

Spektroskopie 2 (NMR)
SS 2024 Klausur

26.7.2024

Frage 1: (5 Punkte)

1. Bestimmen Sie die Struktur. SF: $C_4H_{10}S$ (1 P)
Ordnen Sie die Signale zu.

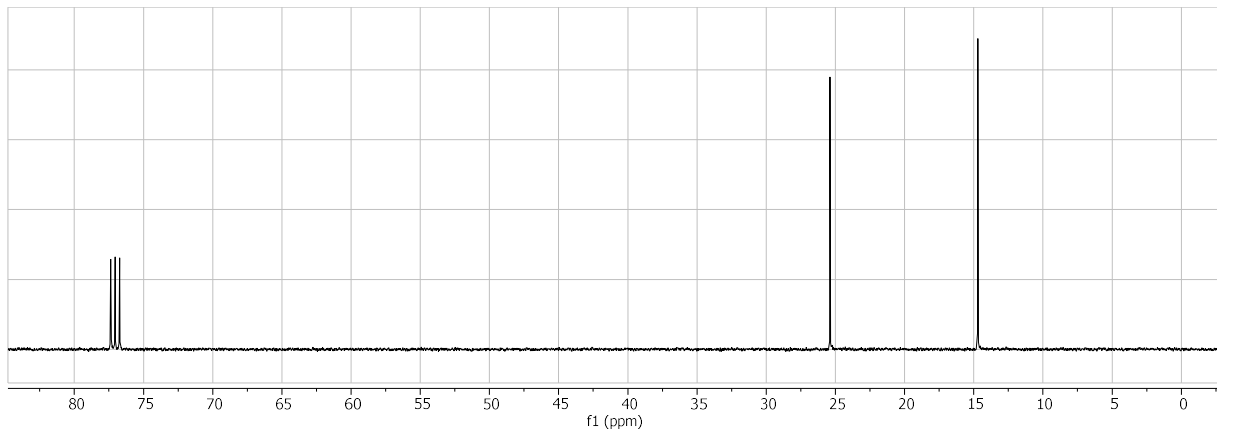
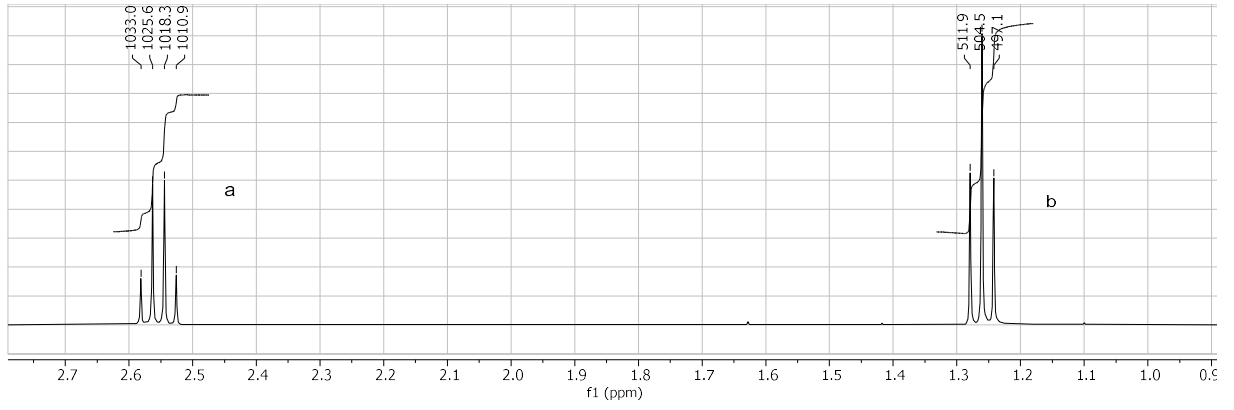
2. Erklären Sie das Kopplungsmuster (1 P)
Wie lautet die allgemeine Formel zur Berechnung der Aufspaltung?

3. Bestimmen Sie die Kopplungskonstante (mit Einheit) (1 P)

4. Welche Bedeutung und welche Einheit haben die Zahlen (1 P)
a) Unten auf der Achse
b) Oben über den Peaks.

Wie kann man diese beiden Zahlen ineinander umrechnen. Welche Größe ergibt sich daraus? Rechnen Sie diese Größe in diesem Beispiel aus.

5. Im ^{13}C -Spektrum sieht man das Lösungsmittel ($CDCl_3$) bei ca. 77 ppm. (1 P)
Warum ist es aufgespaltet?
Können Sie mit obiger allgemeiner Formel diese Aufspaltung auch begründen?



Frage 2: (17 Punkte)

Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_5H_{12}N_2O_2$.

Hinweis: Das Lösungsmittel ist D₂O. Dadurch tauschen -OH und -NH₂-Gruppen aus und sind nicht im Protonen-Spektrum sichtbar.

