

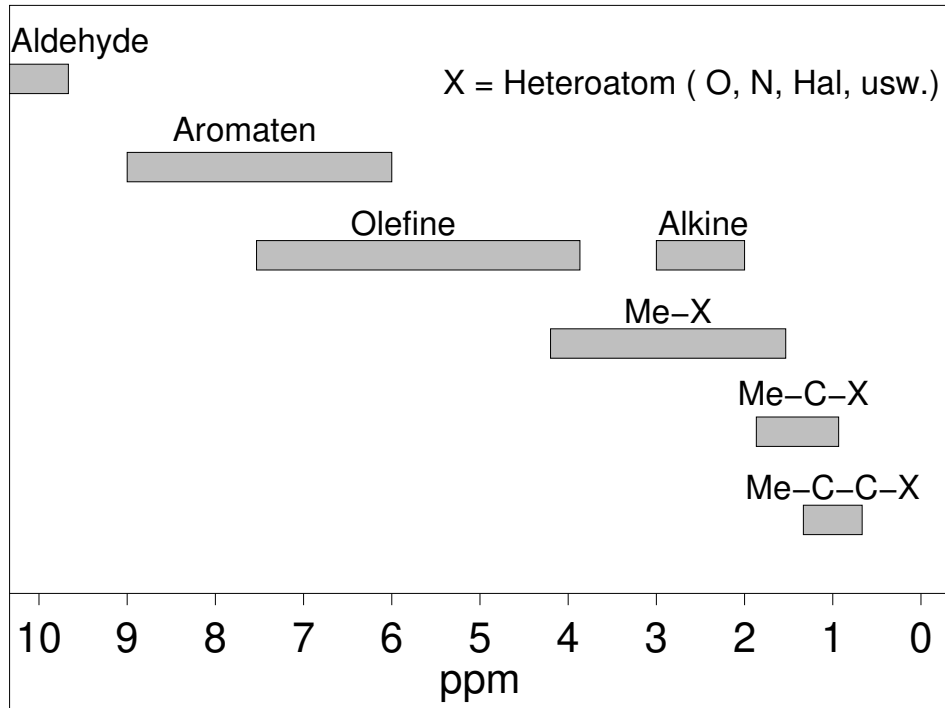
# Übungen zur Spektroskopie 2

C. Ober und Dr. D. S. Stephenson  
Department Chemie, Universität München

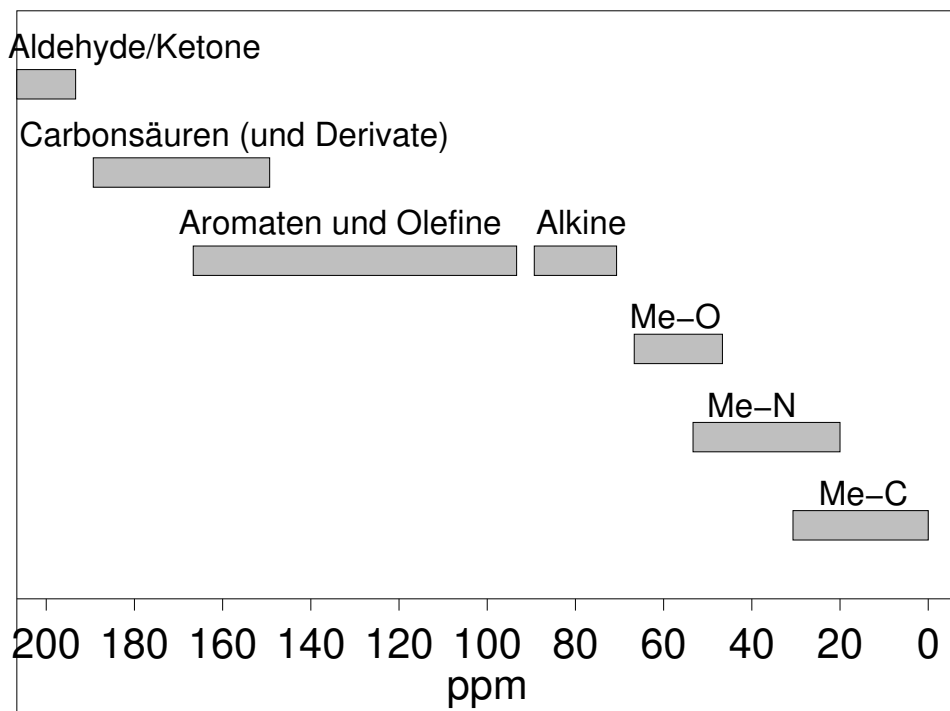
Sie finden diese Übungen und alte Klausuren (mit Lösung) auf unserer Homepage:

<https://www.cup.uni-muenchen.de/oc/nmr/uebungen/>  
<https://www.cup.uni-muenchen.de/oc/nmr/alte-klausuren/>

- Die  $^1\text{H}$  chemischen Verschiebungen liegen meistens zwischen 0 ppm und 10 ppm.



- Die  $^{13}\text{C}$  chemischen Verschiebungen liegen meistens zwischen 0 ppm und 200 ppm.

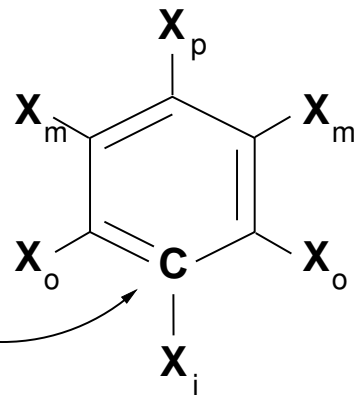


8.  $^{13}\text{C}$  - „Inkremente“

## • Benzole

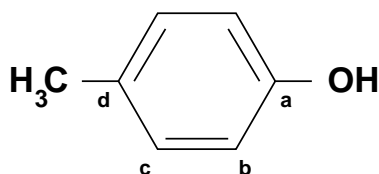
$$\delta_{\text{C}} = 128.5 + \sum_k S_k n_k$$

(  $k = i, o, m, p$  )



X	$S_{ipso}$	$S_{ortho}$	$S_{meta}$	$S_{para}$
CH <sub>3</sub>	9.2	0.7	-0.1	-3.1
CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	15.6	-0.5	0.0	-2.7
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20.1	-2.0	0.0	-2.5
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	22.1	-3.4	-0.4	-3.1
CH <sub>2</sub> Cl	9.3	0.3	0.2	0
CH <sub>2</sub> Br	9.5	0.7	0.3	0.2
CH <sub>2</sub> OH	12.4	-1.2	0.2	-1.1
CH=CH <sub>2</sub>	8.9	-2.3	-0.1	-0.8
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	13.1	-1.1	0.4	-1.1
C≡CH	-6.2	3.6	-0.4	-0.3
CHO	8.4	1.2	0.5	5.7
COCH <sub>3</sub>	8.9	0.1	-0.1	4.4
COOH	2.1	1.6	-0.1	5.2
COOCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2.1	1.0	-0.5	3.9
CONR <sub>2</sub>	5.0	-1.2	0.1	3.4
OH	26.9	-12.8	1.4	-7.4
OCH <sub>3</sub>	31.4	-14.4	1.0	-7.7
OCOCH <sub>3</sub>	22.4	-7.1	0.4	-3.2
CN	-15.7	3.6	0.7	4.3
NH <sub>2</sub>	18.2	-13.4	0.8	-10.0
NO <sub>2</sub>	19.9	-4.9	0.9	6.1
F	34.8	-13.0	1.6	-4.4
Cl	6.3	0.4	1.4	-1.9
Br	-5.8	3.2	1.6	-1.6
I	-34.1	8.9	1.6	-1.1

## – Beispiel: p-Kresol



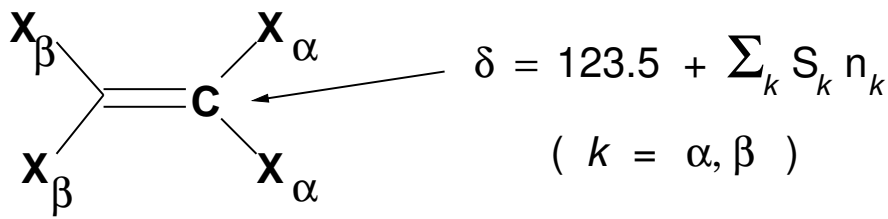
$$\delta_a = 128.5 + 26.9 - 3.1 = 152.3 \quad (\text{gem.: } 152.6)$$

$$\delta_b = 128.5 - 12.8 - 0.1 = 115.6 \quad (\text{gem.: } 115.3)$$

$$\delta_c = 128.5 + 1.4 + 0.7 = 130.6 \quad (\text{gem.: } 130.2)$$

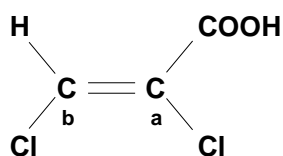
$$\delta_d = 128.5 - 7.4 + 9.2 = 130.3 \quad (\text{gem.: } 130.5)$$

• Olefine



X	$S_\alpha$	$S_\beta$
CH <sub>3</sub>	10.6	-7.9
CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	15.5	-9.7
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	14.0	-8.2
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20.4	-11.5
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	25.3	-13.3
CH <sub>2</sub> Cl	10.2	-6.0
CH <sub>2</sub> Br	10.9	-4.5
CH <sub>2</sub> I	14.2	-4.0
CH <sub>2</sub> OH	14.2	-8.4
CH=CH <sub>2</sub>	13.6	-7.0
C≡CH	-7.5	8.9
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	12.5	-11.0
CHO	13.1	12.7
COCH <sub>3</sub>	15.0	5.8
COOH	4.2	8.9
COOCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	6.3	7.0
OCH <sub>3</sub>	29.4	-38.9
OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	28.5	-39.8
OCOCH <sub>3</sub>	18.4	-26.7
CN	-15.1	14.2
NO <sub>2</sub>	22.3	-0.9
F	24.9	-34.3
Cl	2.6	-6.1
Br	-7.9	-1.4
I	-38.1	7.0

– Beispiel: Dichloracrylsäure



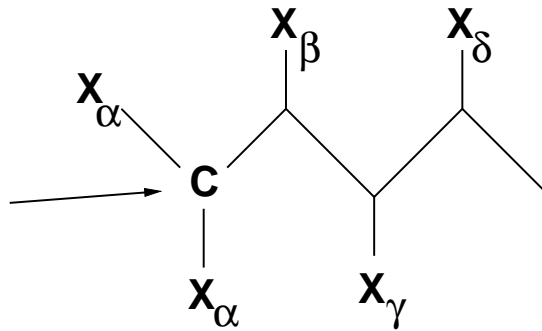
$$\delta_a = 123.5 + 4.2 + 2.6 - 6.1 = 124.2 \text{ (gem.: 129.3)}$$

$$\delta_b = 123.5 + 8.9 - 6.1 + 2.6 = 128.9 \text{ (gem.: 132.6)}$$

• Aliphaten

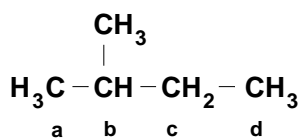
$$\delta = -2.3 + \sum_k S_k n_k$$

(  $k = \alpha, \beta, \gamma, \delta$  )



X	$S_\alpha$	$S_\beta$	$S_\gamma$	$S_\delta$
CH <sub>3</sub>	9.1	9.4	-2.5	0.3
CH=CH <sub>2</sub>	22.3	6.9	-2.2	0.2
CH=CH( <i>cis</i> )	14.2	7.3	-1.5	0
CH=CH( <i>trans</i> )	19.7	7.2	-1.6	0
C≡CH	4.5	5.5	-3.5	0
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	22.3	8.6	-2.3	0.2
CHO	31.9	0.7	-2.3	0
COCH <sub>3</sub>	30.9	2.3	-0.9	2.7
COOH	20.8	2.7	-2.3	1.0
COOCH <sub>3</sub>	20.4	2.3	-1.9	1.2
CONR <sub>2</sub>	22.0	2.6	-3.2	-0.4
CN	3.6	2.0	-3.1	-0.5
NH <sub>2</sub>	28.6	11.5	-4.9	0.3
NO <sub>2</sub>	64.5	3.1	-4.7	-1.0
OH( <i>prim</i> )	48.3	10.2	-5.8	0.3
OH( <i>sek</i> )	44.5	9.7	-3.3	0.2
OH( <i>tert</i> )	39.7	7.3	-1.8	0.3
OR	58.0	8.1	-4.7	1.4
OCOCH <sub>3</sub>	51.1	7.1	-4.8	1.1
SH	11.1	11.8	-2.9	0.7
SCH <sub>3</sub>	21.1	6.4	-3.0	0.5
F	70.1	7.8	-6.8	0
Cl	31.2	10.5	-4.6	0.1
Br	20.0	10.6	-3.1	0.1
I	-6.0	11.3	-1.0	0.2

– Beispiel: Isopentanon



$$\delta_a = -2.3 + 1 * 9.1 + 2 * 9.4 - 1 * 2.5 = 23.1 \text{ (gem.: 21.9)}$$

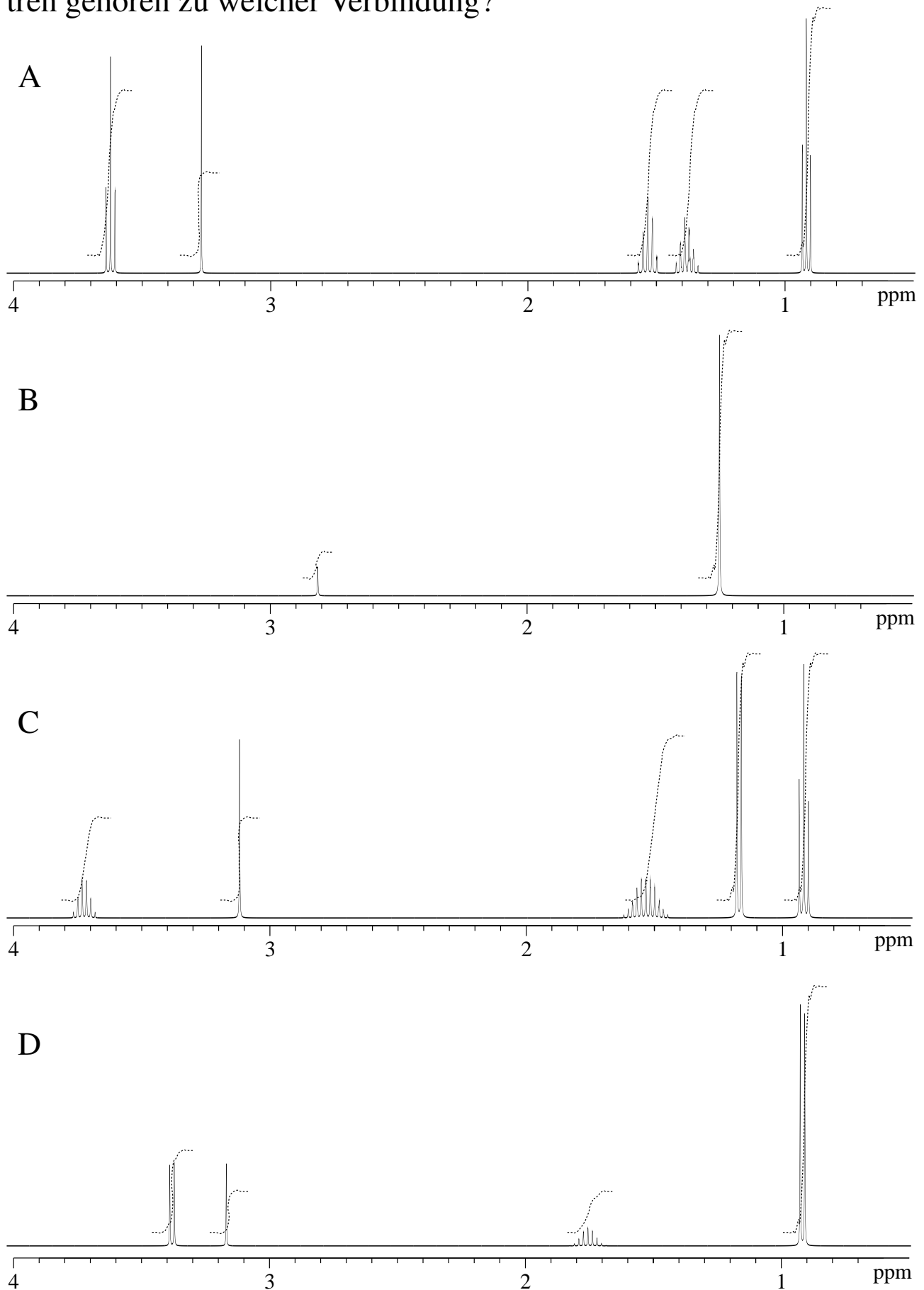
$$\delta_b = -2.3 + 3 * 9.1 + 1 * 9.4 - 0 * 2.5 = 34.4 \text{ (gem.: 29.7)}$$

$$\delta_c = -2.3 + 2 * 9.1 + 2 * 9.4 - 0 * 2.5 = 34.7 \text{ (gem.: 31.7)}$$

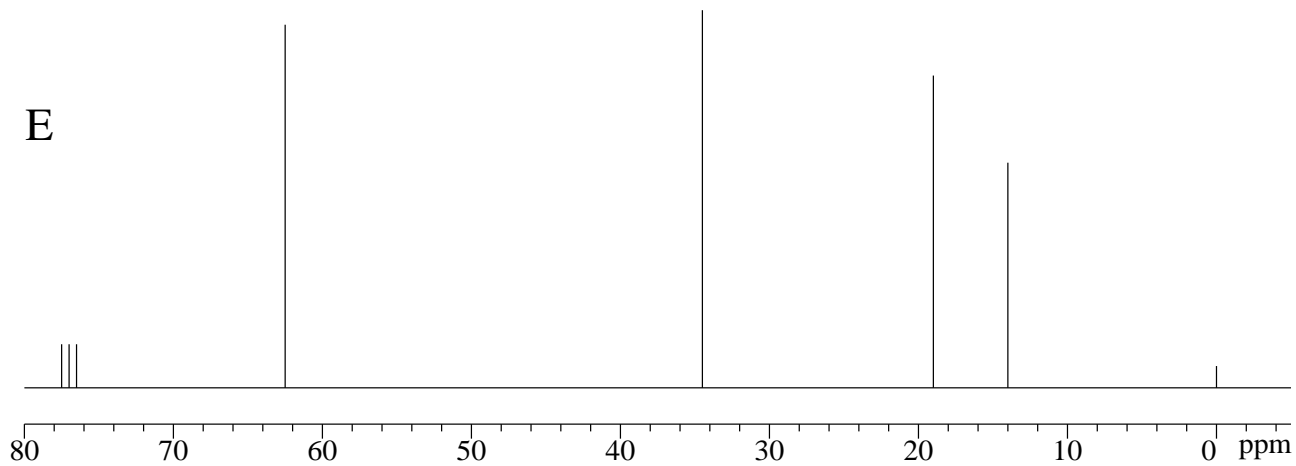
$$\delta_d = -2.3 + 1 * 9.1 + 1 * 9.4 - 2 * 2.5 = 11.2 \text{ (gem.: 11.4)}$$

# Übung 1

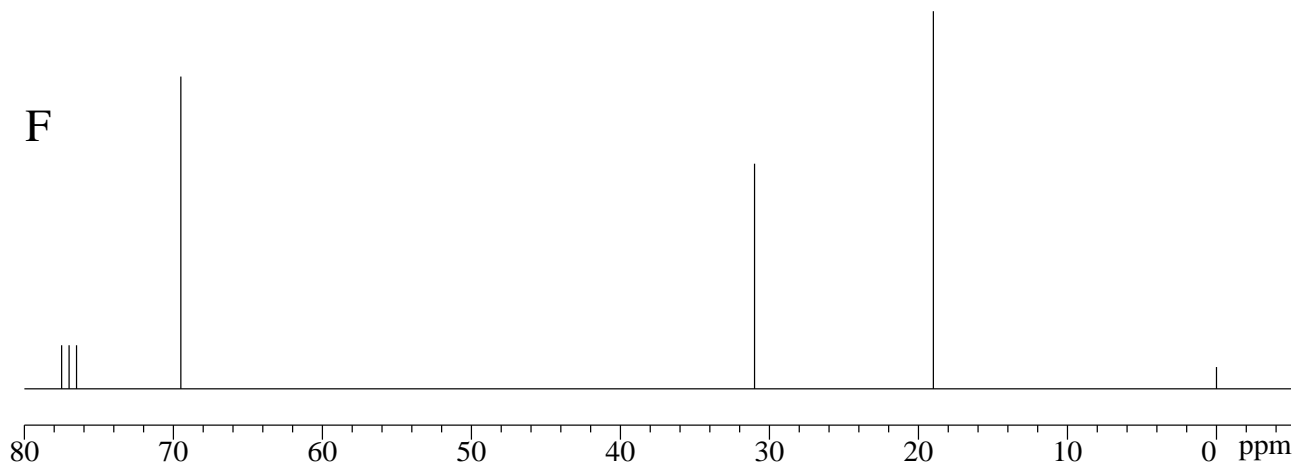
Es gibt 4 isomere Butanole mit der Summenformel  $C_4H_{10}O$ . Die  $^1H$ - und  $^{13}C$ -Spektren dieser Verbindungen sind abgebildet. Welche Spektren gehören zu welcher Verbindung?



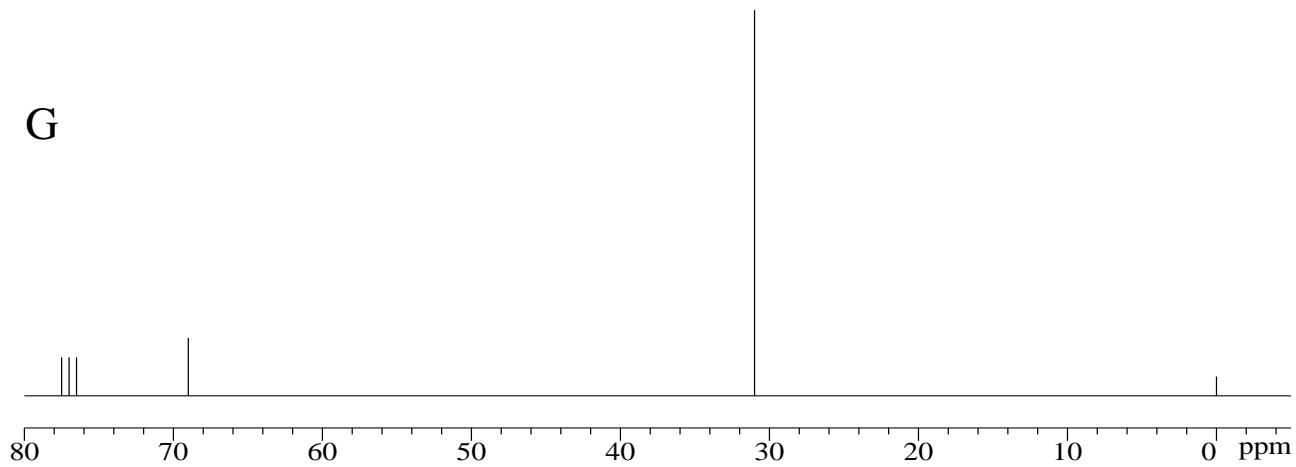
E



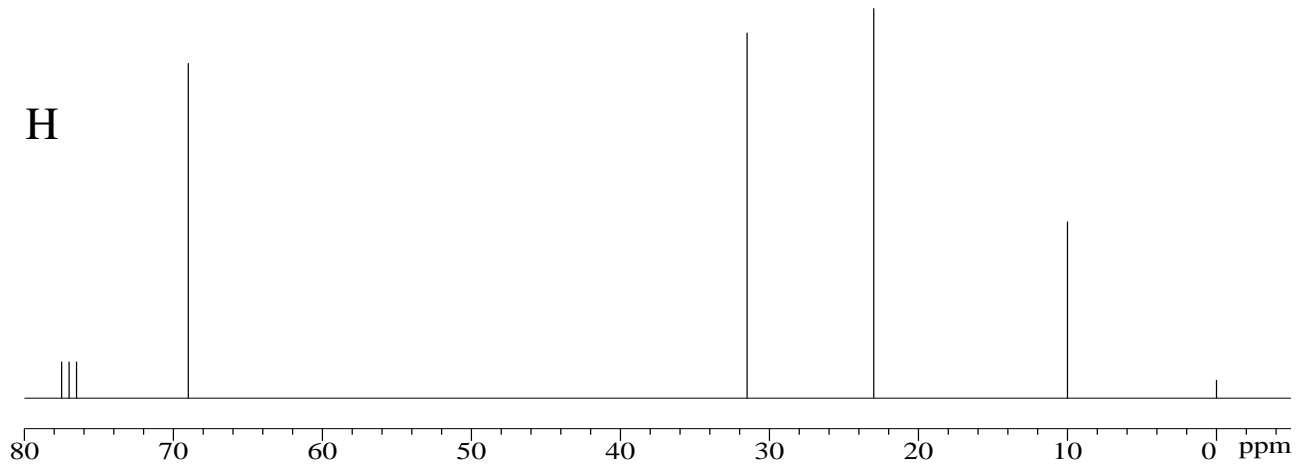
F



G

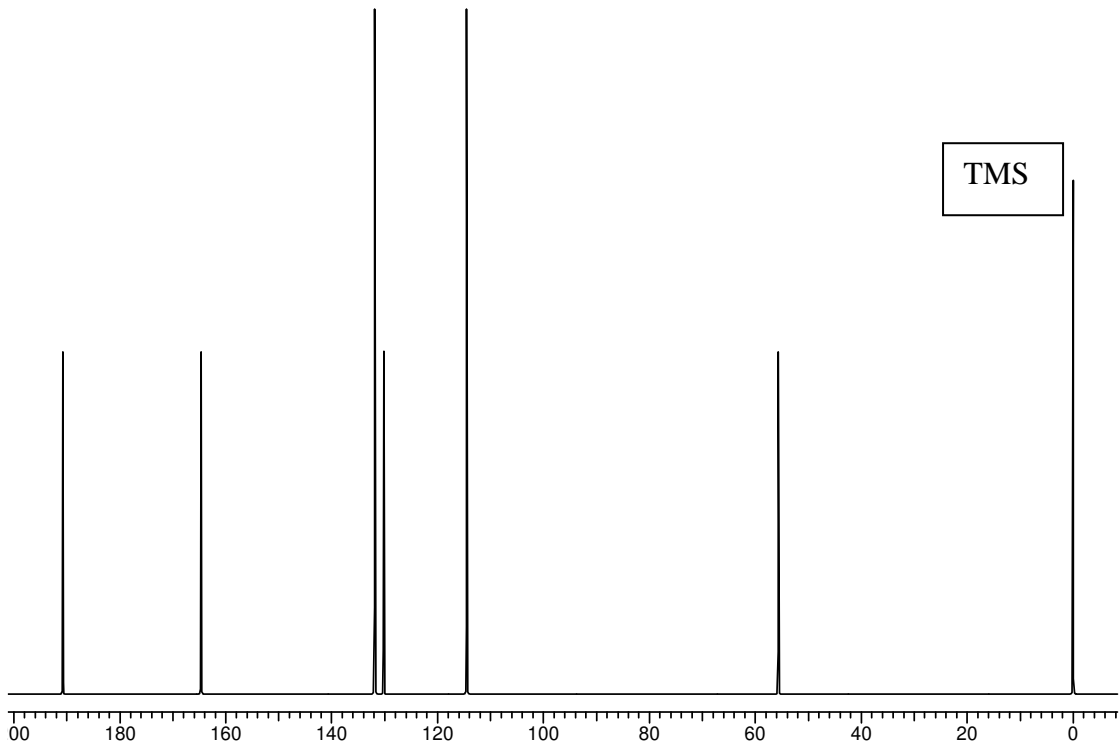
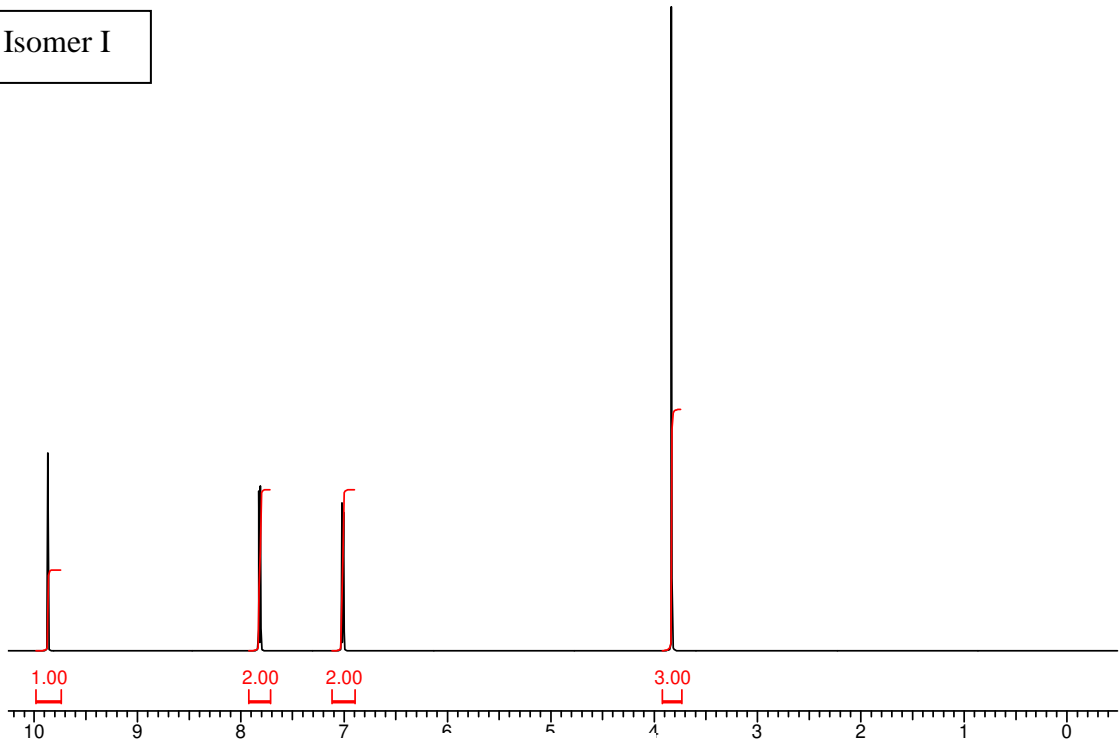


H

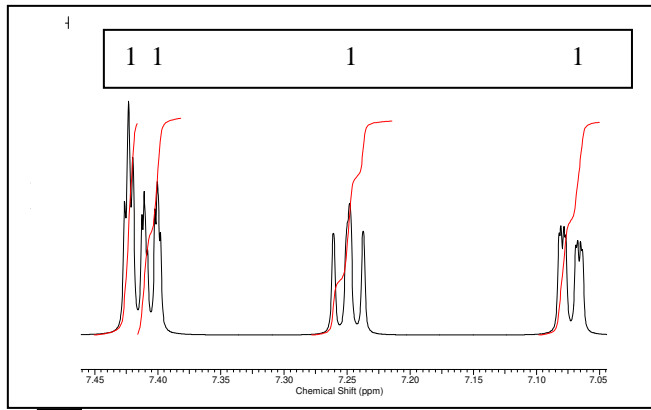


U2 Hier sind die Spektren von 2 Isomeren mit der Summenformel  $C_8H_8O_2$ .  
Bestimmen Sie die Strukturen.

