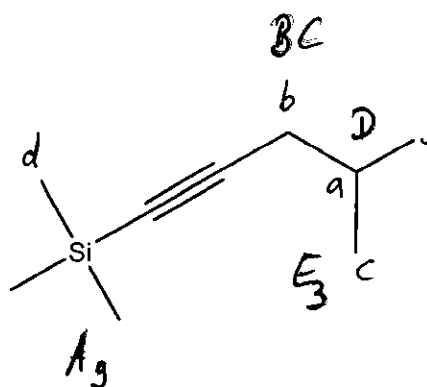


## Spektroskopie 2 (NMR) SS 2023 Klausur

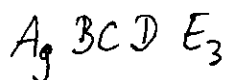
27.0.2023

### Frage 1: (8 Punkte)



1. Ordnen Sie die Protonen-Signale zu. (1 P)

2. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen. (1 P)



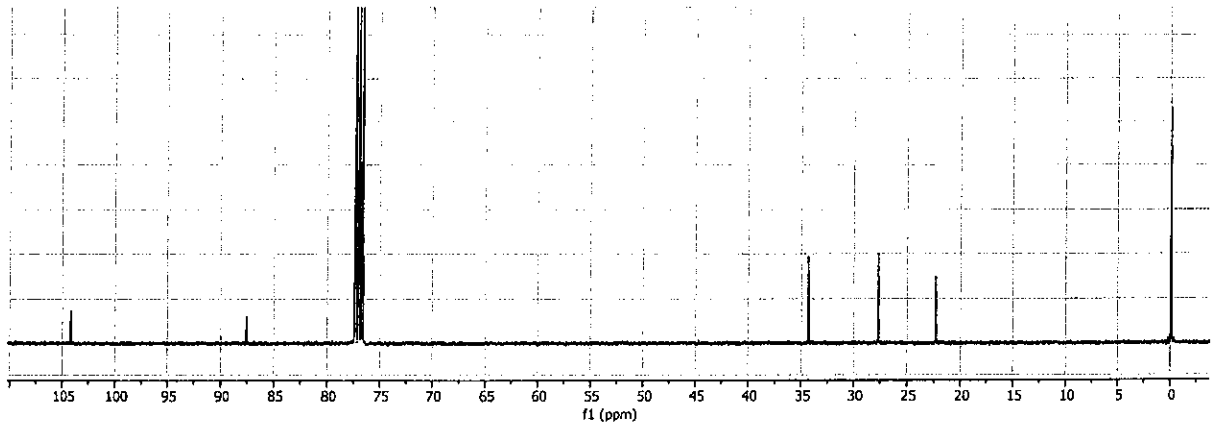
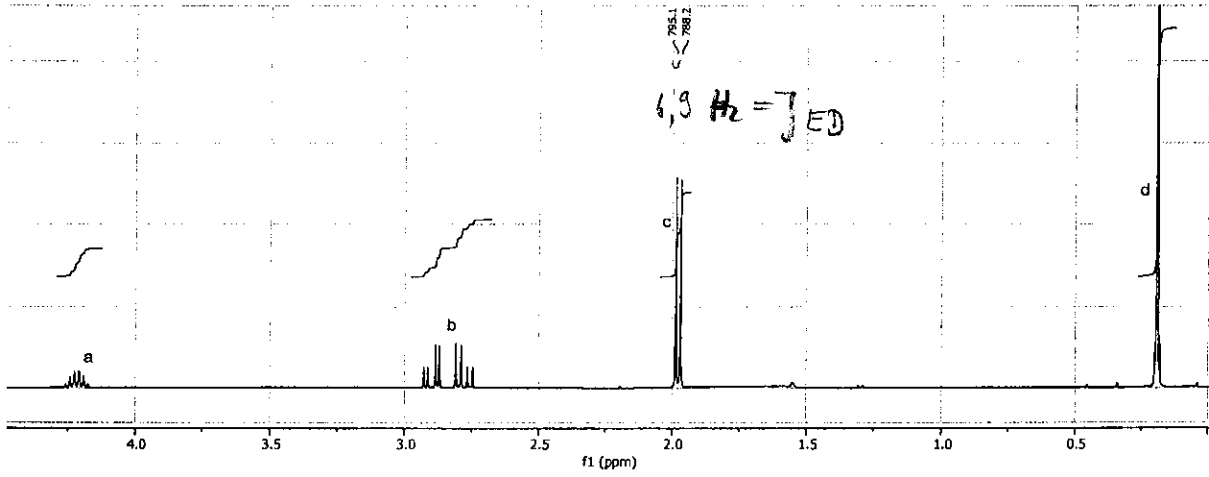
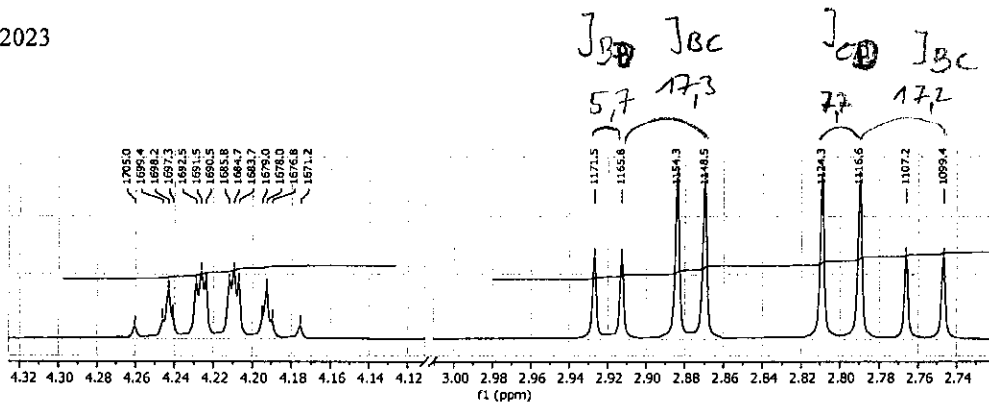
3. Bestimmen Sie die im  $^1H$ -Spektrum sichtbaren Kopplungskonstanten. Es muß ersichtlich sein, woher die KK kommen und was für eine KK es ist. Z. B.  $J_{AB} = \dots$  (mit Einheit)

$$J_{BC} = 17,3 \text{ Hz} \quad (b_1 b_2) \quad J_{DE} = 6,9 \text{ Hz} \quad (a c)^{(2 P)}$$

$$J_{BD} = 5,7 \text{ Hz} \quad (b_1 a)$$

$$J_{ED} = 7,7 \text{ Hz} \quad (b_2 a)$$

4. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die Protonen der rechten Aliphatischen-Kette. Verwenden Sie obige KK. : 1 Hz = 1 mm (4 P)