Wenn Sie sichtbar wären (anderes Lösungsmittel), würden Sie zusätzlich 3 Signale sehen.

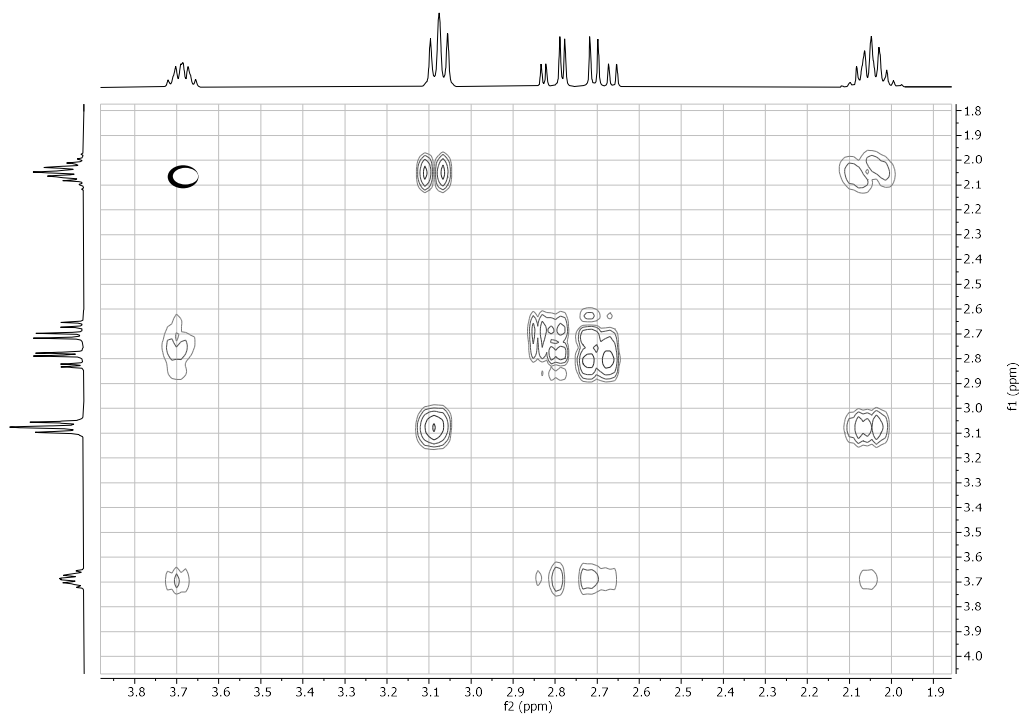
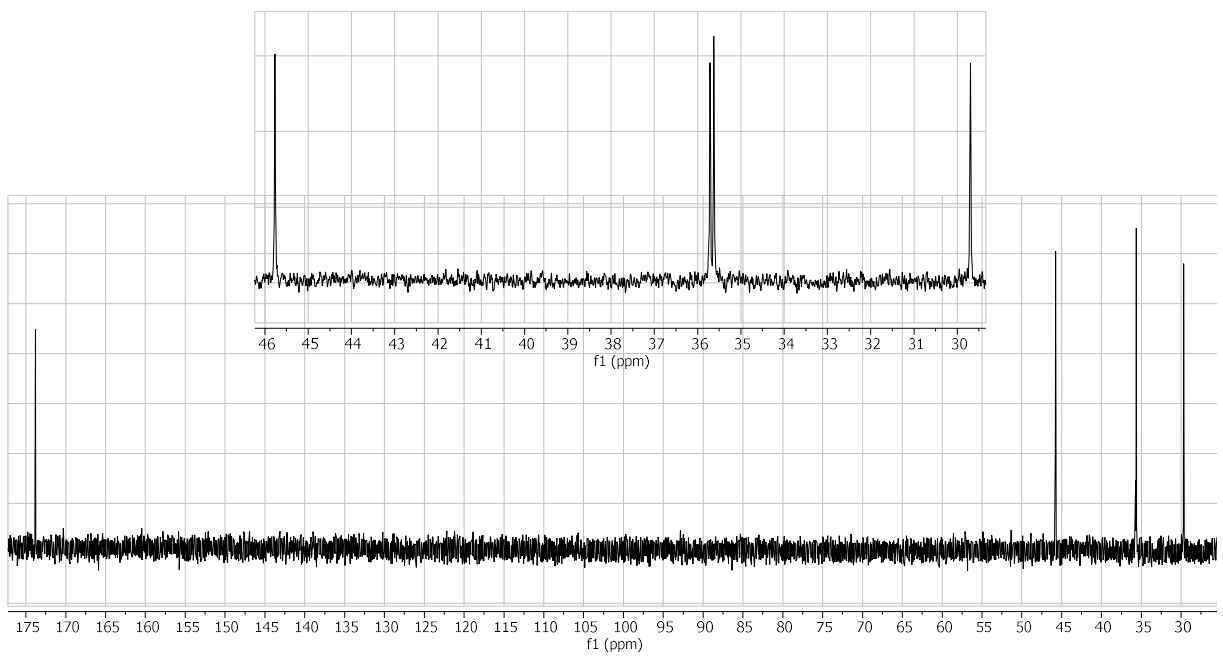
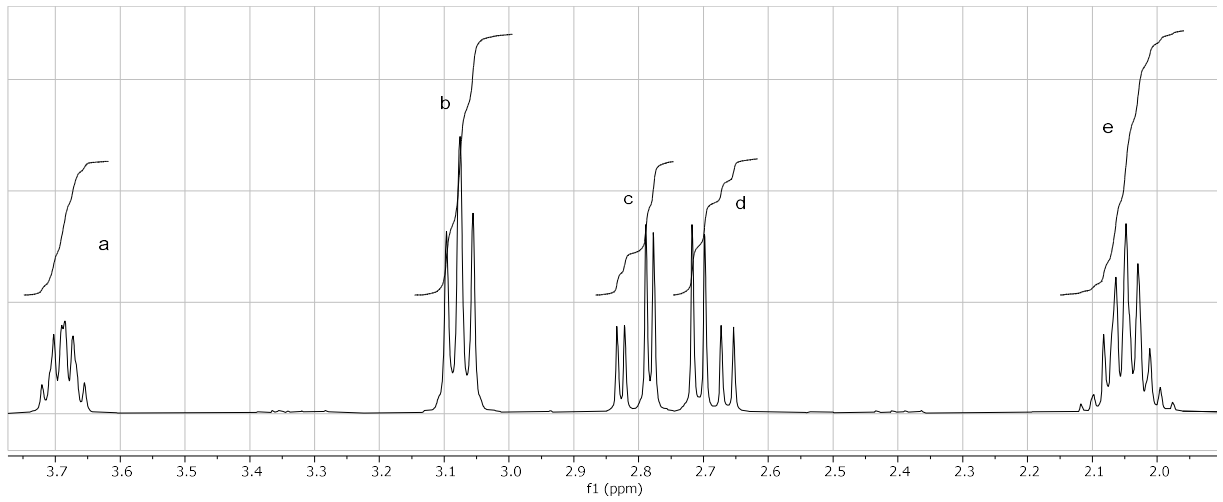
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (5 P)