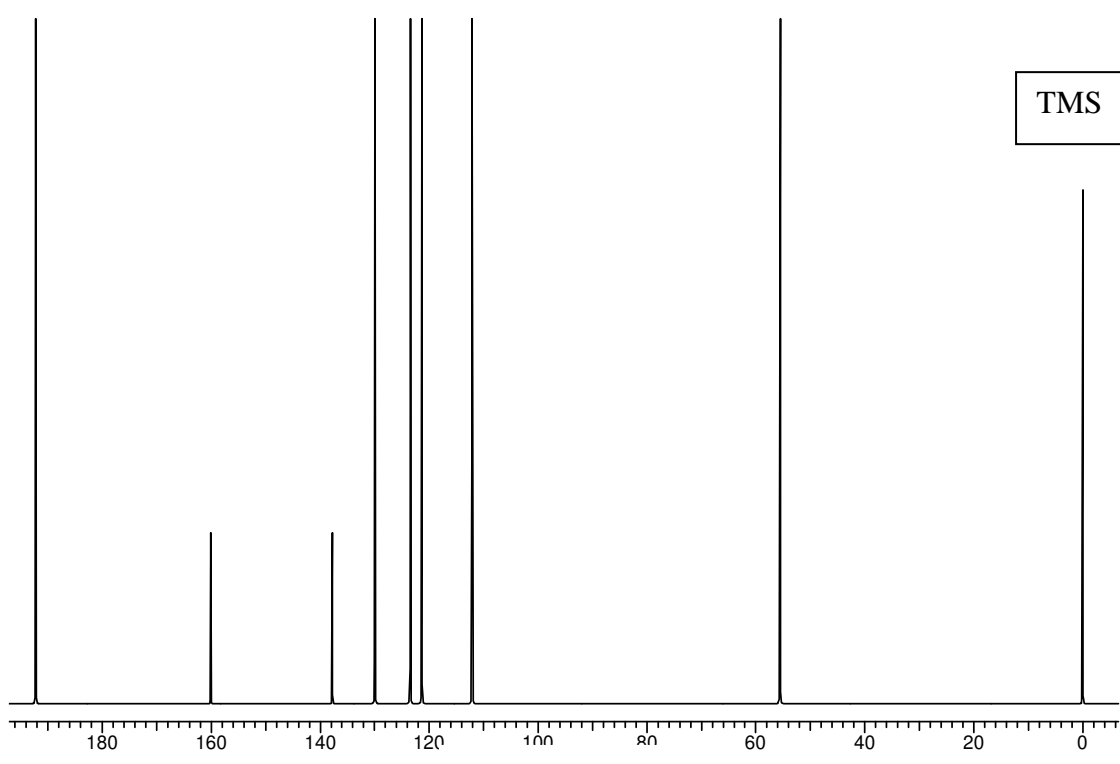
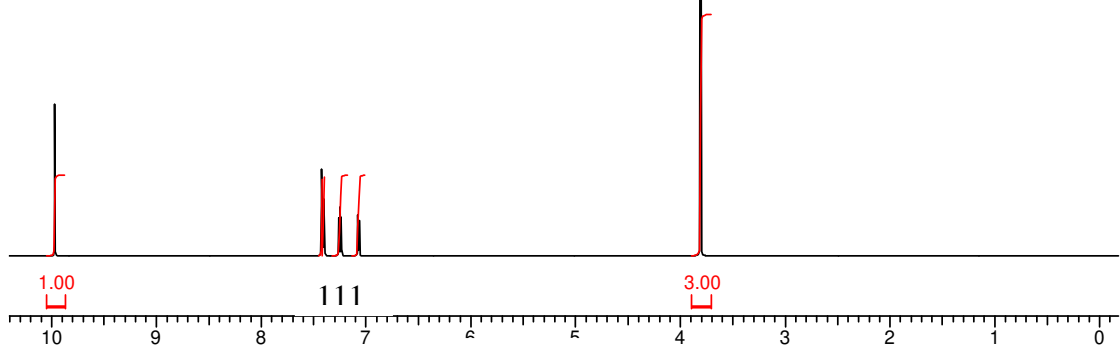
Isomer I



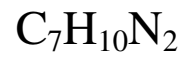




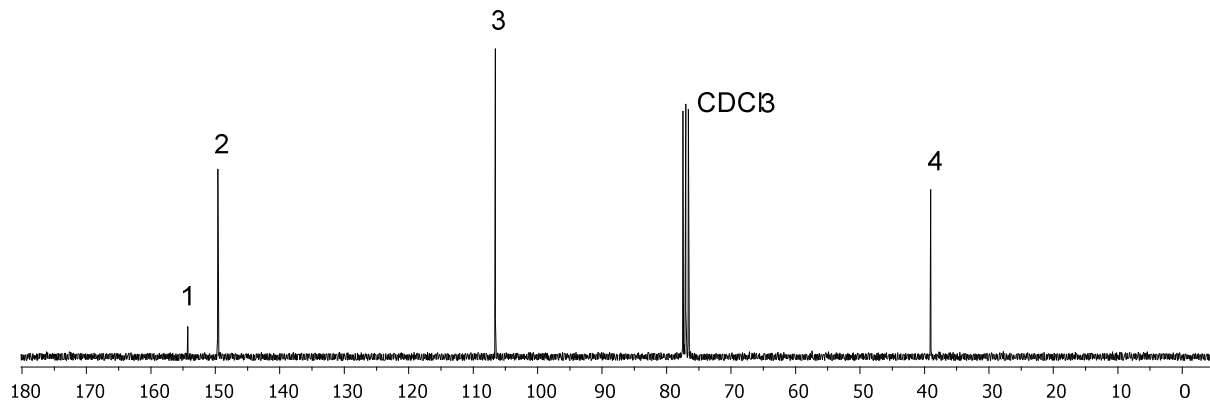
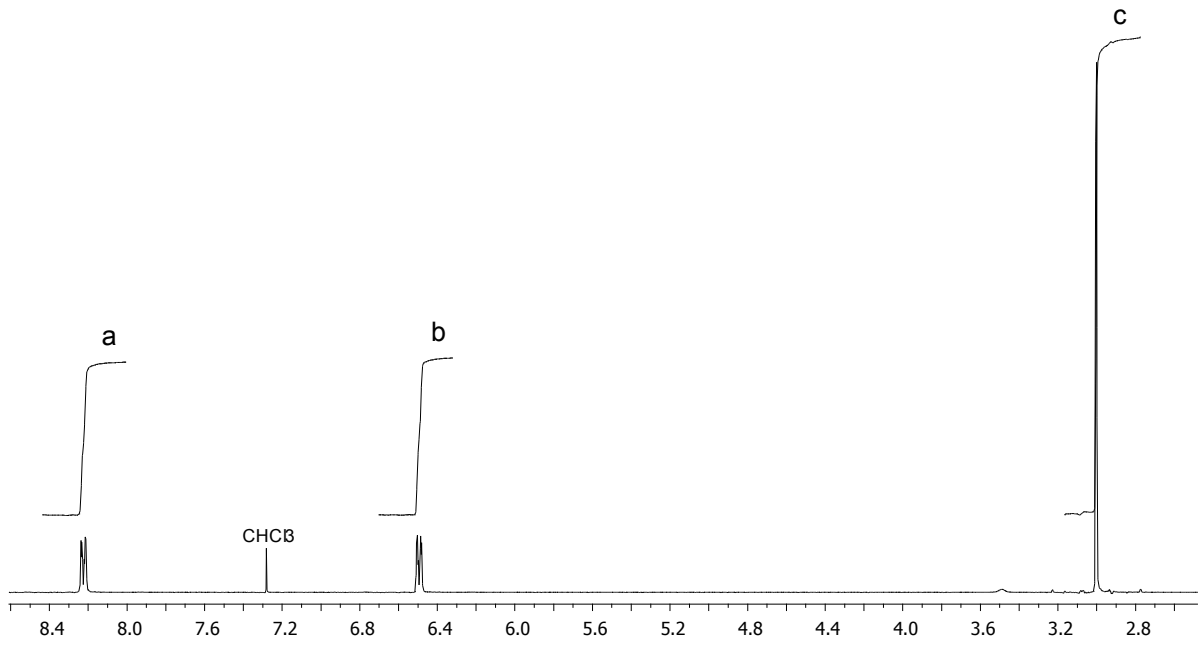
Isomer II



U3

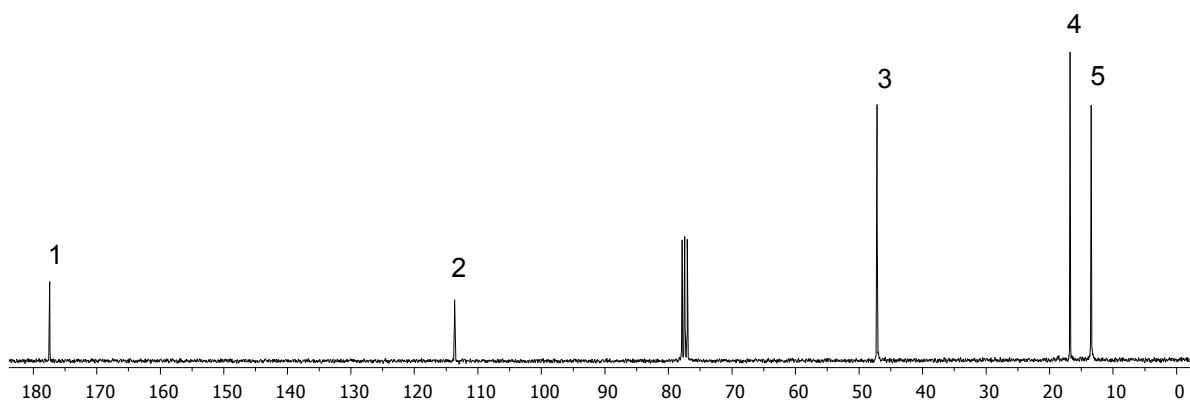
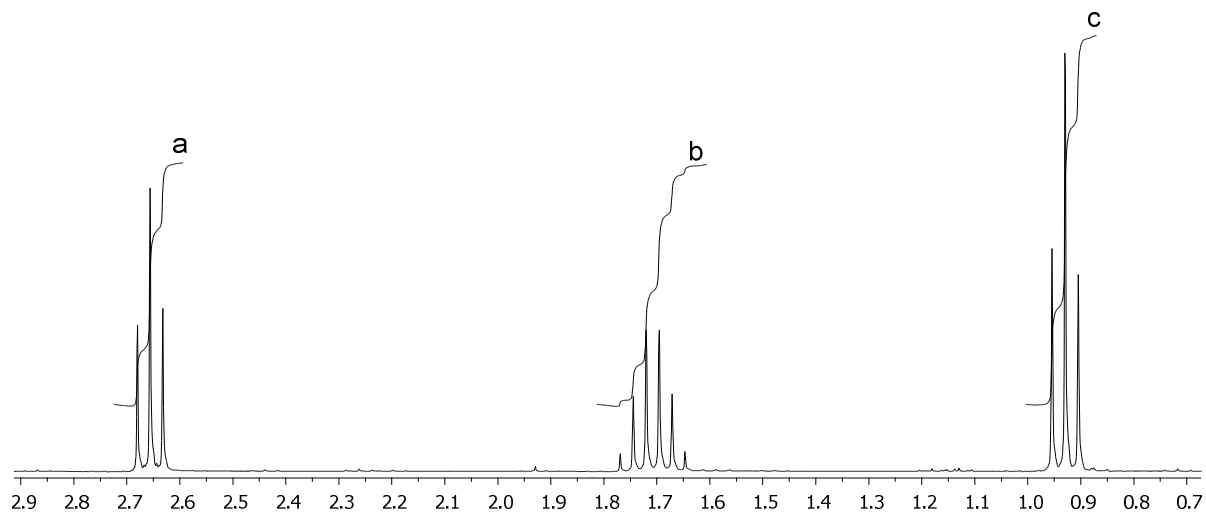


1. Bestimmen Sie die Struktur
2. Ordnen Sie die Signale zu.



U 4

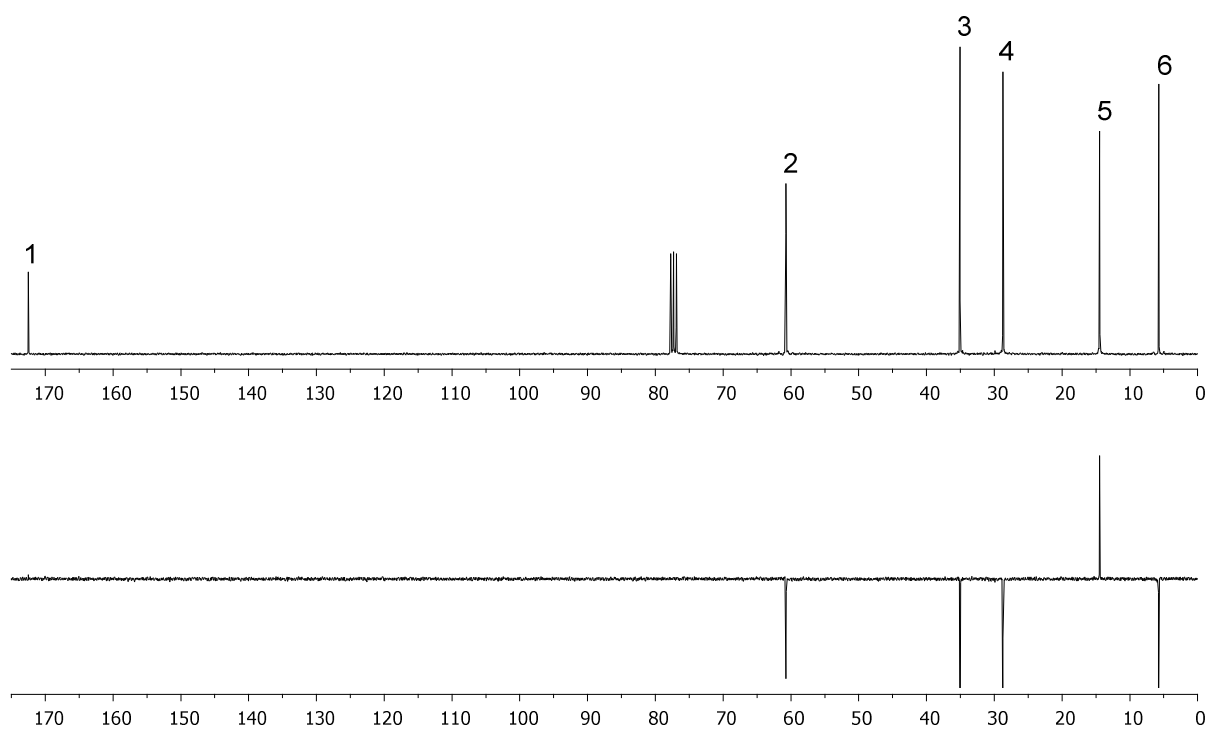
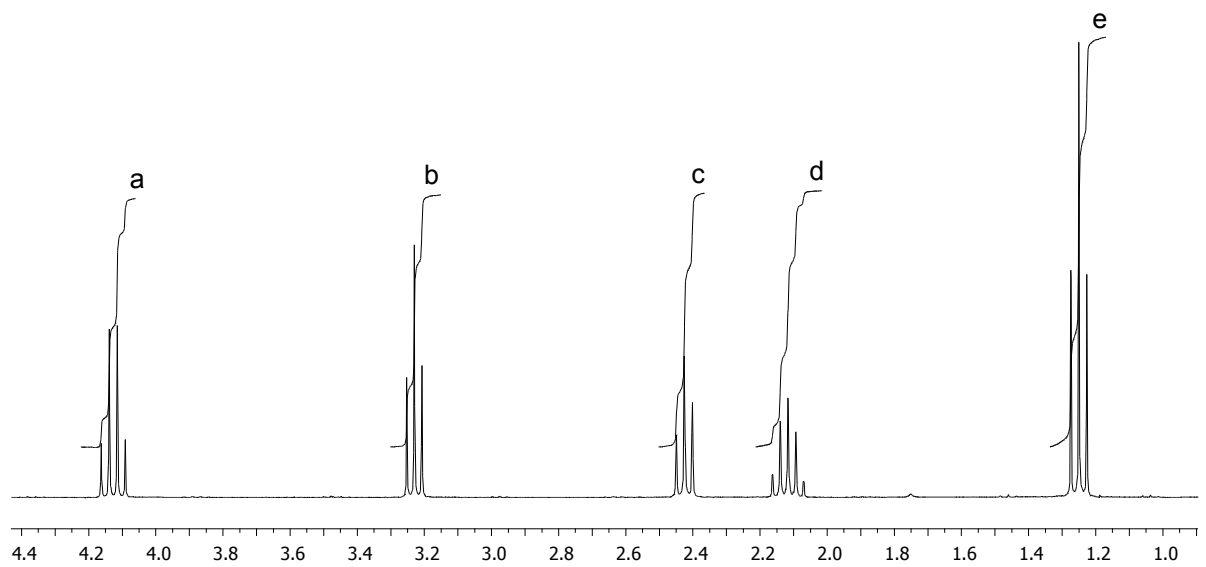
$C_5H_7ON$  (N – 3bindig)



U 5



1. Struktur ?



1. Struktur?
2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die aromatischen Protonen.
3. Auf welchem NMR-Gerät wurden diese Spektren aufgenommen? (200/300/400/600 MHz-Gerät)

Hinweis: Der Name des NMR-Geräts hängt von der Protonen-Frequenz ab.

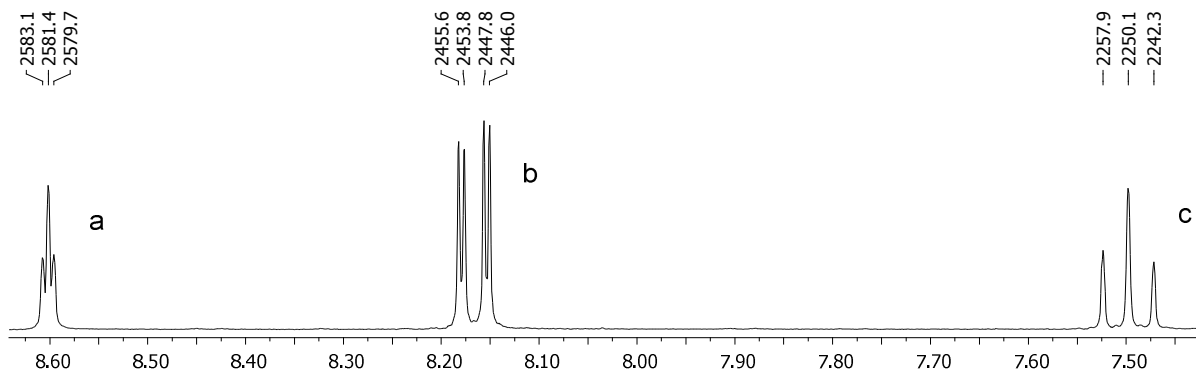
Die  $^{13}C$ -Frequenz ist immer  $\frac{1}{4}$  der Protonenfrequenz

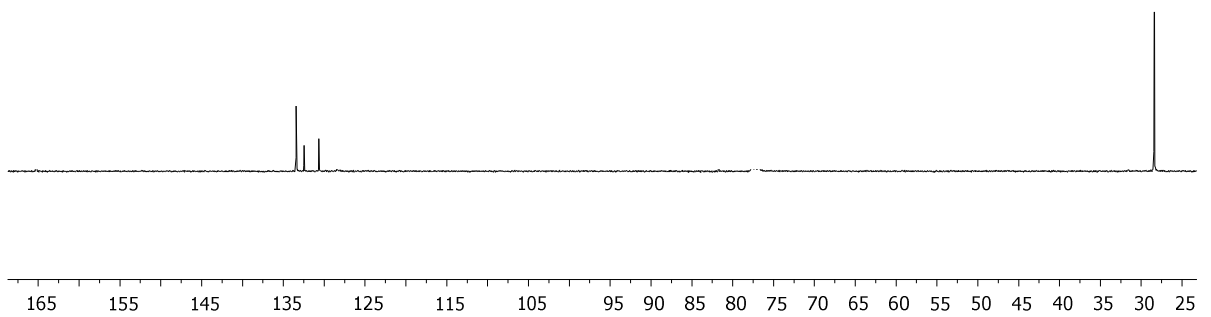
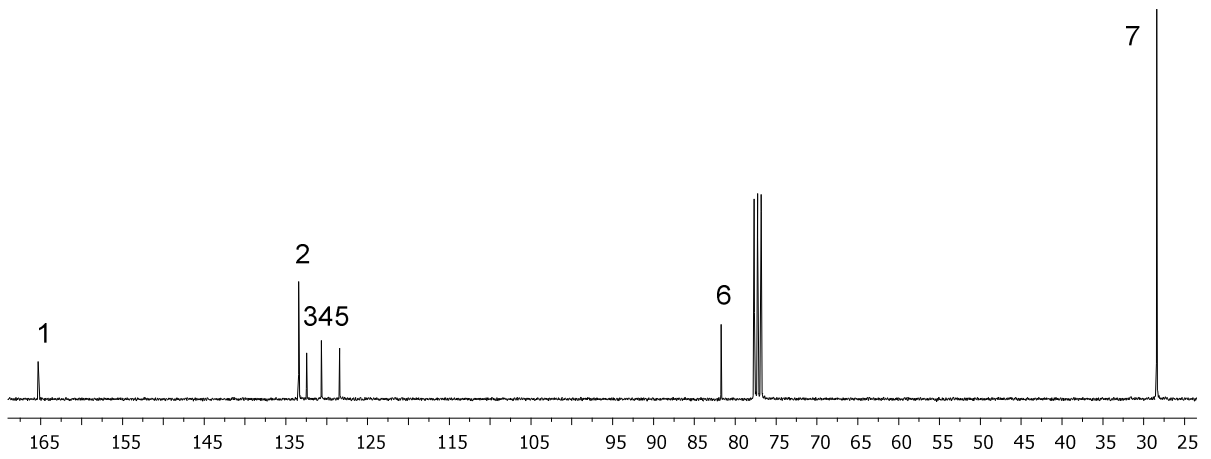
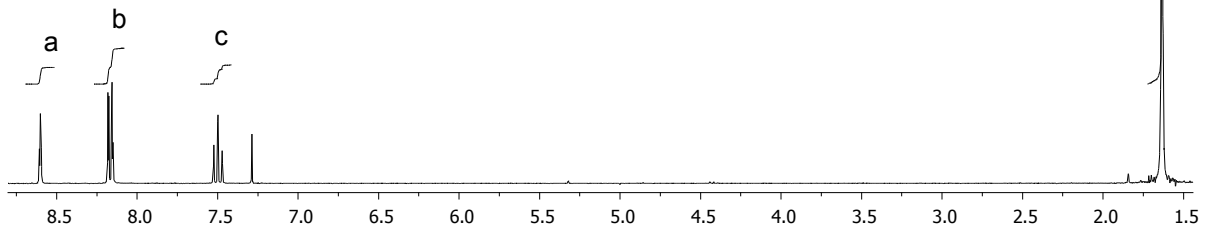
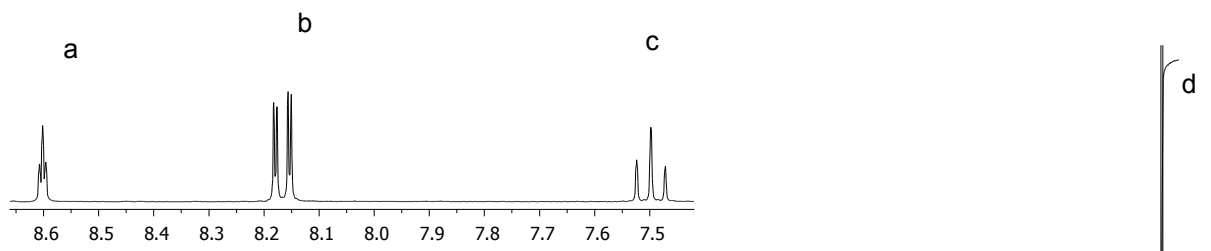
Die Achse (Frequenz in ppm) ist geräteunabhängig.

Das Peakpicking (Frequenz in Hz) ist geräteabhängig (hier: 1 ppm = 300 Hz)

Kopplungskonstanten (in Hz angegeben) sind geräteunabhängig

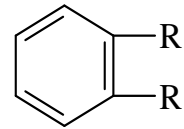
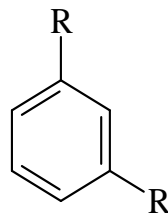
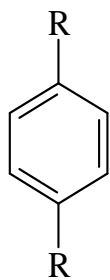
Achten Sie auf die richtige Einheit Messfrequenz: MHz, Spektrum: Hz





# U7

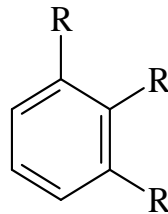
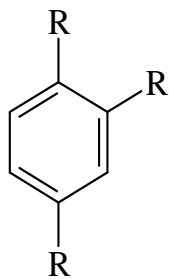
- a) Wieviele Signale erhalten Sie im  $^1\text{H}$  bzw.  $^{13}\text{C}$ -Spektrum?  
b) Geben Sie das Aufspaltungsmuster der Protonen an.



$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signale

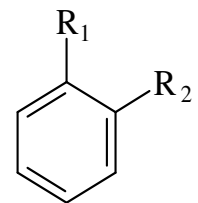
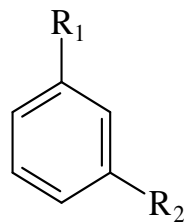
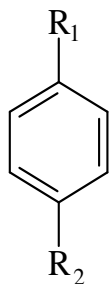
---



$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signale

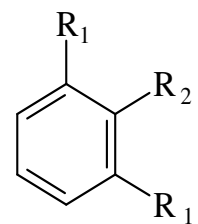
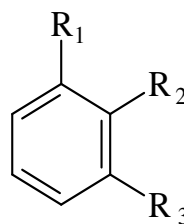
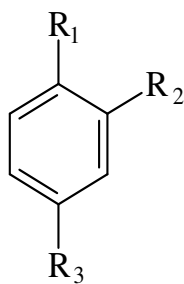
---



$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signale

---

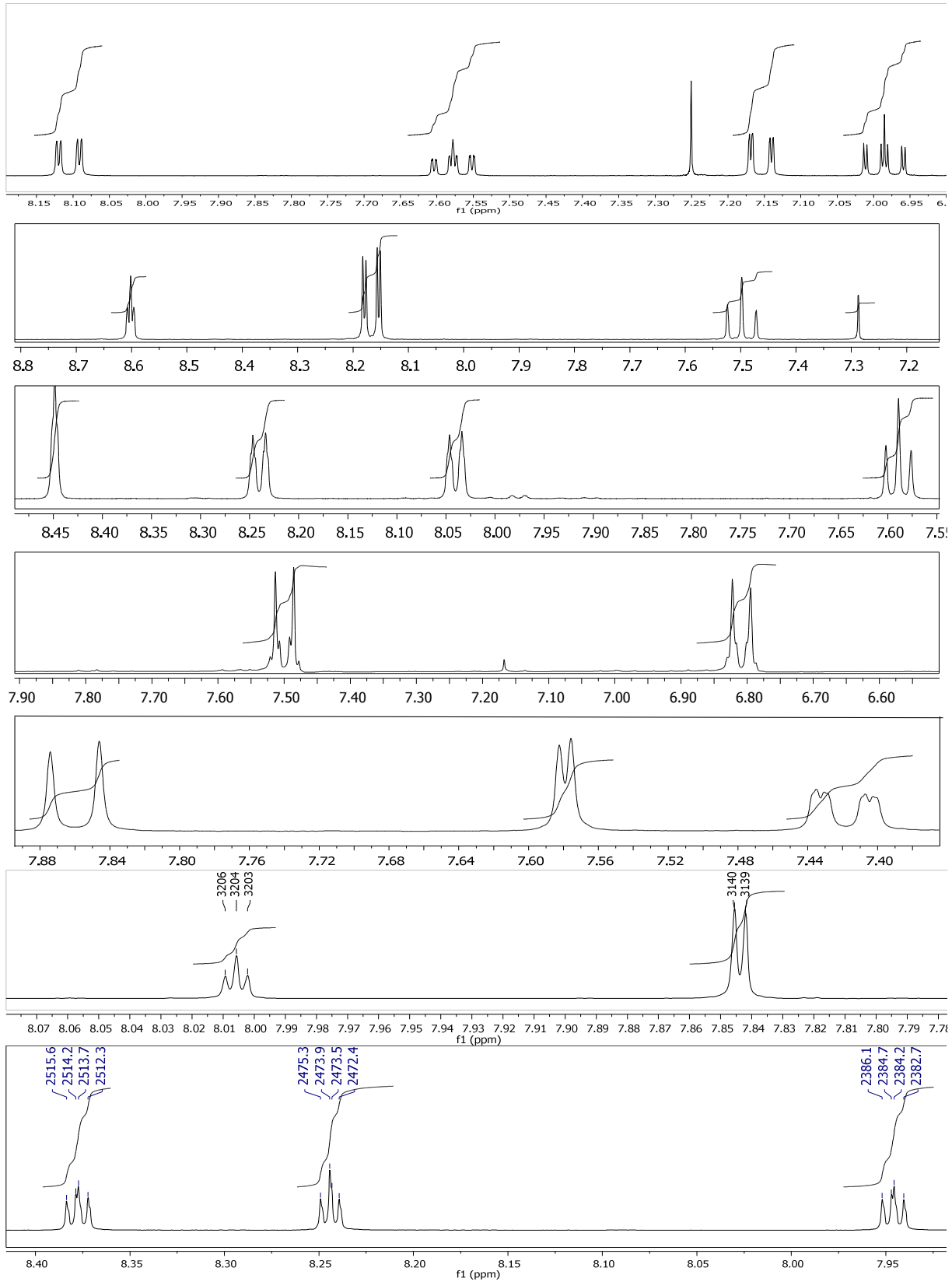


$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signal

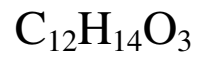
Wie sind die Aromaten in folgenden Spektren substituiert?

U7/2

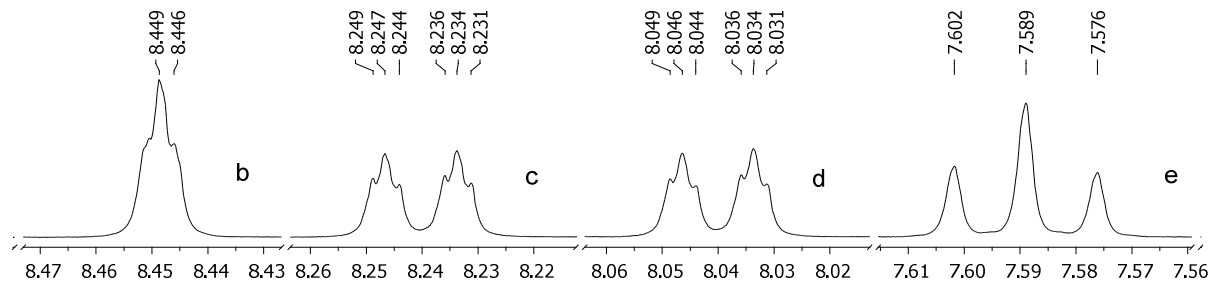


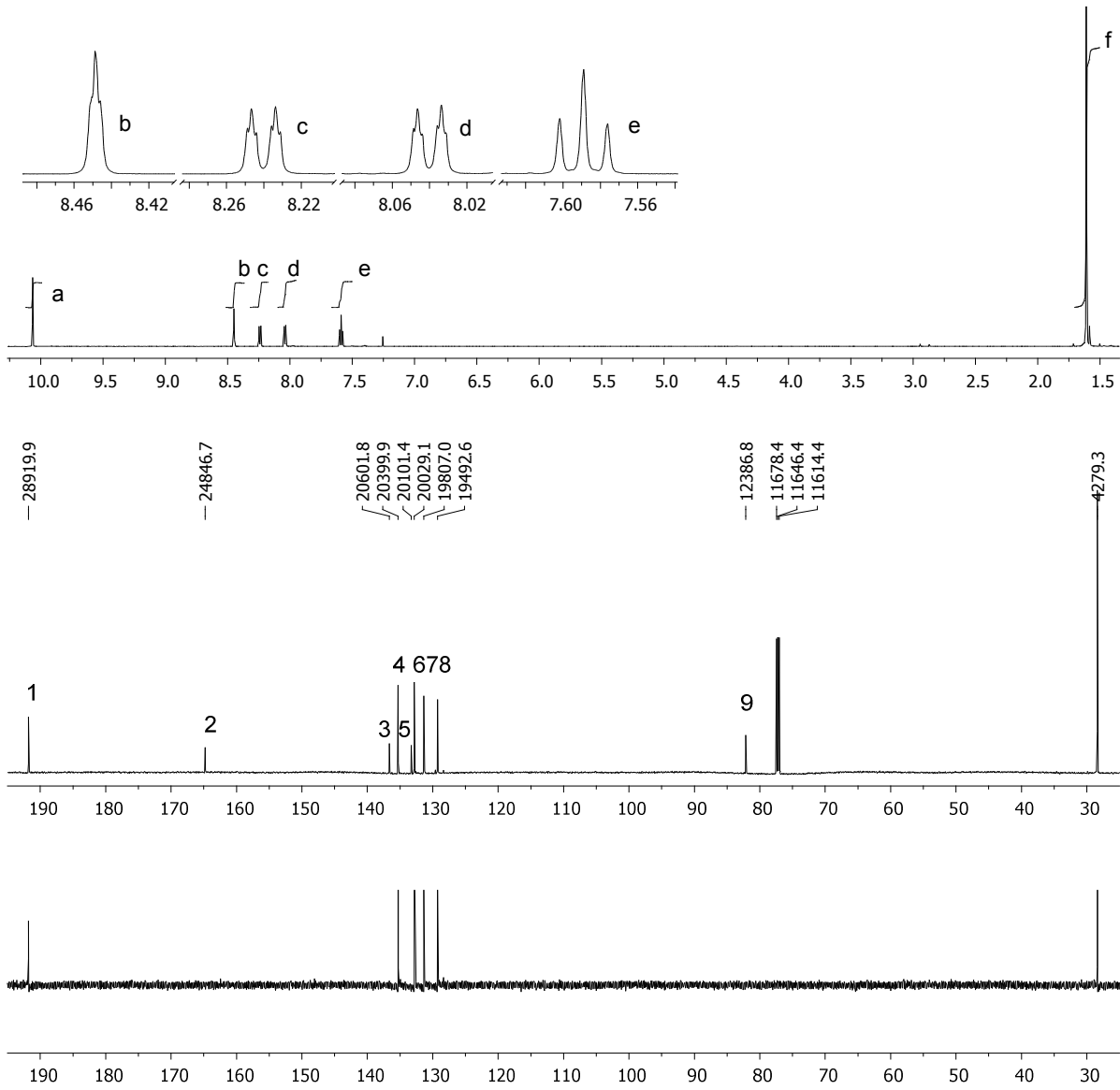


U 8

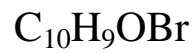


1. Struktur?
2. Auf welcher Maschine wurden die Spektren gemessen?
3. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für alle arom. Protonen incl. allen Kopplungskonstanten.



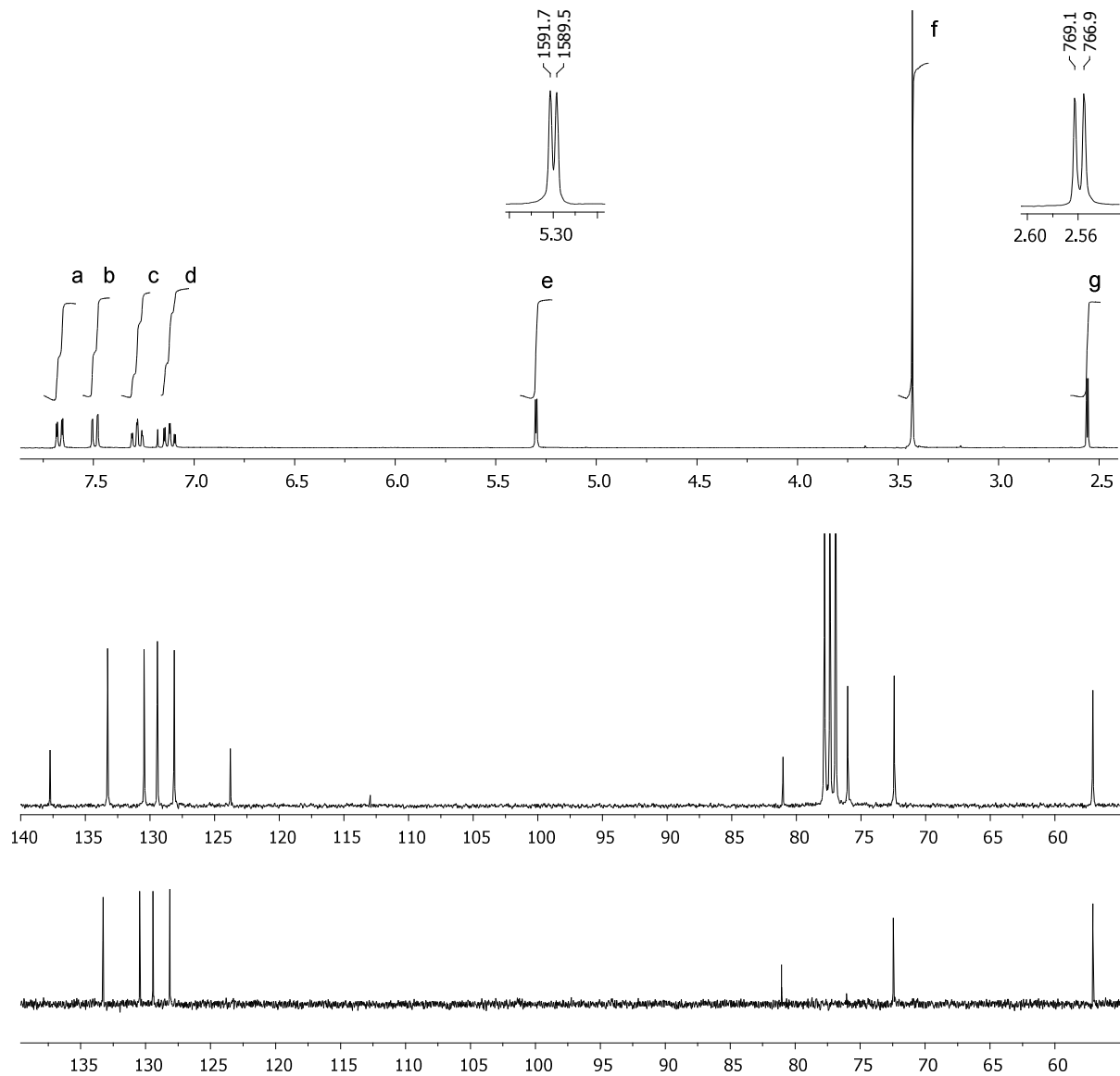


# U9



Hinweis:  $\delta(\text{Acetylen}, ^1\text{H}) = 1,8 \text{ ppm}$  ,  $\delta(\text{Acetylen}, ^{13}\text{C}) = 71,9 \text{ ppm}$

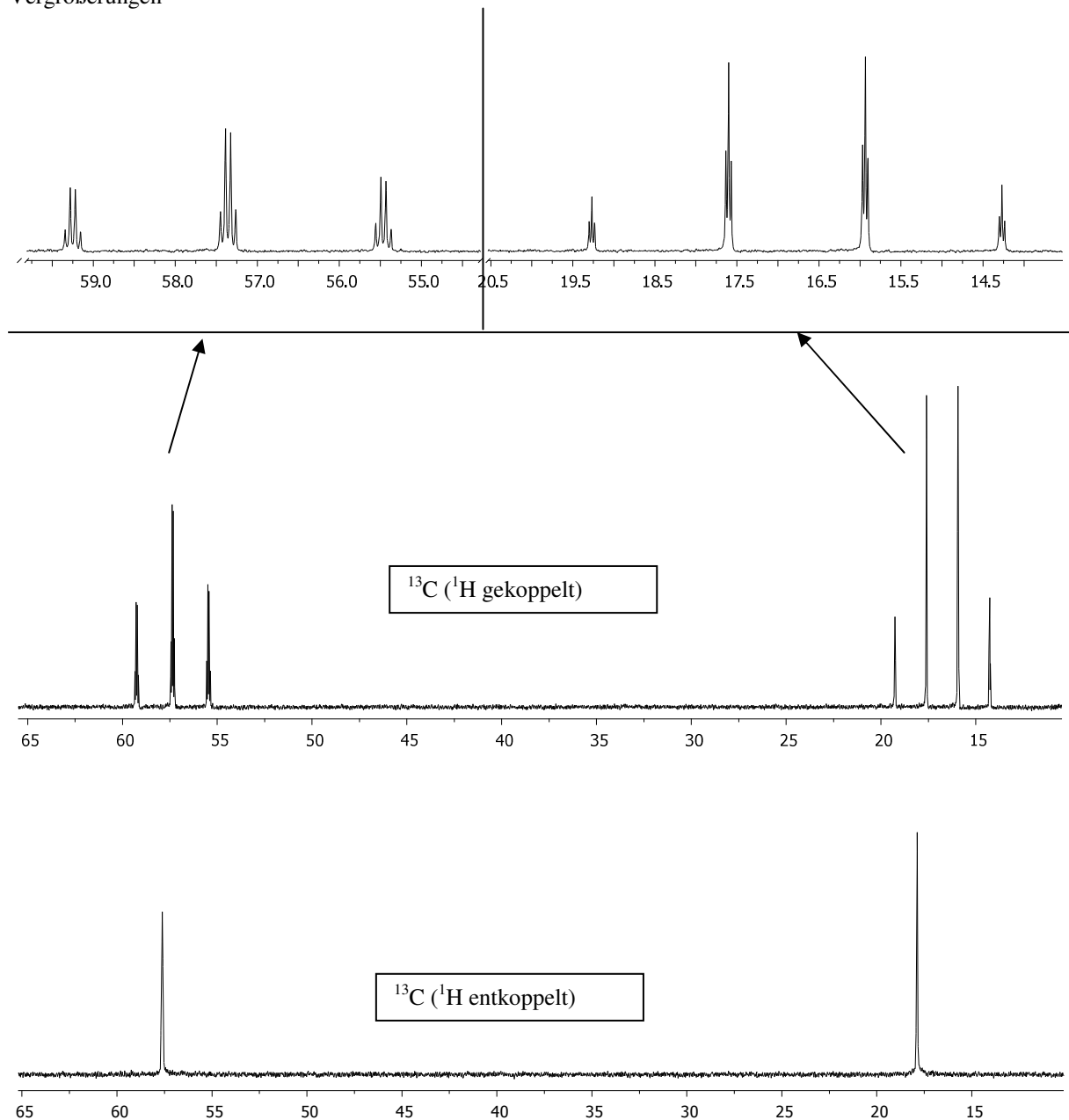
1. Struktur?
2. Im Protonenspektrum haben die 2 Peaks bei 5,3 ppm und 2,56 ppm die gleiche Kopplungskonstante. Was schließen Sie daraus?



