

1; 10
2; 14
3; 12
...
4; 14

50

Spektroskopie 2 (NMR)

WS2025 Klausur

23.2.2025
9.12.25

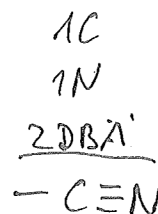
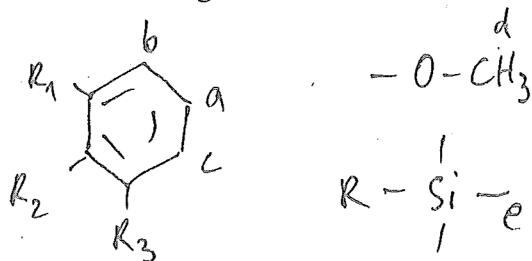
Frage 1: (10 Punkte)

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{11}H_{15}NOSi$. $DBA = 1 + \frac{1}{22} = 15 + 1 + 2 = 6$

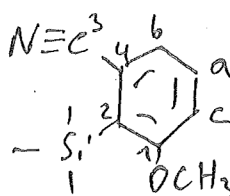
$$DBA' = 1 + \frac{1}{2}(22 - 15 + 1 + 2) = 6$$

Hinweis: Es ist keine Carbonyl-Gruppe enthalten.

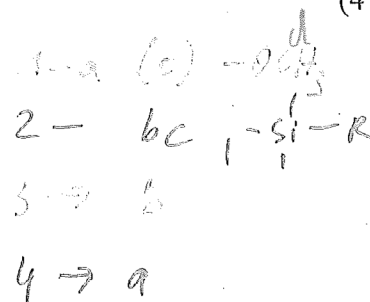
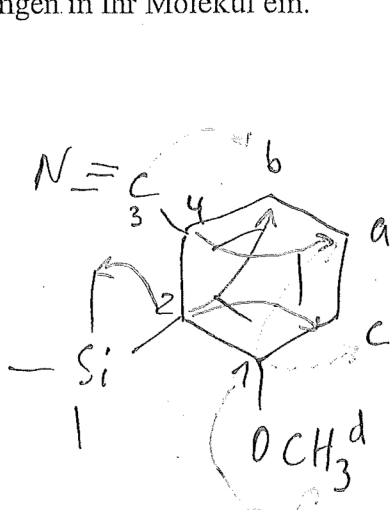
1. Markieren Sie das Chloroformsignal im ^1H -Spektrum. (1 P)
2. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des ^1H - und ^{13}C -Spektren? (4 P)

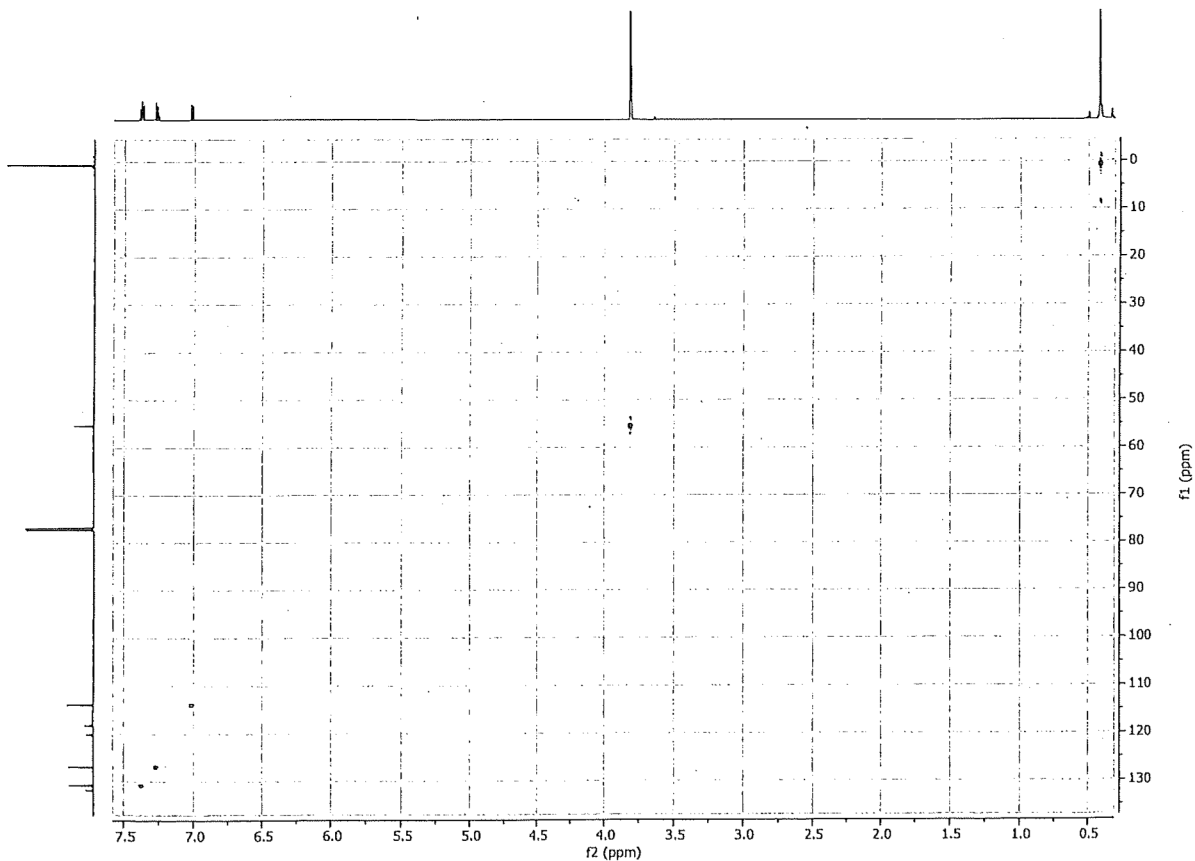
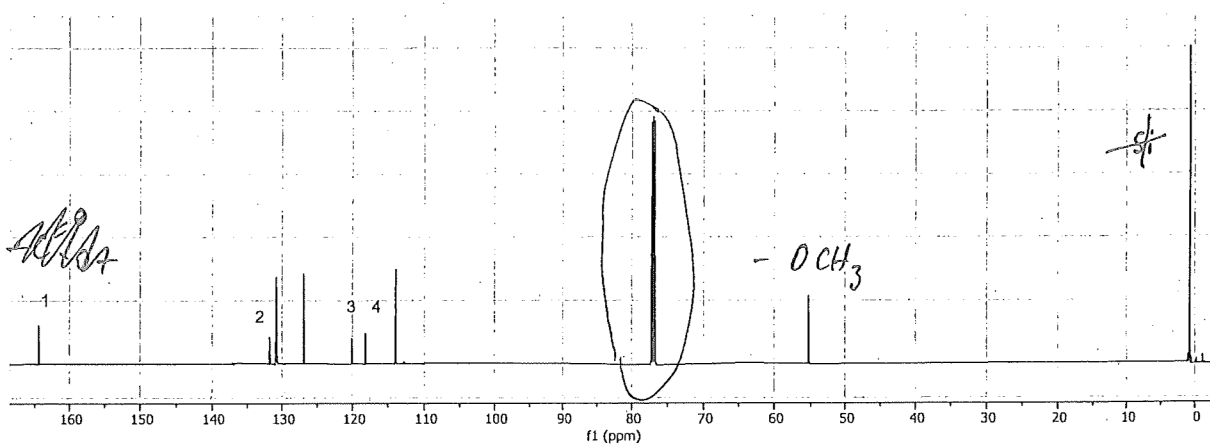
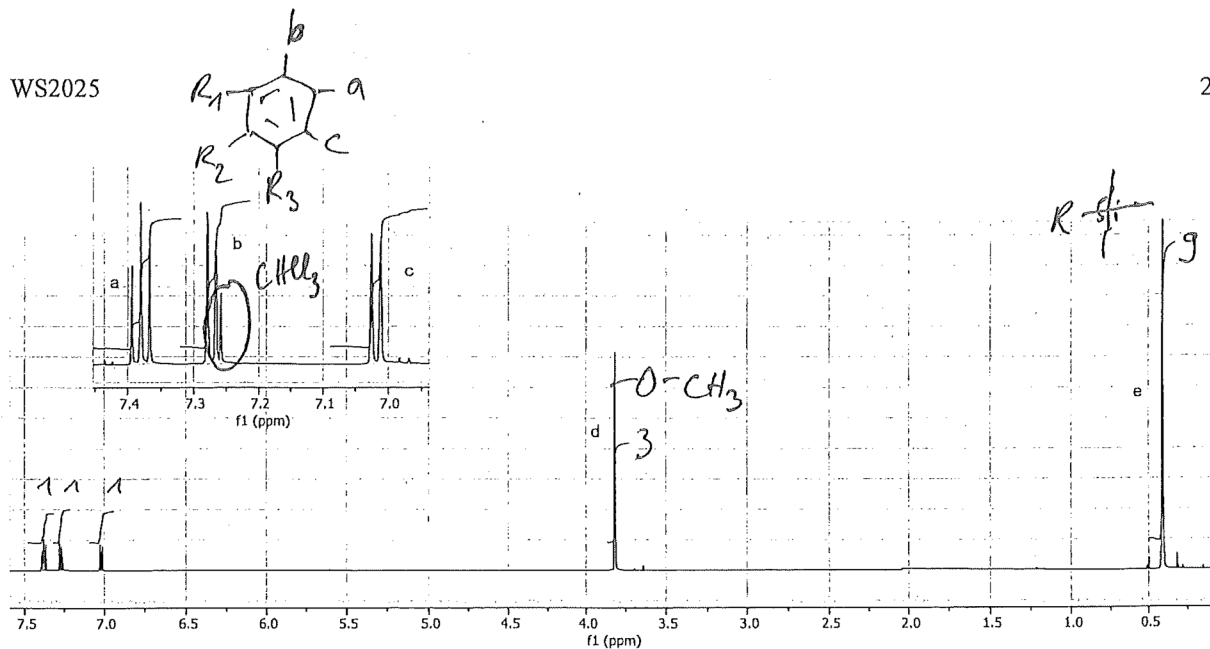