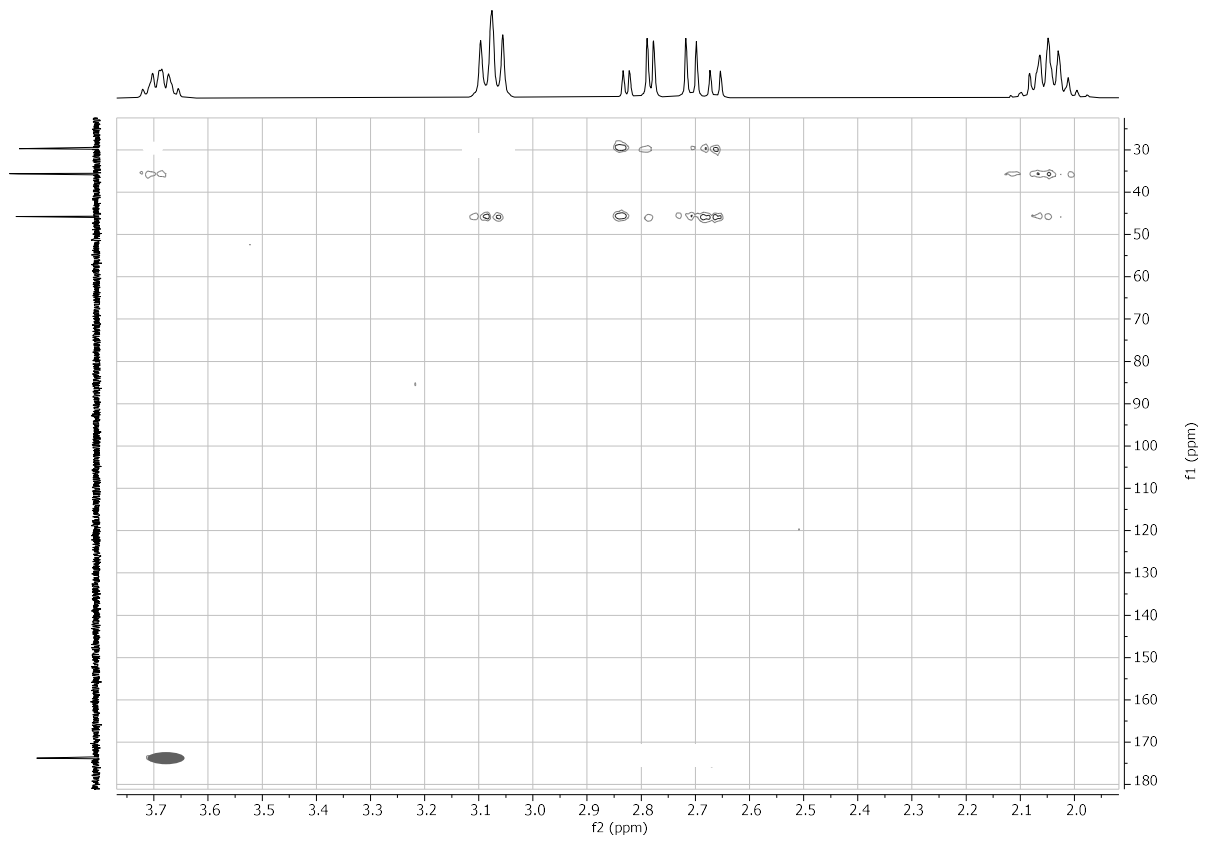
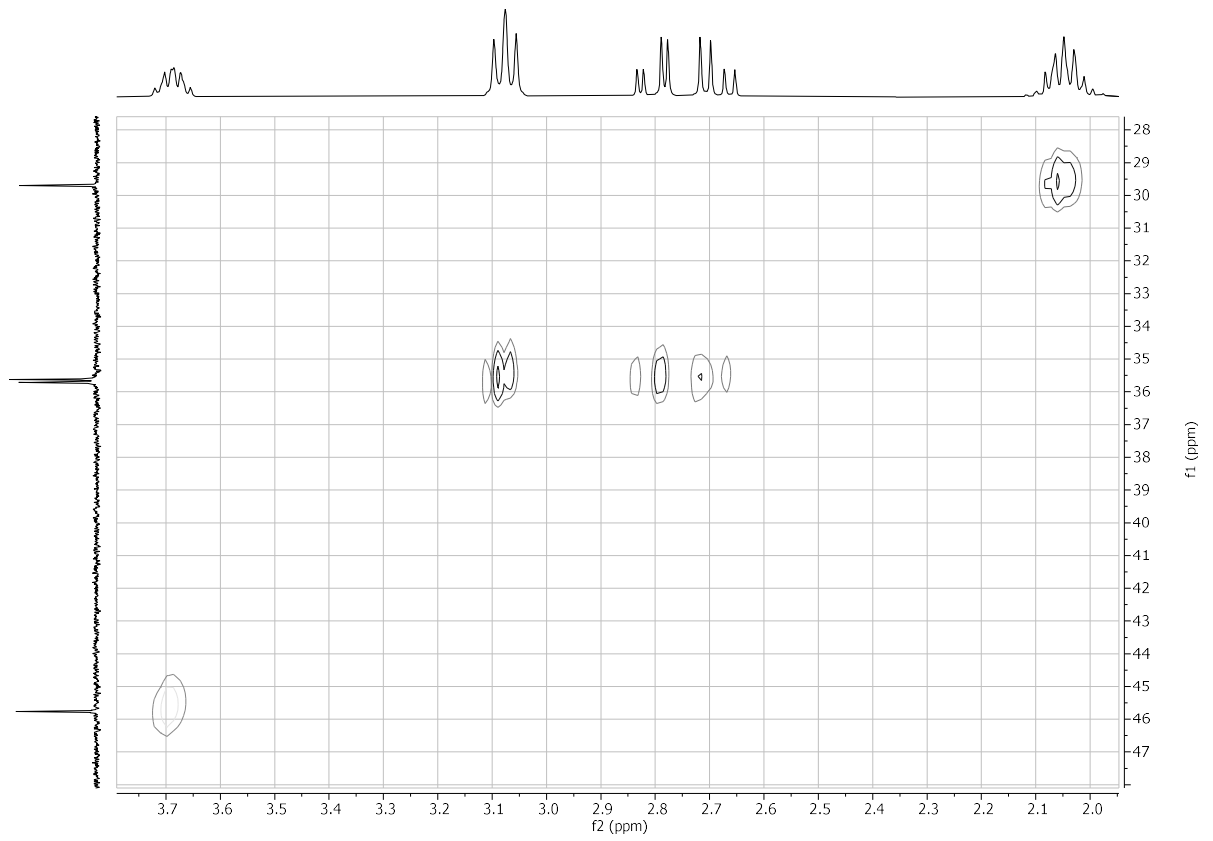
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