## U 10: Entkopplung

- Um welchen Alkohol handelt es sich?
- Erklären Sie das Kopplungsmuster
- Warum entkoppelt man normalerweise das  $^{13}\text{C}$ -Spektrum?
- Wenn man nicht entkoppelt, sieht man in  $^{13}\text{C}$ -Spektren die Protonenkopplungen. Warum sieht man im  $^1\text{H}$ -Spektrum keine  $^{13}\text{C}$ -Kopplungen?

Vergrößerungen

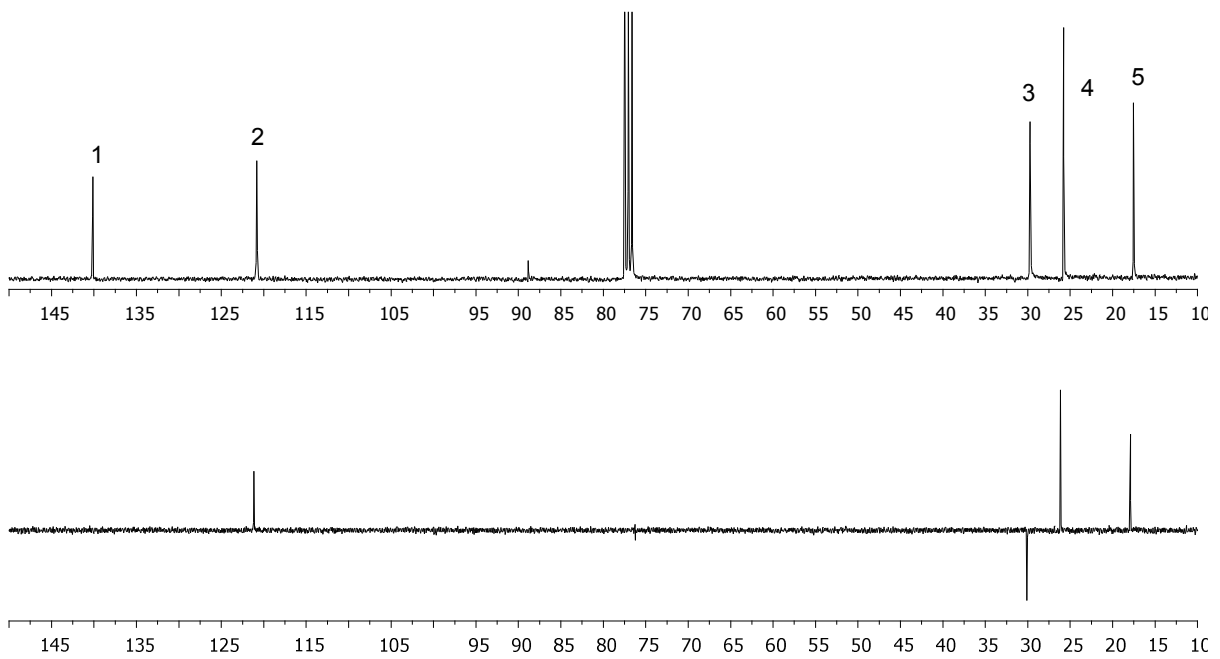
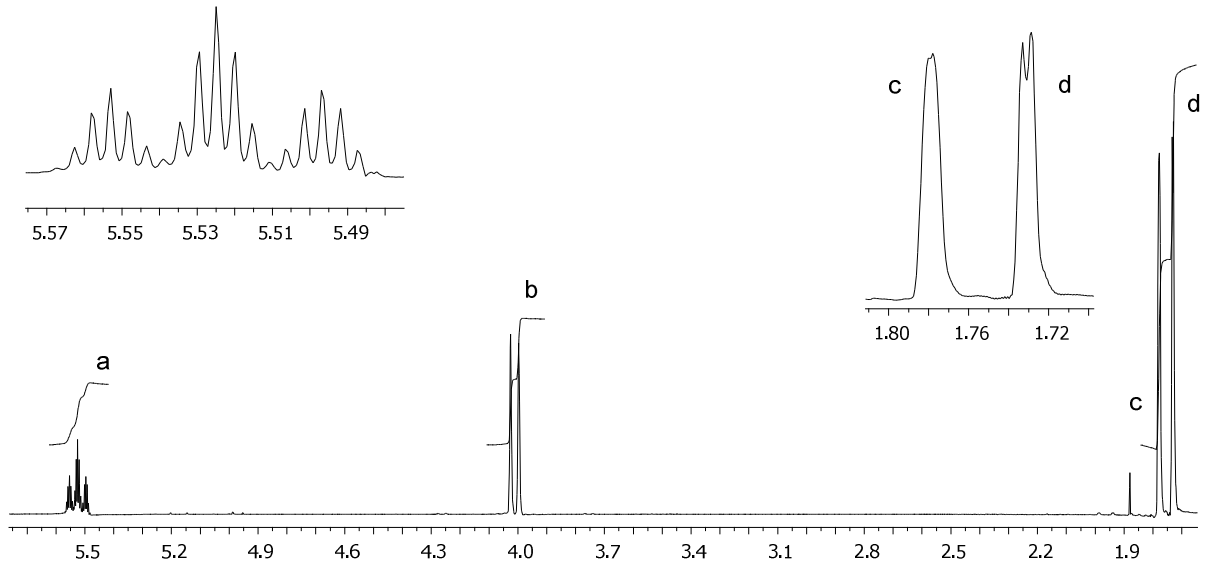


U 11

$C_5H_9Br$

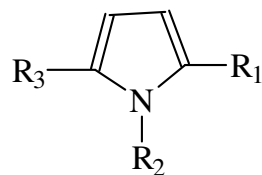
1. Struktur ?

2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für alle  $^1H$ -Signale.

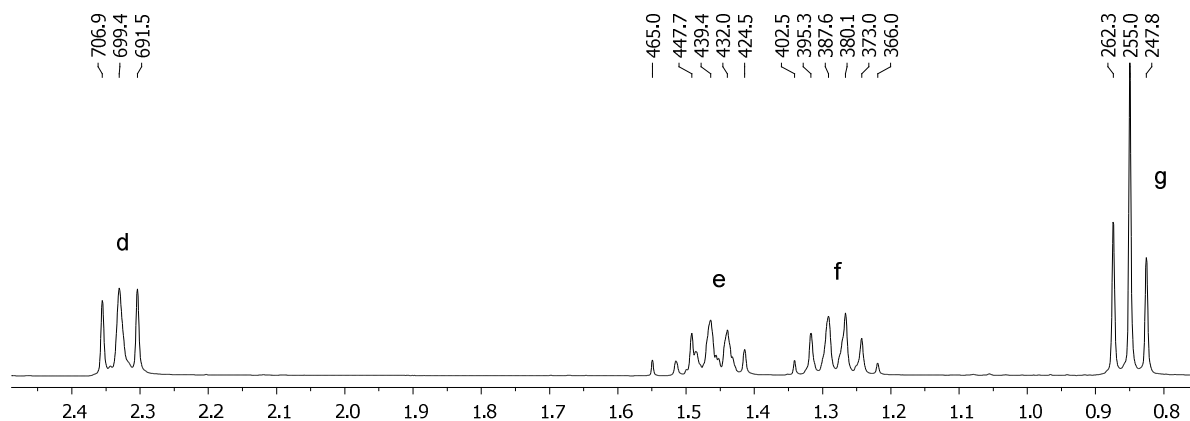


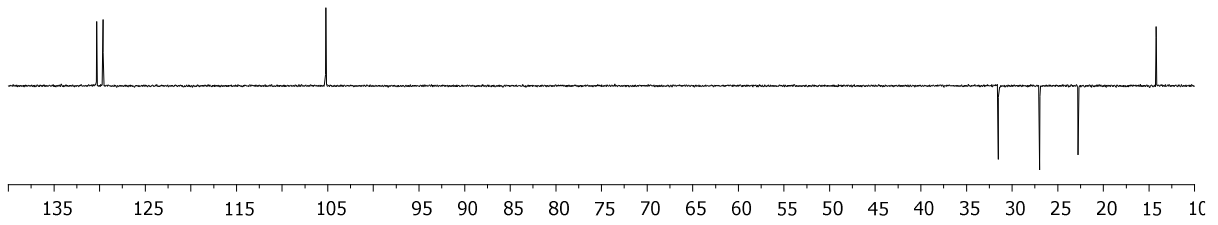
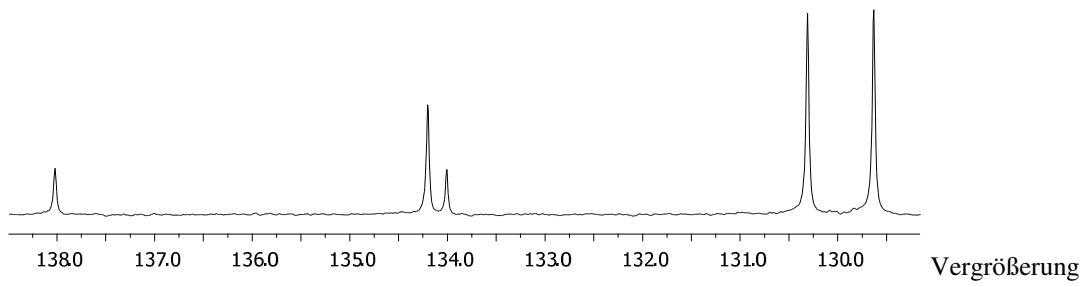
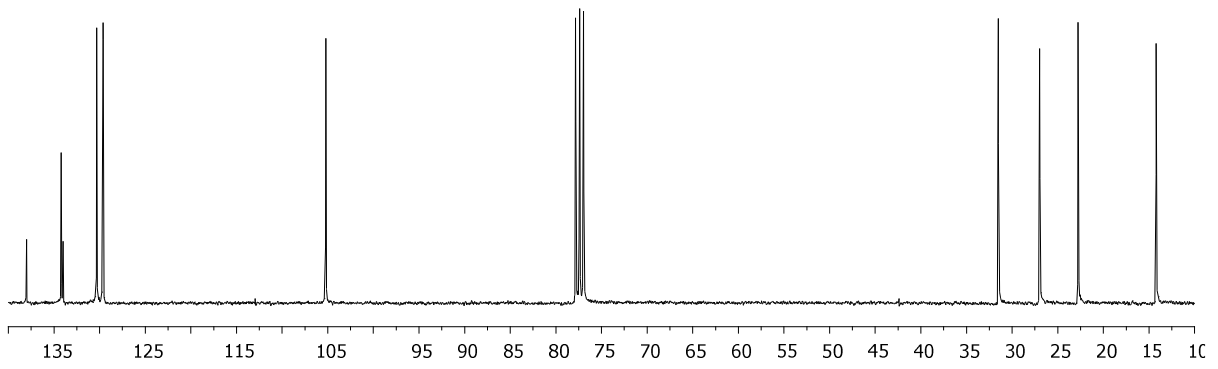
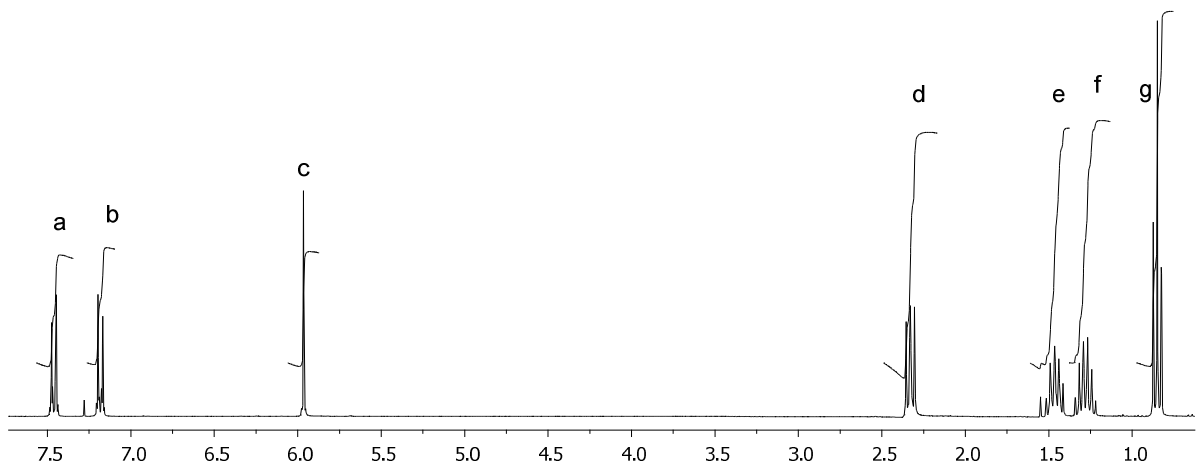
U 12

$C_{18}H_{24}NCl$



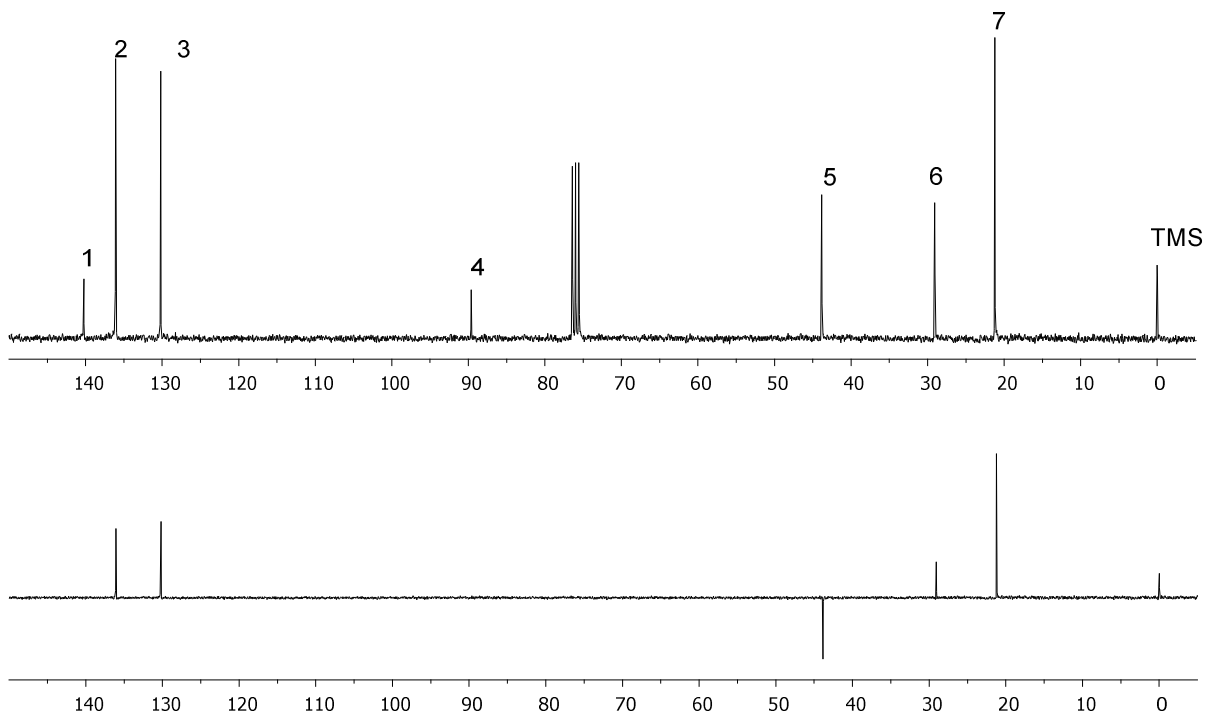
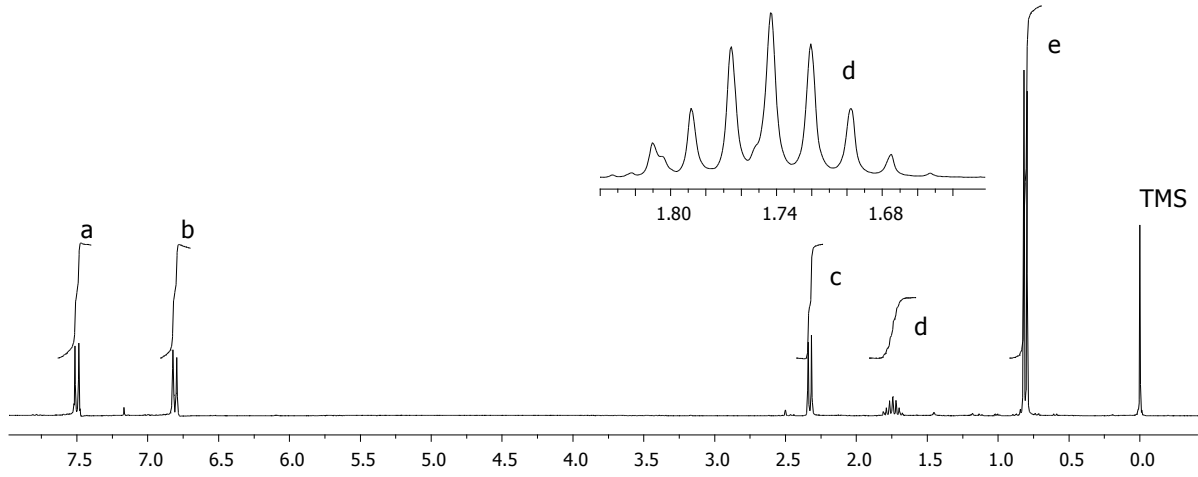
1. Struktur – bestimmen Sie die 3 Reste
2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die aliphatischen Protonen. Bezeichnen Sie die Aufspaltungen mit den jeweiligen Kopplungskonstanten. (z. B.  $J_{AB}$ ,  $J_{AC}$  usw. )
3. Auf welchem NMR-Gerät wurden diese Spektren aufgenommen?
4. Wie würde das Spektrum unten auf dieser Seite aussehen, wenn es auf einem 600 MHz-Gerät gemessen worden wäre?





U13:  $C_{10}H_{13}J$

Struktur?

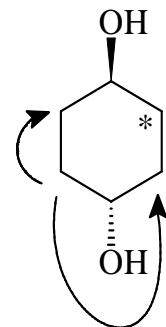
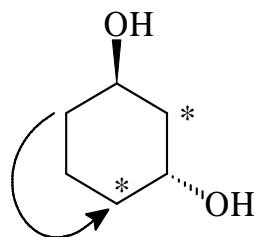
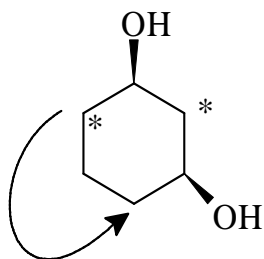
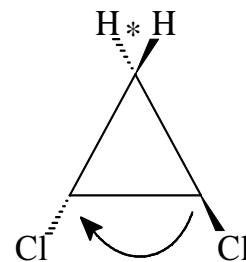
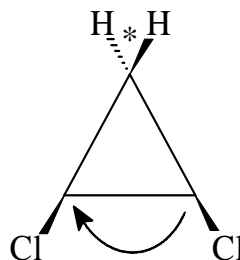
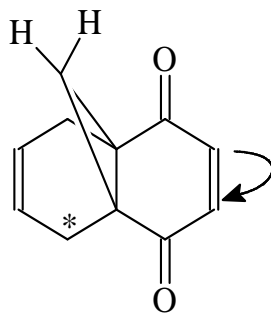
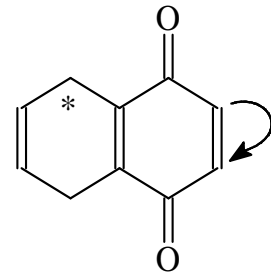
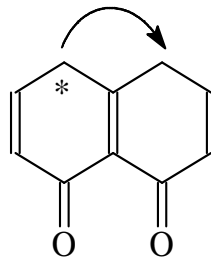
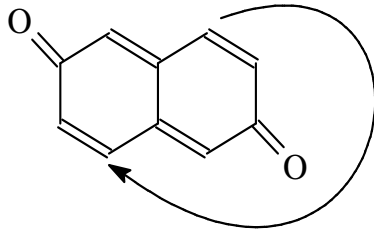
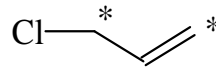
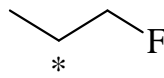
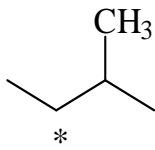




# U14

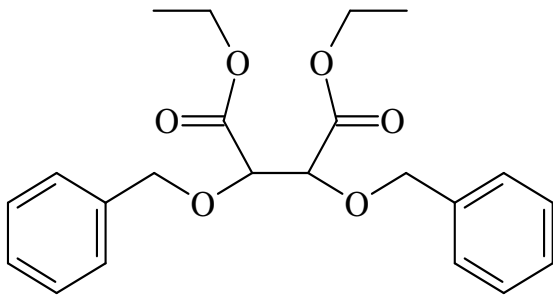
homotop -  
enantiotop -  
diastereotop -

Rotation  
Spiegelebene  
nichts, chirales Zentrum

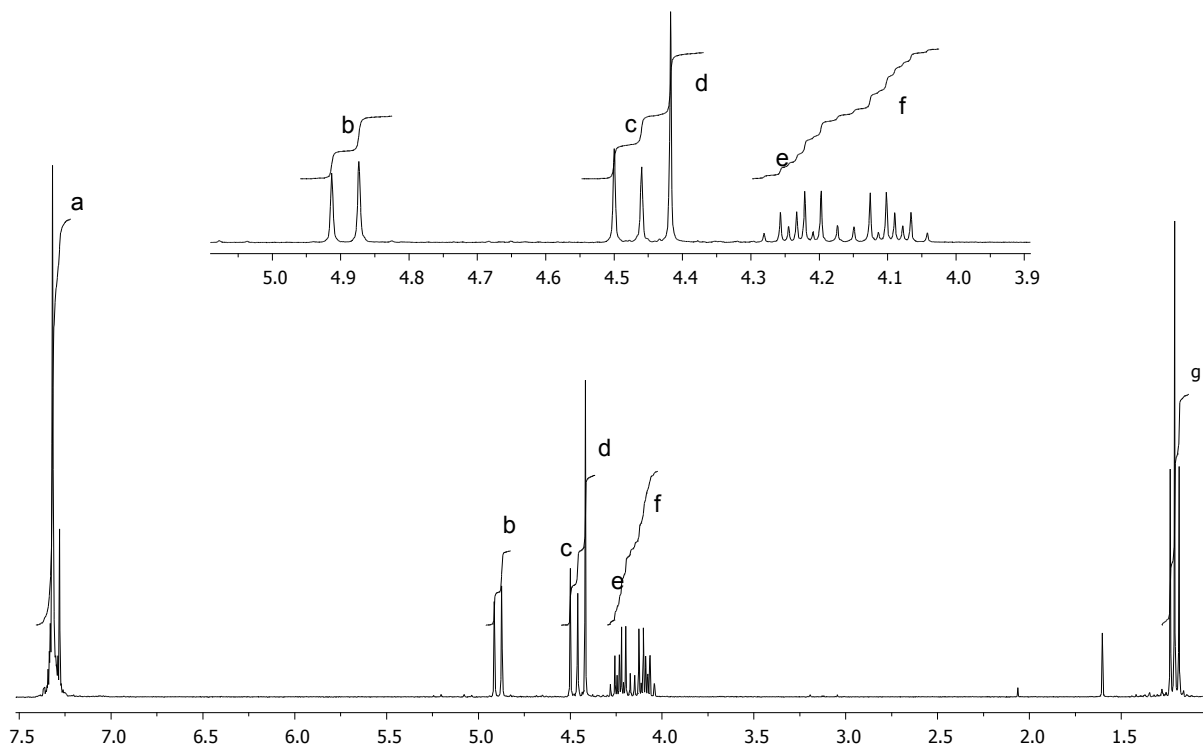


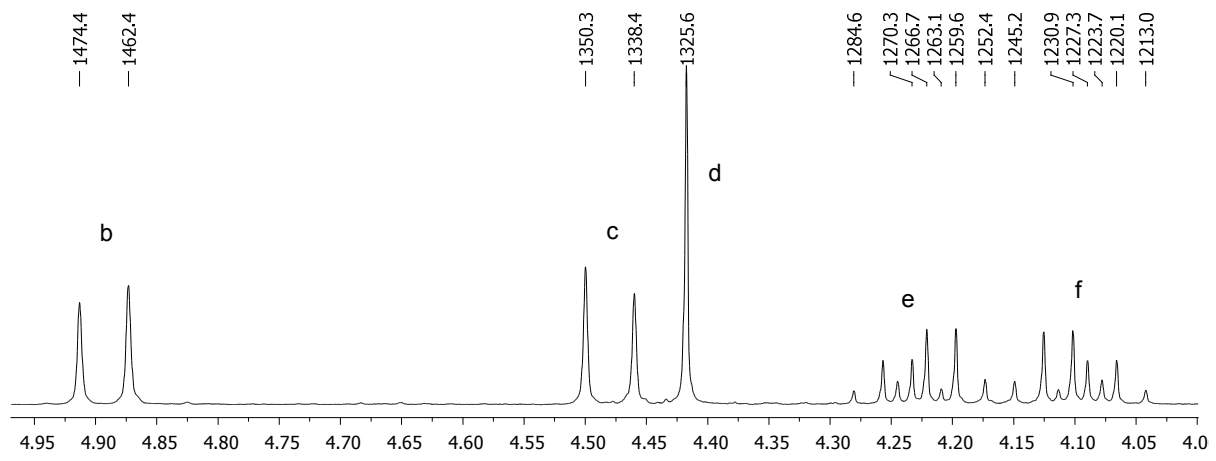
1. Bestimmen Sie, ob die 2 Protonen der markierten Methylene-Gruppen (\*) homotop, enantiotop oder diastereotop sind.
2. Bestimmen Sie, ob die markierten Gruppen (Pfeile) homotop, enantiotop oder diastereotop sind.
3. Wieviele Signale erwarten Sie im  $^1\text{H}$ -Spektrum?
4. Bestimmen Sie das Spinsystem.
5. Geben Sie je ein Beispiele für ein AB, AB<sub>2</sub>, ABC, ABCDE und AA'BB'-System an.

# U 15

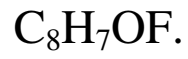


1. Ordnen Sie alle Protonen-Signale zu.
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die Protonen zwischen 4 und 5 ppm incl. allen Kopplungskonstanten in Hz (z.B.  $J_{ab} = 8$  Hz) (Seite 2)
3. Erklären Sie die Protonen-Signale zwischen 4.4 und 5 ppm genau. (Warum ist b und c ein Duplett? Warum ist d ein Singulett?)

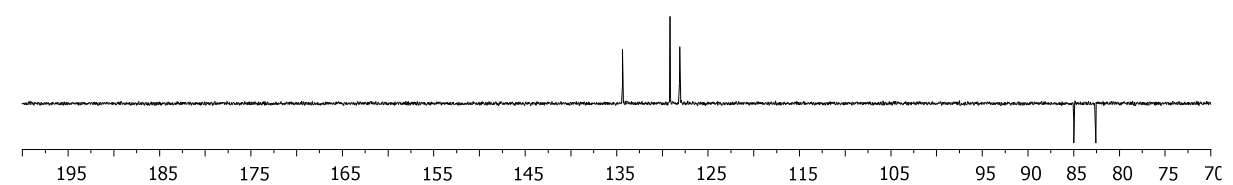
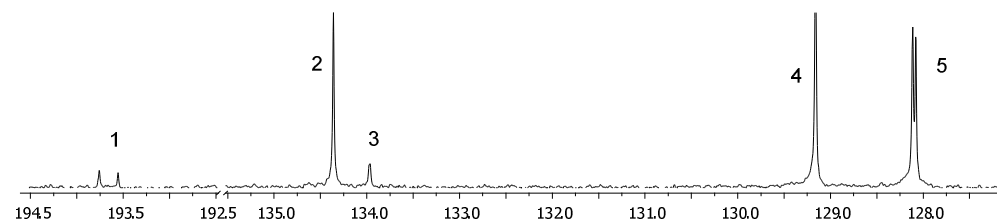
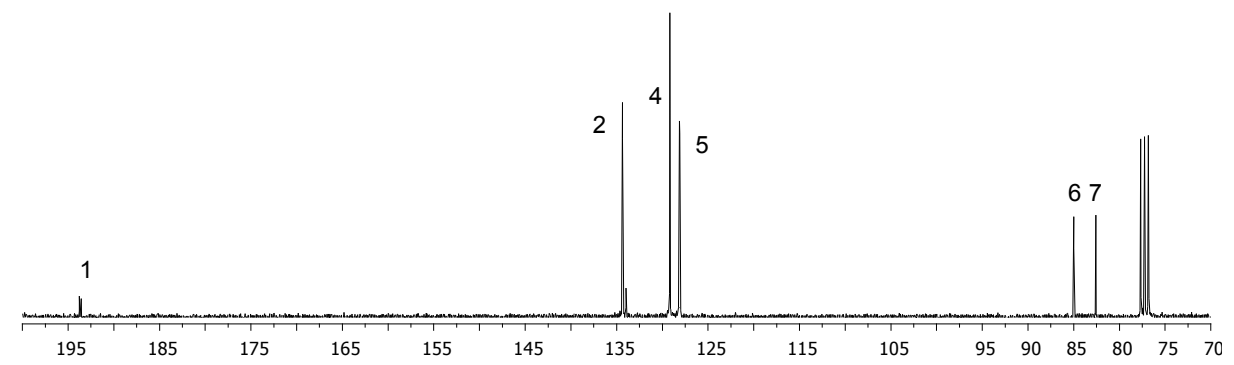
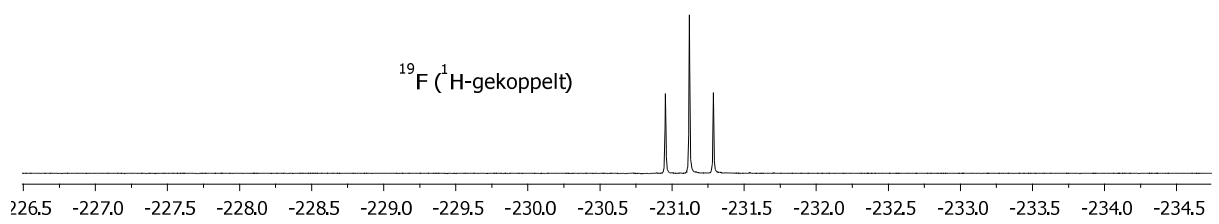
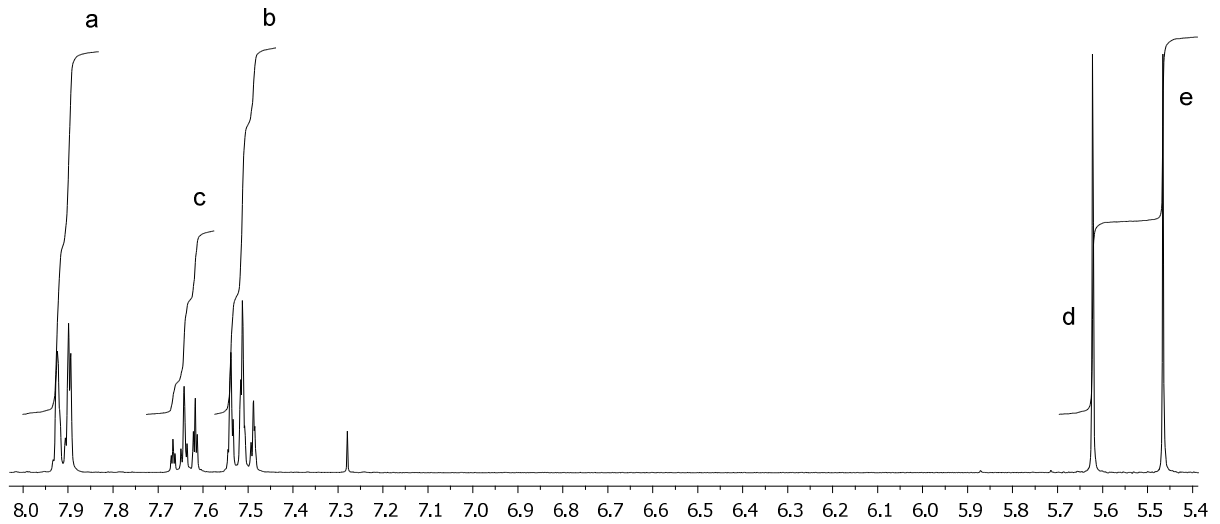