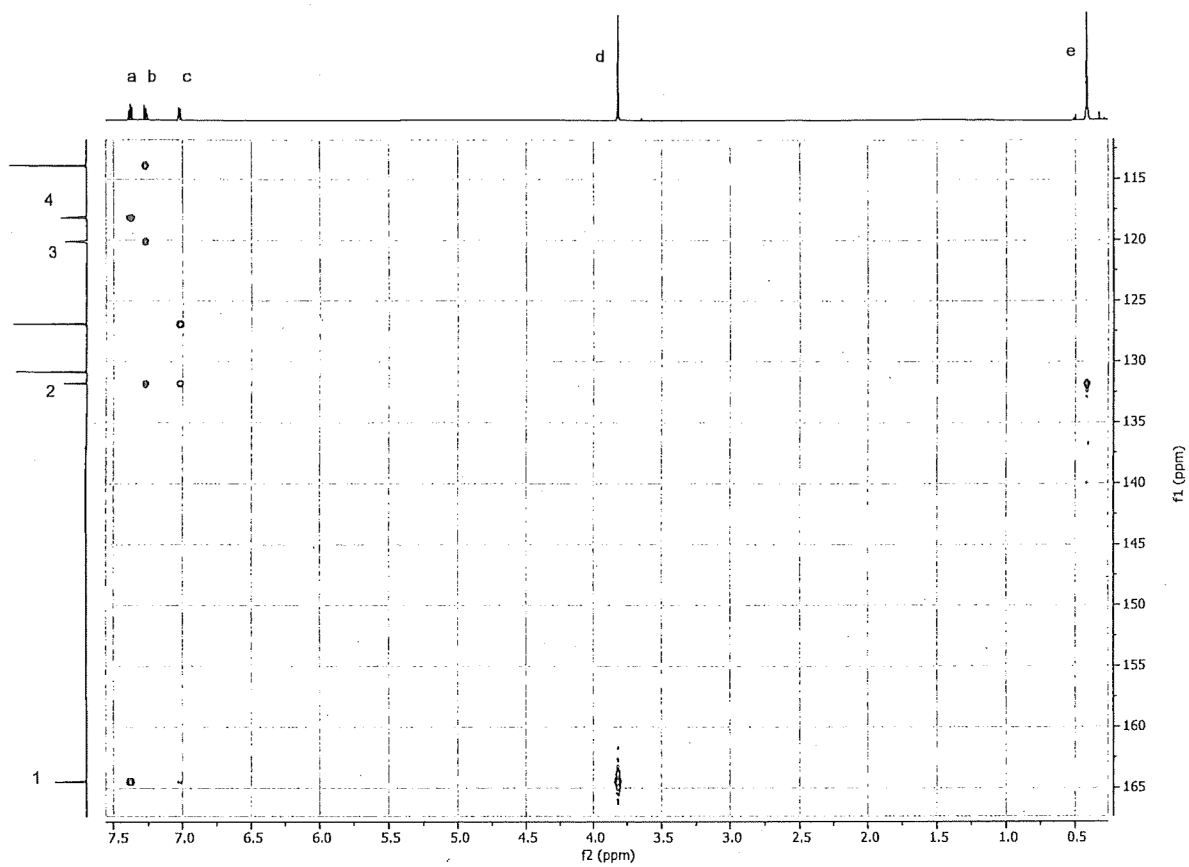
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)



