WS 2004/2005 Name:		1
--------------------	--	---

### Spektroskopie und Beugung I (NMR) WS 2004/2005 Klausur

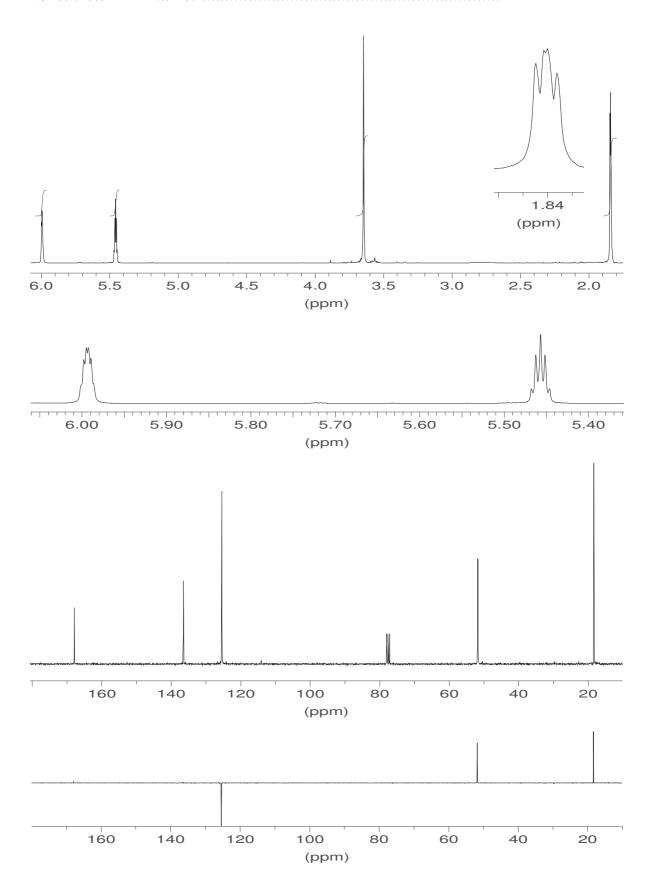
15.12.2004

# Frage 1: (5 Punkte)

Auf Seite 2 sir	nd die NMR-	Spektren ein	er Substanz	mit folgender	Summenformel	abgebildet
$C_5H_8O_2$						

- 1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des <sup>1</sup>H- , <sup>13</sup>C- und DEPT-Spektren? (3 P)
- 2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

3. Geben Sie das Spinsystem der Protonen dieser Verbindung an. (1 P)



#### Frage 2: (10 Punkte)

Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Substanz mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{18}H_{24}NCl$ 

$$R_3$$
 $R_1$ 
 $R_2$ 

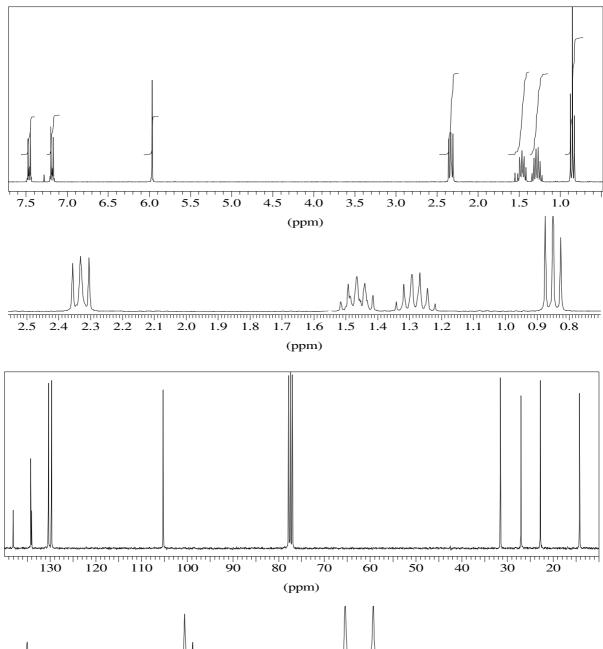
Hinweis:

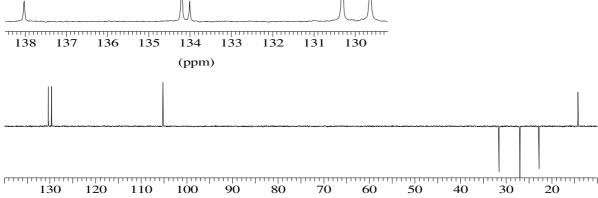
ist enthalten!!