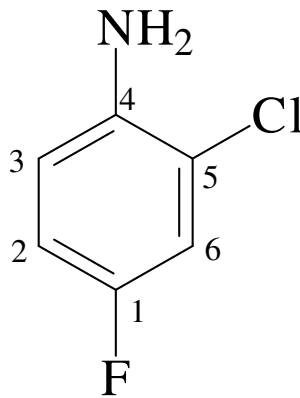
U16



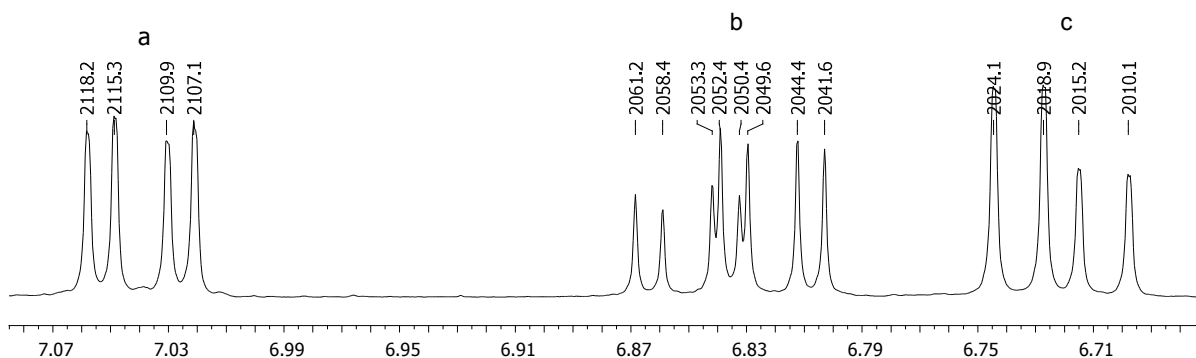
1. Struktur?
2. Erklären Sie die Signale bei ca. 82 und 86 ppm. (2 P)



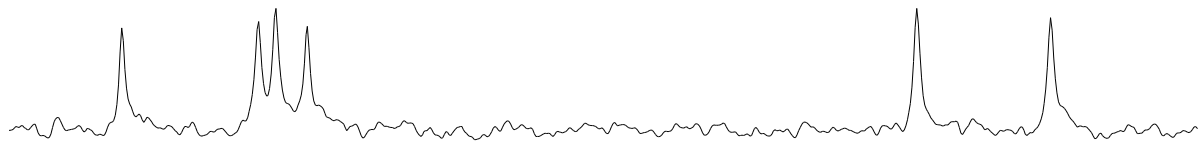
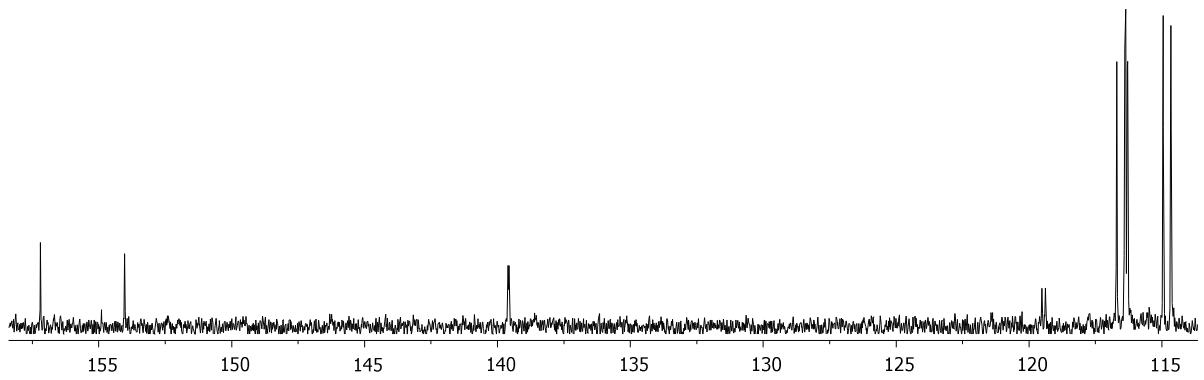
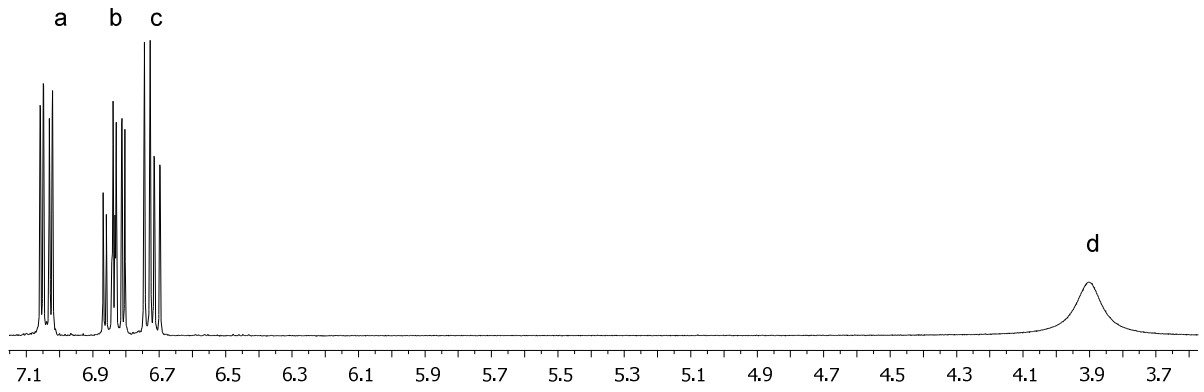
# U17



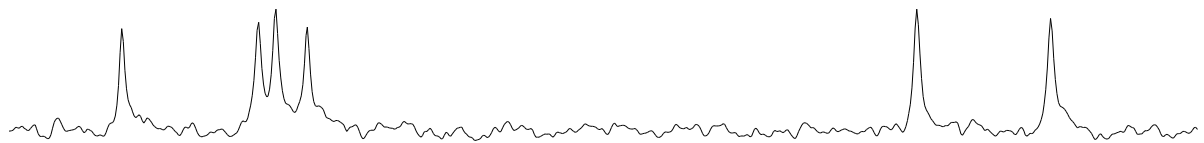
1. Ordnen Sie die Protonen zu. (Für die genaue Zuordnung der  $^{13}\text{C}$ -Signale lernen Sie später das HSQC-Spektrum kennen)
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die Protonen (1 Hz = 1mm). Bestimmen Sie alle Kopplungskonstanten.



3. Zeichnen Sie das F-Spektrum (Ohne und mit Protonen-Entkopplung,  $\delta = -130$  ppm)  
 → 2 Spektren zeichnen. Geben Sie auch hier die Kopplungskonstanten an.
4. Zeichnen Sie das Protonen-Spektrum, wenn bei dessen Aufnahme  $^{19}\text{F}$  entkoppelt wäre.
5. Warum sind im  $^{13}\text{C}$ -Spektrum so viele Signale zu sehen, obwohl nur 6 Cs im Molekül sind? Können Sie einige Signale zuordnen?



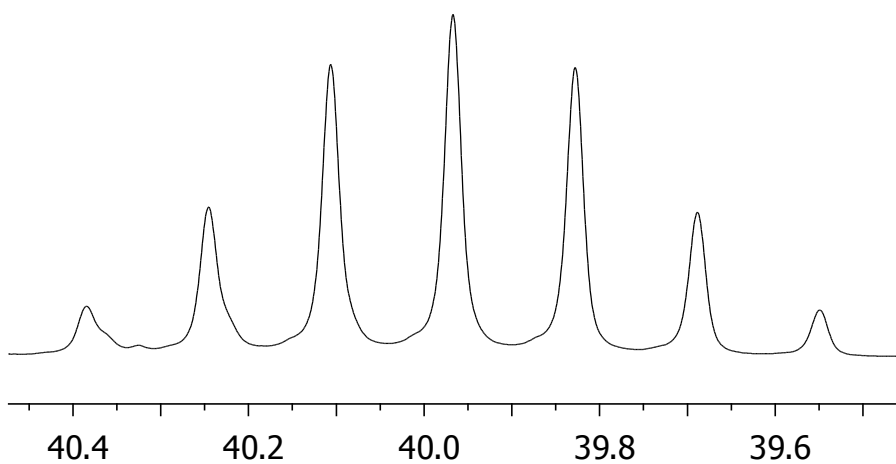
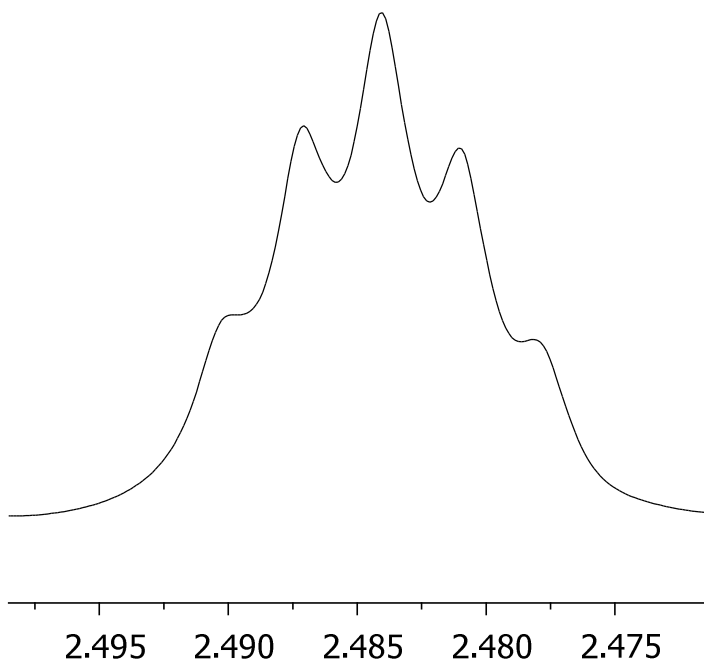
<sup>13</sup>C-Vergrößerung



Dept

## U18

1. Erklären Sie das Kopplungsmuster von d6-DMSO (99 %)
2. Wie würden die Spektren ausschauen, wenn Sie d6-DMSO (100 % deuteriert) hätten?
3. Wie würden die Spektren ausschauen, wenn Sie d5-DMSO hätten? ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  (1H-entk.),  $^{13}\text{C}$  (1H-gek.))



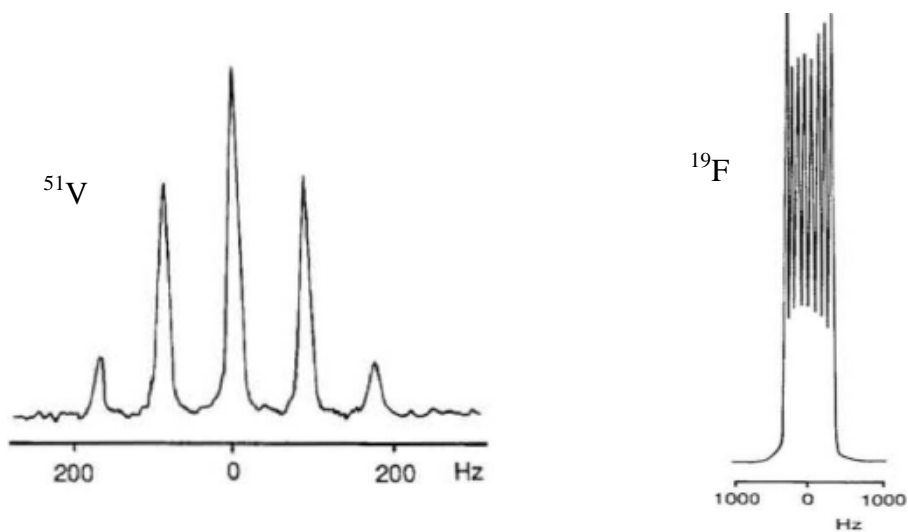
## U19

Erklären Sie die Aufspaltung des  $^{51}\text{V}$ - und des  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektrums des Anions  $\text{VOF}_4^-$ .

$^{51}\text{V}$ :  $I=7/2$ , Nat. Häufigkeit: 99.76 %

$^{19}\text{F}$ :  $I=1/2$ , Nat. Häufigkeit: 100 %

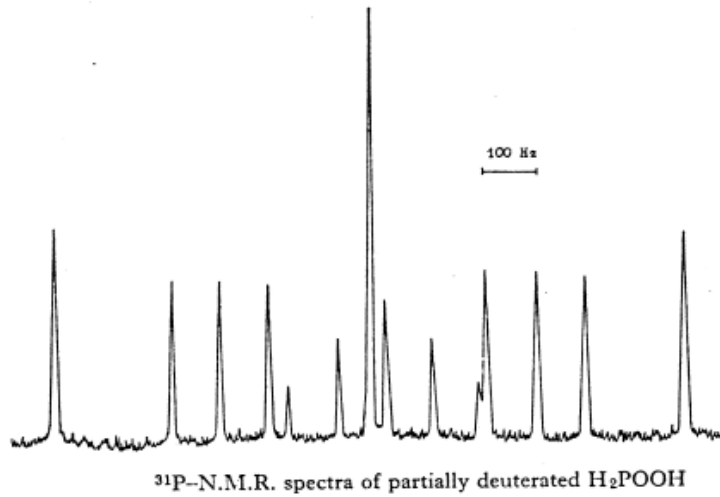
Was sagen Ihnen diese beiden Spektren über die Struktur des Anions aus?





## U20

Erklären Sie in folgendem  $^{31}\text{P}$ -Spektrum die Aufspaltung von partiell deuterierter hypophosphoriger Säure  $\text{H}_2\text{PO}(\text{OH})$



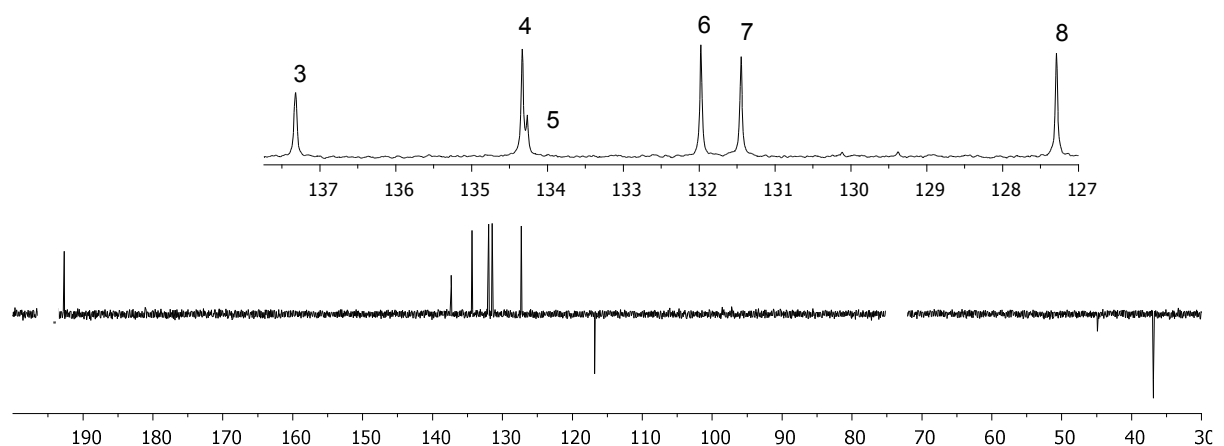
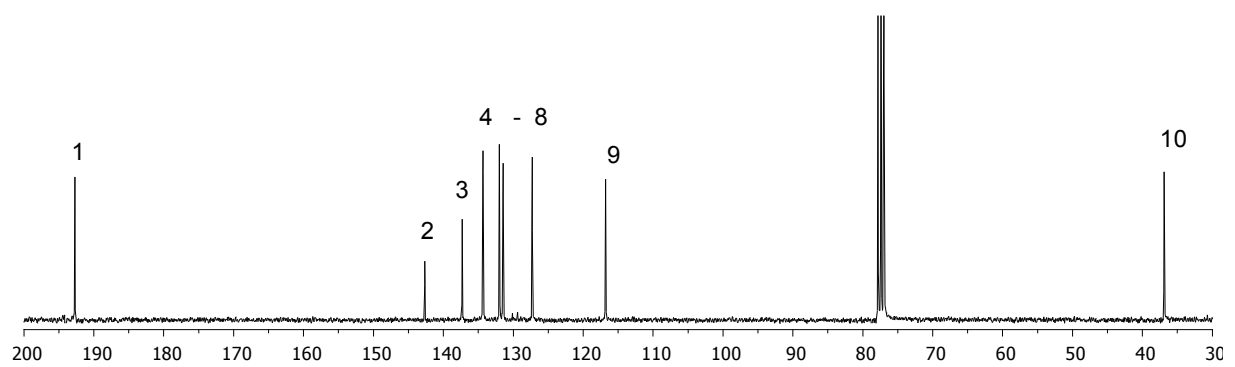
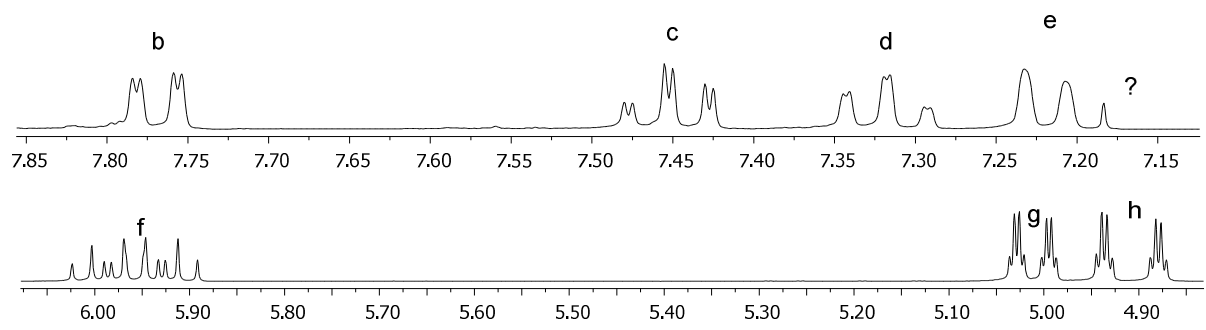
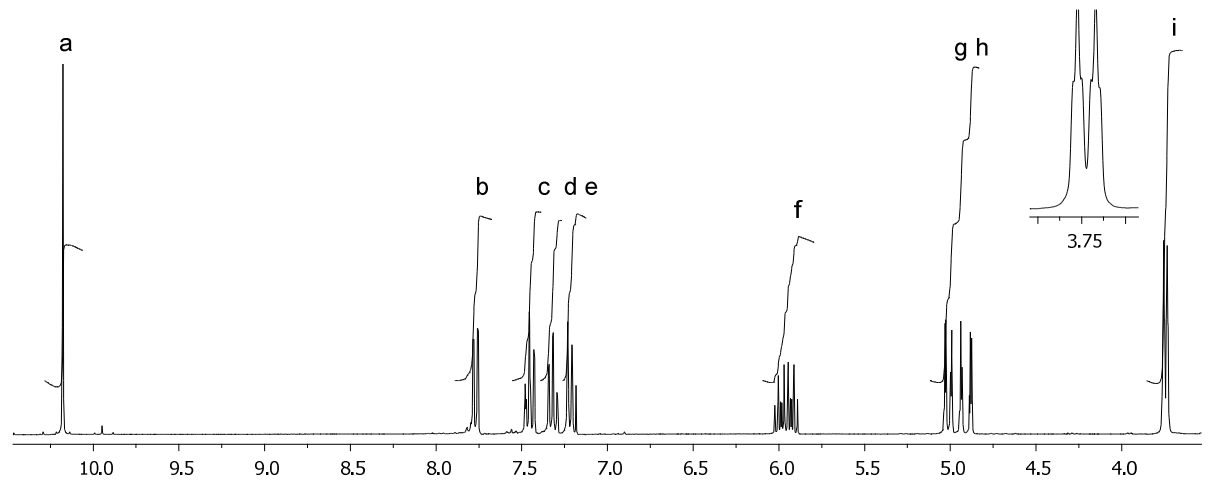
$\text{H}_2\text{PO}(\text{OH})$

$\text{HDPO}(\text{OH})$

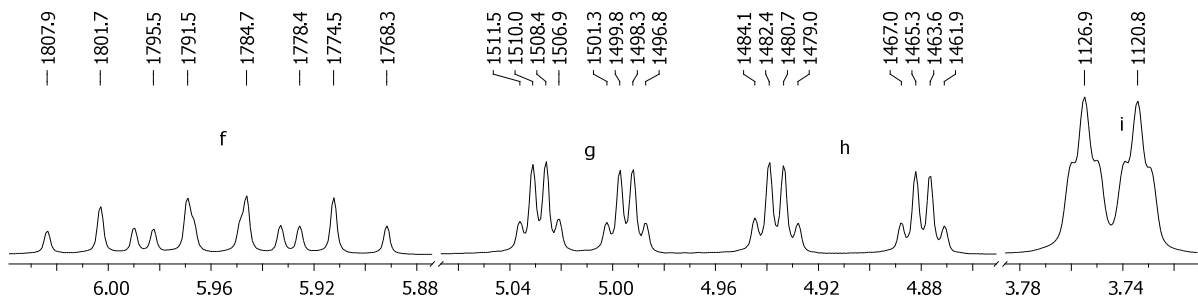
$\text{D}_2\text{PO}(\text{OH})$

# U21 $C_{10}H_{10}O$

- Strukturen ?
- Splittingschlüssel mit Kopplungskonstanten



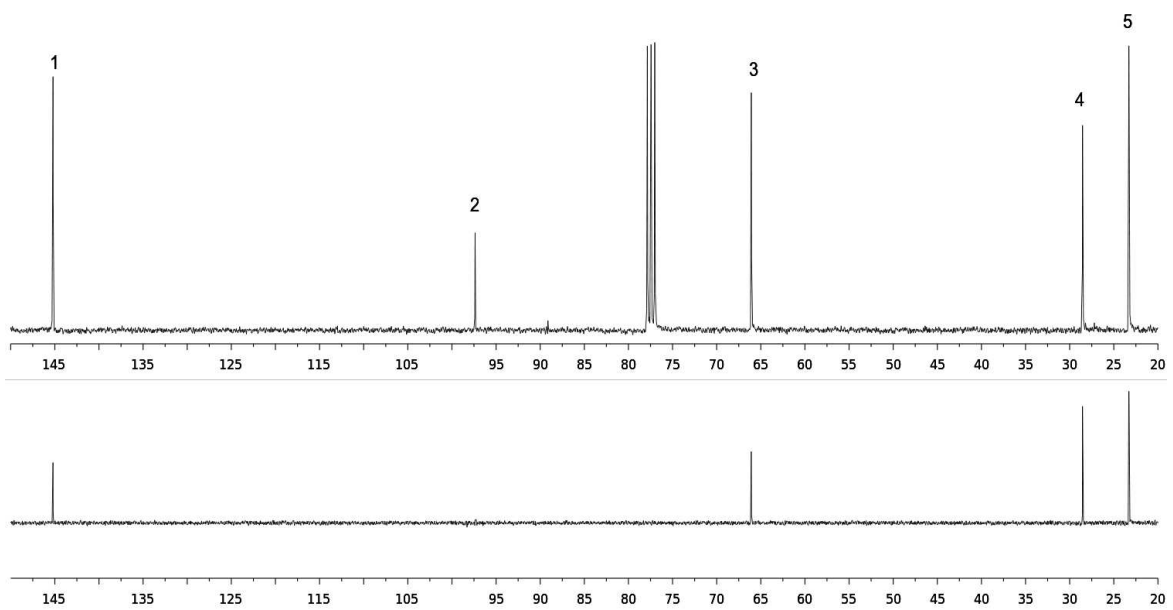
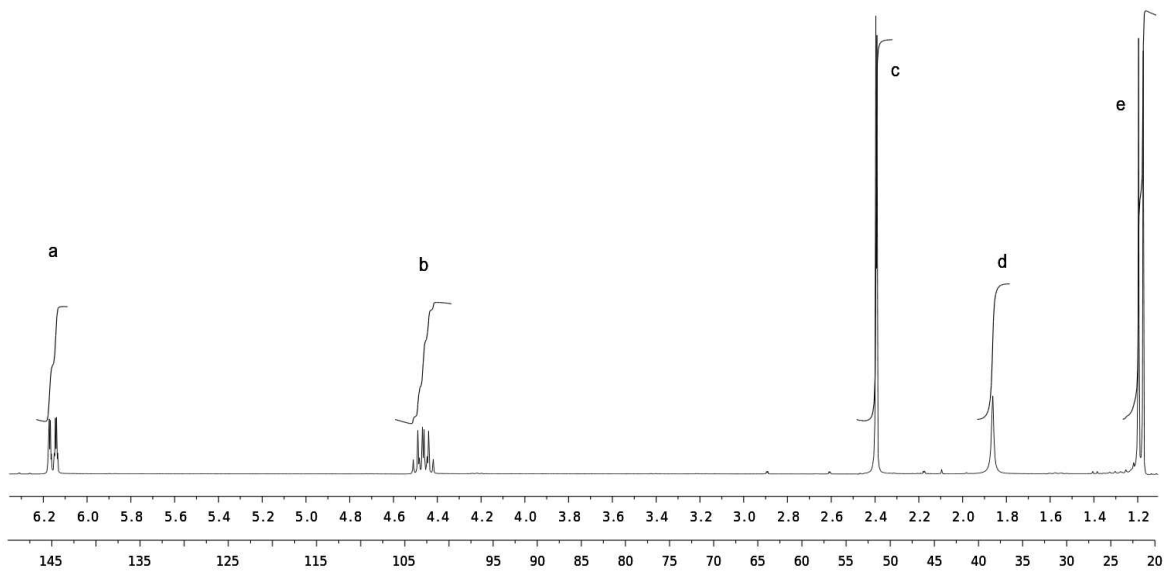
Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel incl. allen Kopplungskonstanten.  
 Der Rechner zeigt nicht alle Kopplungskonstanten an. → Selber zufügen!

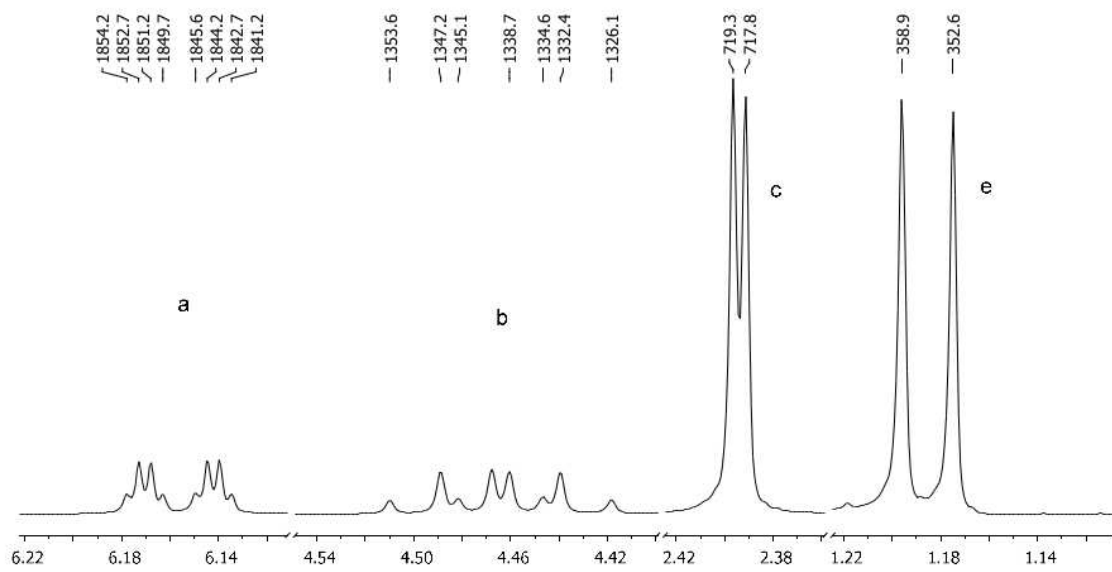


U22

SF:  $C_5H_9OI$

1. Struktur ?
2. Erklären Sie das Kopplungsmuster der Signale bei 4.45 ppm und 6.15 ppm.  
Bestimmen Sie die Kopplungskonstanten. (Seite 2)

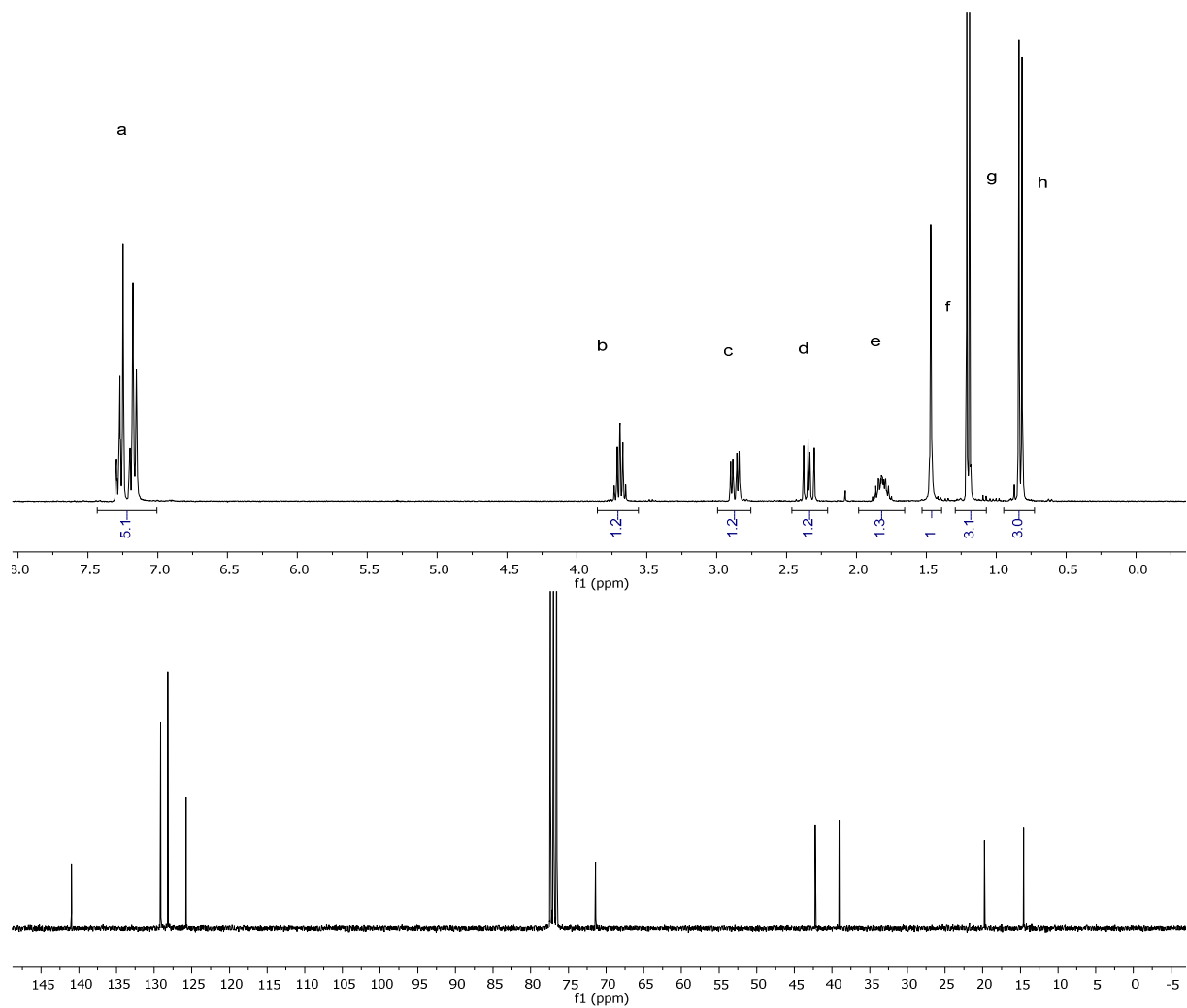


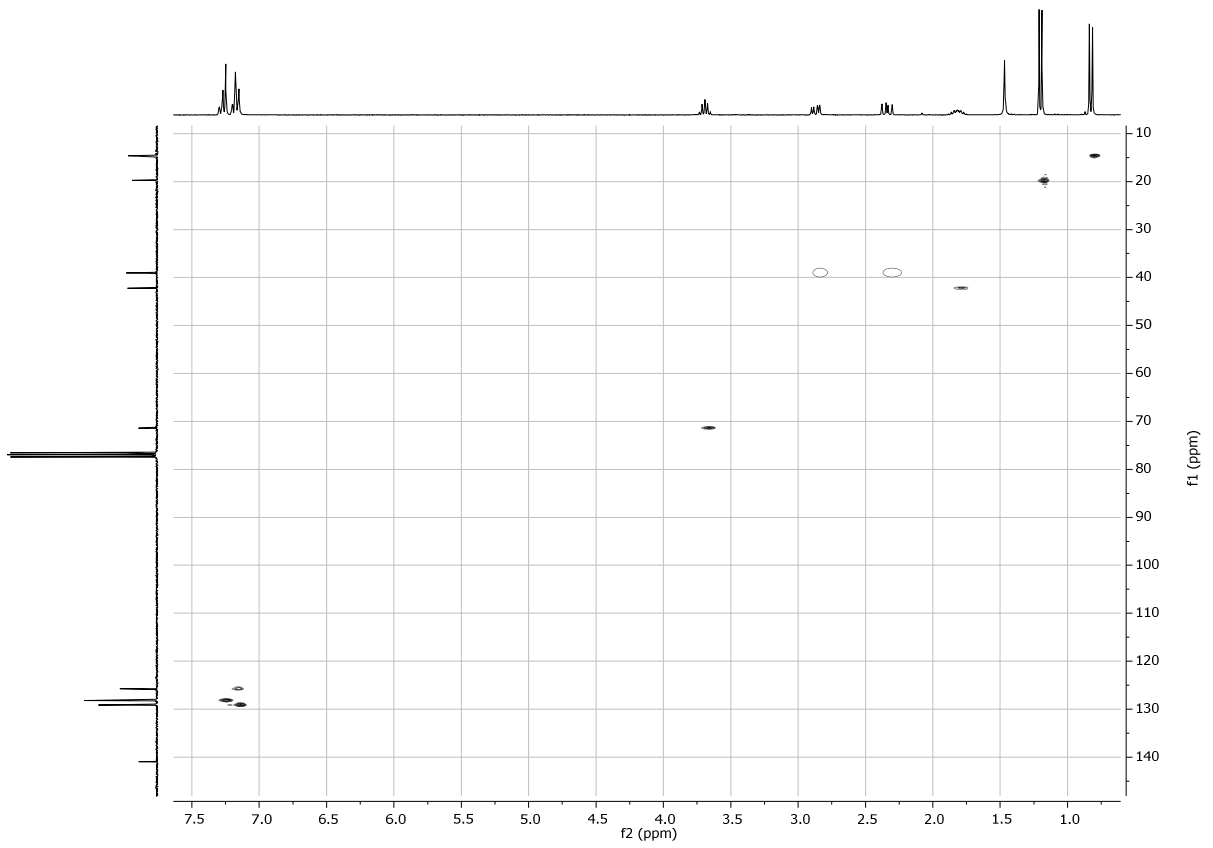
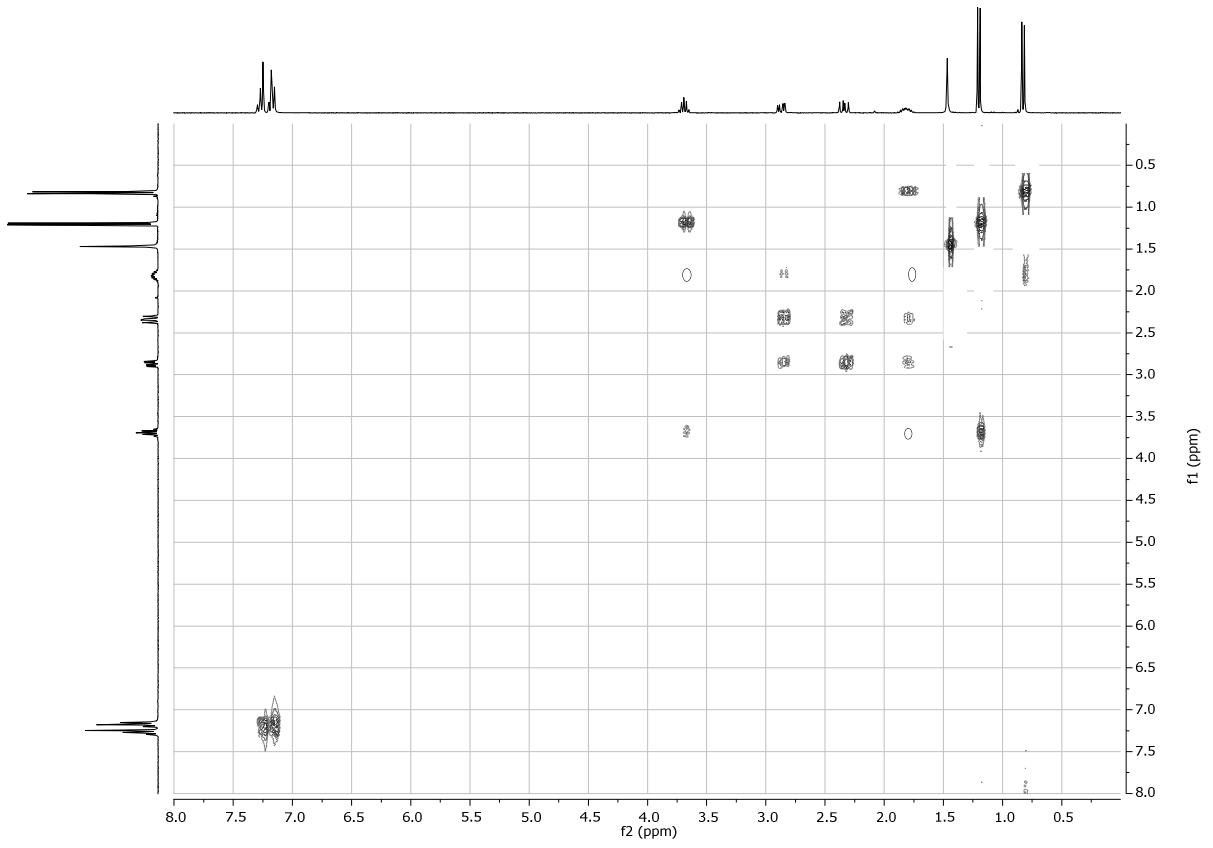