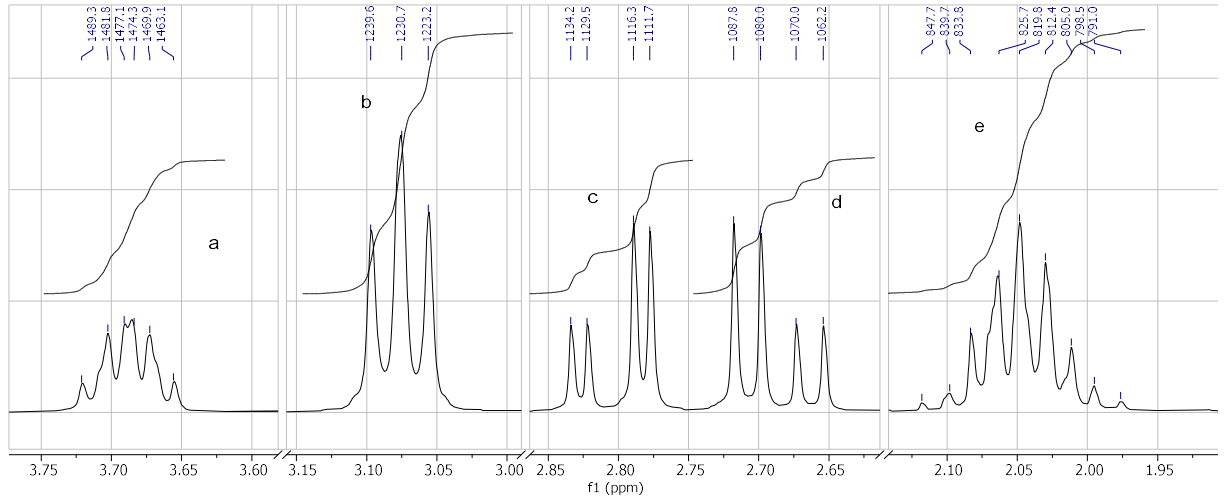
3. Ordnen Sie die im Spektrum sichtbaren Protonen zu. (1 P)

4. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen. (nur sichtbare Protonen) (2 P)

5. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel (Seite 6) (8 P)
Geben Sie dabei 3 Kopplungskonstanten an, die Sie sicher im Spektrum erkennen können.







Frage 3: (16 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_9H_{11}BrO$.

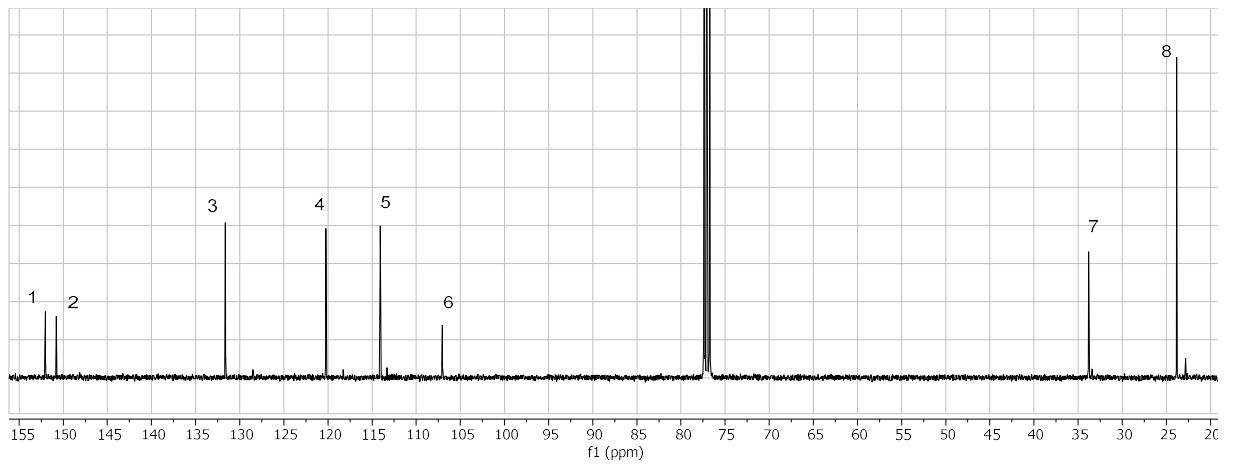
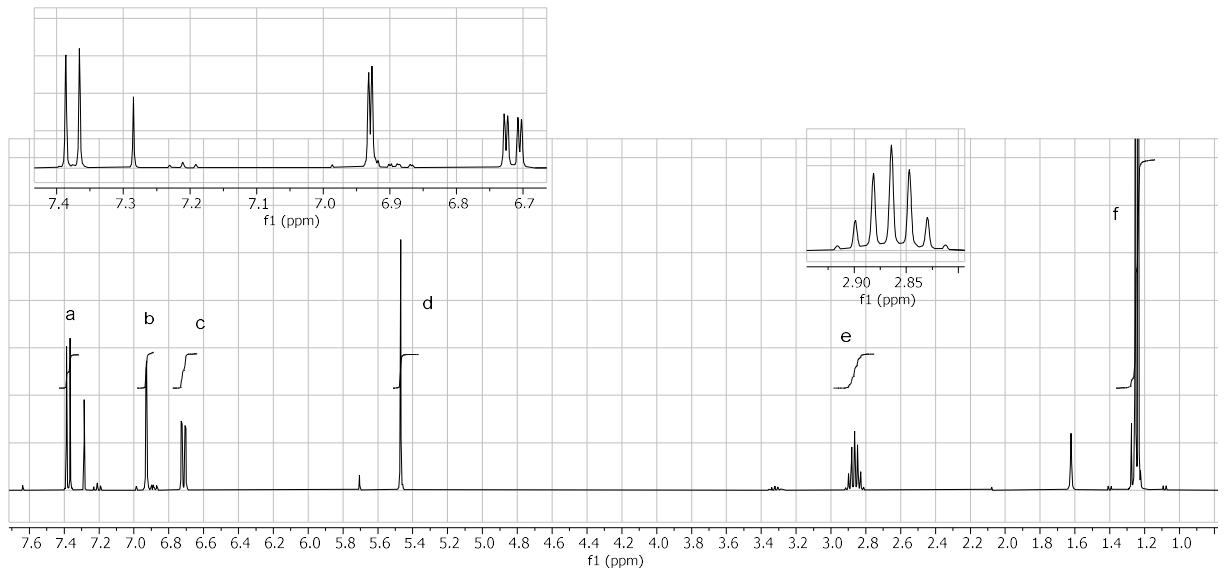
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (3 P)