4. Ordnen Sie die vier quartären C-Atome zu und zeichnen Sie die im HMBC sichtbaren Kopplungen in Ihr Molekül ein. (4 P)







HMQC

1 $\rightarrow$ a, d (c)

2 $\rightarrow$ b, c

3 $\rightarrow$ b

4 $\rightarrow$ a

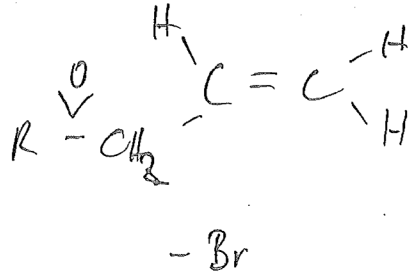
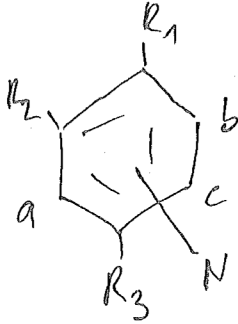
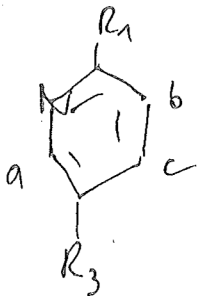
Frage 2: (14 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C_8H_8BrNO .

$$DBA = 1 + \frac{1}{2}(16 - 8 - 1 + 1) = 5$$

Hinweis: Es ist keine Carbonyl-Gruppe enthalten!

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



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

3. Ordnen Sie die Signale d, e und f zu und zeichnen Sie einen Splittingschlüssel incl. der Kopplungskonstanten. (Rückseite) (9 P)

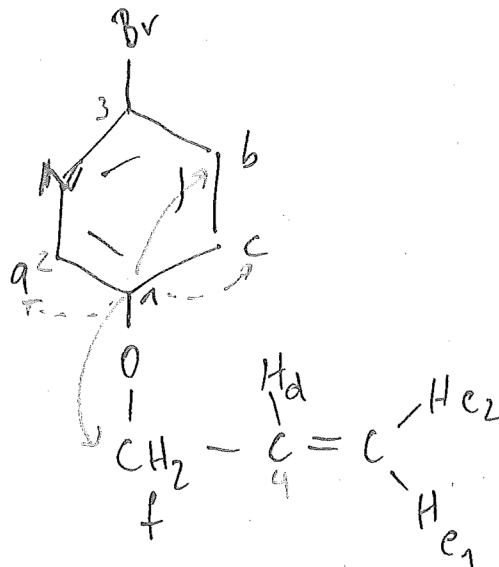
4. Bei welcher Frequenz wurden das 1H und das ^{13}C -Spektrum aufgenommen? (2 P)