## U23

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

1. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (5 P)
2. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)
3. Zeichnen Sie für den Aliphaten-Teil einen Splittingschlüssel. (6 P)

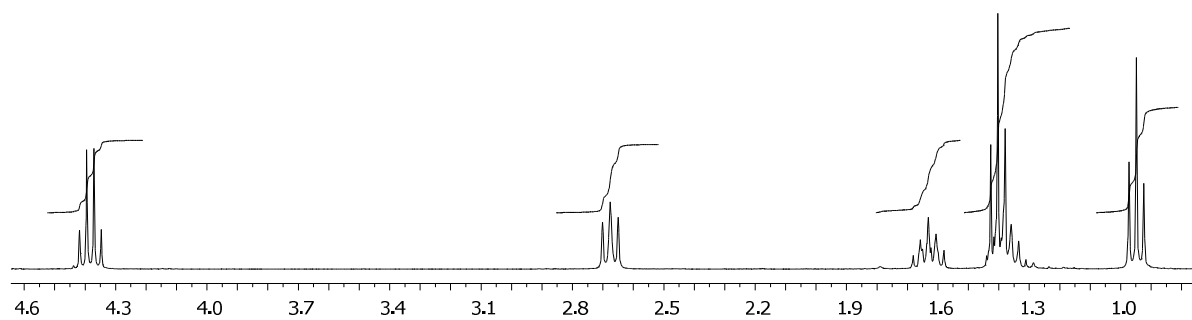
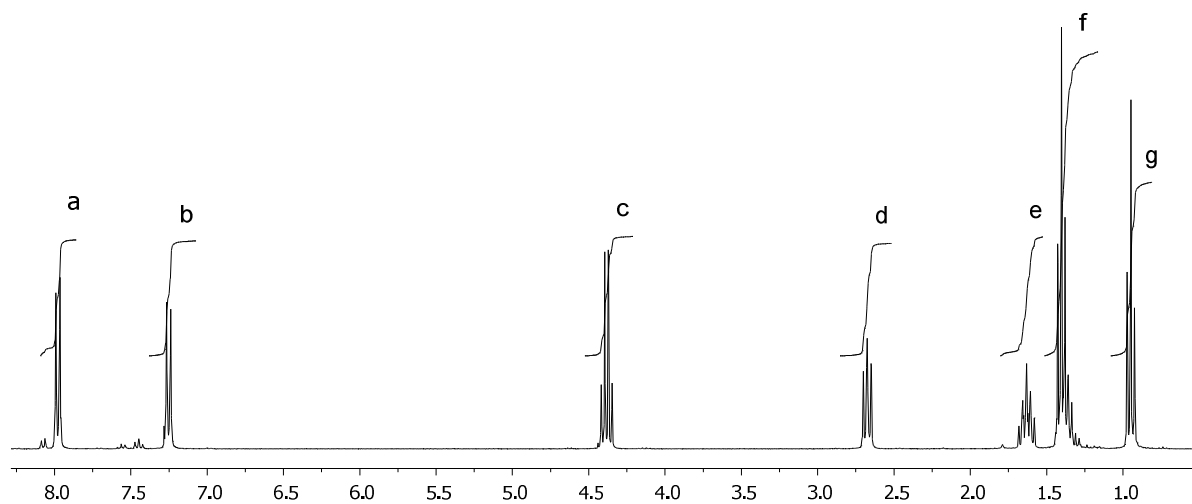




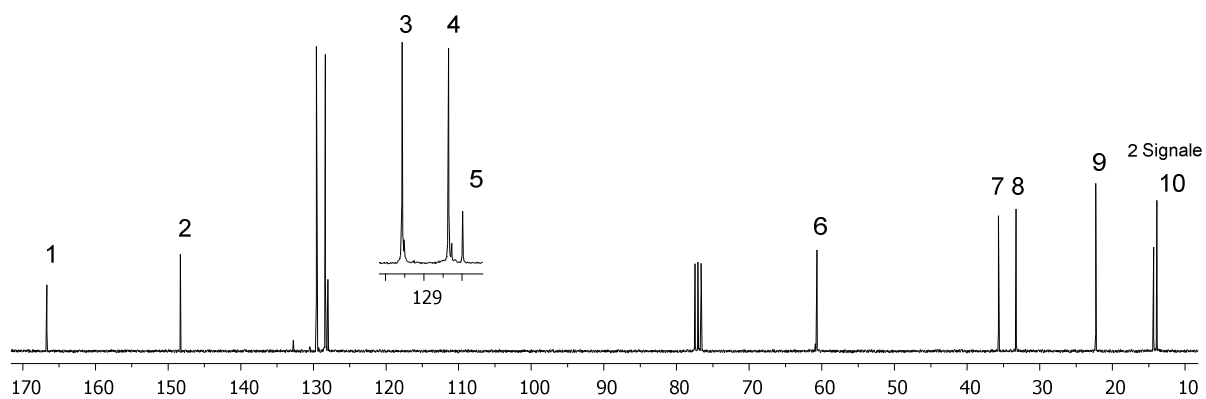
U24

SF:  $C_{13}H_{18}O_2$

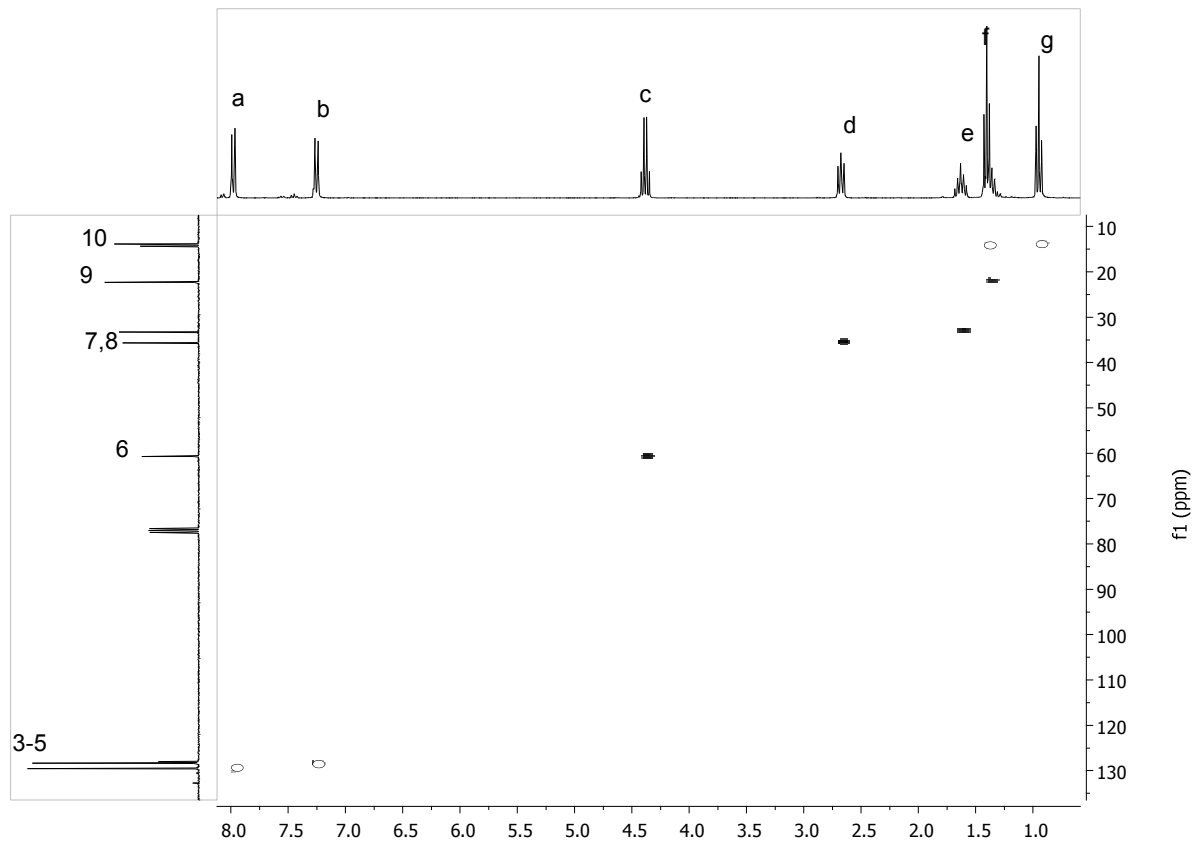
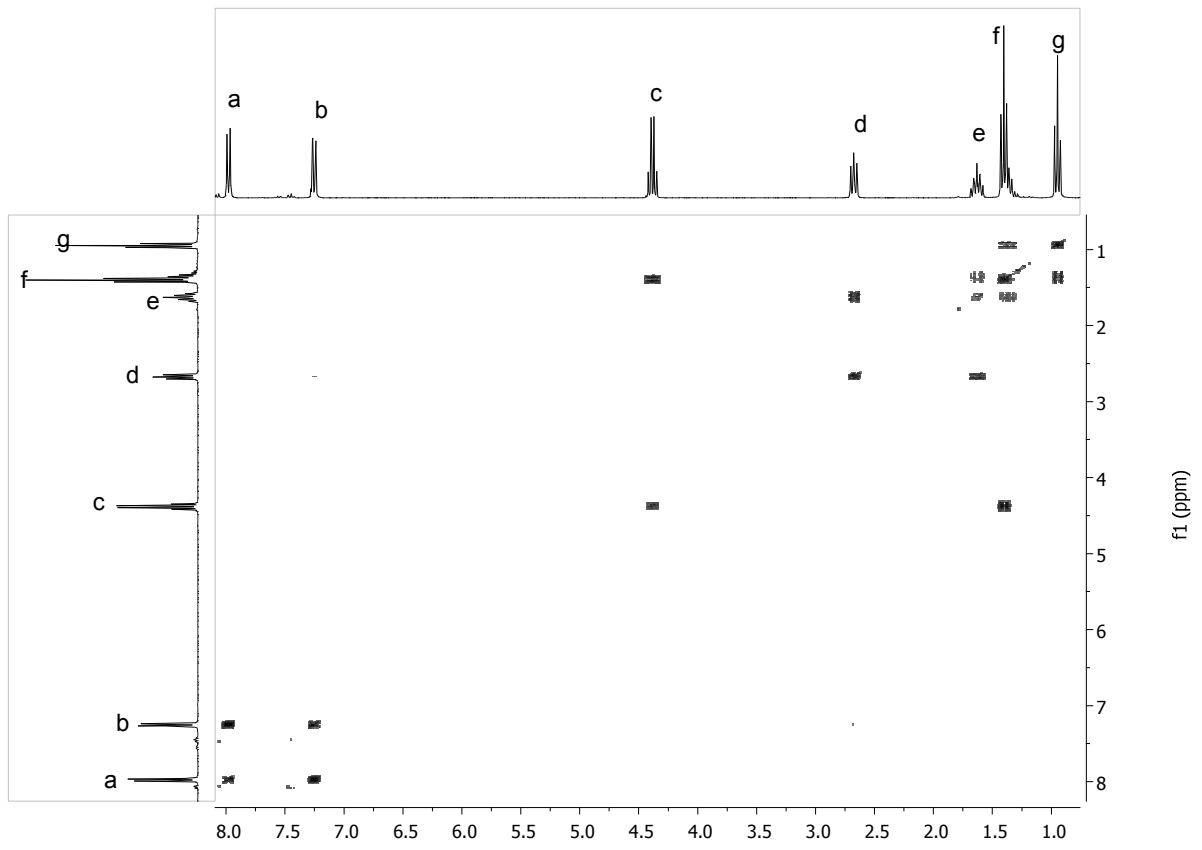
1. Bestimmen Sie die Struktur
2. Erklären Sie das Signal f.



Vergrößerung







HSQC: phasensensitiv

○ → CH oder CH<sub>3</sub>  
 ● → CH<sub>2</sub>

U25

$C_9H_{13}NO$

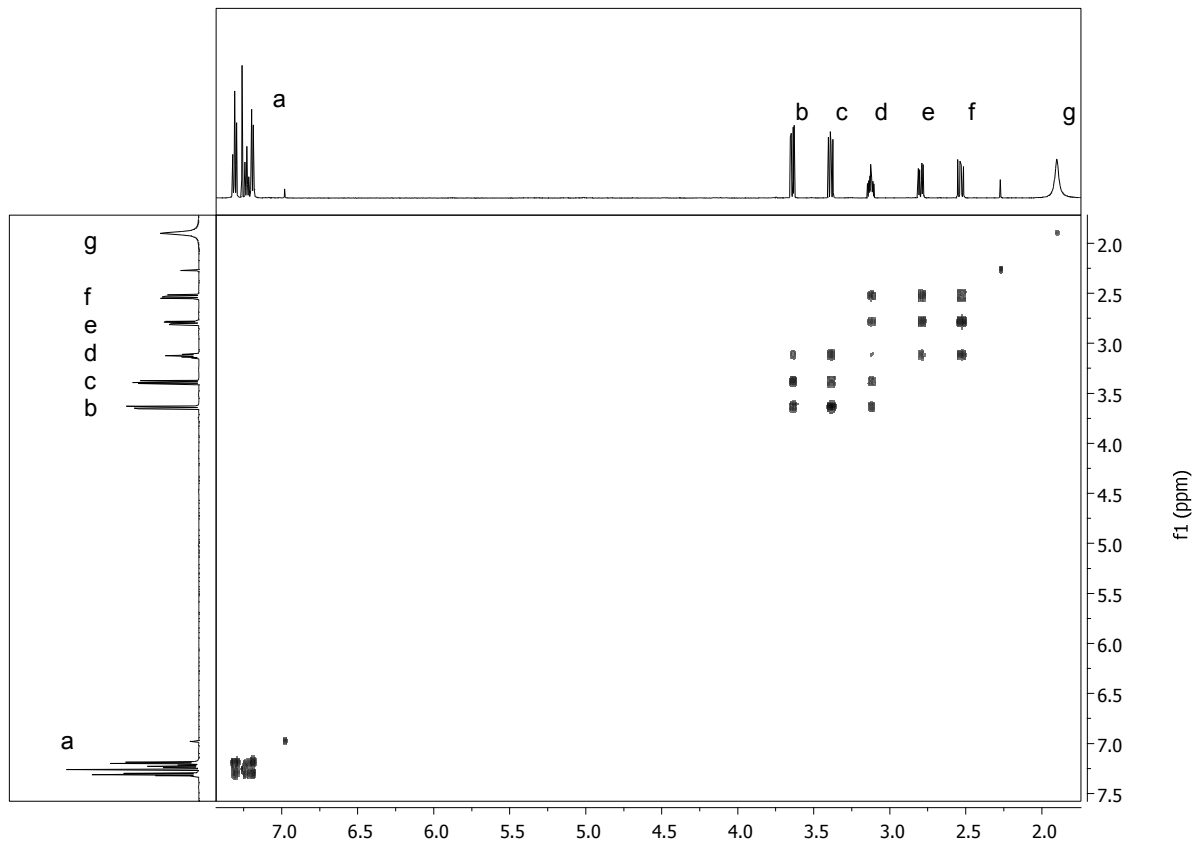
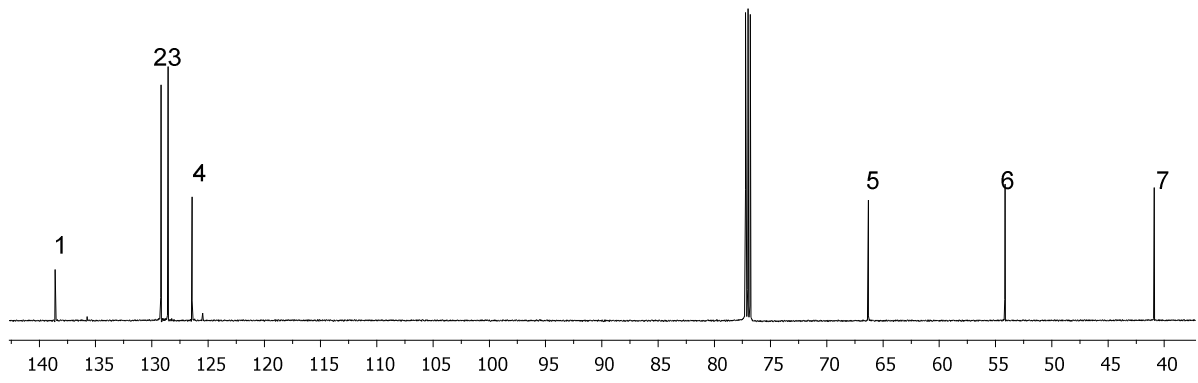
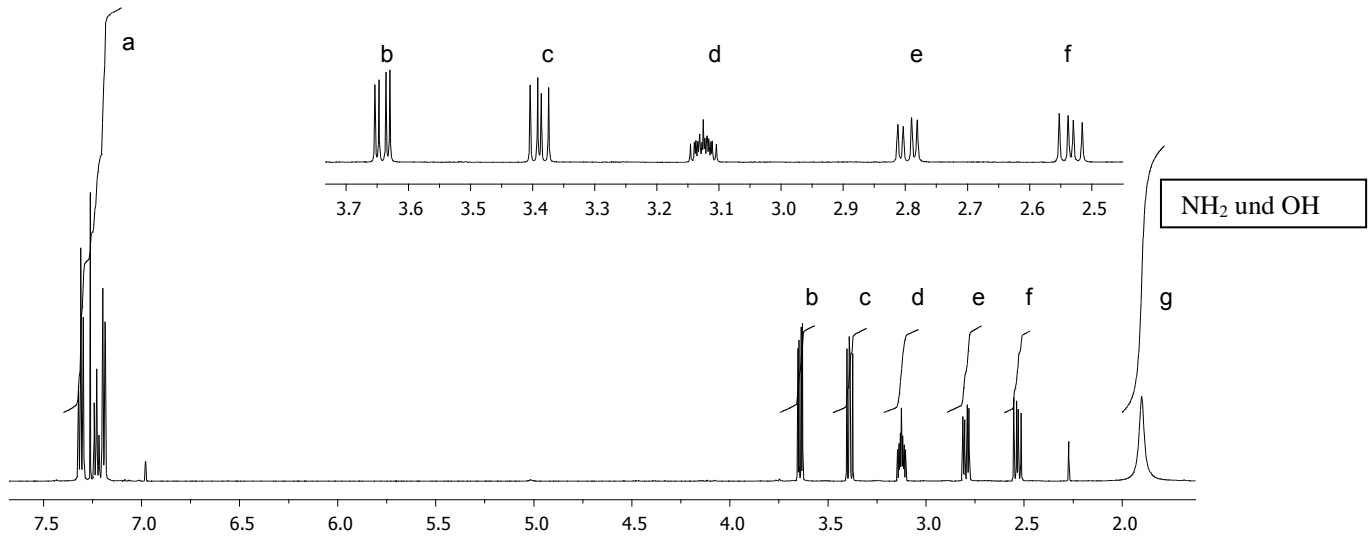
Hinweis: O ist elektronegativer als N !!

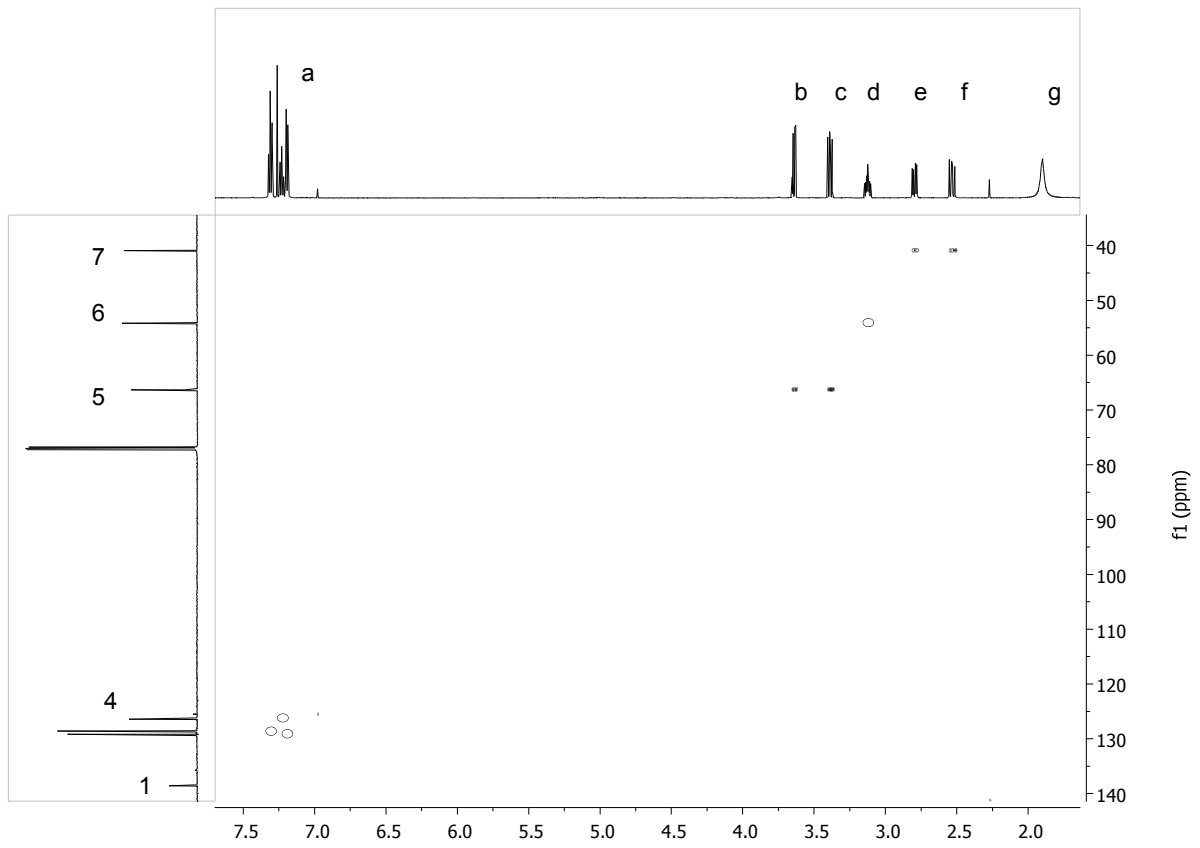
1. Bestimmen Sie die Struktur

1. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen.

2. Im HSQC sehen Sie, dass an einem C-Atom 2 verschiedene H-Atome sitzen können.

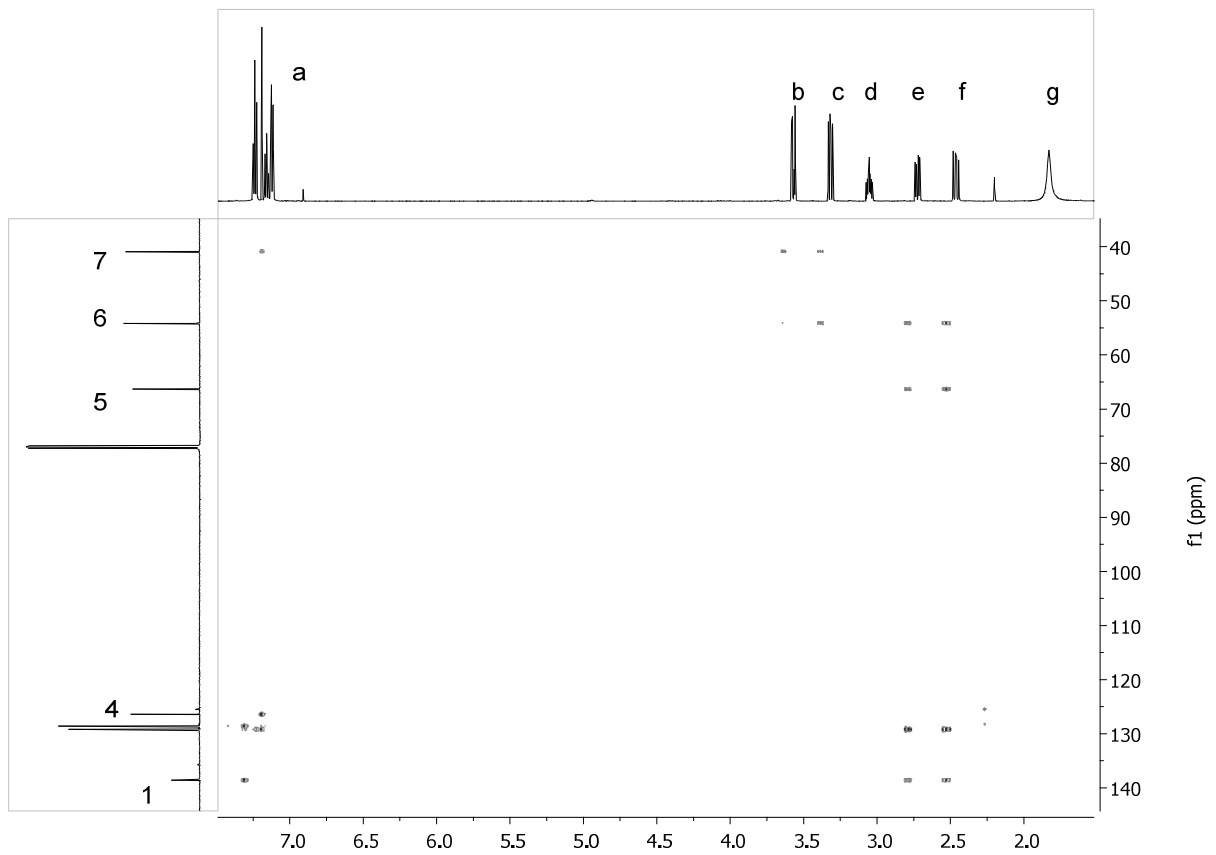
- a) Welche Eigenschaft haben diese Protonen? Kurze Erklärung.
- b) Wie nennt man diese Protonen auf Grund dieser Eigenschaft?
- c) Welche Auswirkung hat diese Eigenschaft auf das Spinsystem?





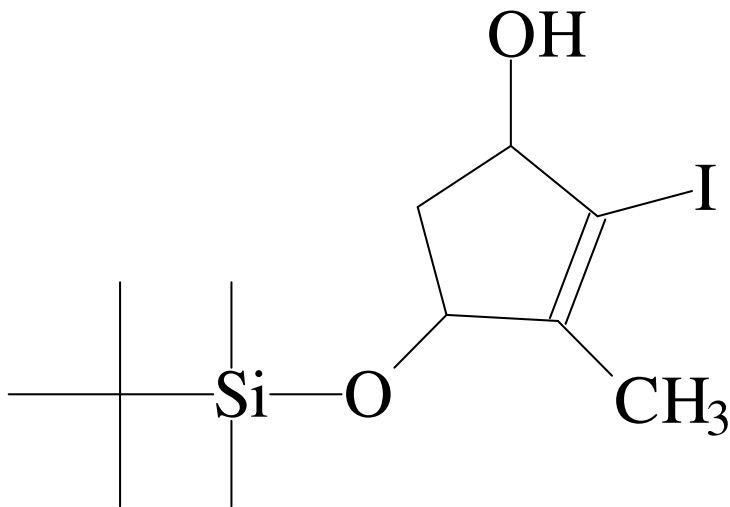
HSQC:  $^1J_{CH}$  phasensensitiv

- → CH oder CH<sub>3</sub>
- → CH<sub>2</sub>

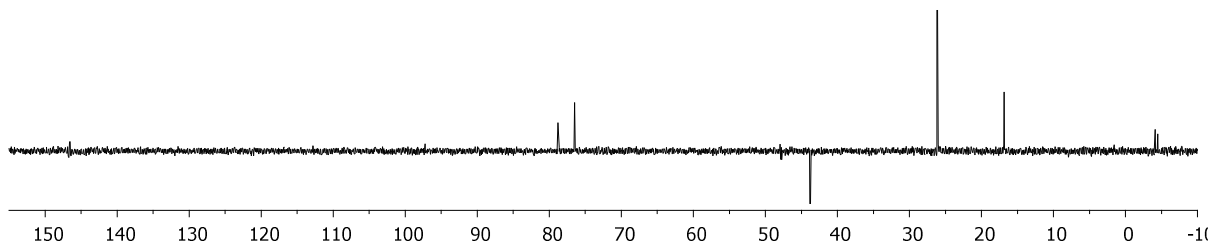
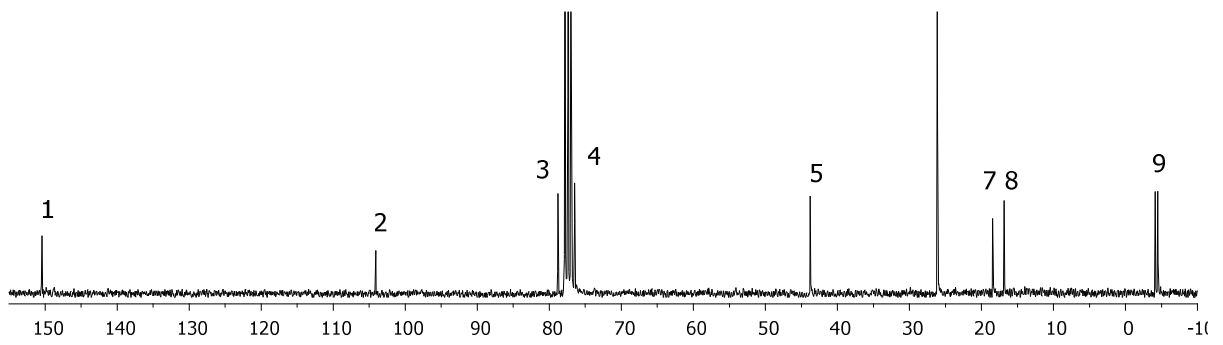
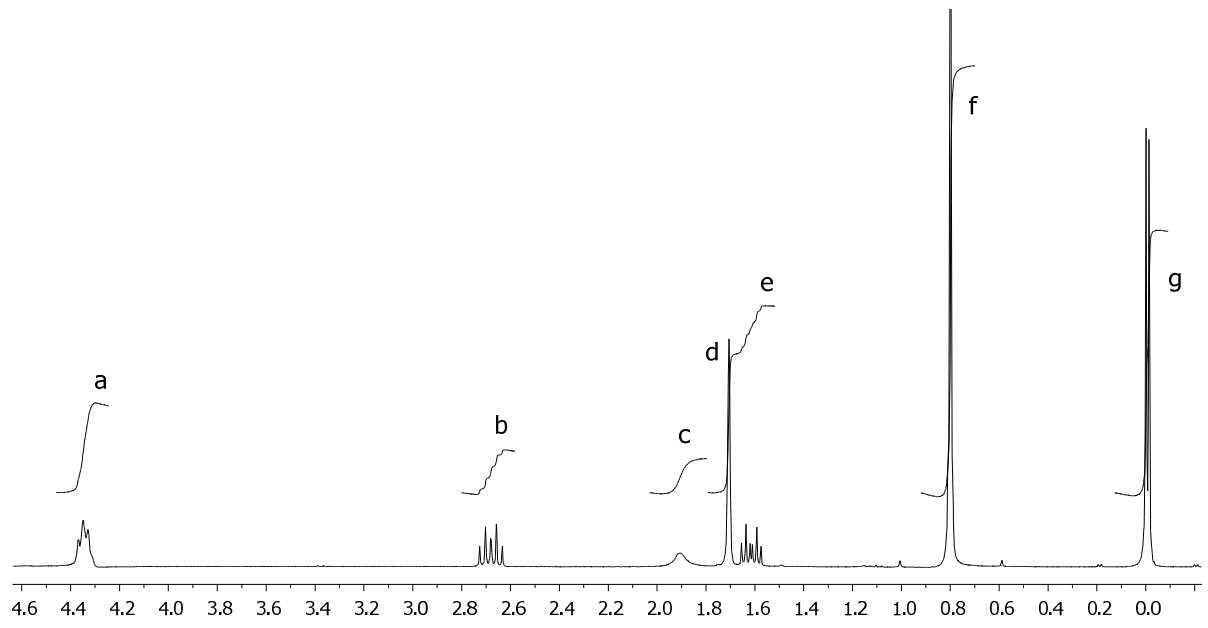