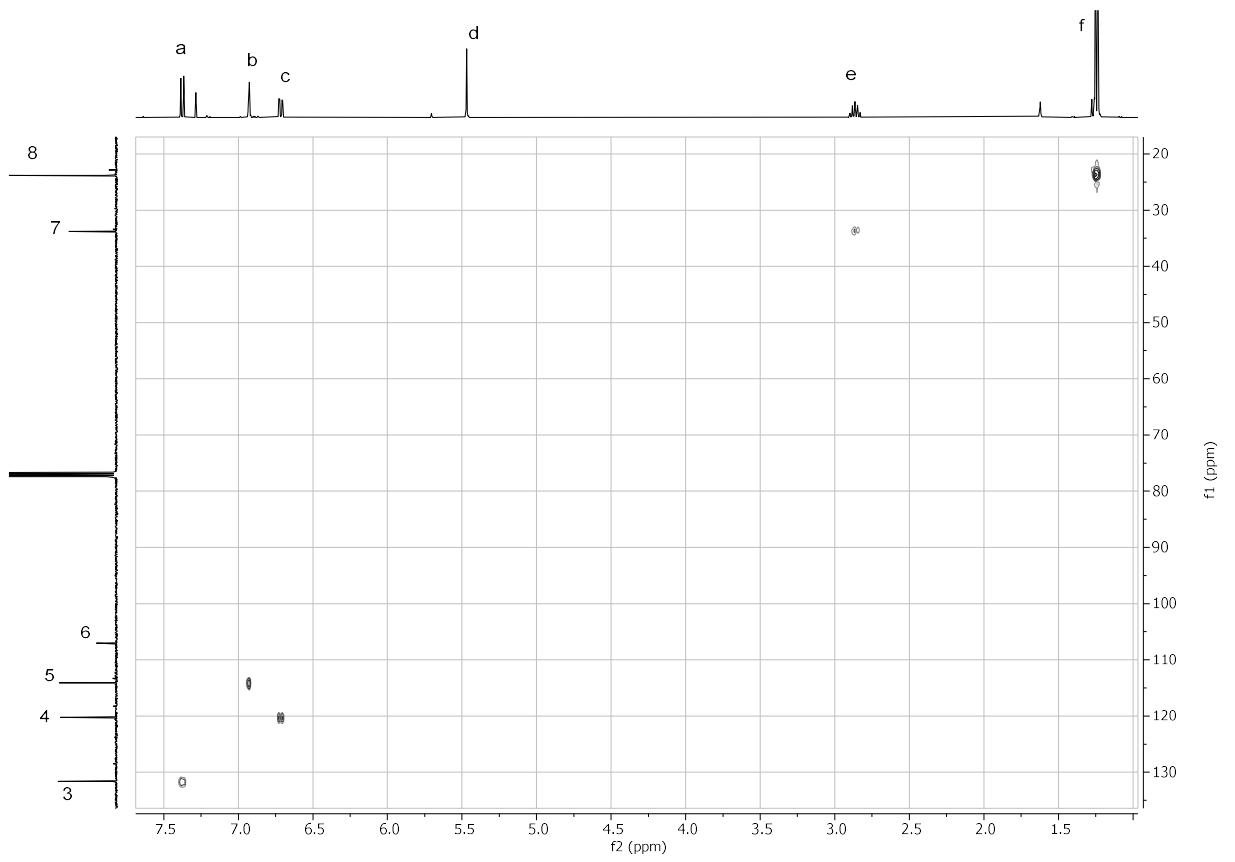
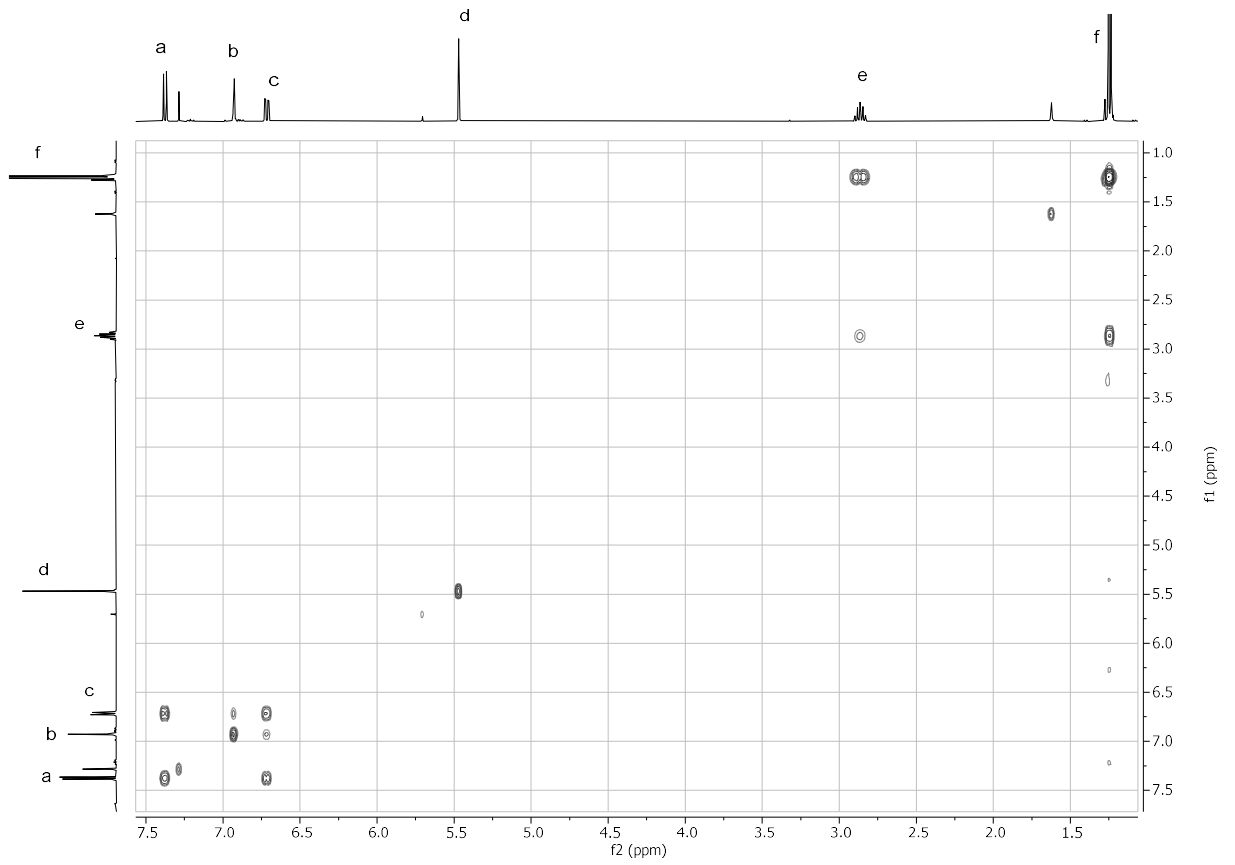
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu.