$$^1H: 4,6 \text{ ppm} = 1840 \text{ Hz}$$

$$1 \text{ ppm} = 400 \text{ Hz}$$

$$^1H: 400 \text{ MHz}$$

$$^{13}C (= 1/4 \times ^1H) = 100 \text{ MHz}$$



d

$$J_{de_1} = 17.3 \text{ Hz}$$

$$J_{de_2} = 10.6 \text{ Hz}$$

$$J_{df} = 5.3 \text{ Hz} \quad 4x$$

$$J_{e_1 e_2} \approx 1.5 \text{ Hz}$$

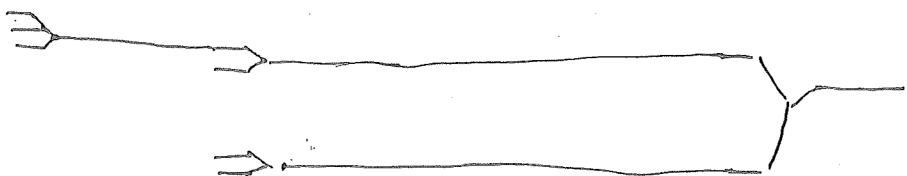
$$J_{e_1 df} \approx 1.5 \text{ Hz}$$

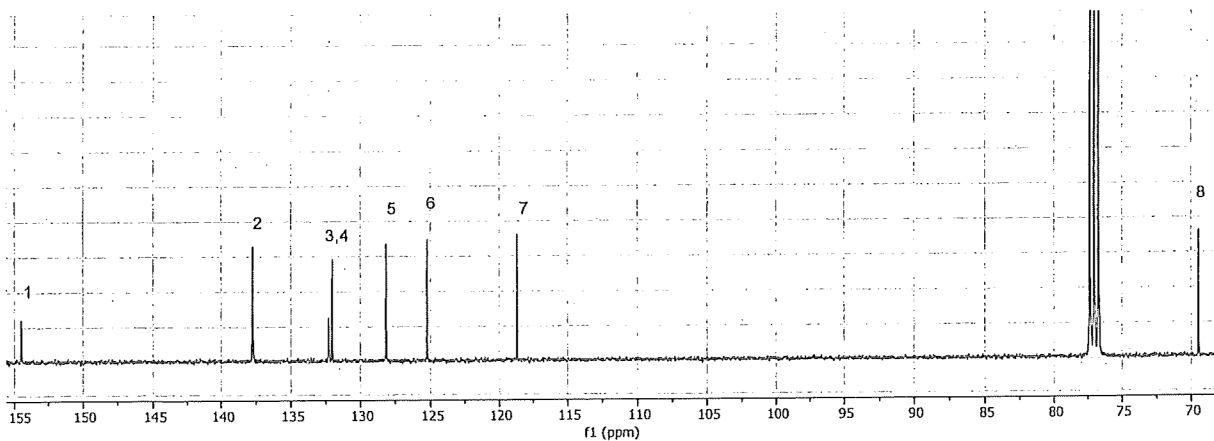
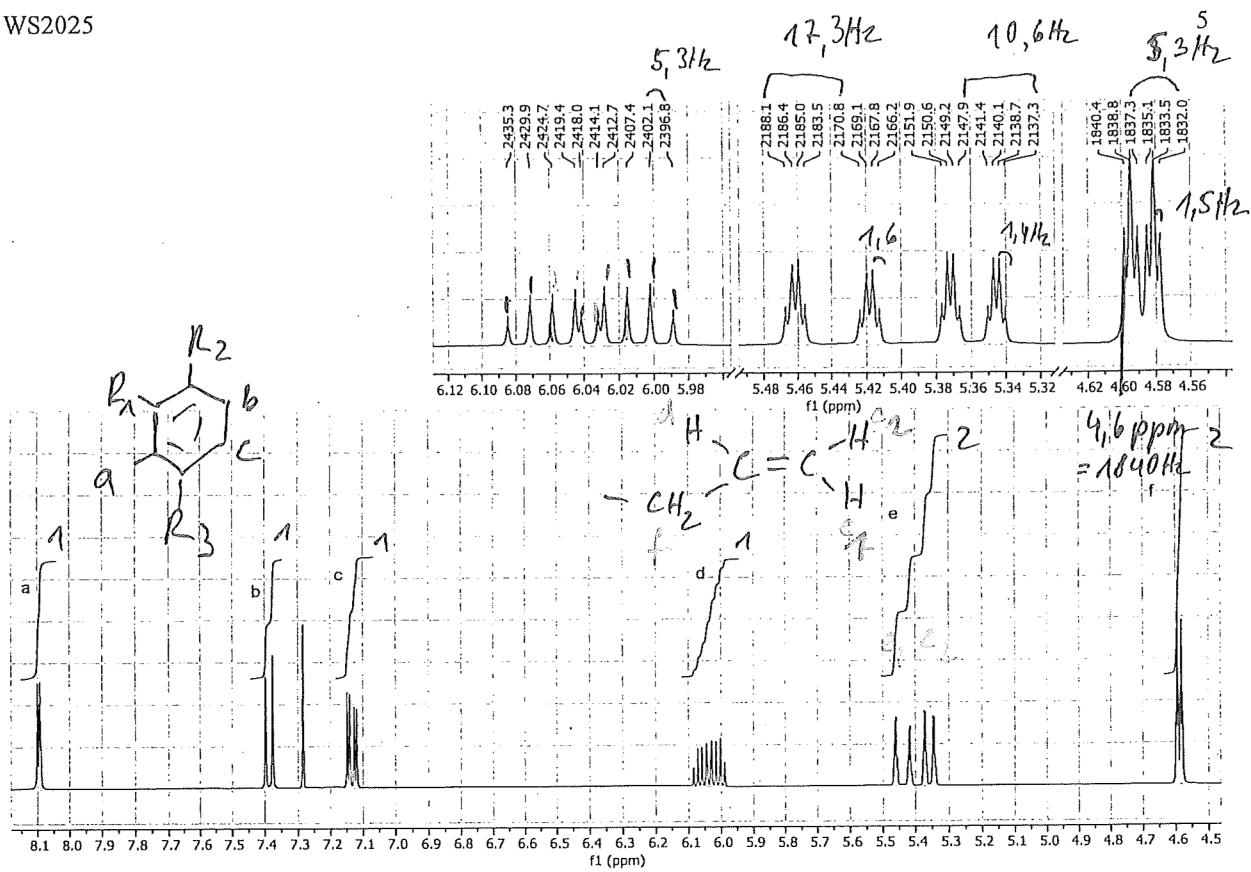
$$J_{e_2 df} \approx 1.5 \text{ Hz}$$

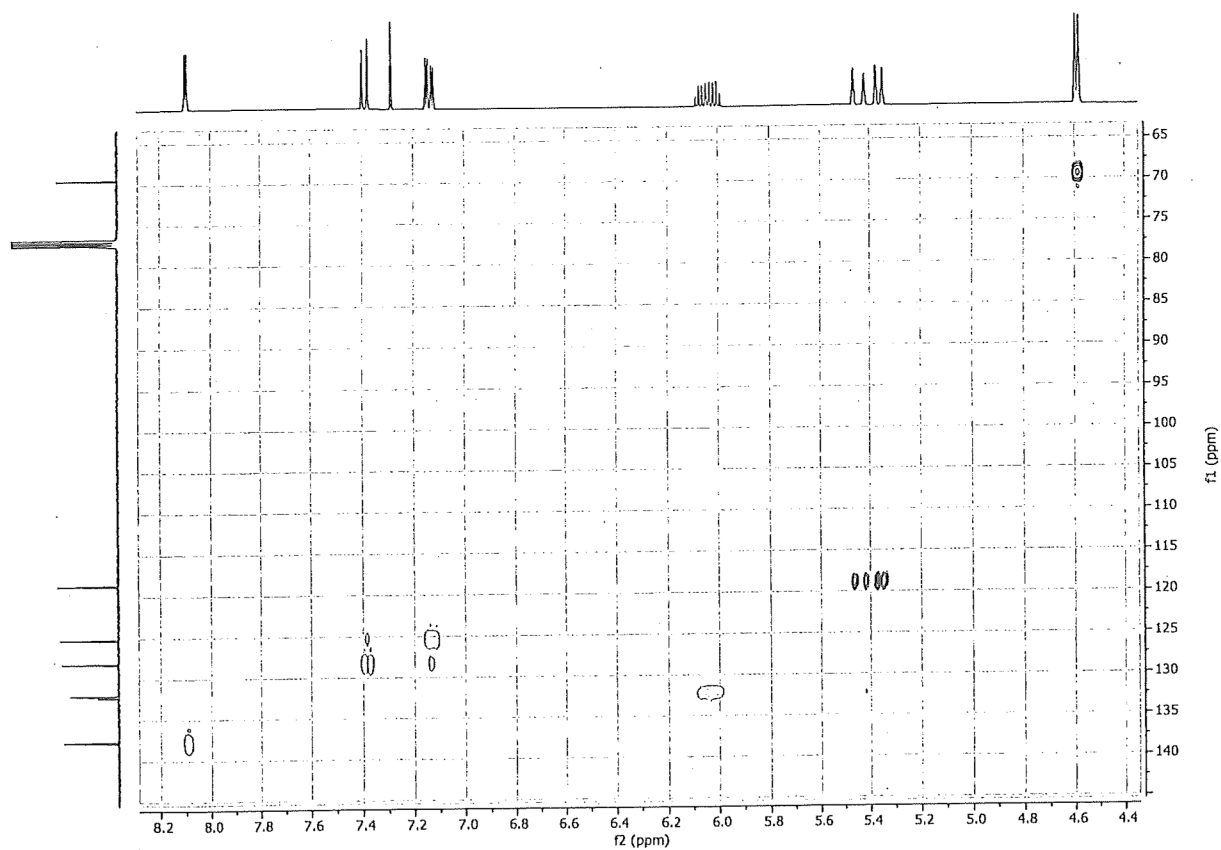
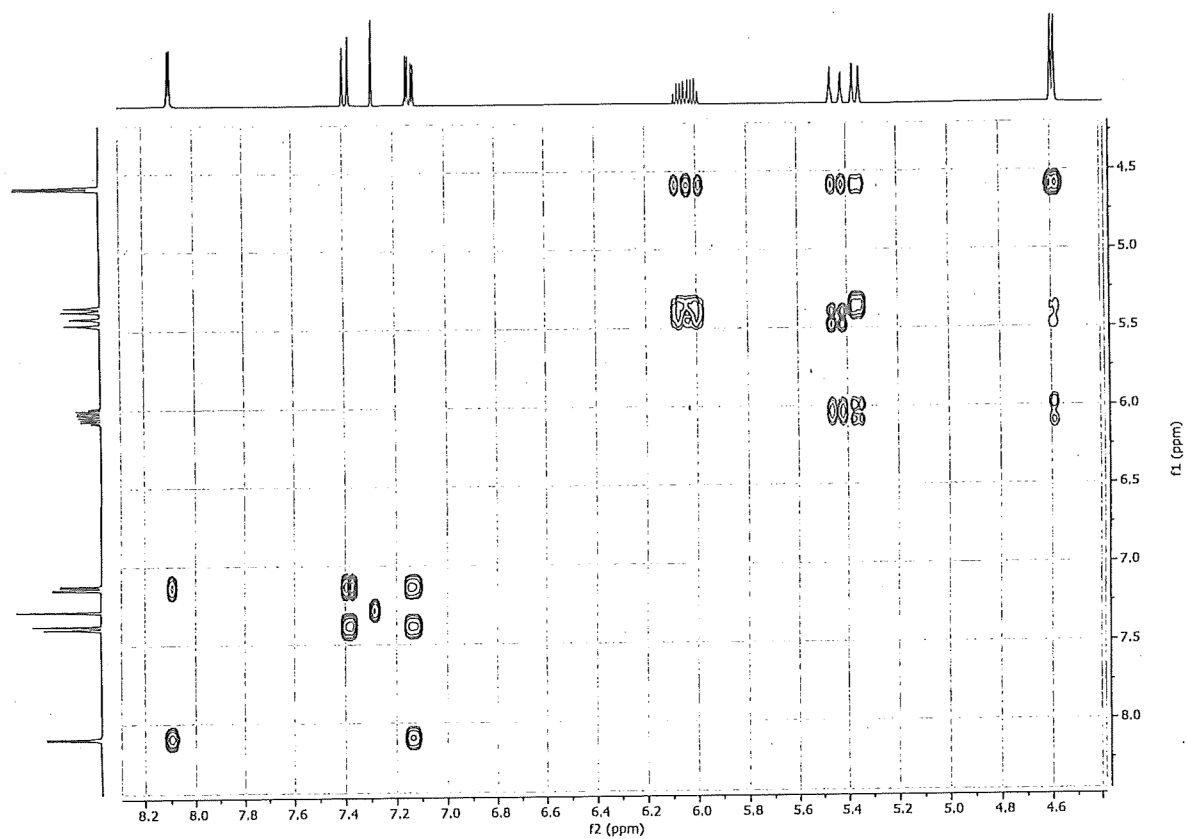
e₁