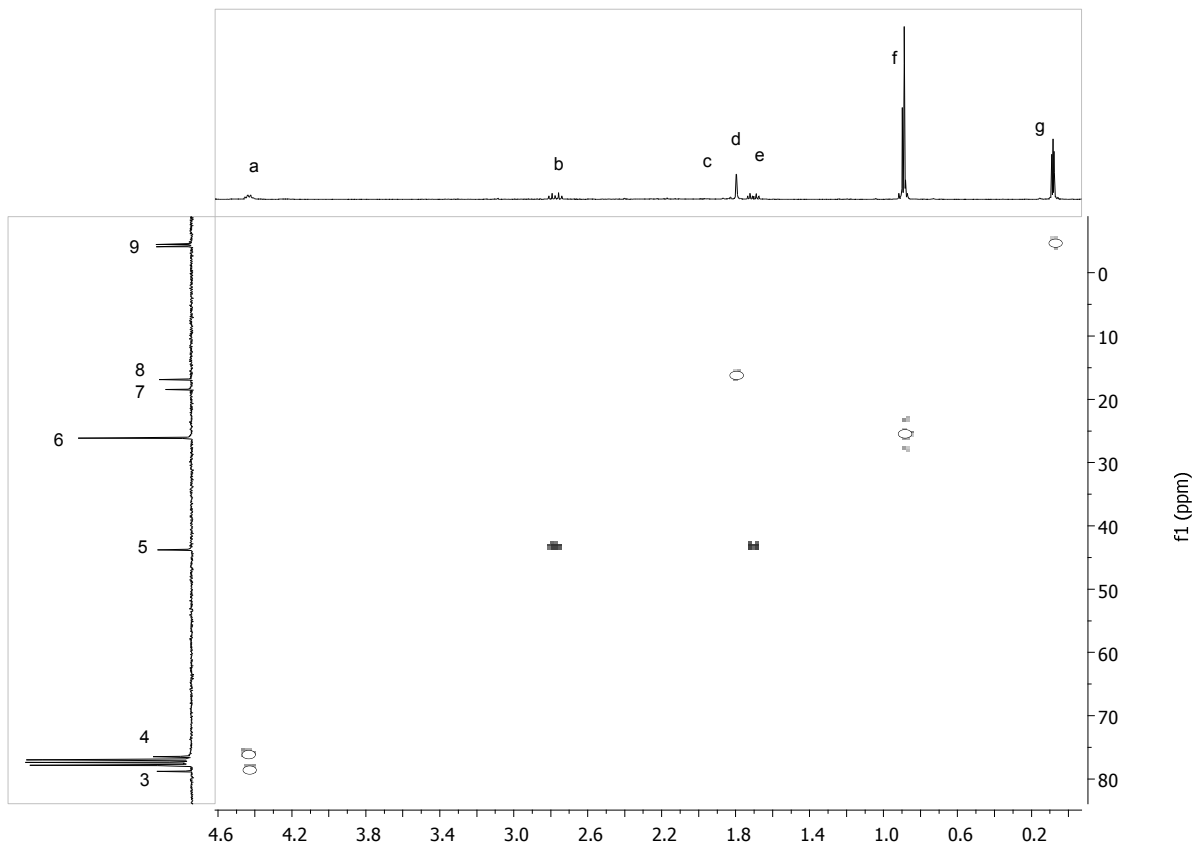
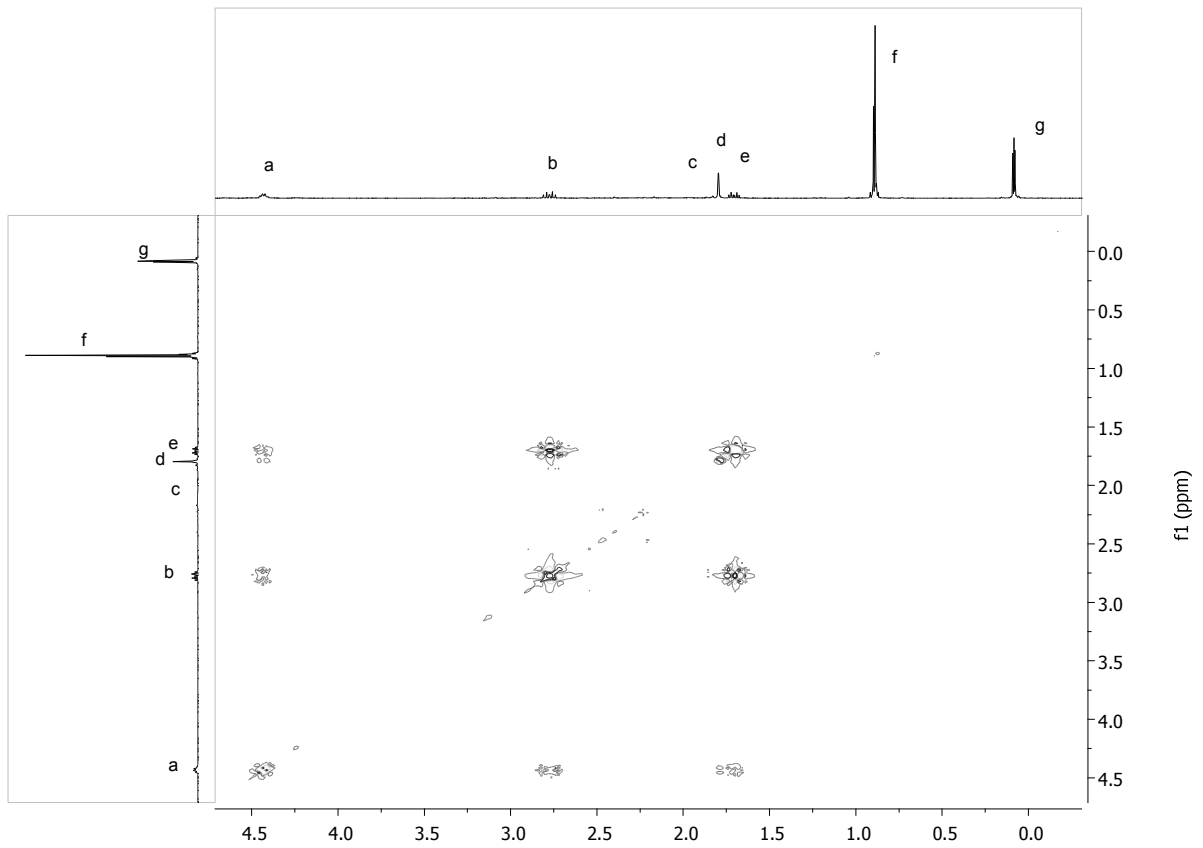
HMBC  $^3J_{CH}$  und  $^2J_{CH}$

U26

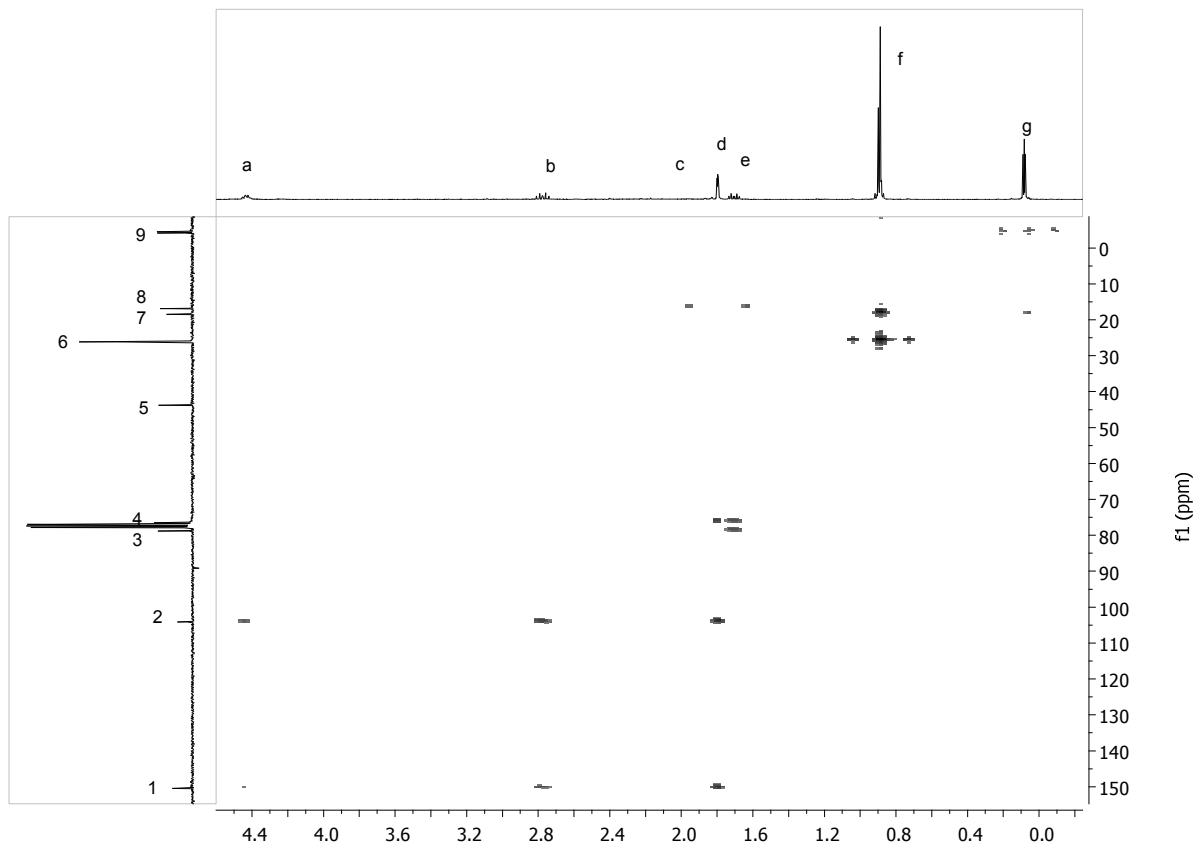


1. Ordnen Sie alle Signale soweit möglich zu.
2. Warum ist das <sup>13</sup>C-Signal bei ca. -5 ppm ein Dublett? (Zwei Signale)
3. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die 4 Protonen am Ring (nicht für OH)
4. Geben Sie das Spinsystem an. Beachten Sie Punkt 2!



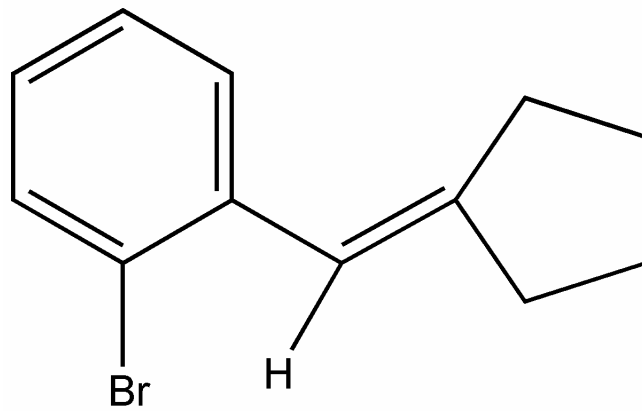


HMBC: vorwiegend  $^3J_{CH}$ -Kopplungen. (d. h. zwischen C und H liegen 3 Bindungen)  
gelegentlich  $^2J_{CH}$ -Kopplungen

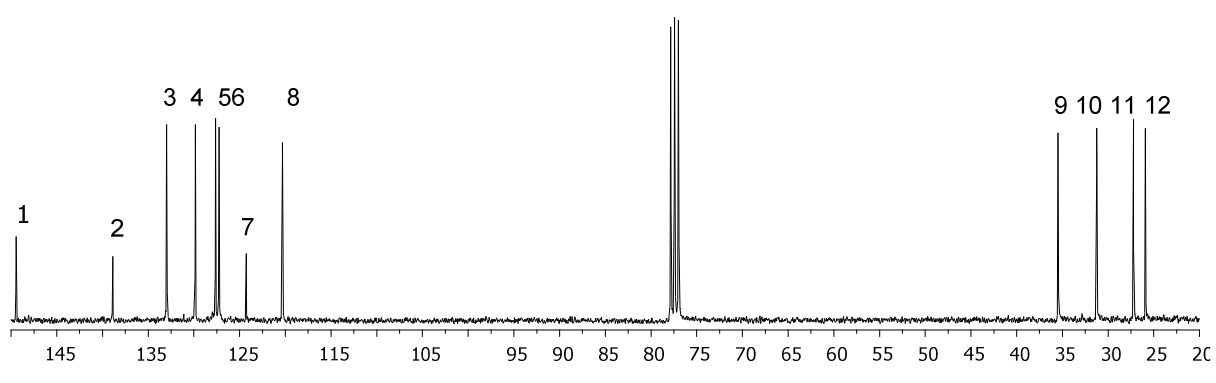
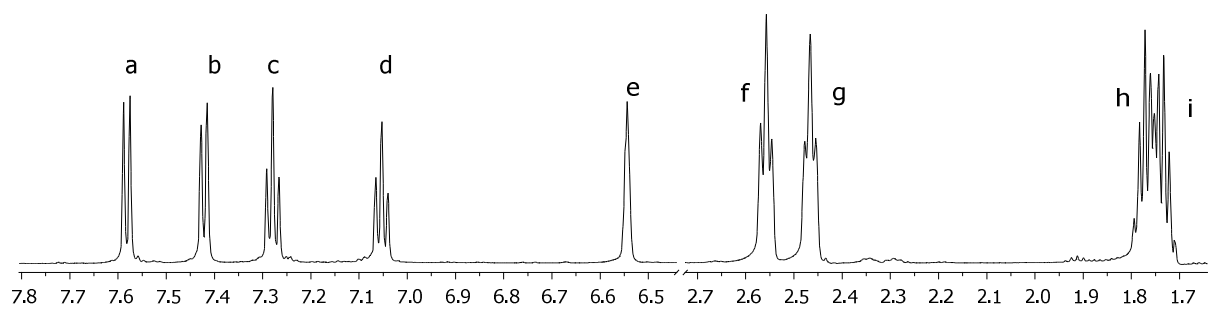
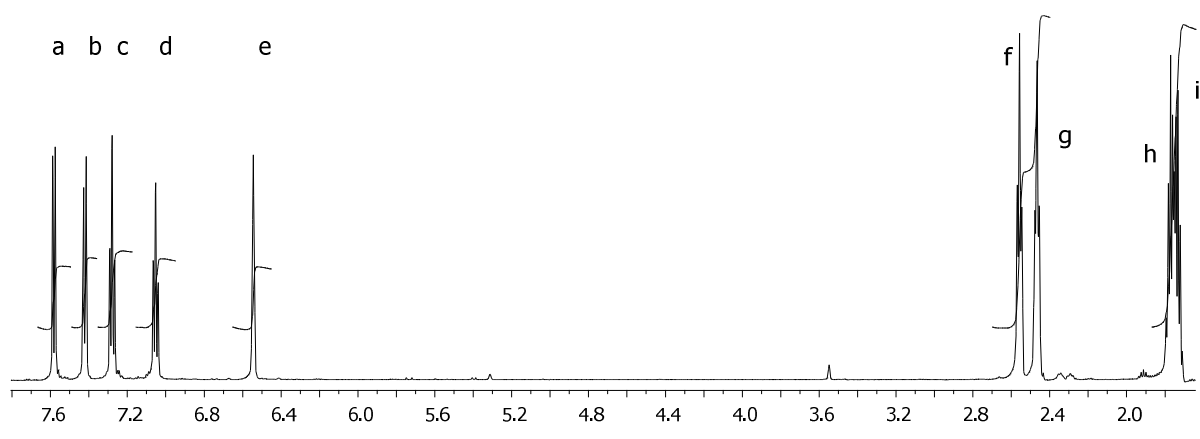


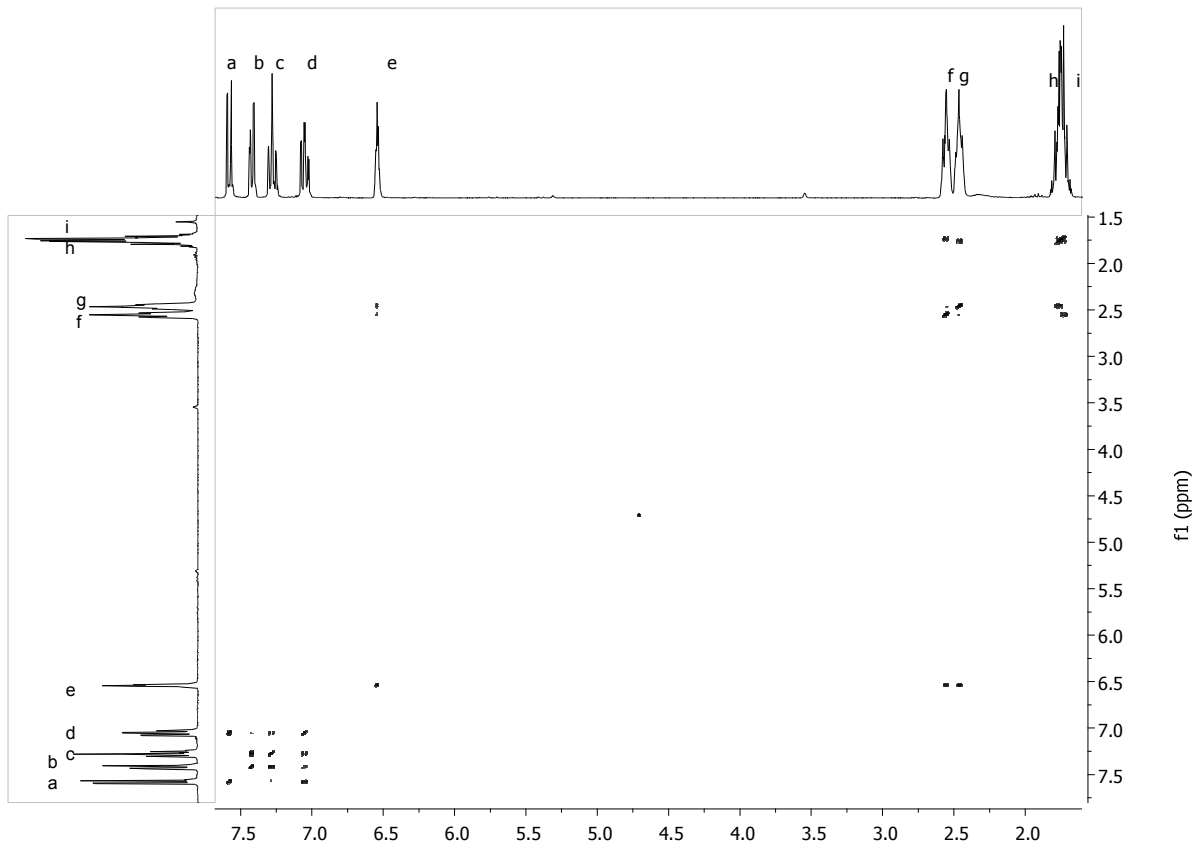


U27

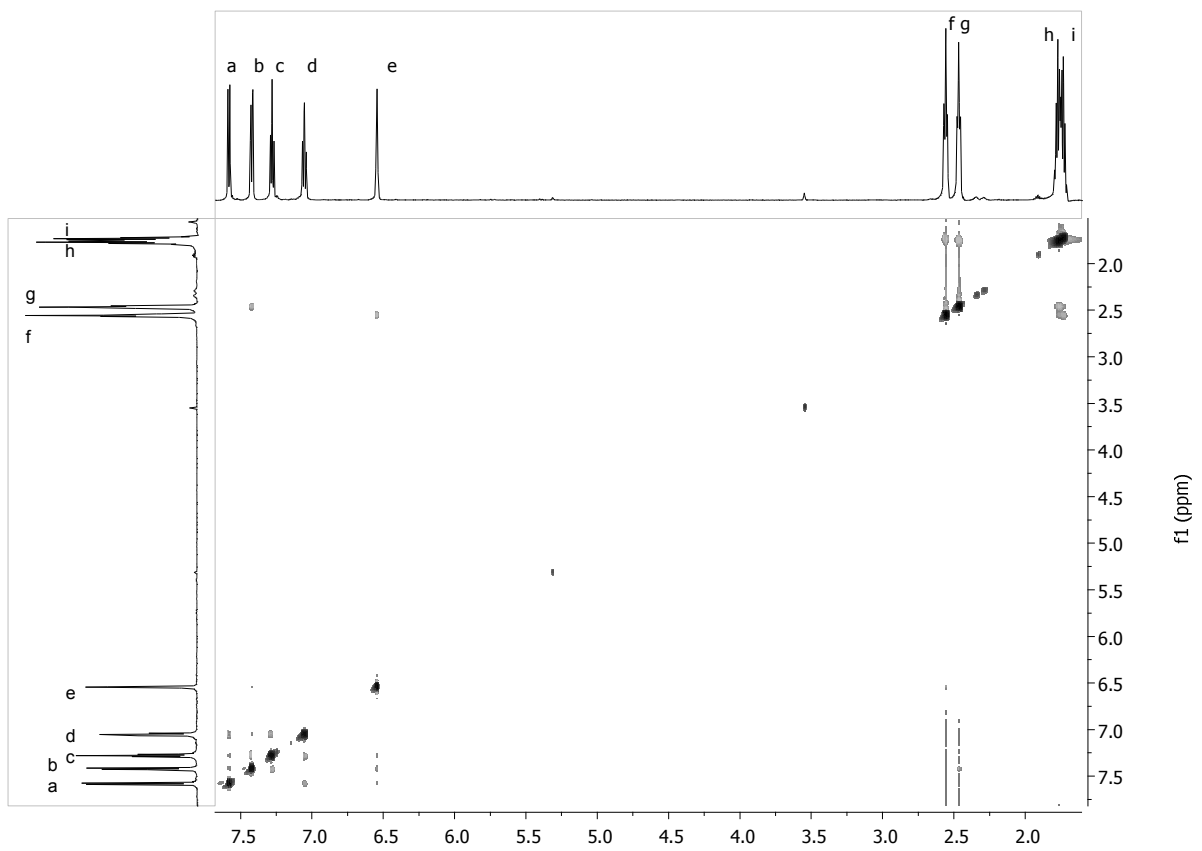


1. Ordnen Sie die Signale aus dem  $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$  -Spektrum obiger Strukturformel zu.

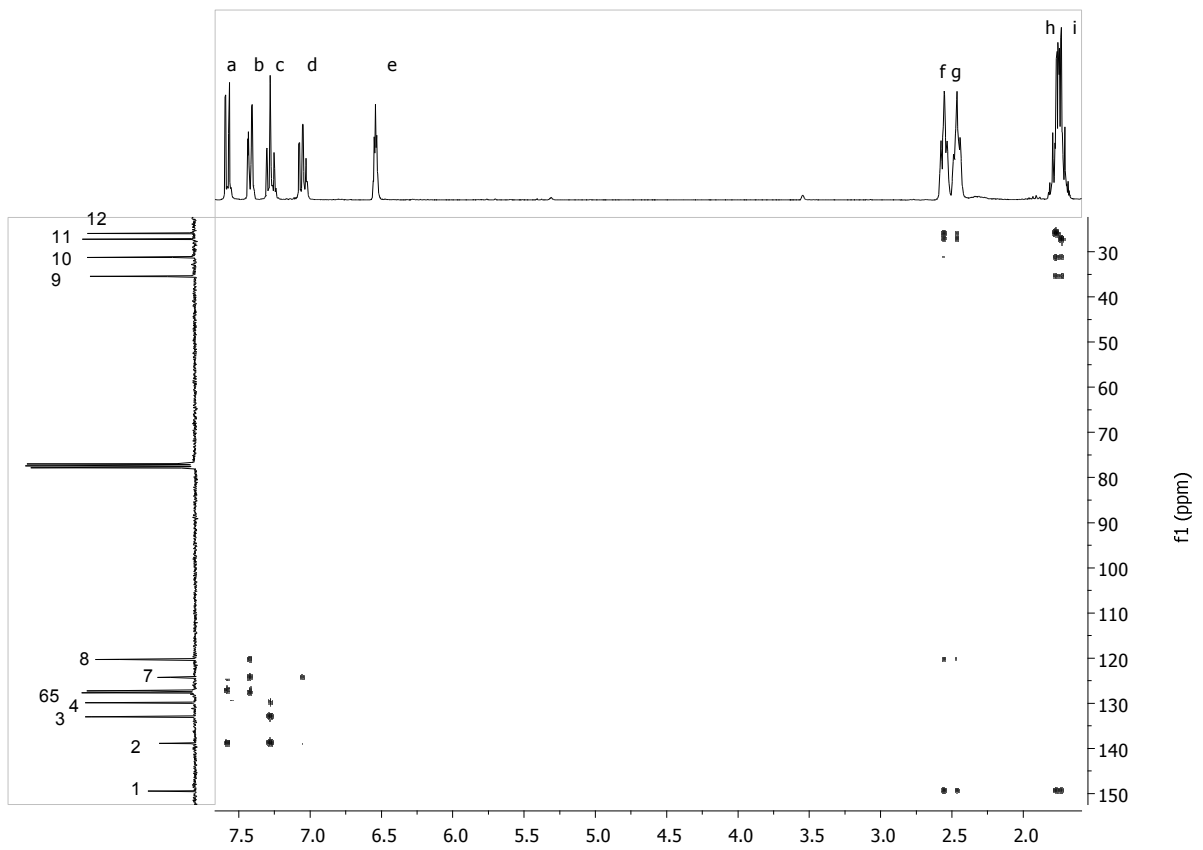
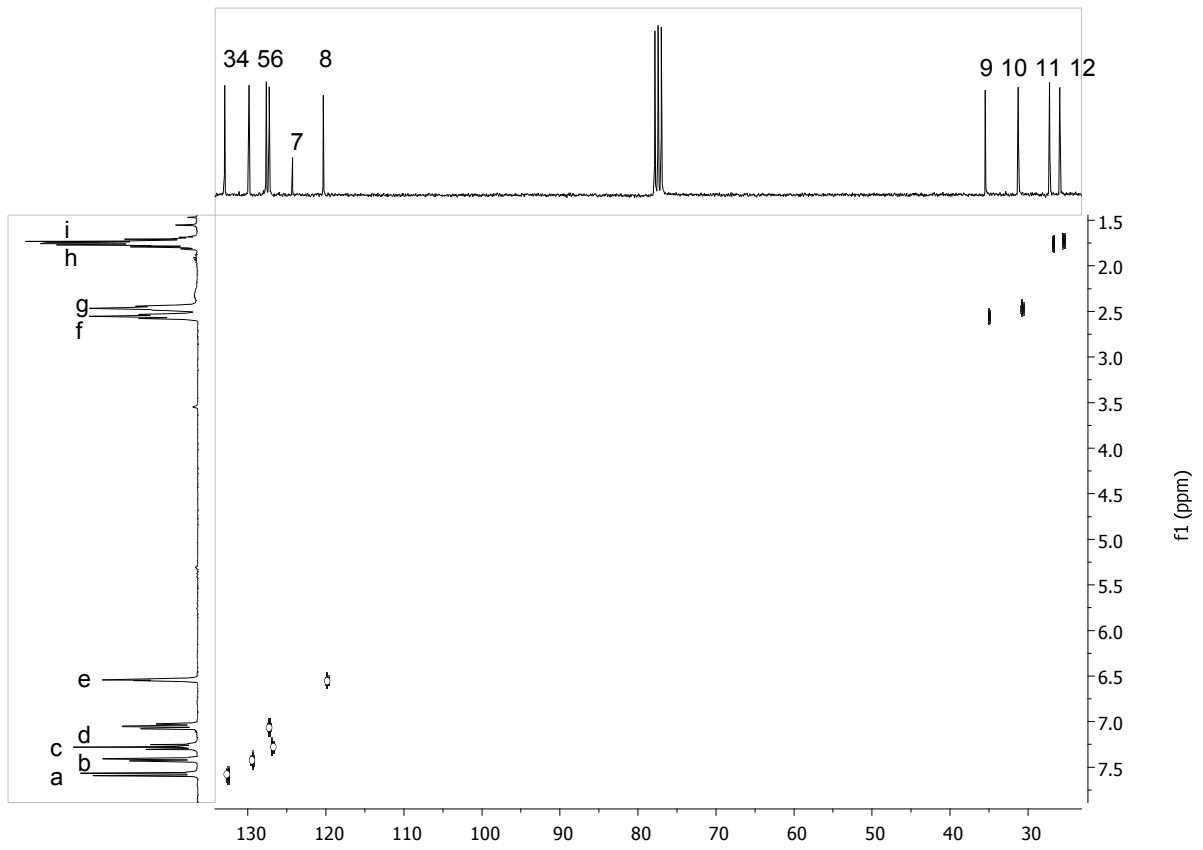


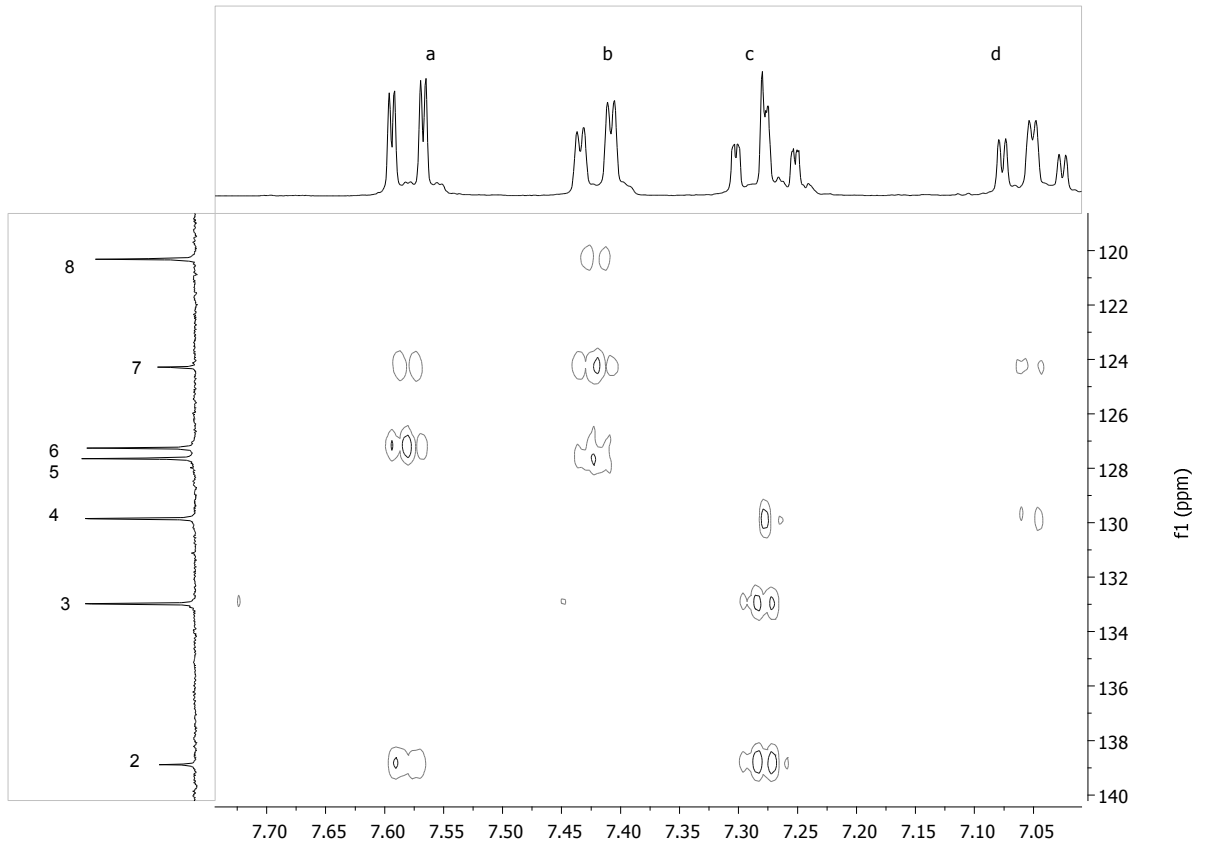


cosy



noesy



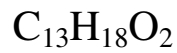


Vergrößerung des HMBCs

2. Geben Sie alle im obigen Spektrum (Vergrößerung des HMBCs) sichtbaren Kopplungen in folgender Tabelle an und bestimmen Sie deren Art ( $^1J$ ,  $^2J$ ,  $^3J$ ,  $^4J$  usw.) (3 P)

<sup>13</sup> C	<sup>1</sup> H	Kopp.
8	b	<sup>3</sup> J

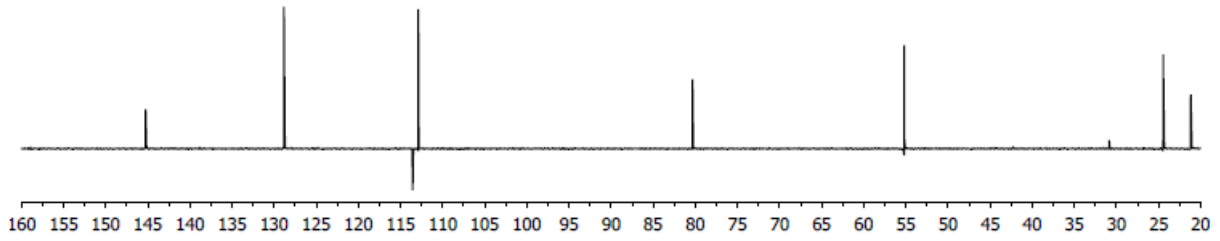
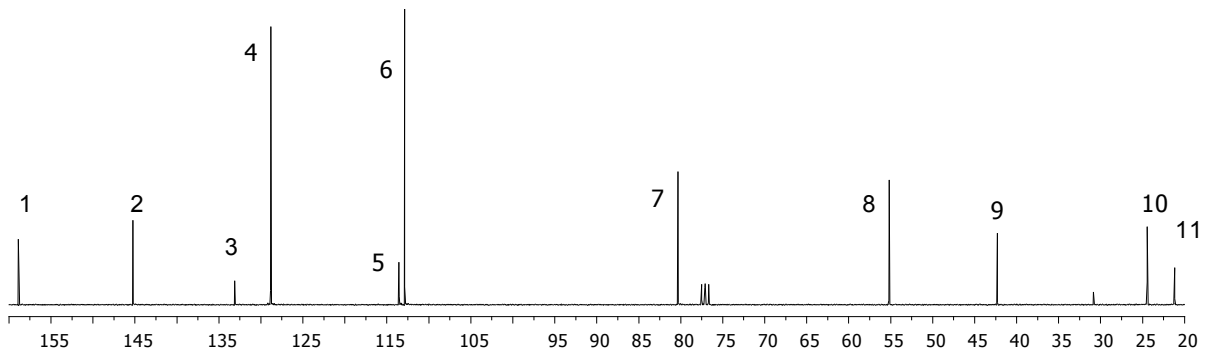
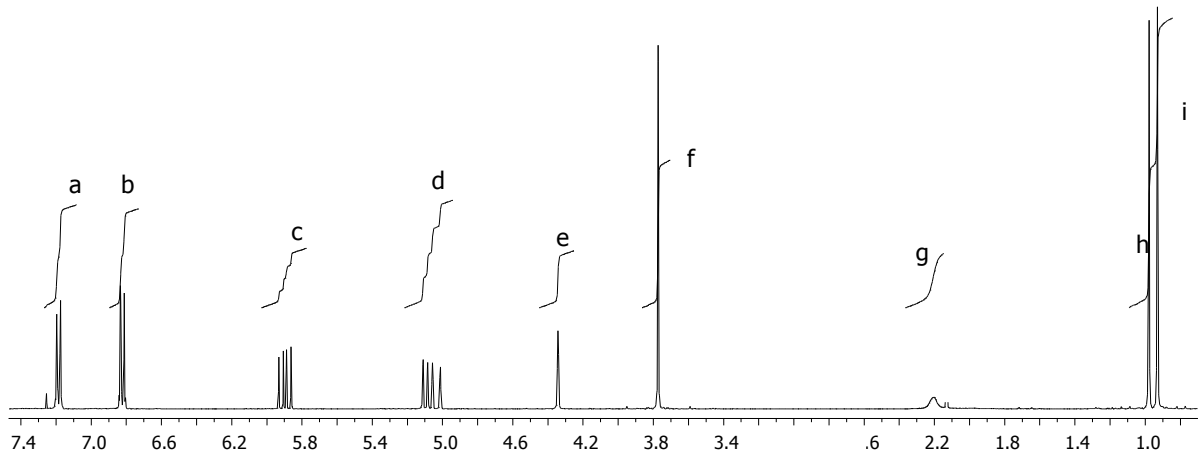
U 28