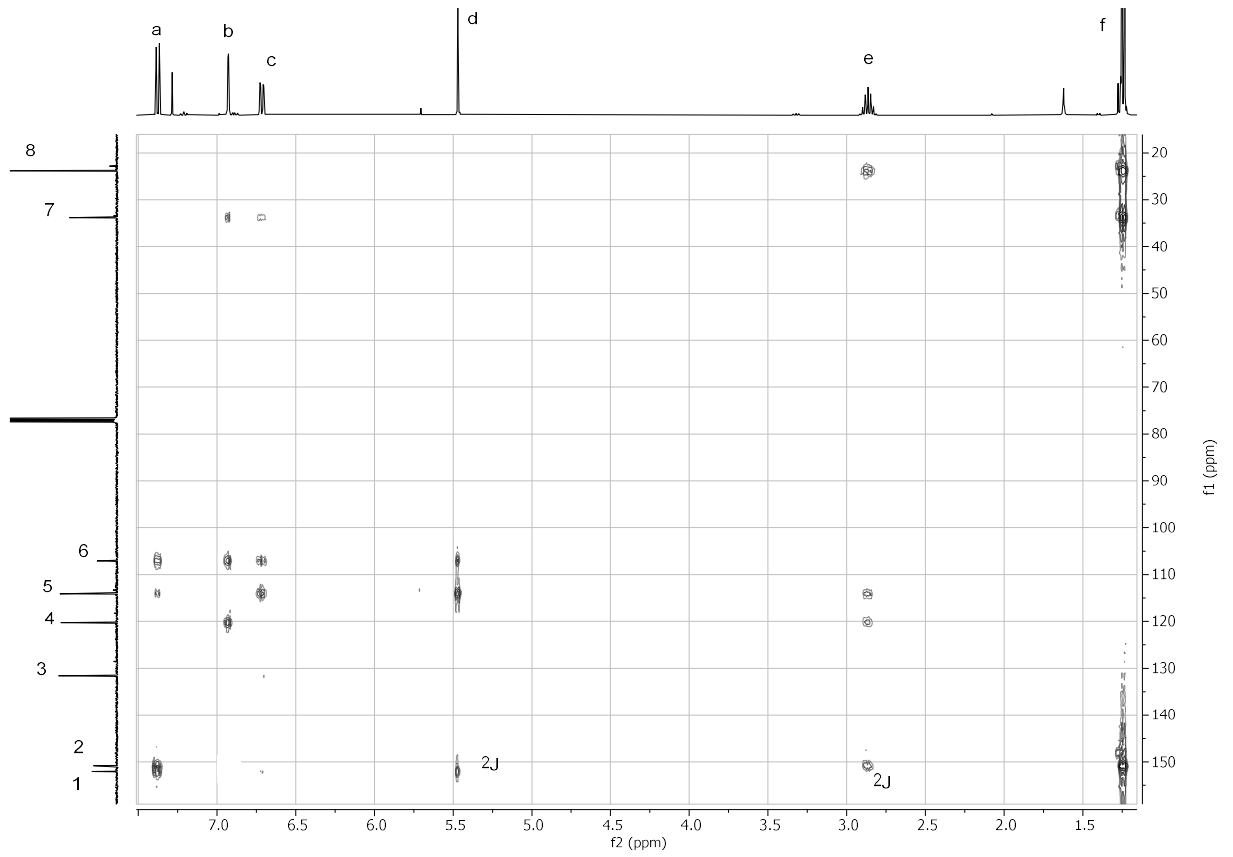
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