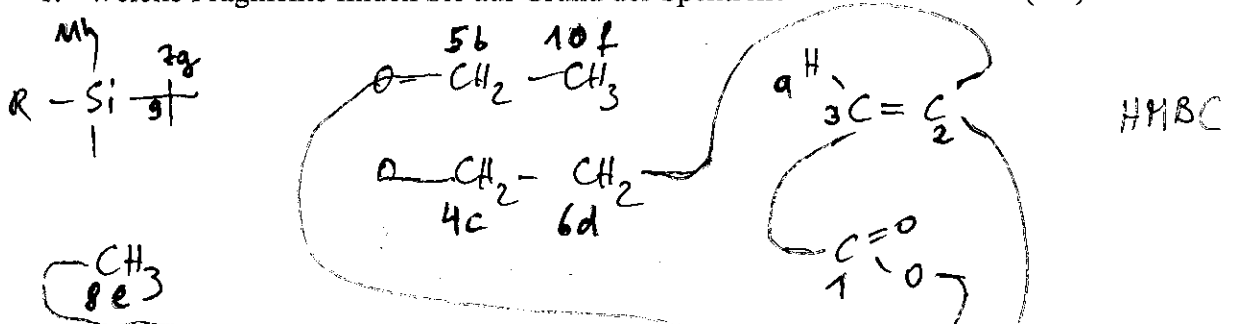


**Frage 2: (15 Punkte)**

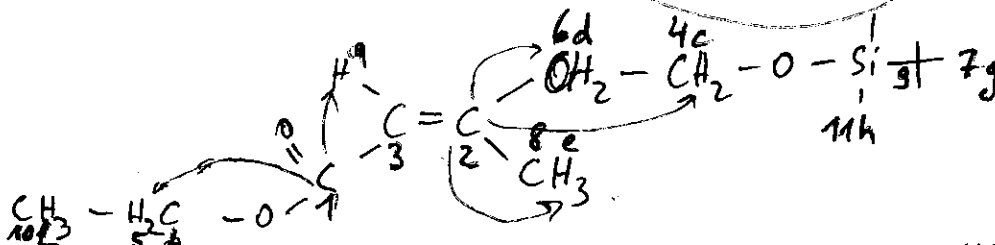
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{14}H_{28}O_3Si$ .

$$DBA' = 1 + \frac{1}{2} (28 - 28 + 2) = 2$$

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



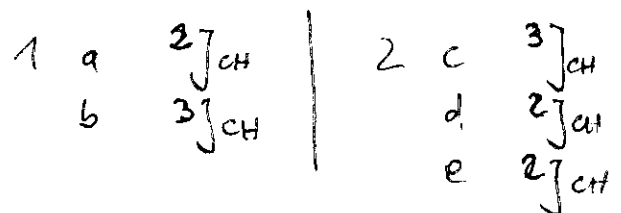
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)



3. Ordnen Sie alle Protonen und C<sub>1</sub> und C<sub>2</sub> zu. (4 P)

4. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbaren Kopplungen von Kohlenstoff 1 und 2 ein. Füllen Sie folgende Tabelle aus. (2 P)

|    | J <sub>CH</sub> |
|----|-----------------|
| C1 |                 |
| C2 |                 |