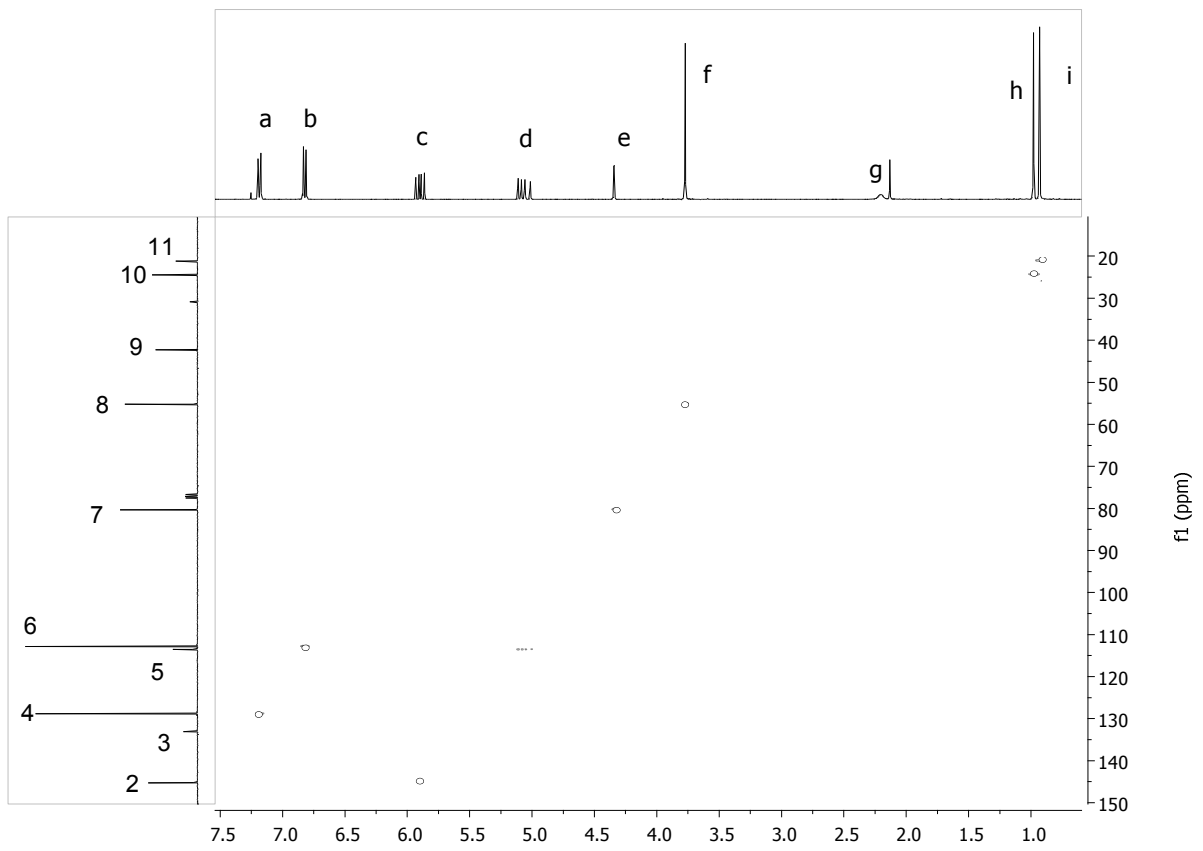
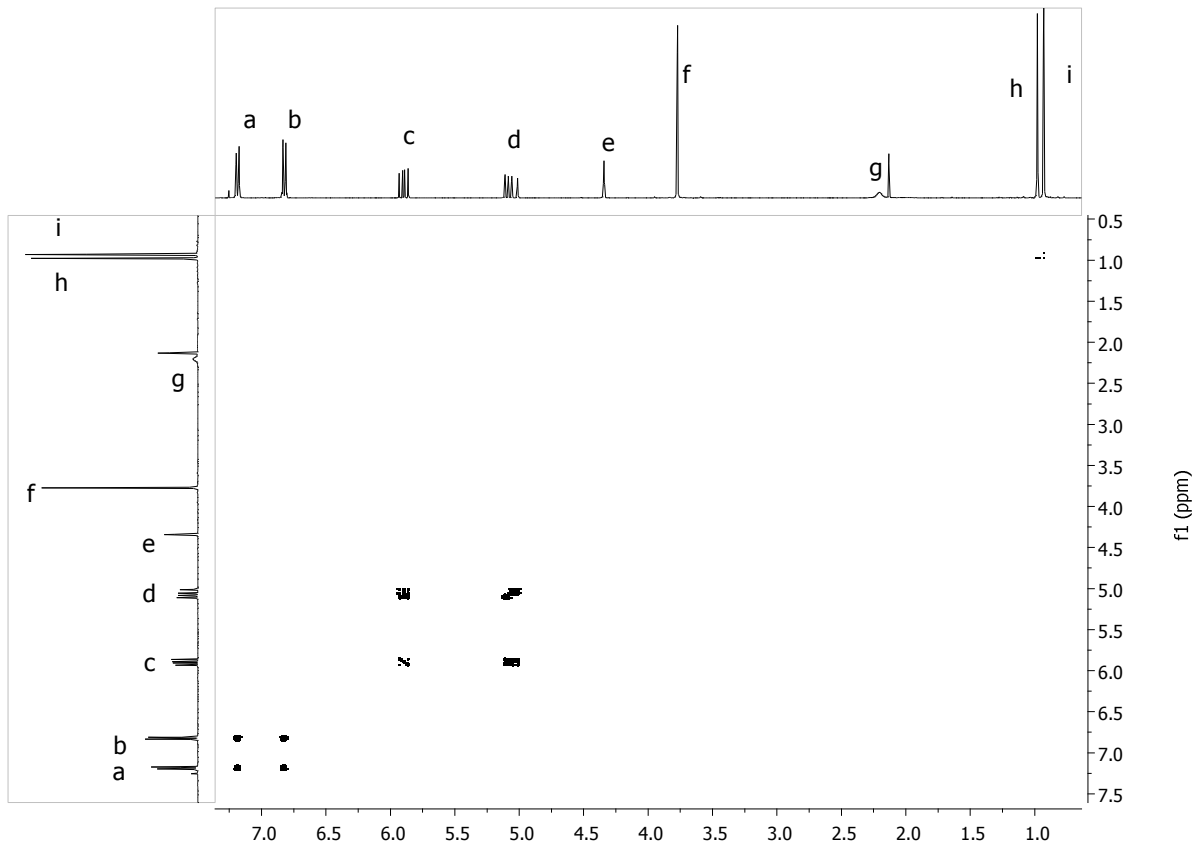


1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (3 P)
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, um Frage 3 beantworten zu können.
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)
4. Ordnen Sie alle Signale zu ( $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$ ). (4 P)
5. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbare Kopplung der C-Atome 1, 2, 3, 4, 5 und 6 in Ihr gefundenes Molekül ein. Verwenden Sie Farbstifte (nicht rot!). Füllen Sie nachfolgende Tabelle aus. (4 P)

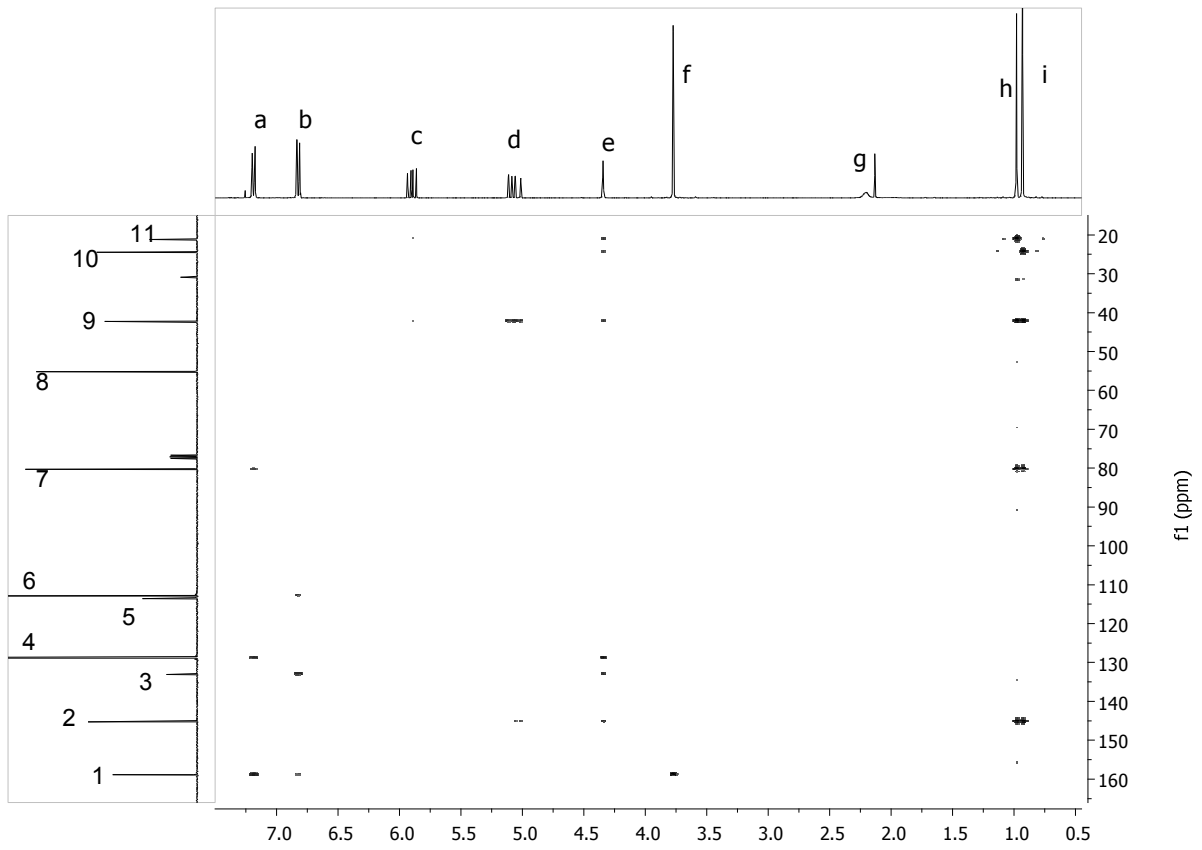
C-Atom	H-Atom	Kopplung
1	f	$^3J_{\text{CH}}$

usw.

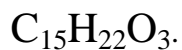








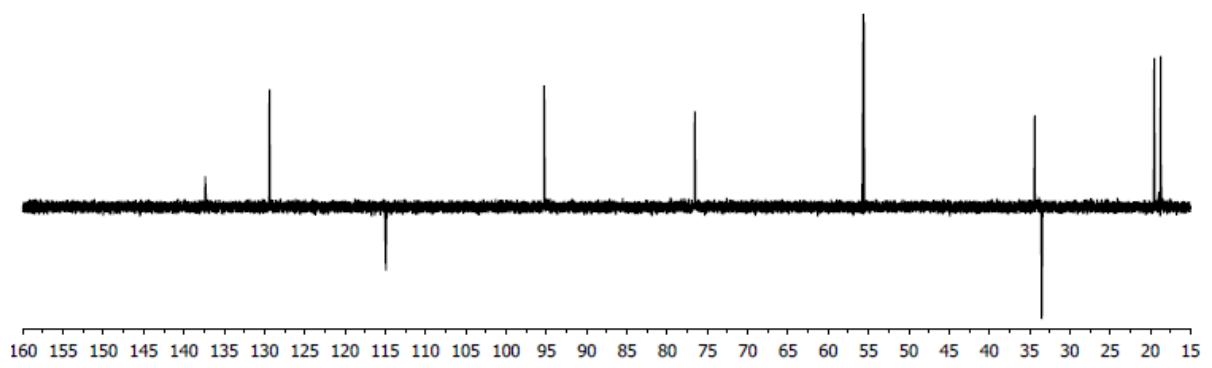
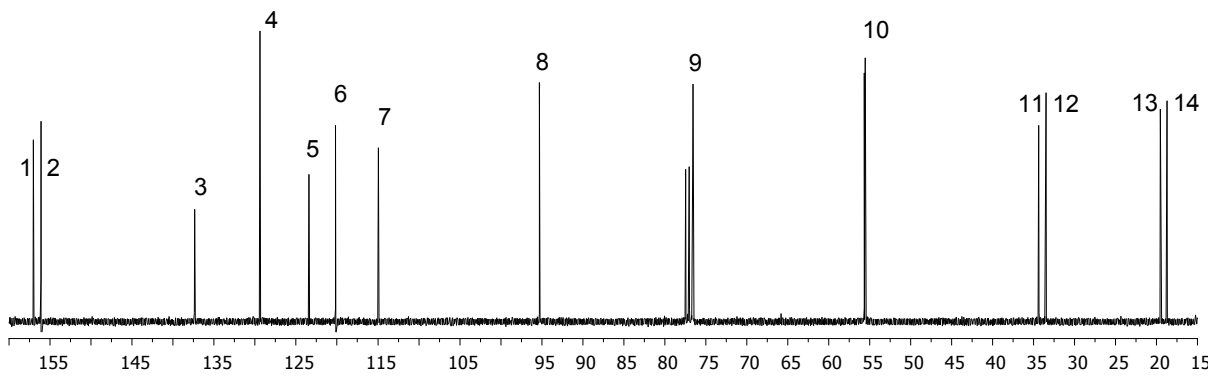
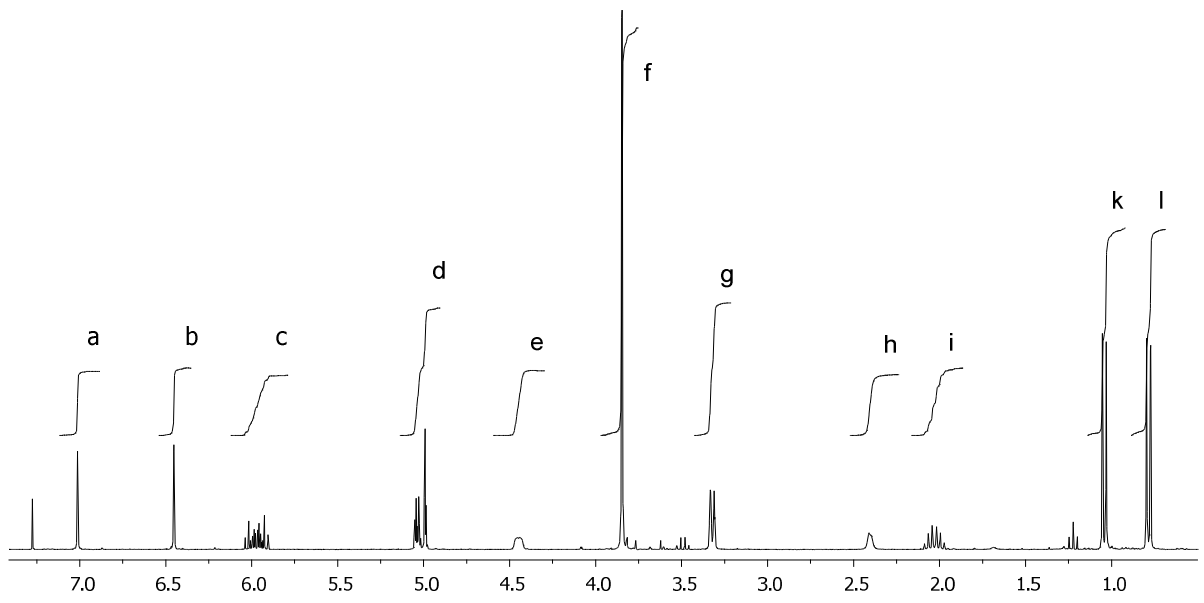
U 29

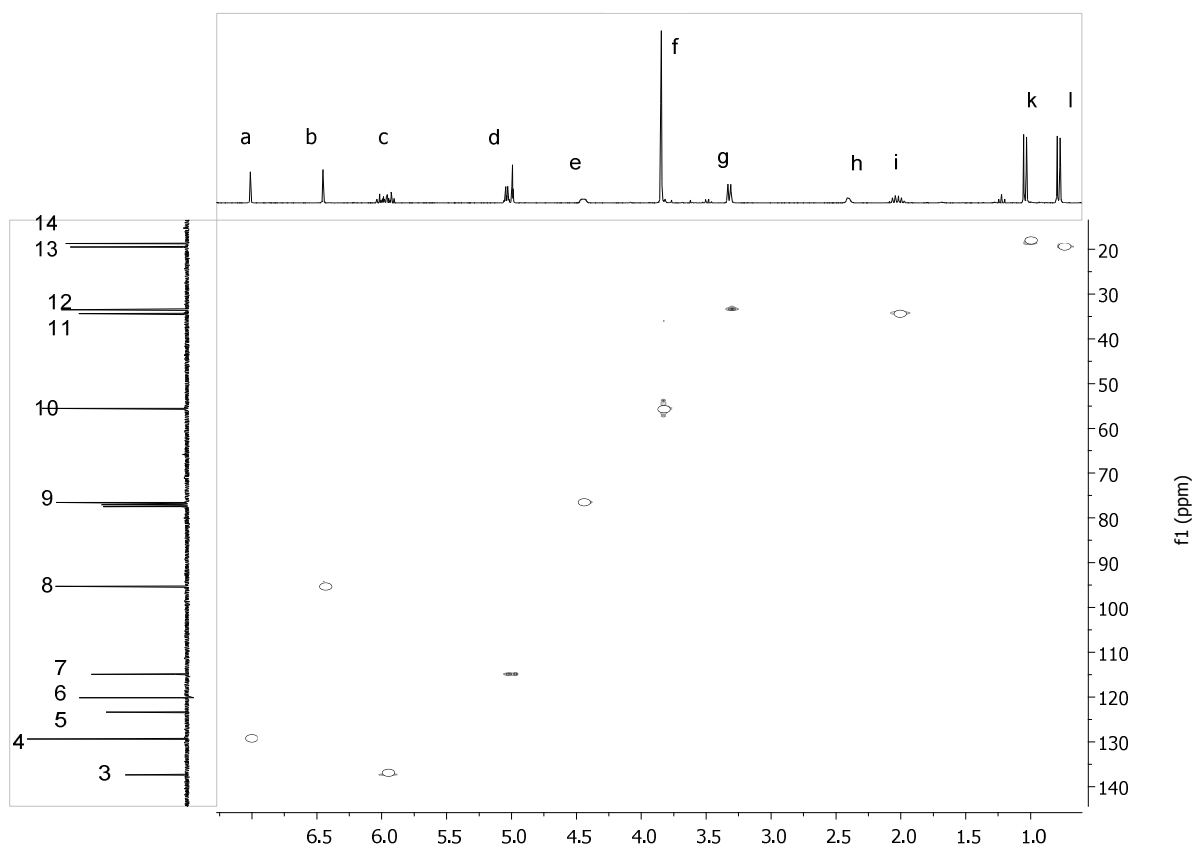
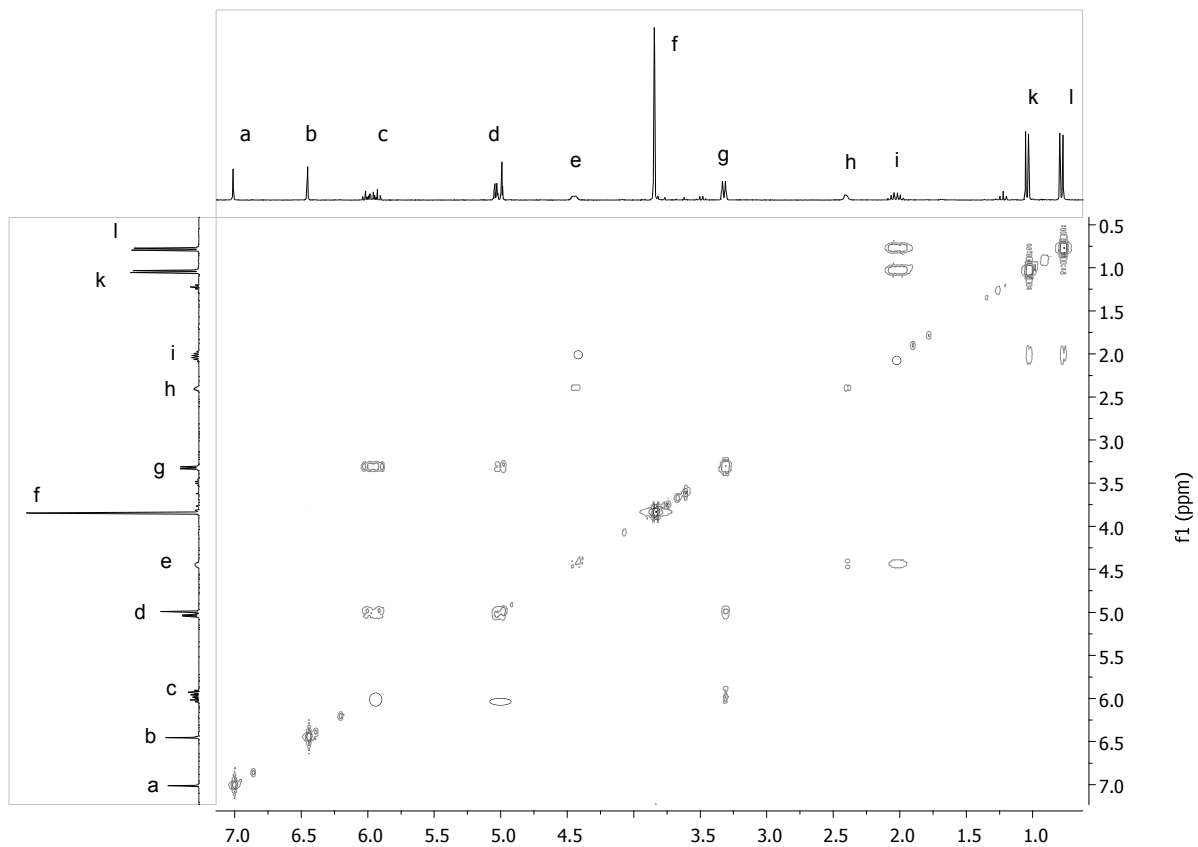


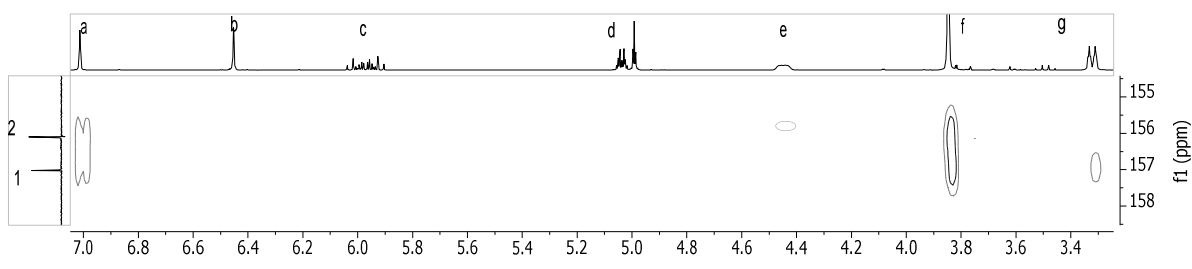
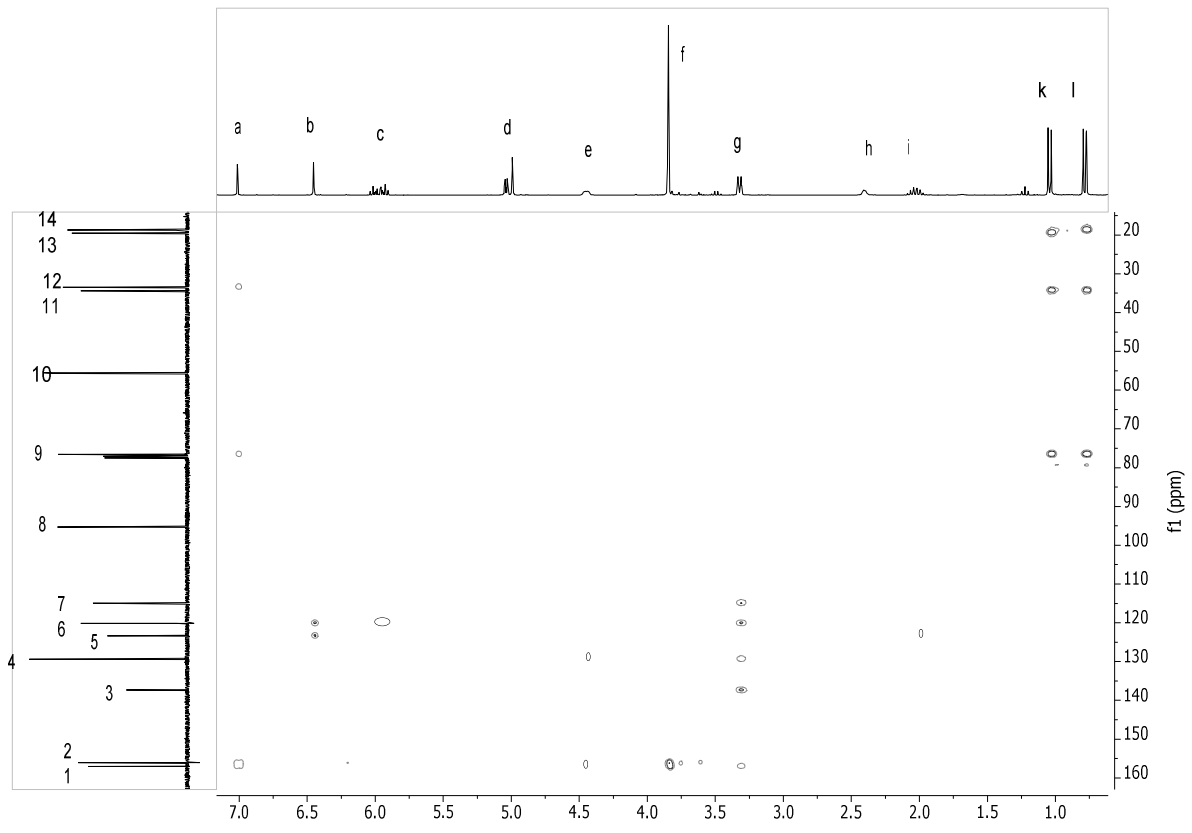
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren?  
Hilfestellungen:  
Schauen Sie im COSY, welche Protonen miteinander koppeln.  
Schauen Sie im HSQC, welche Protonen zu welchen Cs gehören.  
Welche C-Atome gehören zum Aromaten. Warum ist eines dieser C-  
Atome so stark Hochfeld-verschoben? (siehe Inkremententabelle)
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, um Frage 3 beantworten zu können.
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an.
4. Ordnen Sie alle Signale zu.
5. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbare Kopplung der C-Atome 1, 2, 5 und 6 in Ihr  
gefundenen Molekül ein. Verwenden Sie Farbstifte. Füllen Sie nachstehende Tabelle  
aus.

<b>13C</b>	<b>1H</b>	<b>J(C,H)</b>
<b>1</b>		<b>3 J</b>

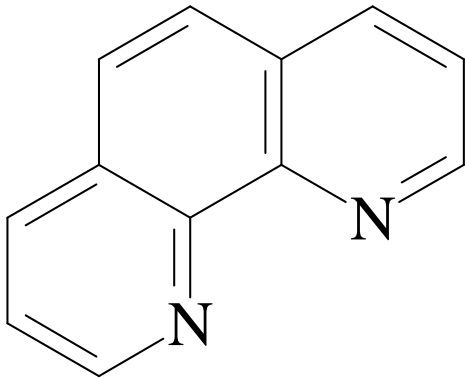
usw.



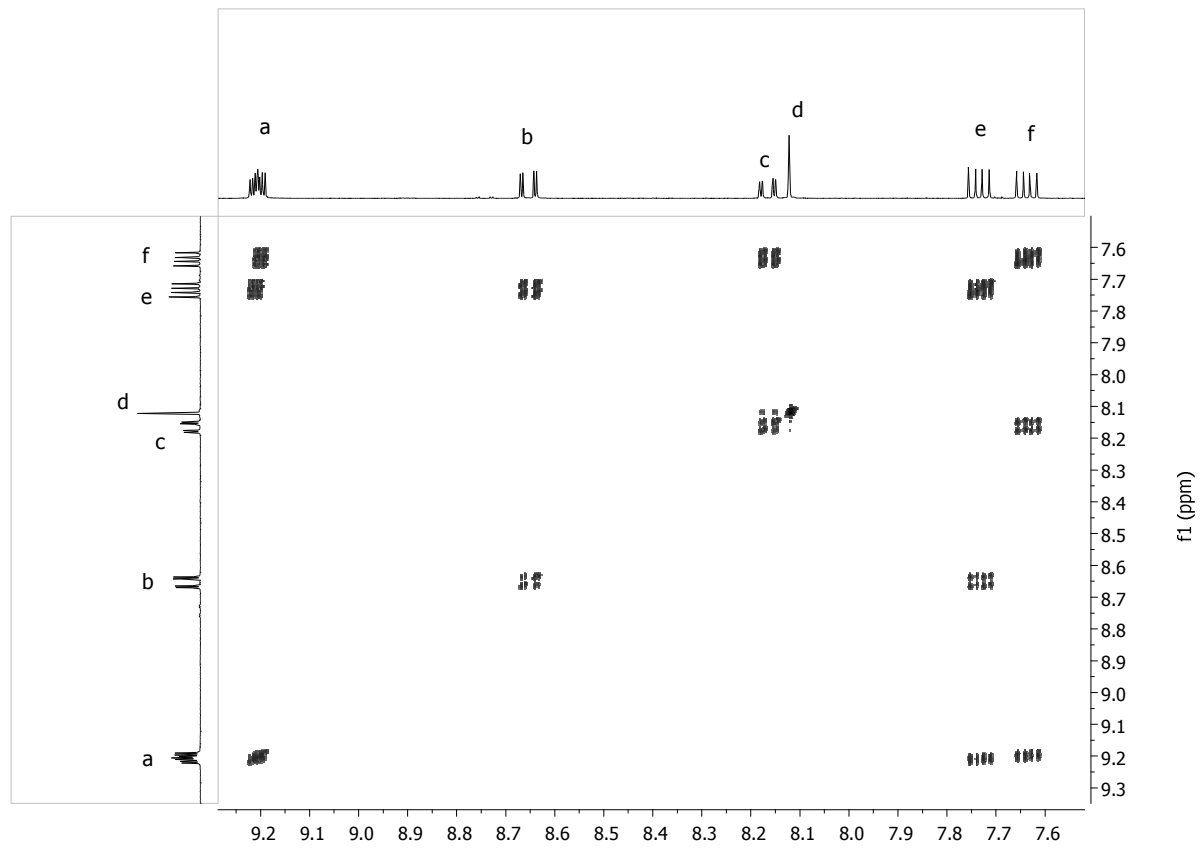
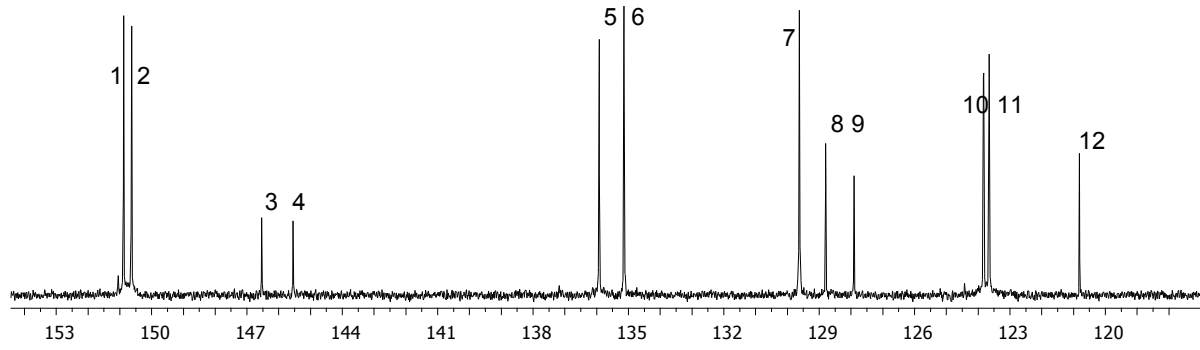
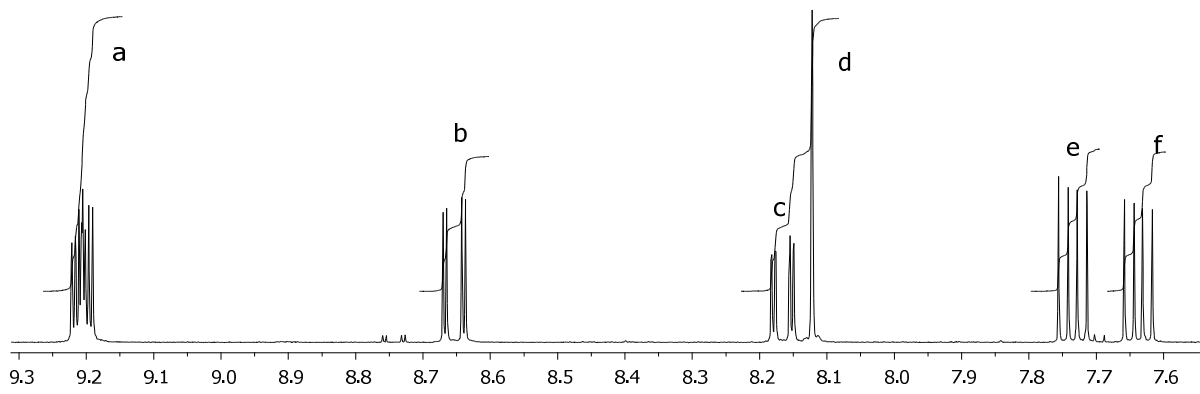