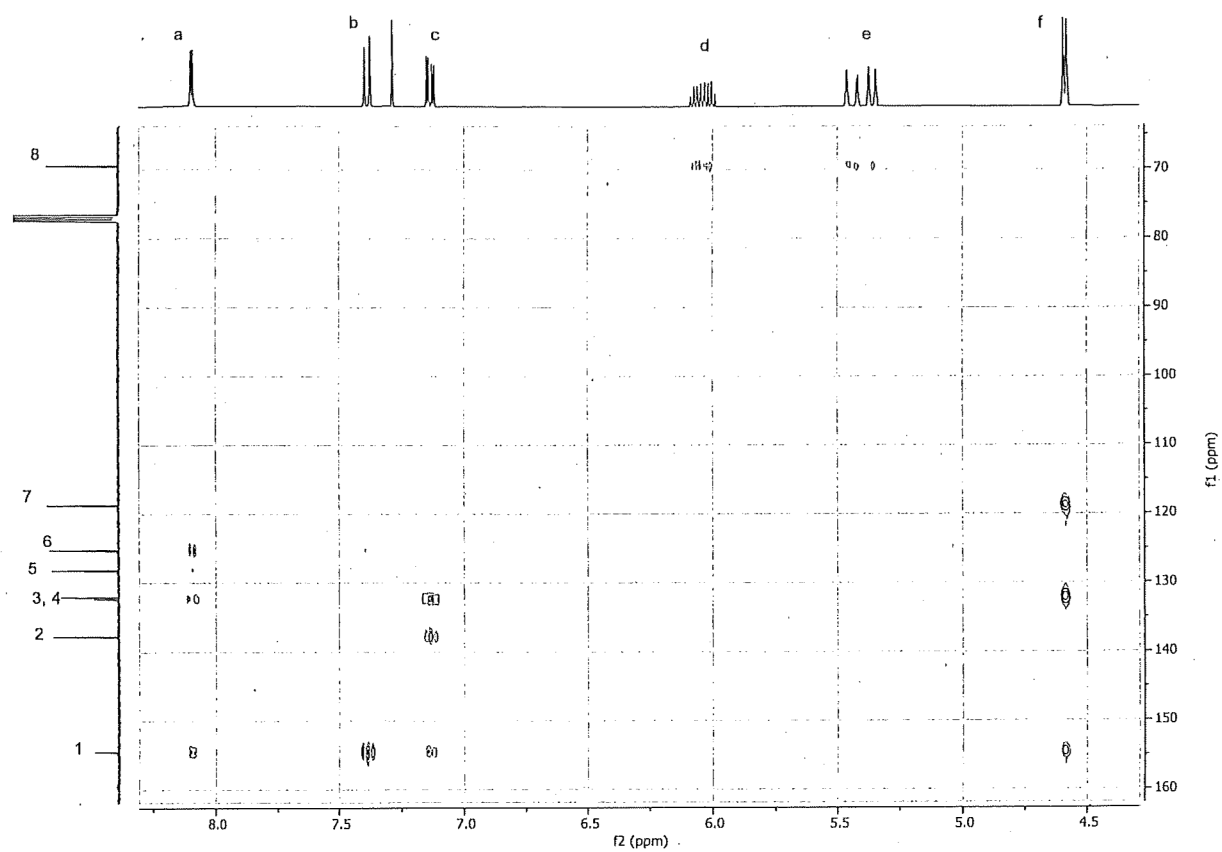
e₂

f









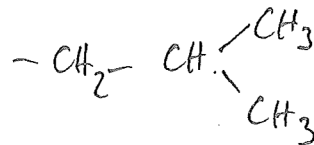
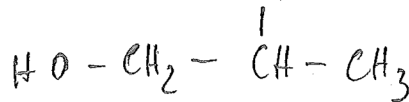
1 $\rightarrow$ b, f (a, c)