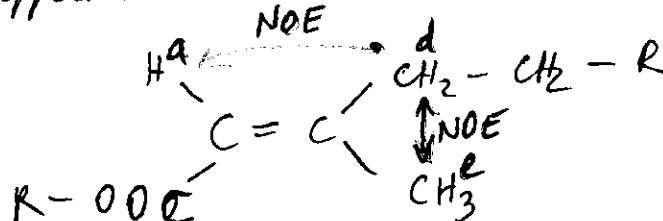


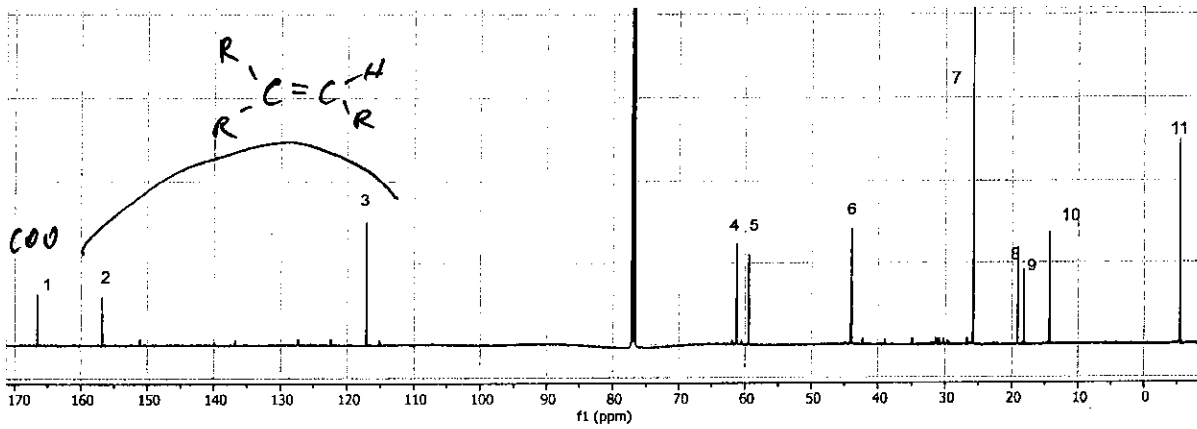
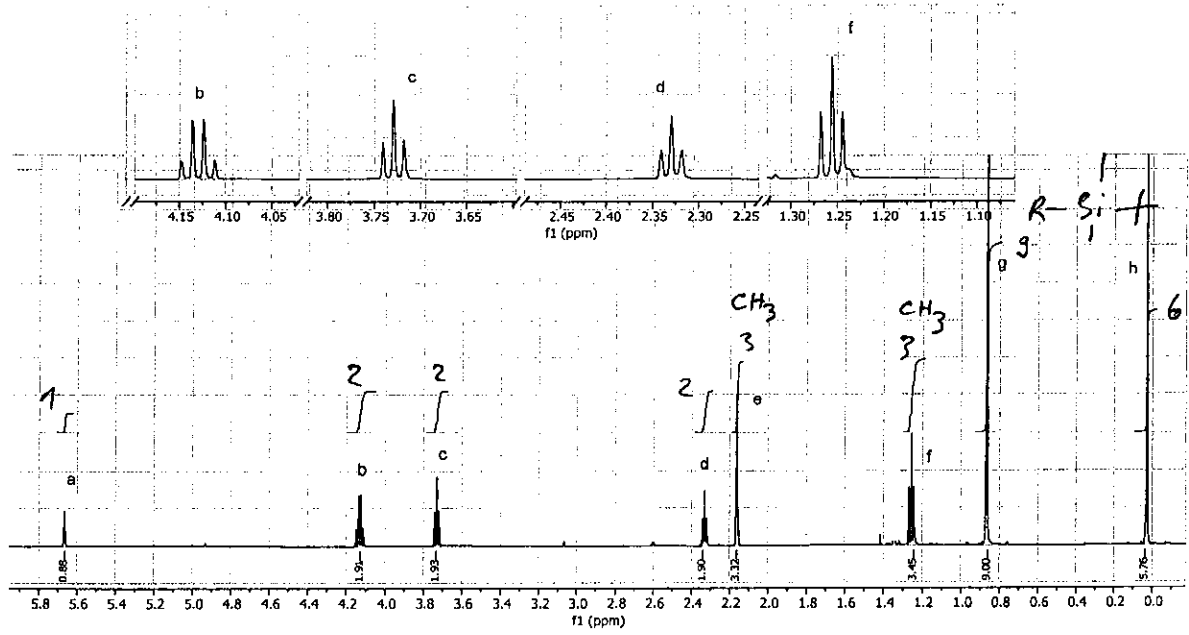
5. Das letzte 2D-Spektrum ist ein NOESY. (4 P)