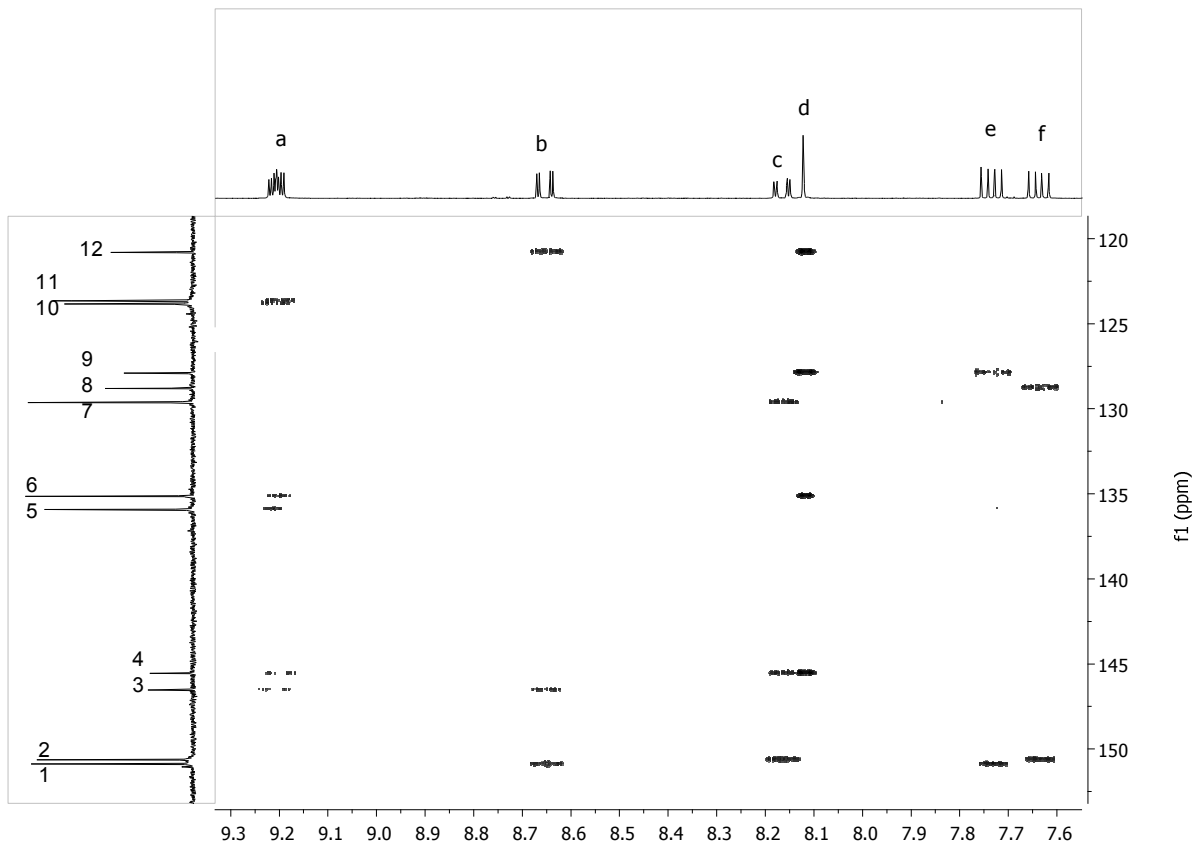
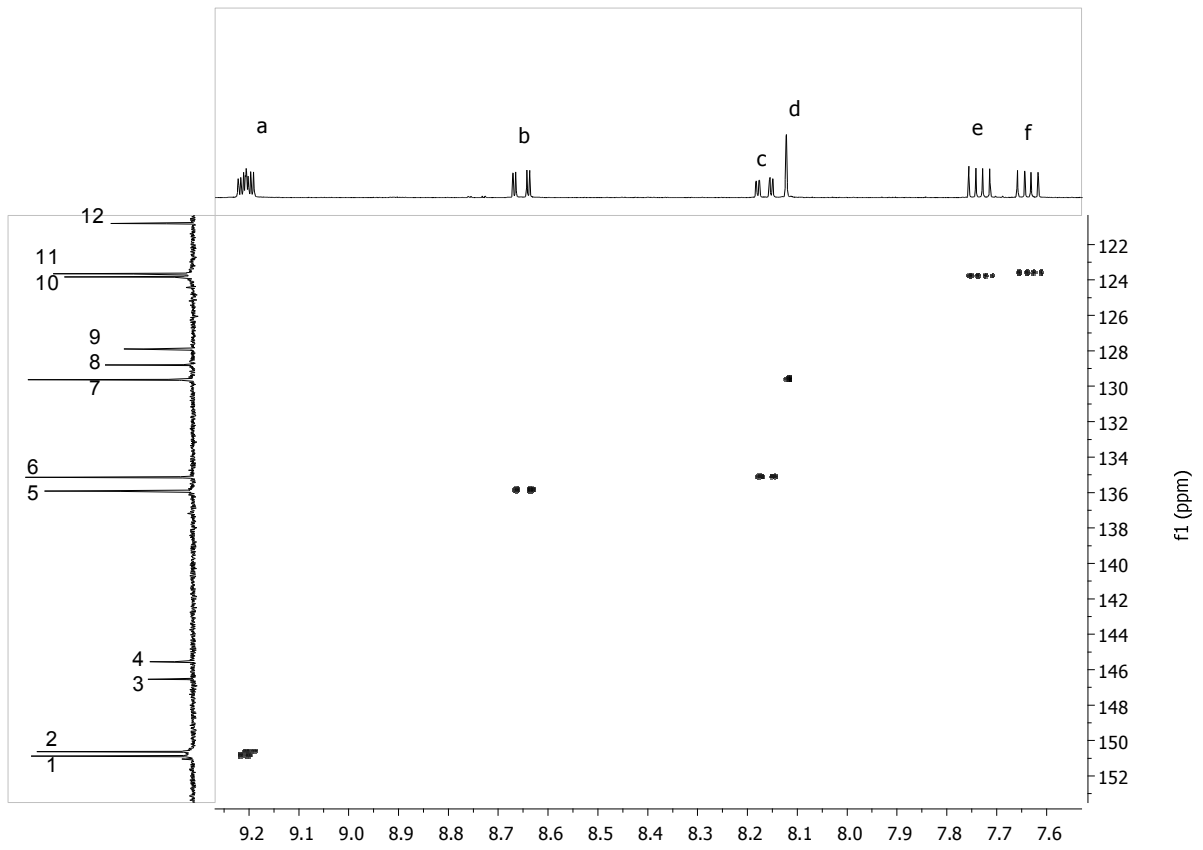


U30



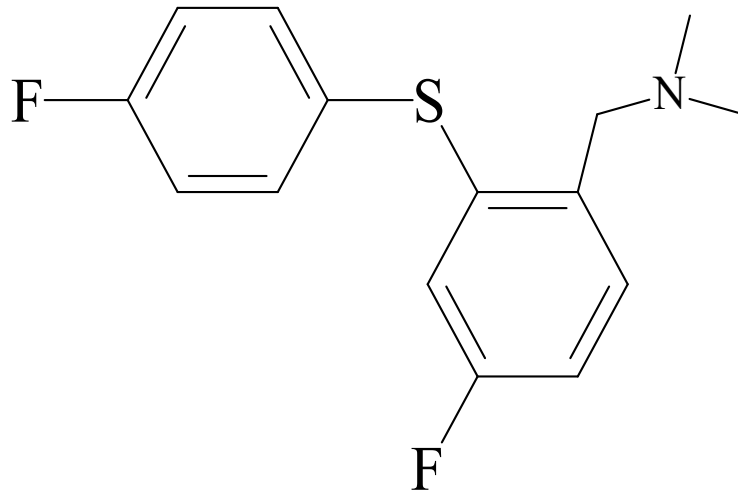
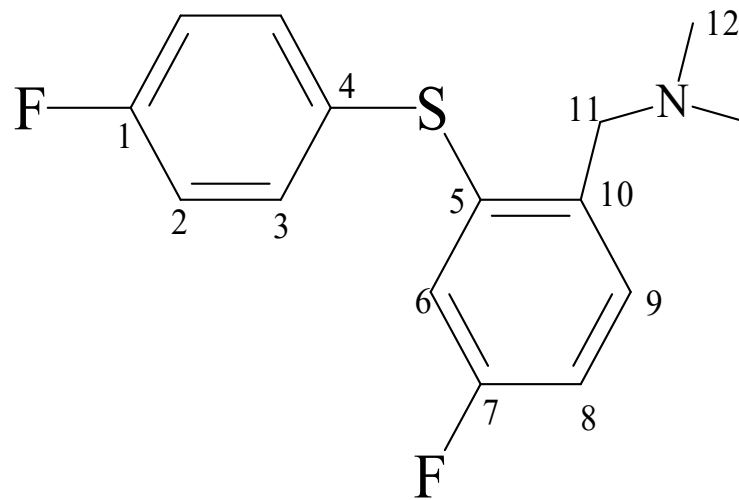
1. Bestimmen Sie, an welcher Stelle Br sitzt. (mit Begründung)
2. Ordnen Sie alle Signale zu.
3. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie für C-Atom 3, 4, 7, 8, 9 und 12 die im HMBC sichtbaren Kopplungen einzeichnen. Verwenden Sie Farbstifte.



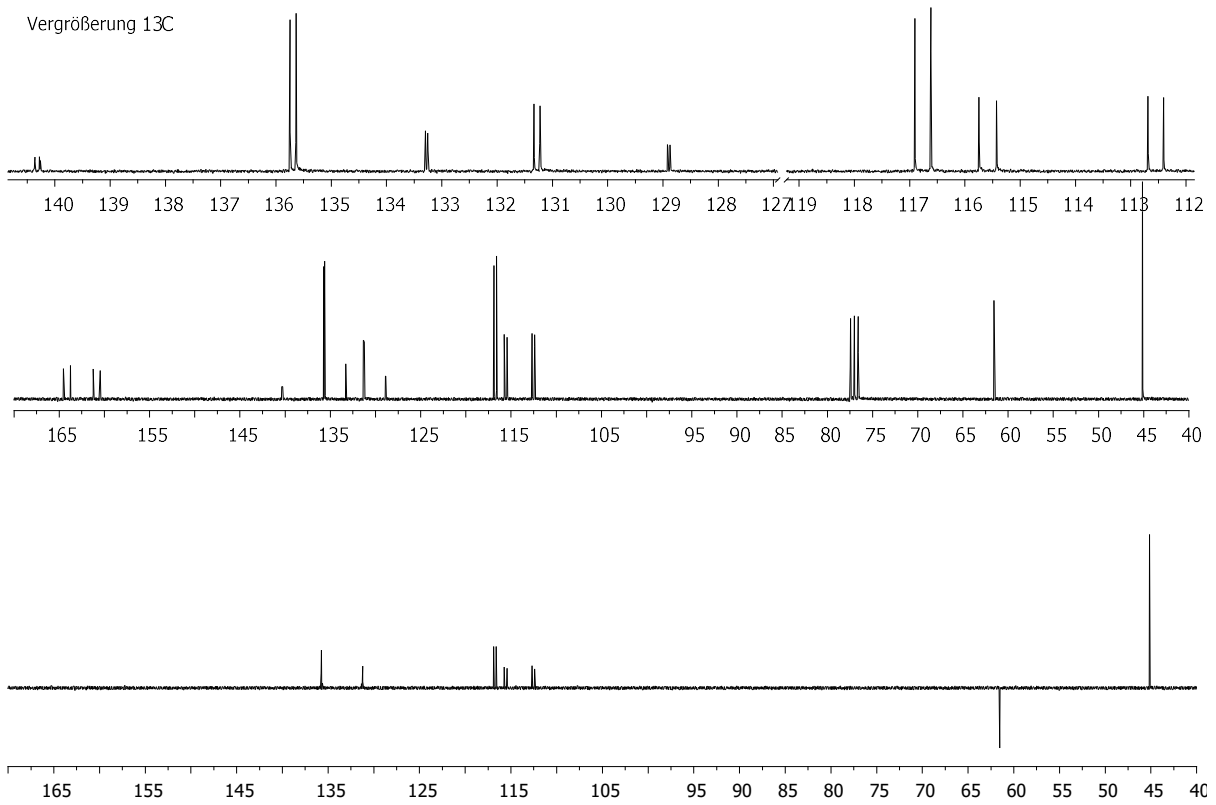
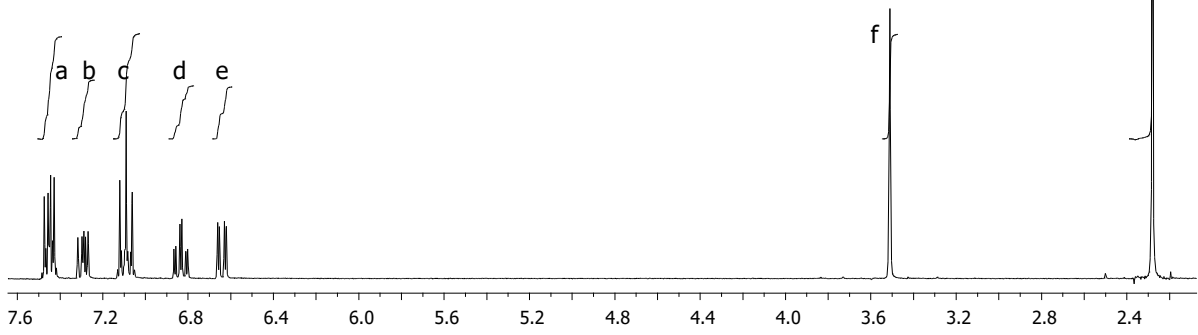
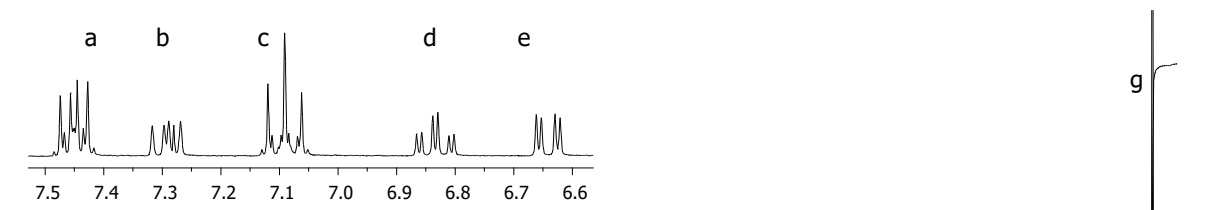


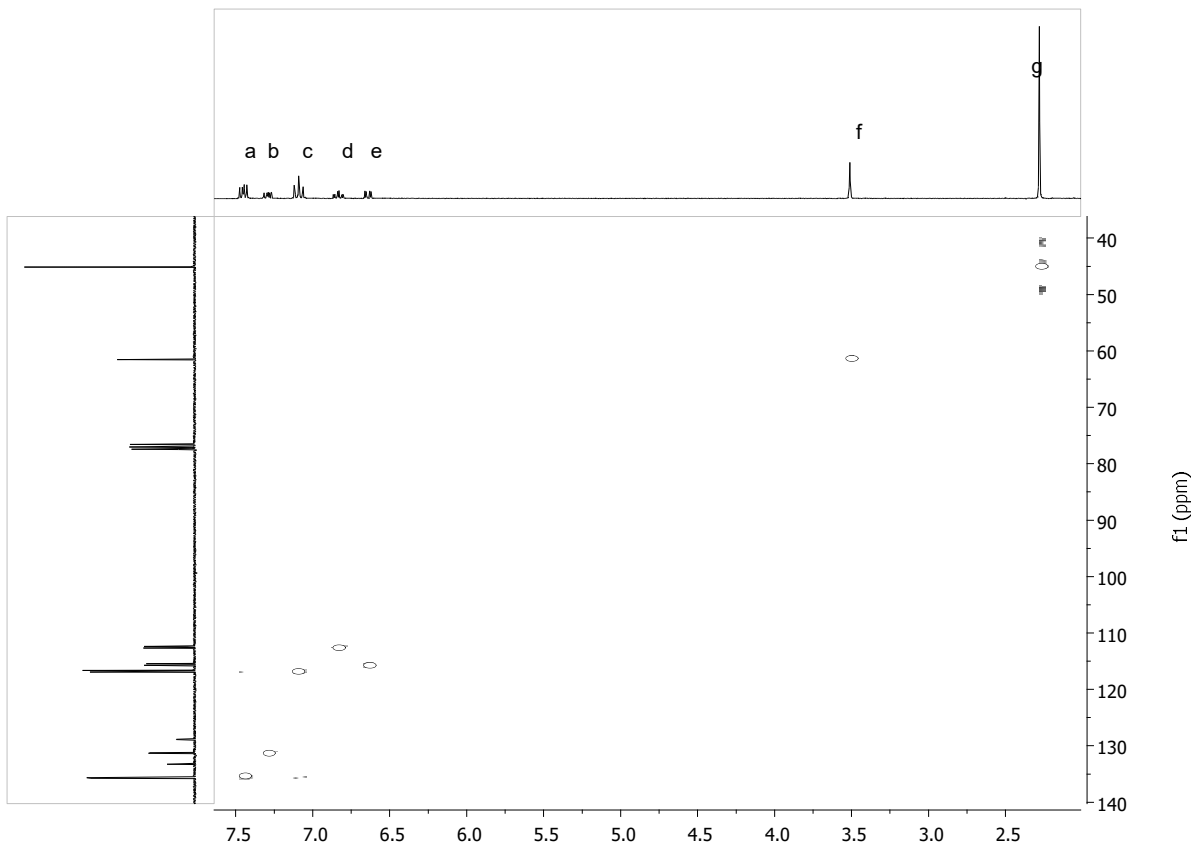
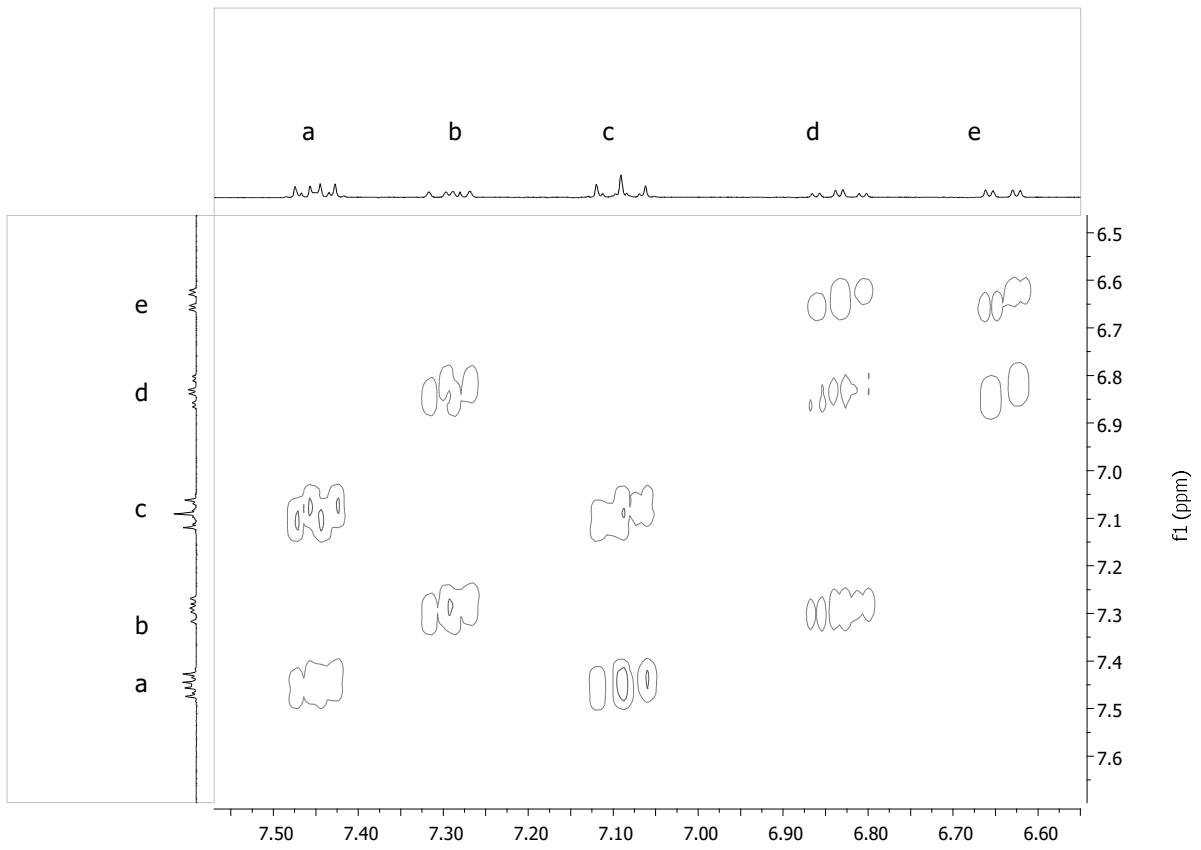


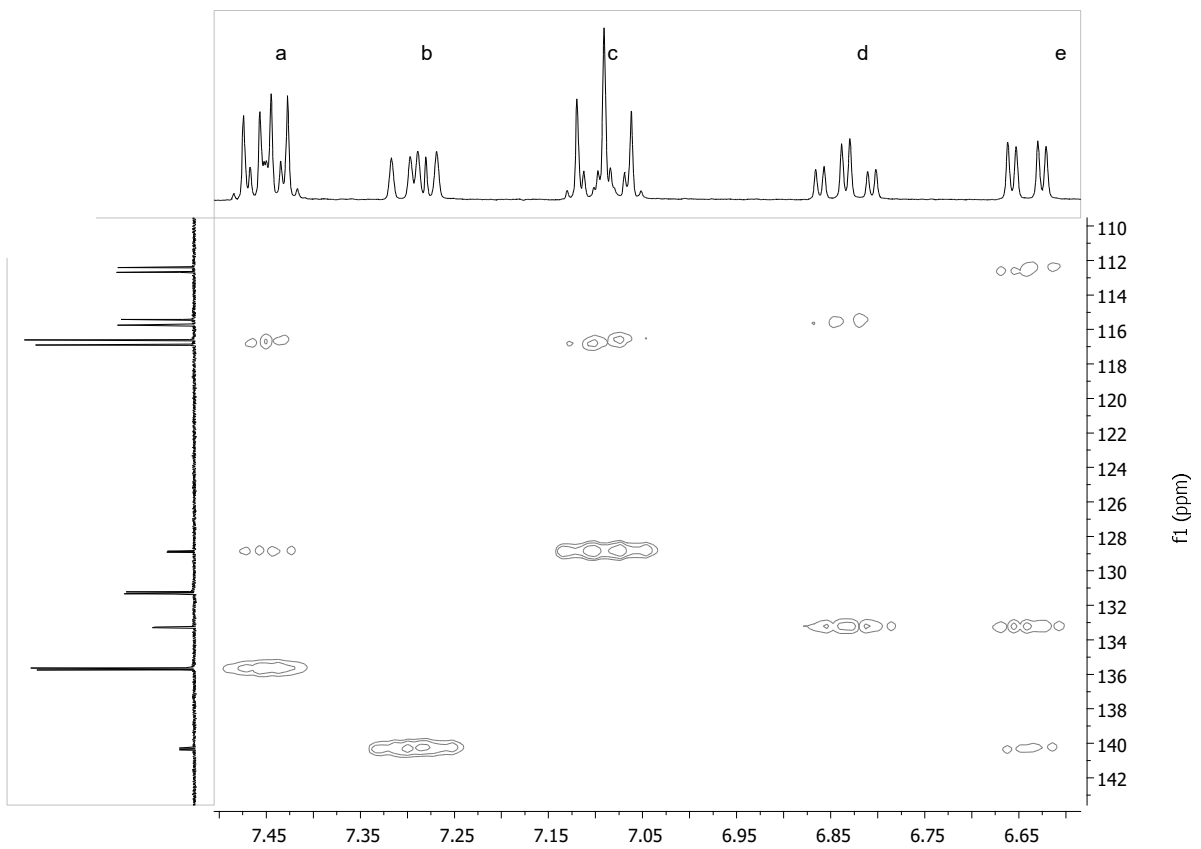
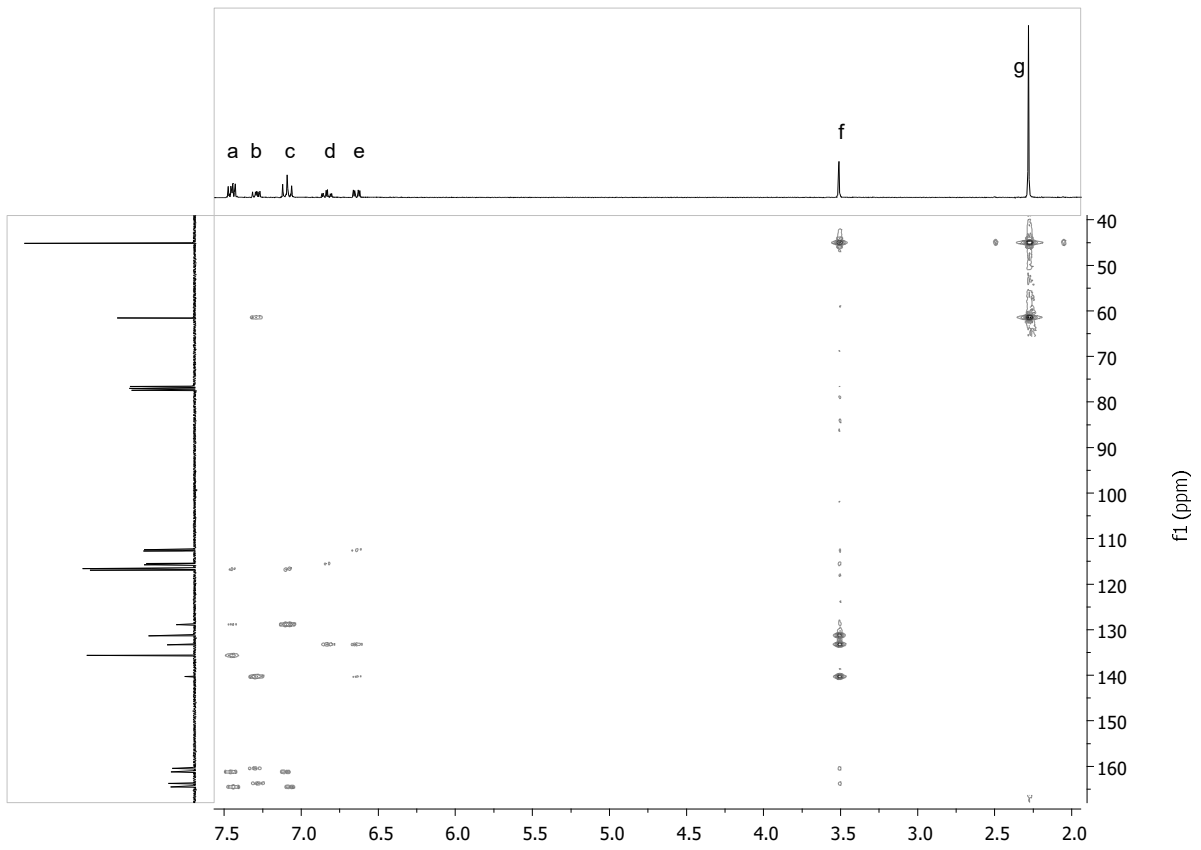
U31

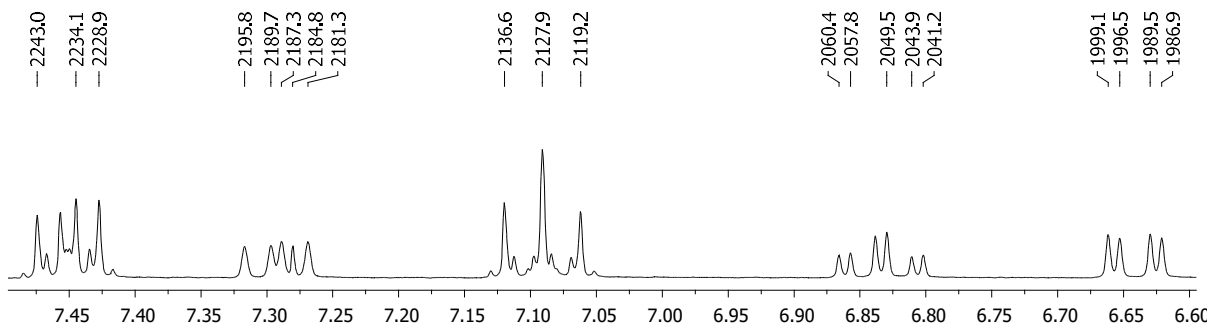


1. Ordnen Sie alle Signale zu.  
Für die  $^{13}\text{C}$ -Signale tragen Sie obige Zahlen in das  $^{13}\text{C}$ -Spektrum ein.  
Für die  $^1\text{H}$ -Signale tragen Sie wie üblich die Buchstaben in obiger Struktur ein. (6 P)
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die drei Protonen des rechten Aromaten.  
(letzte Seite)

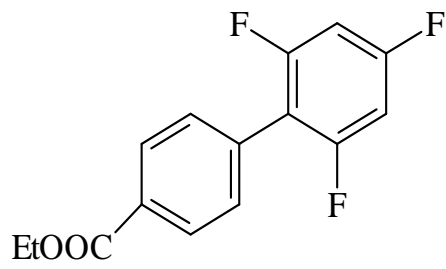






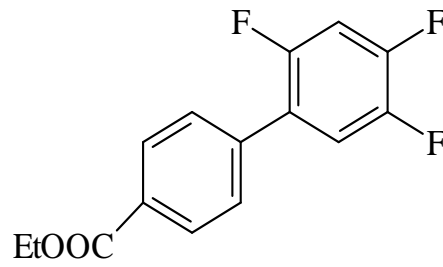


# U32



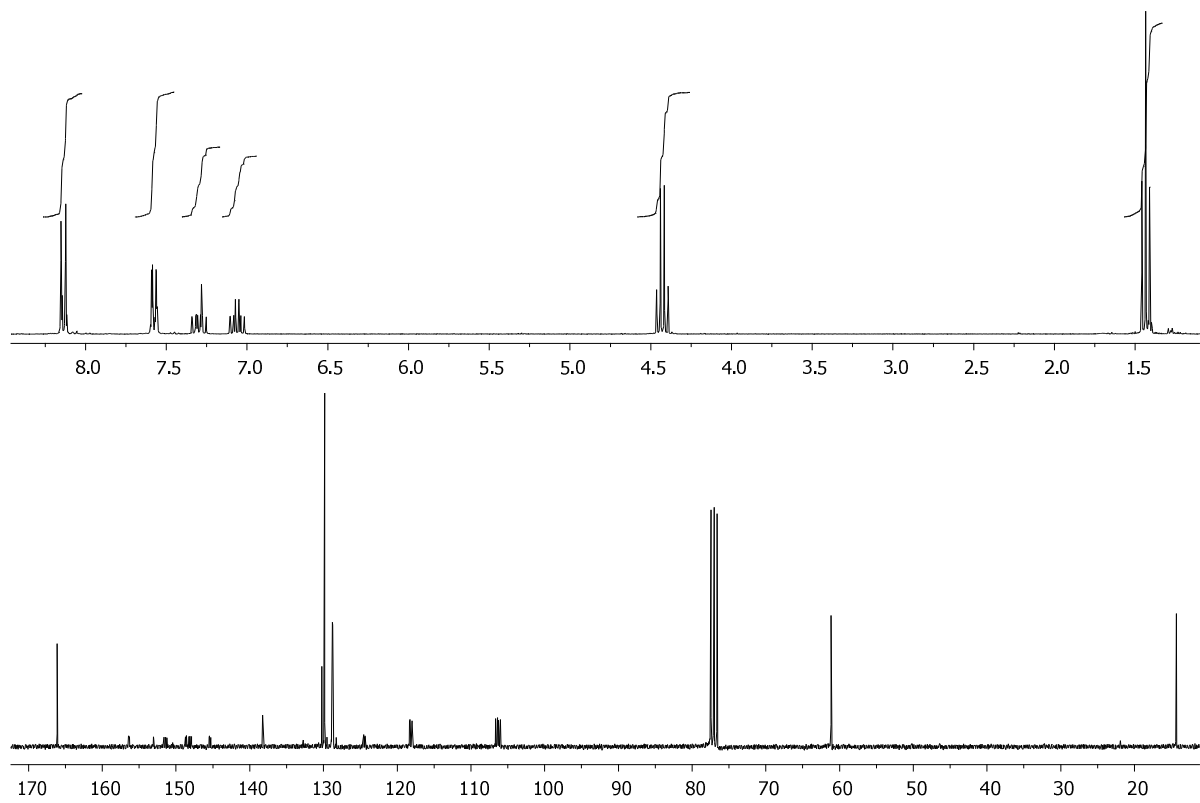
Struktur 1

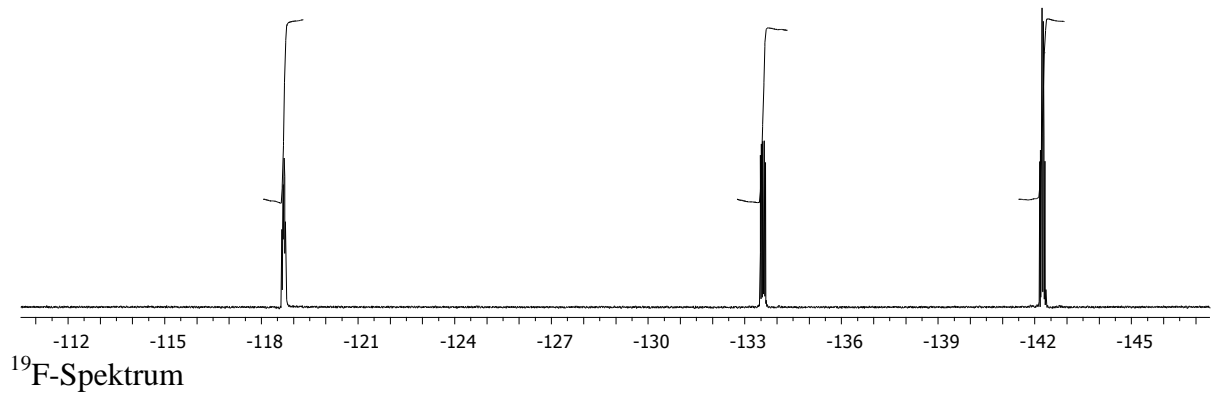
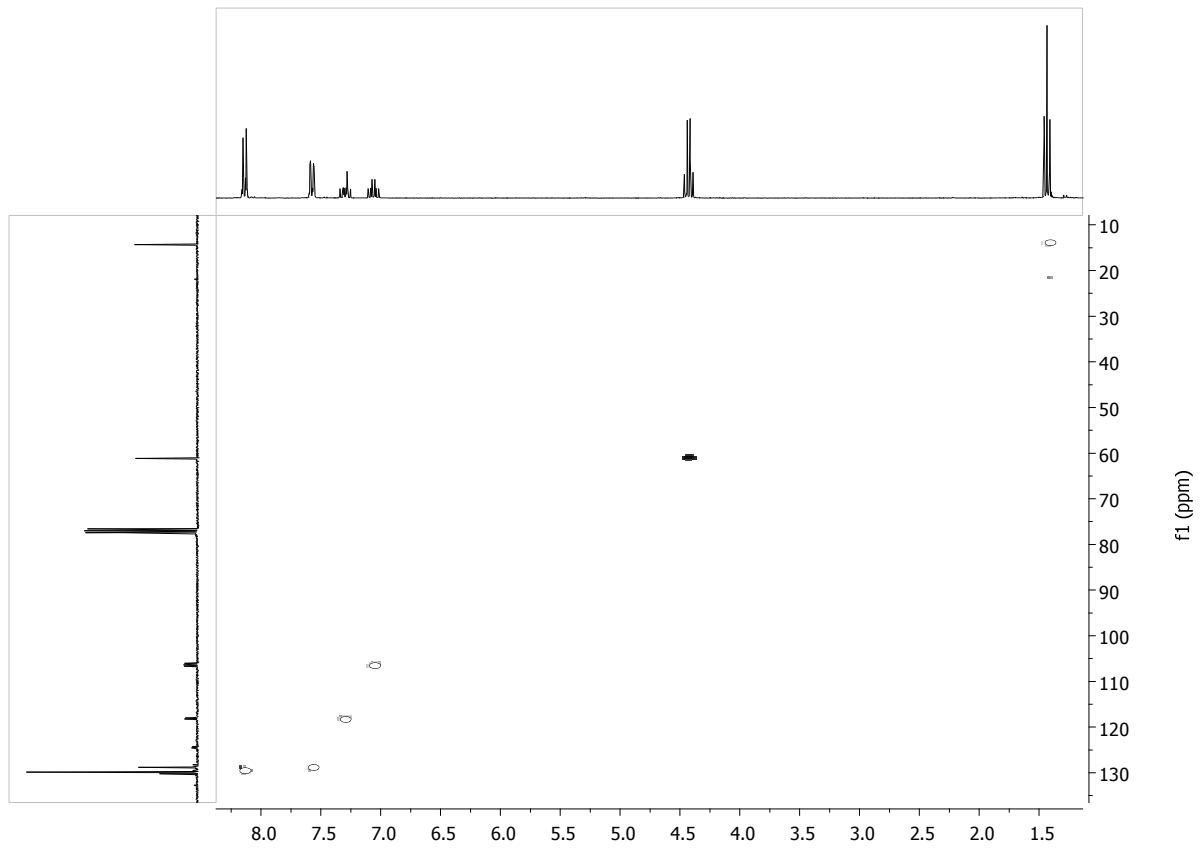
oder



Struktur 2

1. Um welche Substanz handelt es sich? Geben Sie mind. 3 Gründe an, warum sich für Struktur 1 oder 2 entschieden haben.





$^{19}\text{F}$ -Spektrum