4. Ordnen Sie alle Signale zu. (8 P)

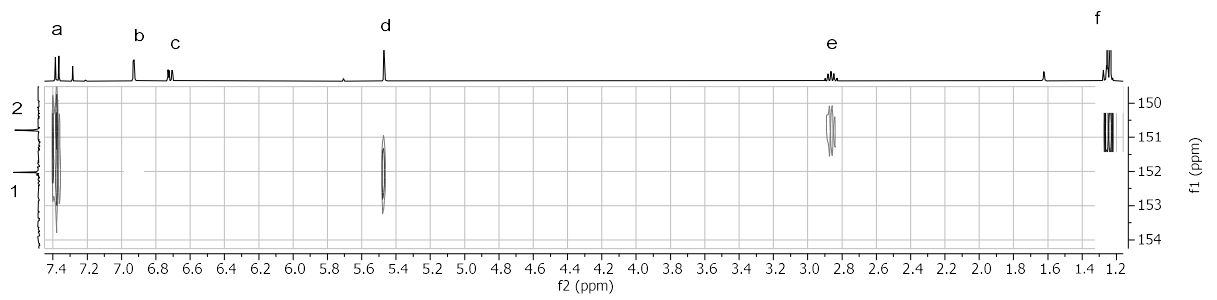
5. Zeichnen Sie die sichtbaren Kopplungen von C_7 und H_d aus dem HMBC in Ihr Molekül ein. Um welche Kopplung handelt es sich? ($^2J_{CH}$, $^3J_{CH}$) (4 P)
Zeichnen Sie das Molekül dafür neu!

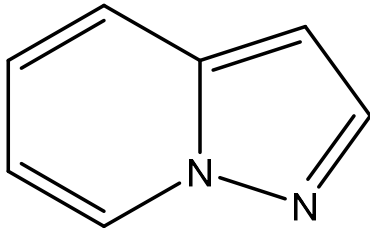






Vergrößerung



Frage 4: (12 Punkte)

1. Ordnen Sie die alle Signale zu. (7 P)
2. Zeichnen Sie im HMBC für die C-Atome 2 und 3 sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül ein.
HMBC: Füllen Sie für diese C-Atome folgende Tabelle aus. (5 P)

^{13}C	^1H	$^n\text{J}_{\text{CH}}$
2		$^3\text{J}_{\text{CH}}$