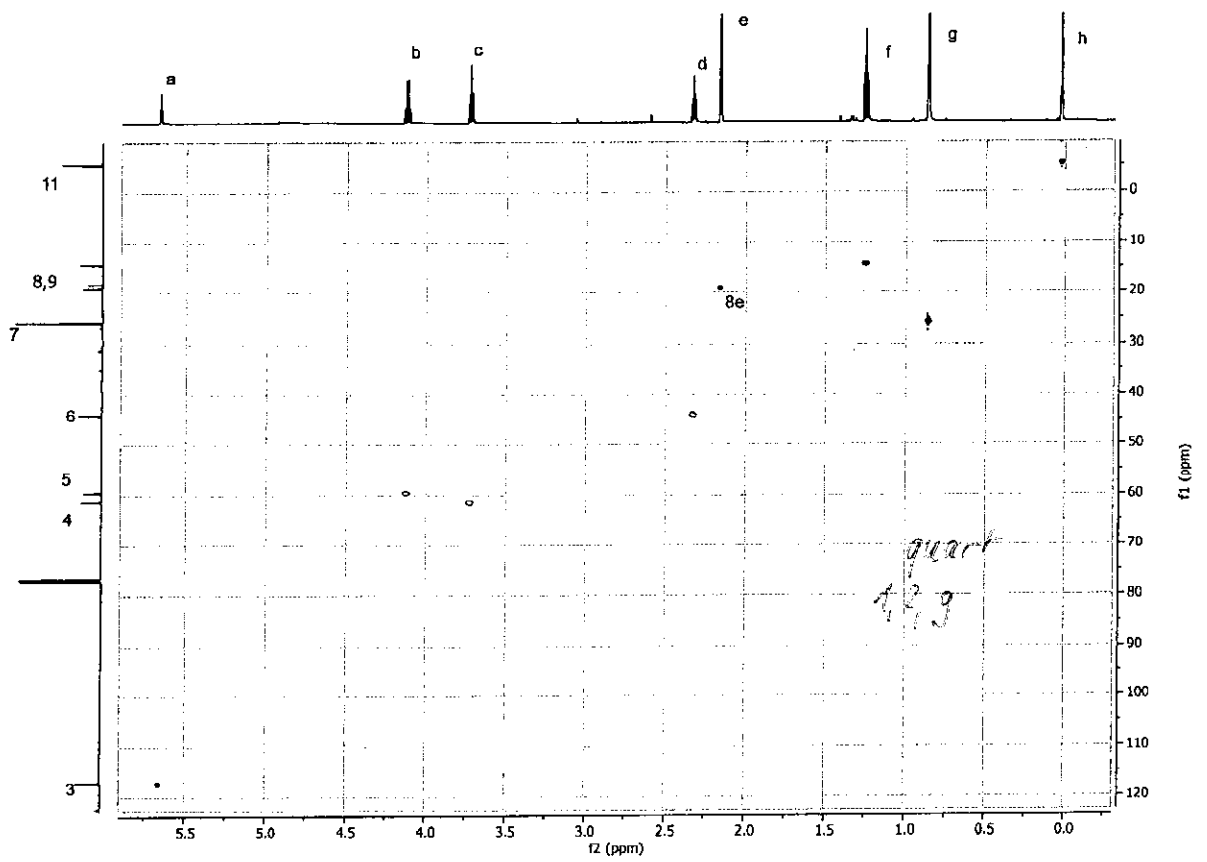
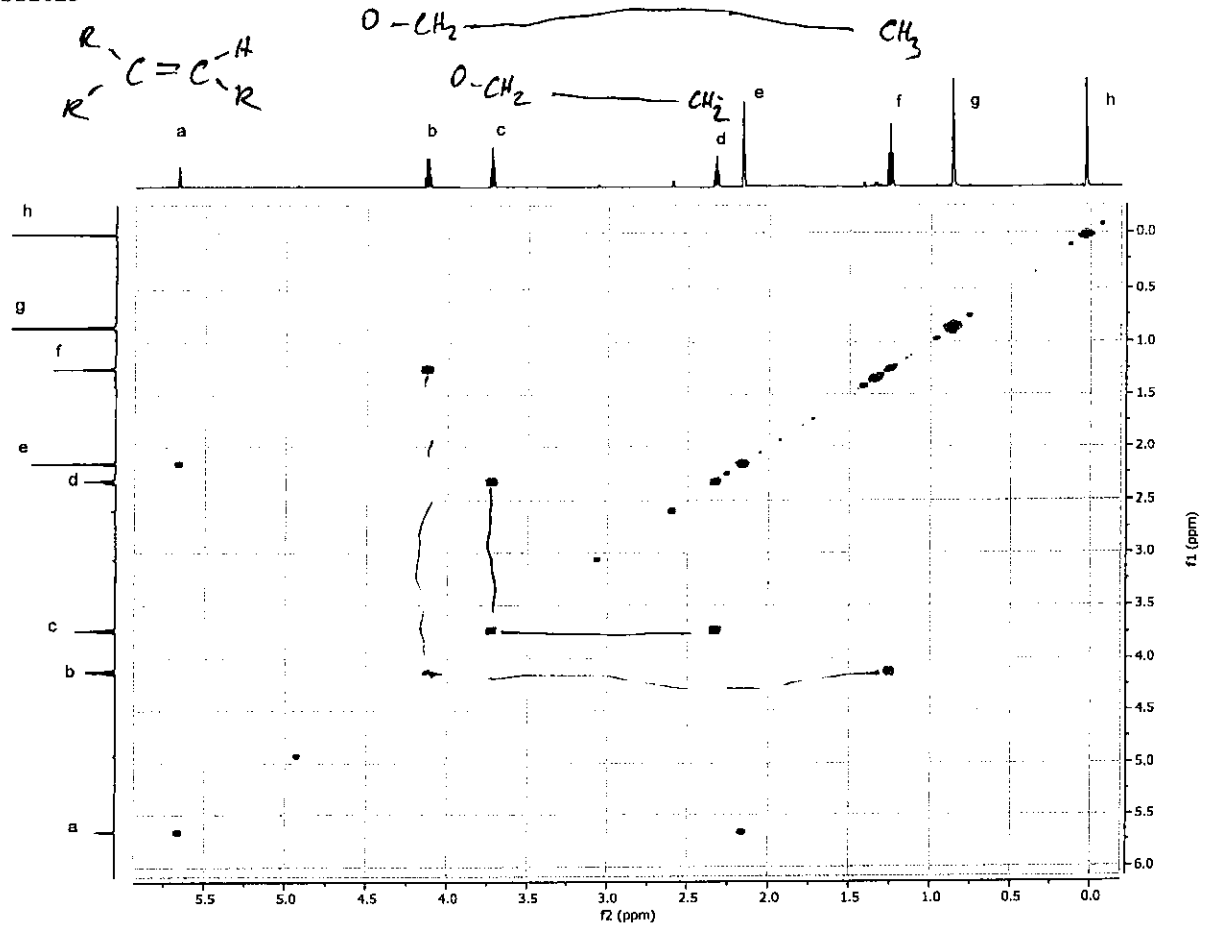
- a) Was bedeutet NOE? Welche Informationen gibt der NOE?  
 b) Welche wichtigen Infos gibt er Ihnen bei Ihrem gefundenen Molekül? (ins Molekül einzeichnen !)