Frage 3: (12 Punkte)

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

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

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



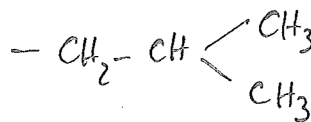
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)



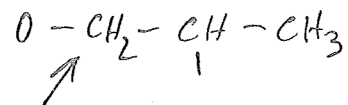
3. Schreiben Sie kurz und Stichpunkt artig, wie Sie auf die Fragmente gekommen sind. (4 P)

COSY

Integral 2 : 1 : 6
d - e - h



Integral 2 : 1 : 3
b - c - g



↗
0 daneben, da bei 3,7 ppm

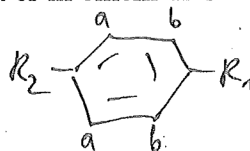
hsqc: Proton f: kein Peak → OH

Aromat: 2 Doublets mit starkem Dacheffekt, hsqc → 2 Cs

4. Was ist ein Dacheffekt. Wo tritt er in einem dieser Spektren auf? (3 P)

in 1H -Spektrum

beim Aromaten



normalerweise
wenn Reste sehr
unterschiedlich



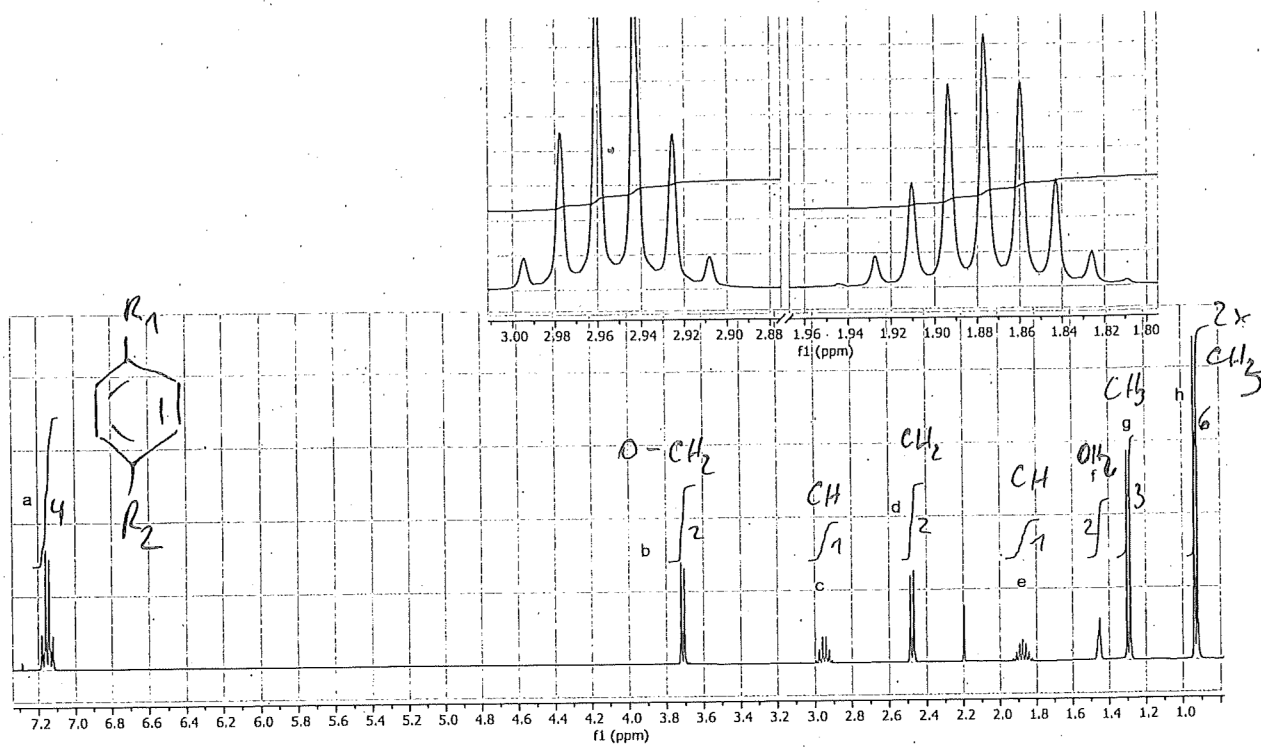
wenn Reste ähnlich
Verschiebung

da beide Reste an
Aliphatische Ketten



$$\Delta \delta_{ab} \approx J_{ab}$$

Verschiebungsdifferenz ≈ Kopplungskon



Integrale:

4

2

1

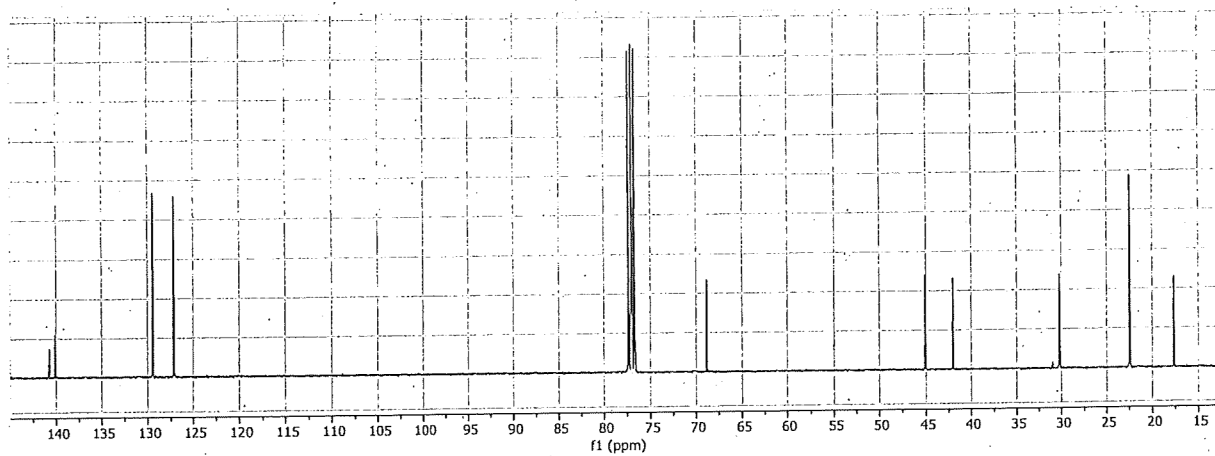
2

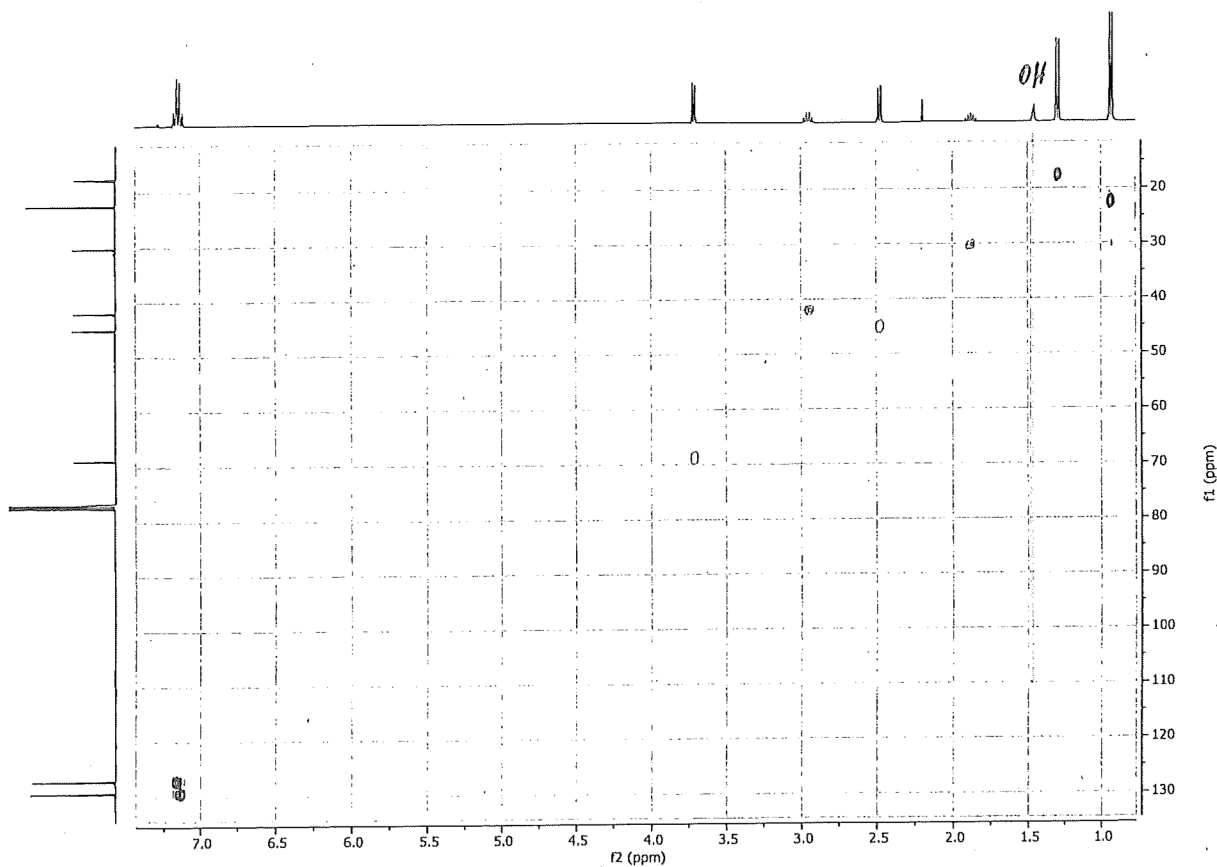
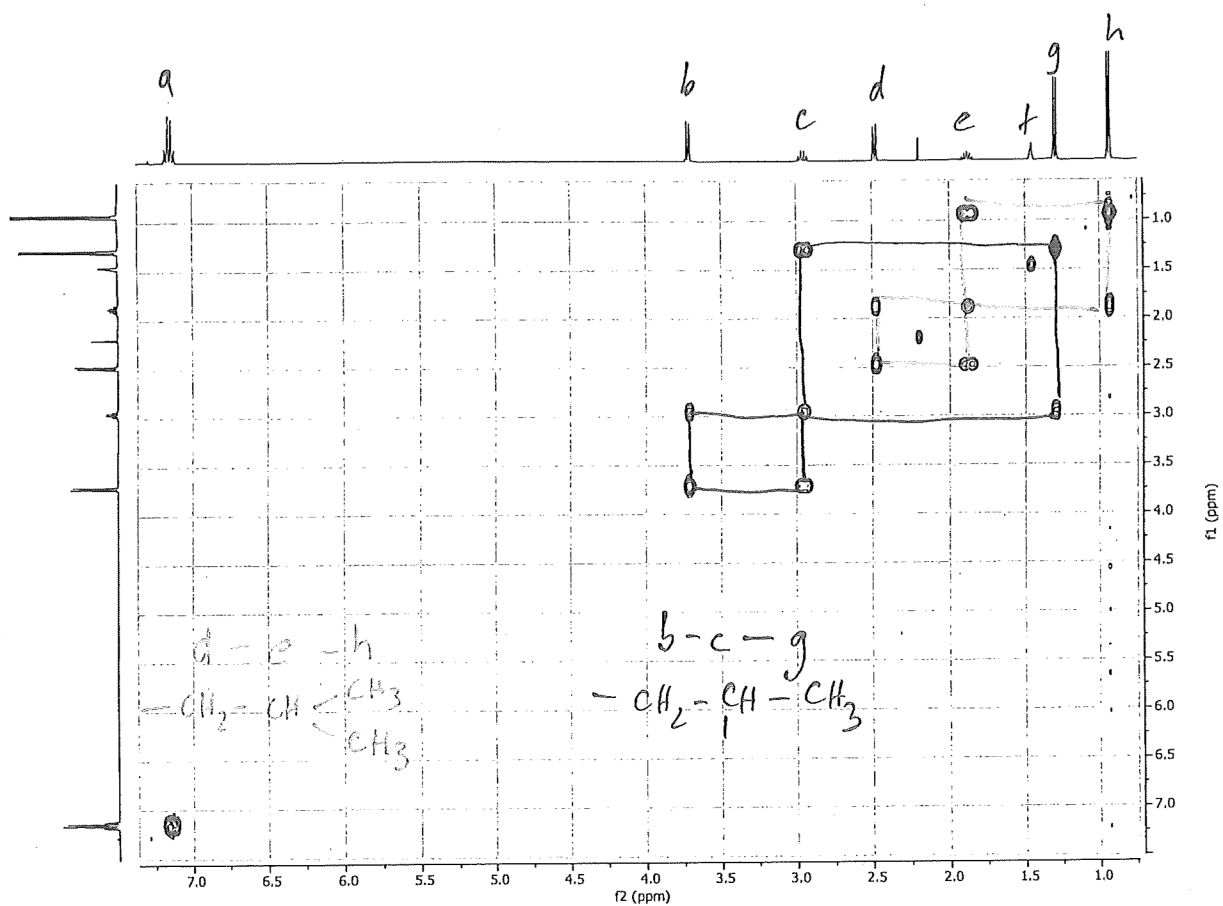
1