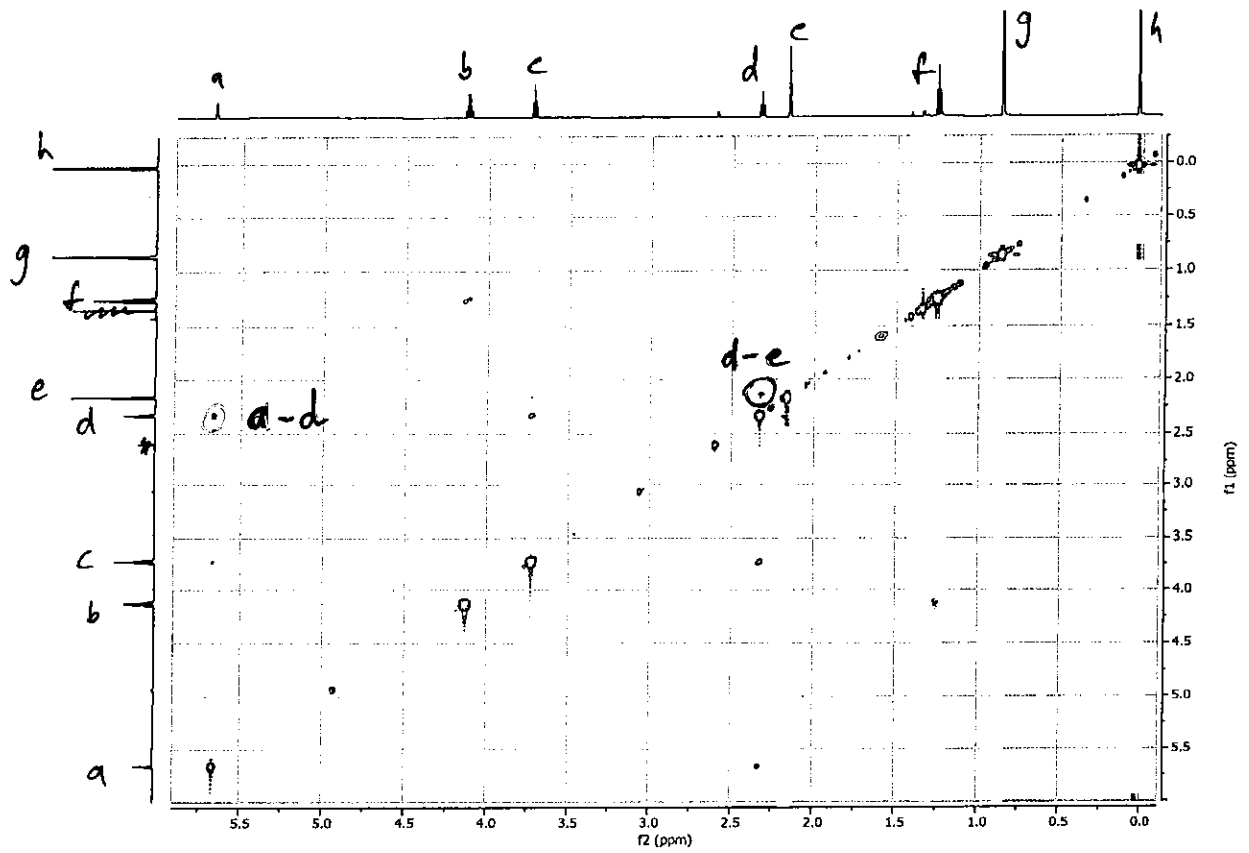
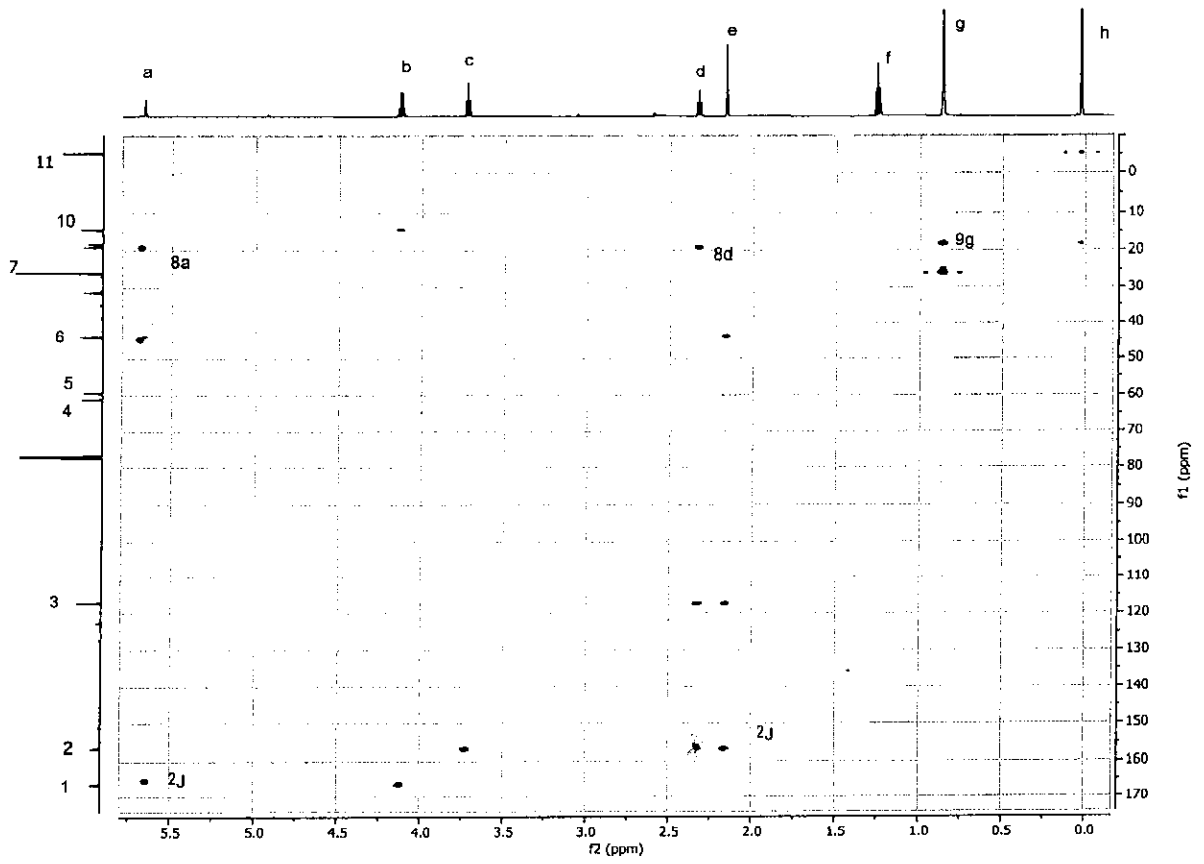
NOE: Nuclear Overhauser Effekt

Das Signal von Kernen, die in der räumlichen Nähe von entkoppelten Protonen sitzt, werden verstärkt (positiver NOE)









NOESY

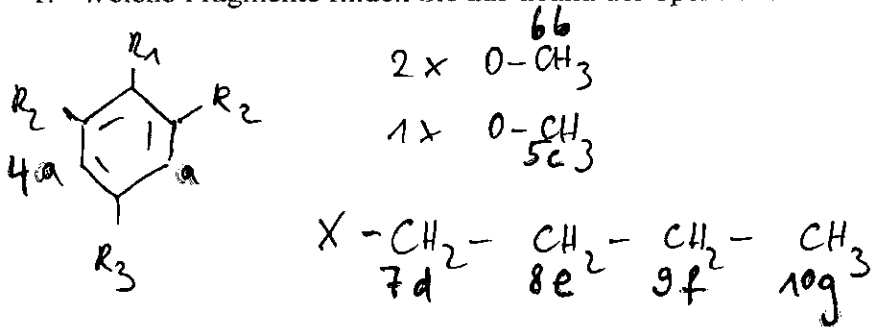
**Frage 3: (13 Punkte)**

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{13}H_{20}O_3S$ .

Hinweis: S ist 2bindig

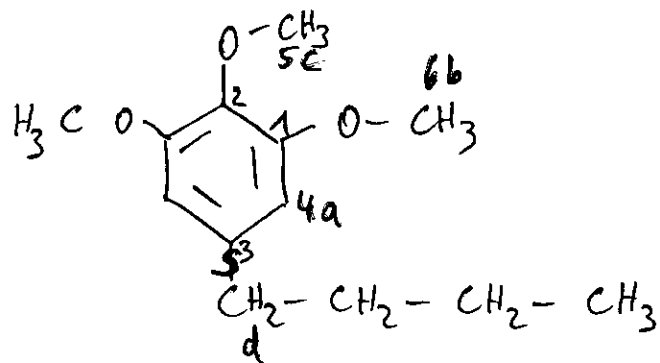
$$DBA = 1 + \frac{1}{2}(26 - 20) = 4$$

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (3 P)



2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu.

6. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)



7. Ordnen Sie alle Protonen zu und die Kohlenstoffe 1, 2 und 3. (5 P)

8. Erklären Sie stichpunktartig, warum Sie die Kohlenstoffe 1, 2 und 3 so zugeordnet haben. (3 P)

1, 2, 3 → quartäre C : kein Signal im HSQC

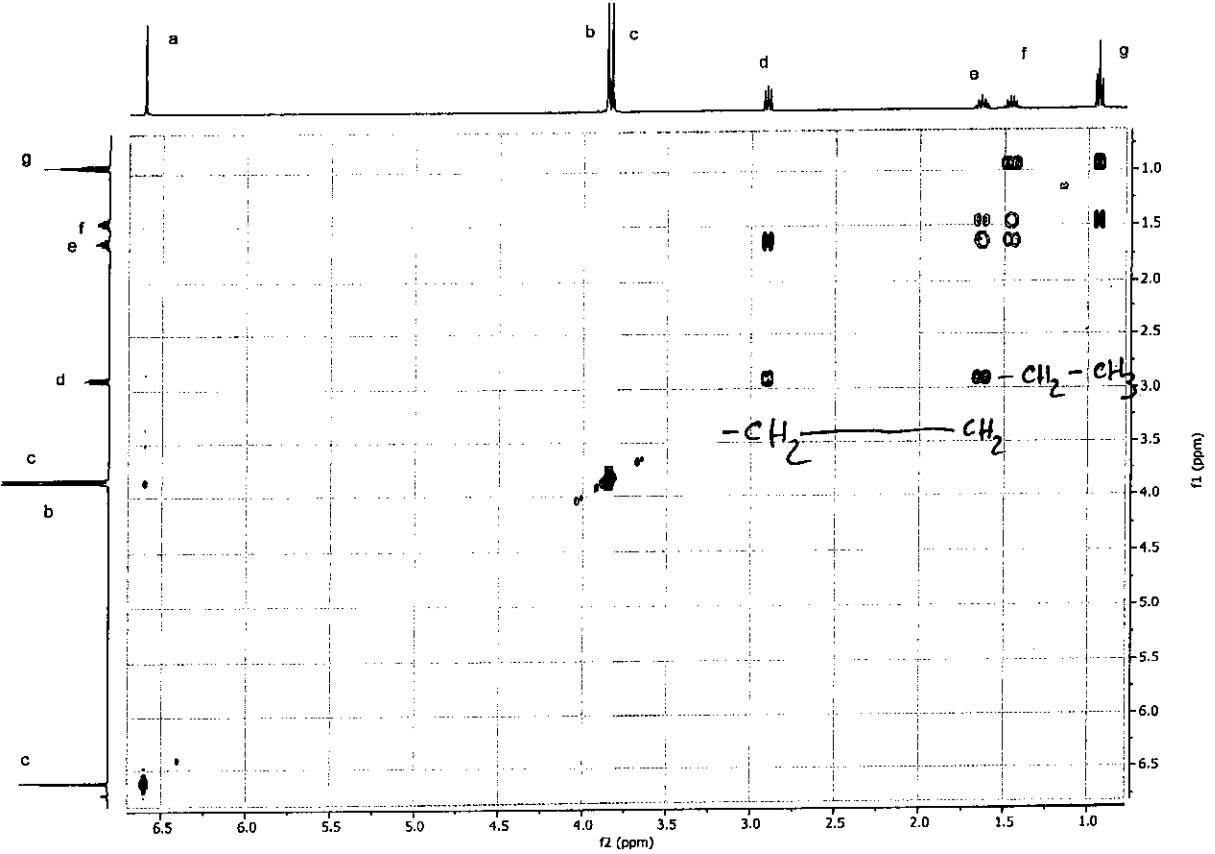
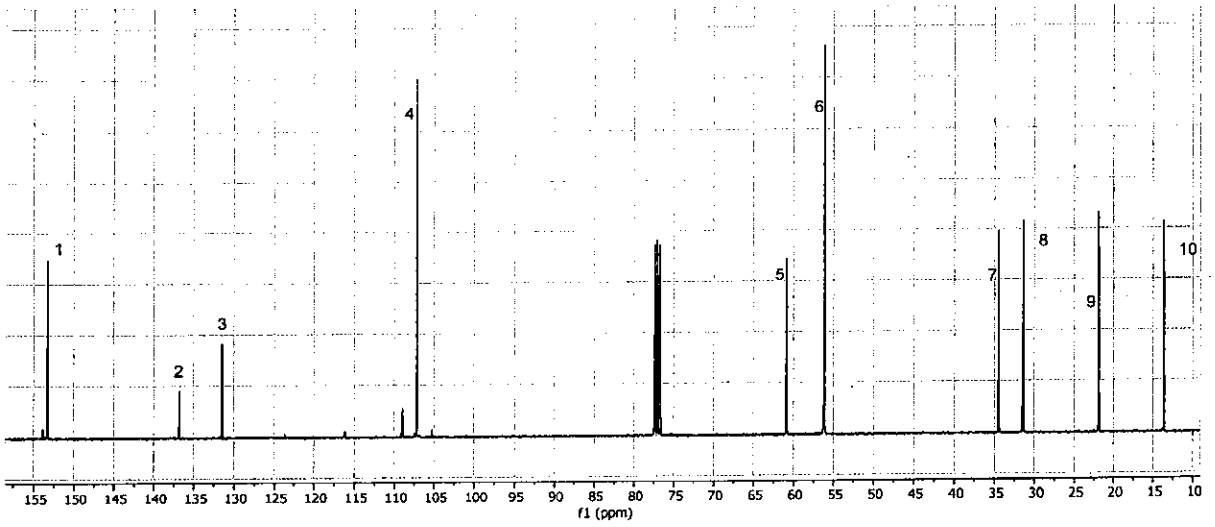
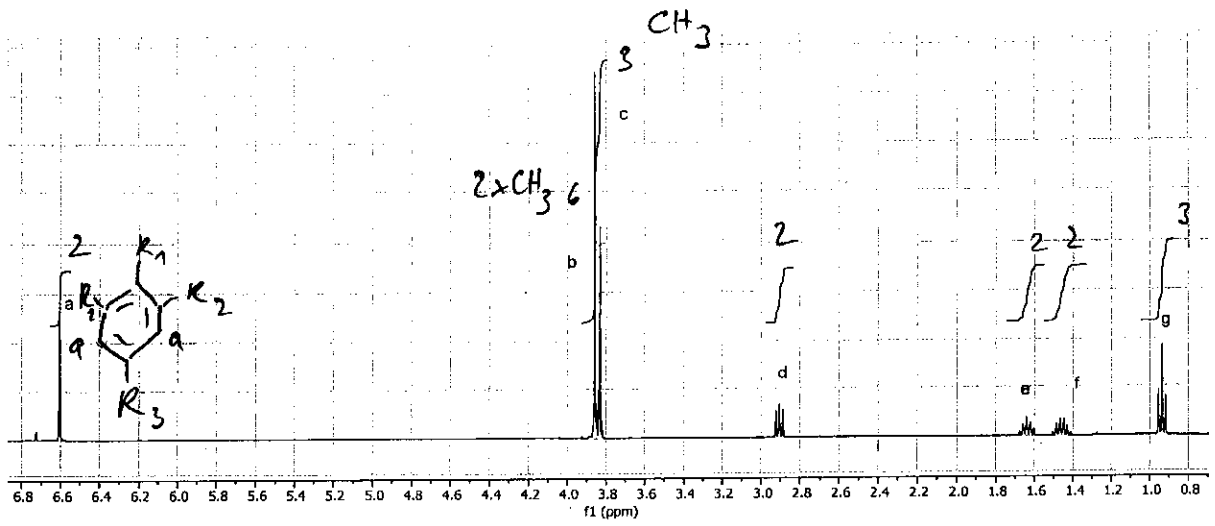
1: großes Signal - doppelt