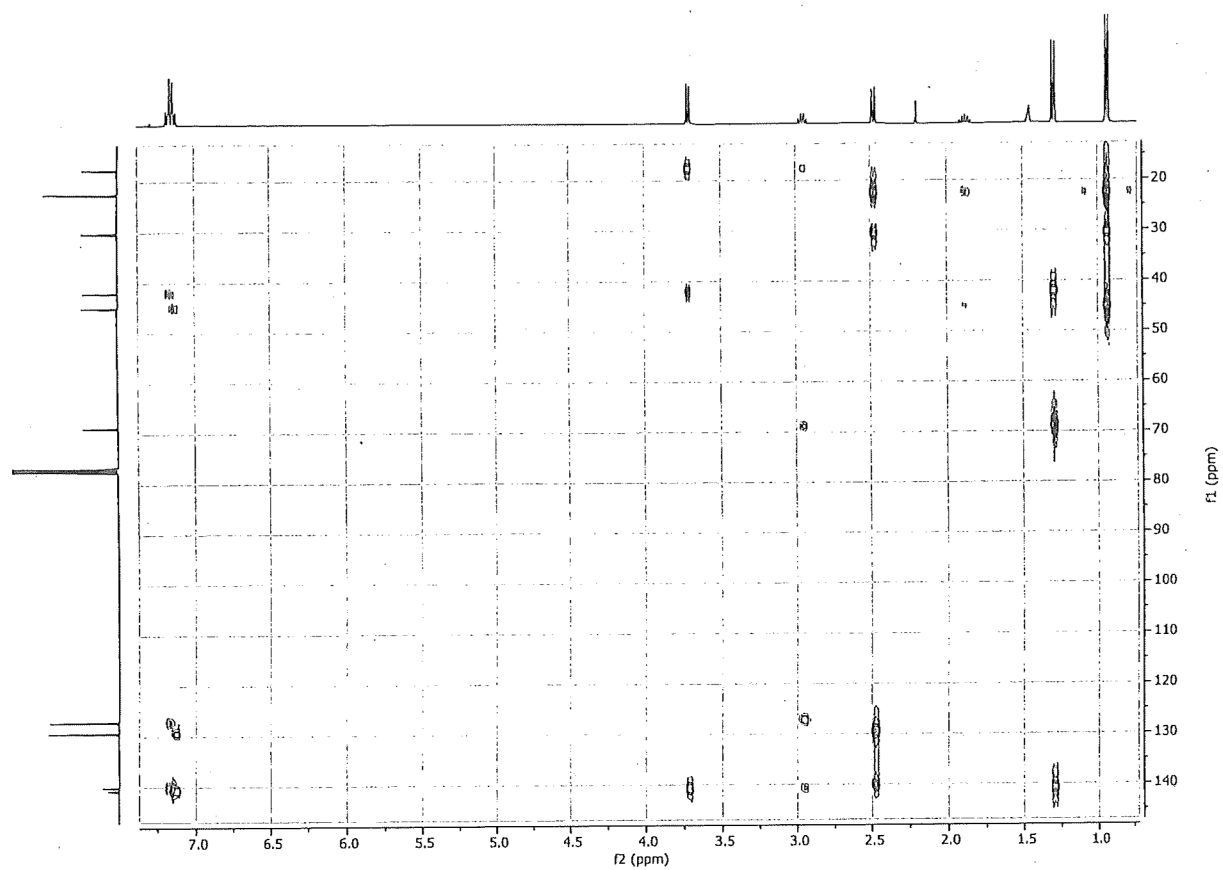
1

3

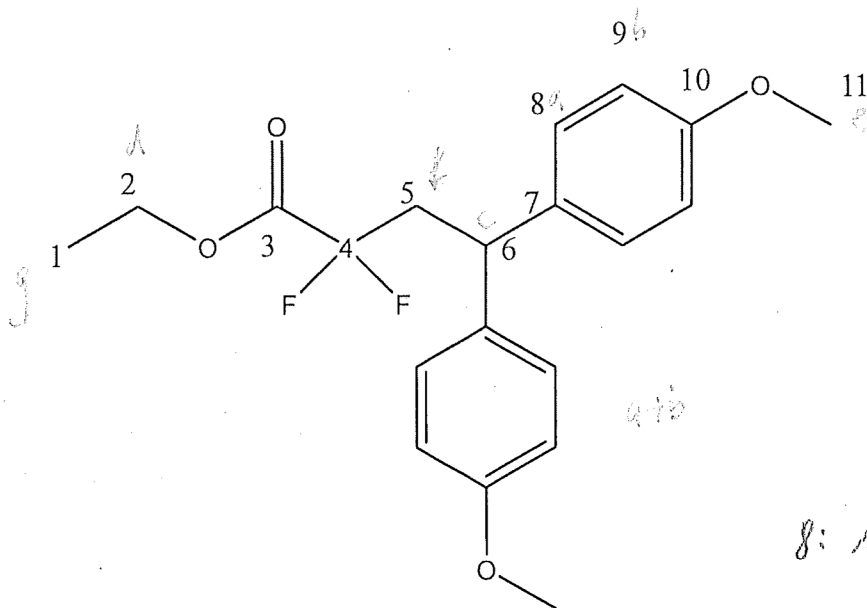
6







Frage 4: (14 Punkte)



OMe $CH(CH_3)_2$
 8: $128.5 + 1 - 2 \approx 127.5 \text{ ppm}$
 9: $128.5 - 14.4 - 0 \approx 114.1 \text{ ppm}$

1. Ordnen Sie ~~die~~ alle Signale zu. (11 P)

Für die Zuordnung der ^{13}C -Signale schreiben Sie die Zahl aus der Struktur in das ^{13}C -Spektrum zum jeweiligen Signal.

2. Aus welchem Grund haben Sie C₈ und C₉ so zugeordnet? (3 P)

Berechnung der Verschiebung mit Hilfe der
Inkremententabelle

3. Proton f