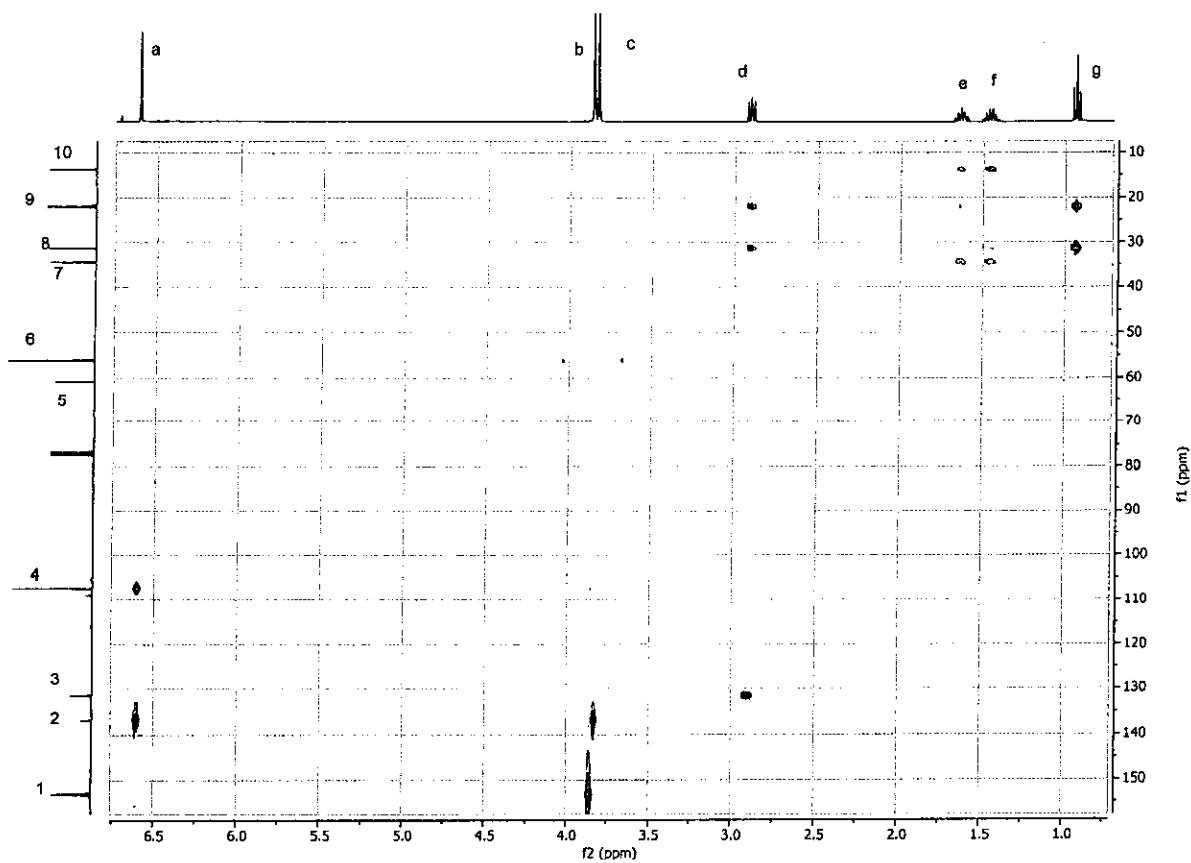
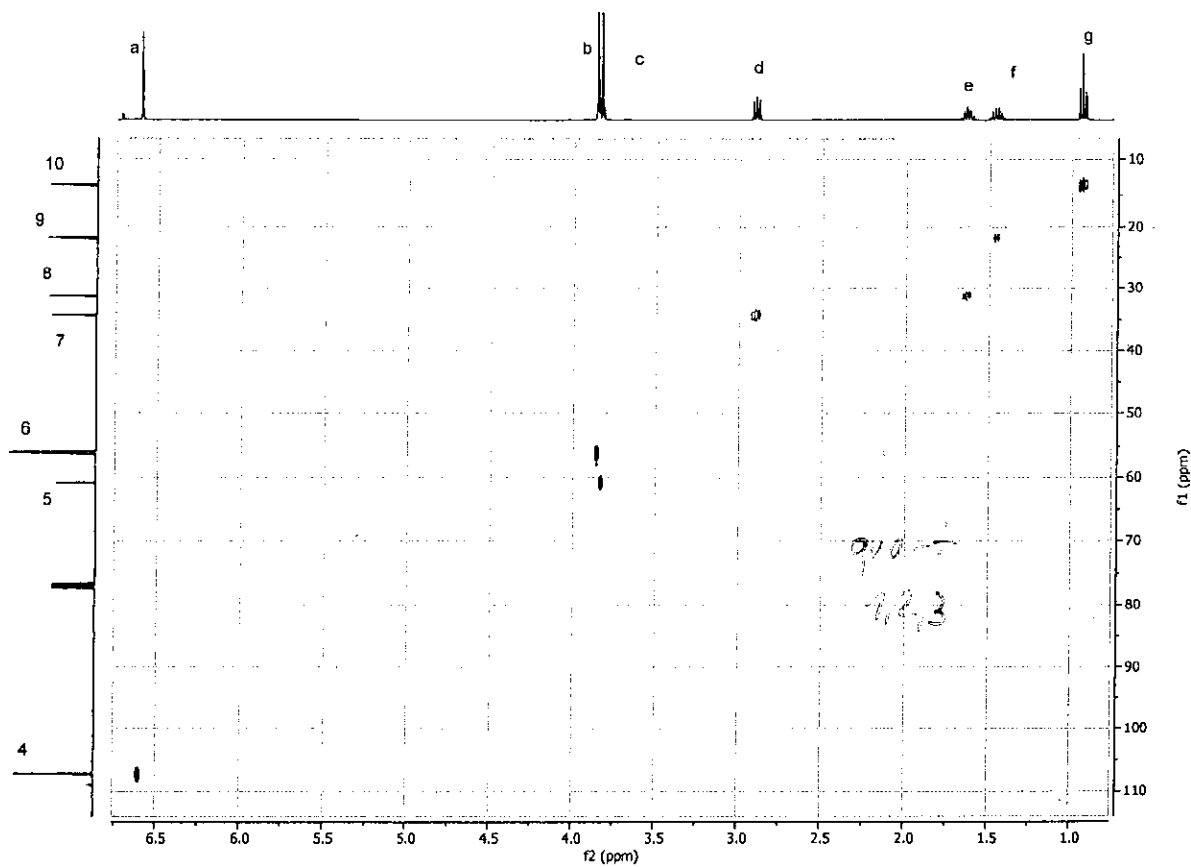
HMBC 1-b ; b = 2 x OCH<sub>3</sub>

2: HMBC 2-a  
2-c

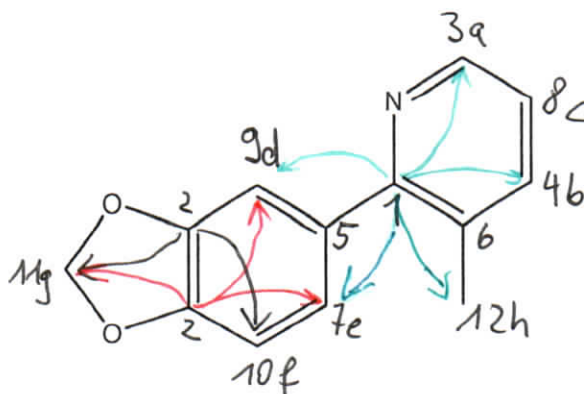
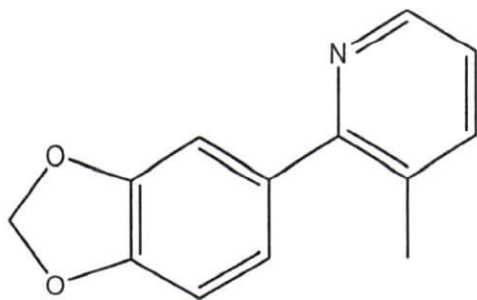
3: HMBC 3-d Schwefel dazwischen → <sup>3</sup>J<sub>sd</sub>







**Frage 4: (9 Punkte)**



1. Ordnen Sie die alle Signale zu.

(6 P)

Hinweis: C<sub>2</sub> sind 2 Signale

2. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie für die C-Atome 1 und 2 im HMBC sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül einzeichnen. Unterscheiden Sie (wenn möglich) die beiden C<sub>2</sub> HMBC: Füllen Sie für diese C-Atome folgende Tabelle aus. (3 P)

| <sup>13</sup> C | <sup>1</sup> H | <sup>n</sup> J <sub>CH</sub> |
|-----------------|----------------|------------------------------|
| 1               | a, b, d, e, h  | <sup>3</sup> J <sub>CH</sub> |
| 2               | d, e, g        | <sup>3</sup> J               |
| 2               | f, i, g        | <sup>3</sup> J <sub>CH</sub> |
|                 |                |                              |
|                 |                |                              |