1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des <sup>1</sup>H- , <sup>13</sup>C-,DEPT- und Cosy-Spektren? (4 P)

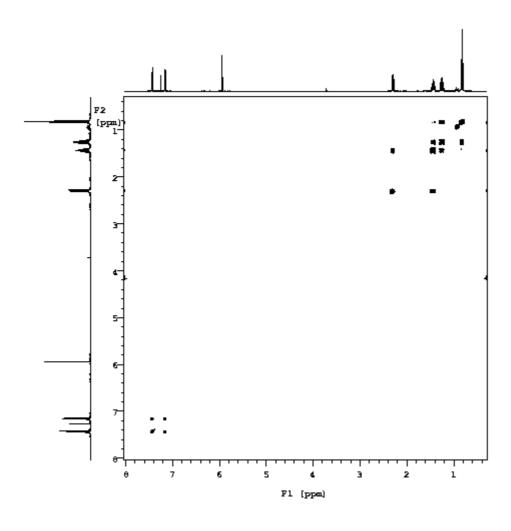
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

Weiter auf Seite 6

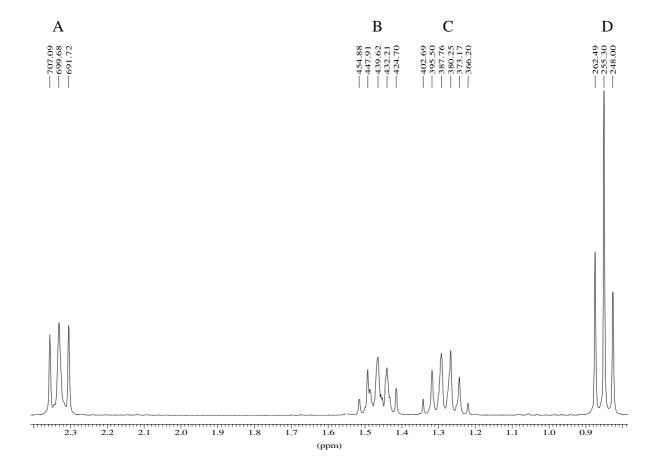




(ppm)



3. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die aliphatischen Protonen. Bezeichnen Sie die Aufspaltungen mit den jeweiligen Kopplungenkonstanten. (z. B. J<sub>AB</sub>, J<sub>AC</sub> usw.) (4 P)



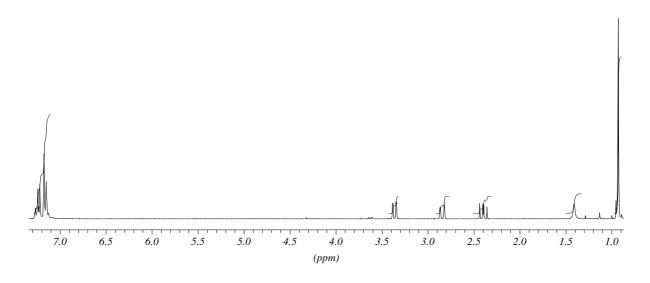
WS 2004/2005	Name:	7	7

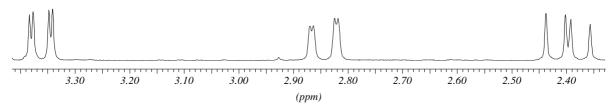
#### Frage 3: (12 Punkte)

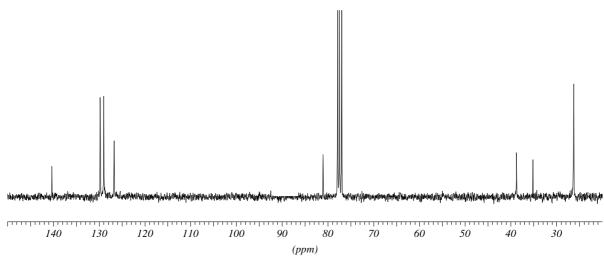
Auf Seite 8 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{12}H_{18}O$ .

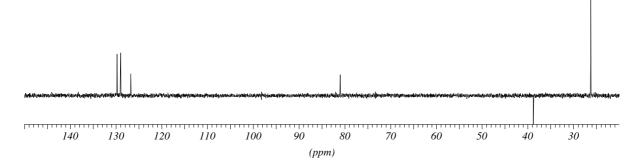
- 1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des <sup>1</sup>H-, <sup>13</sup>C- und DEPT-Spektren? (4 P)
- 2. Geben Sie zwei sinnvolle Strukturen an. (2 P)

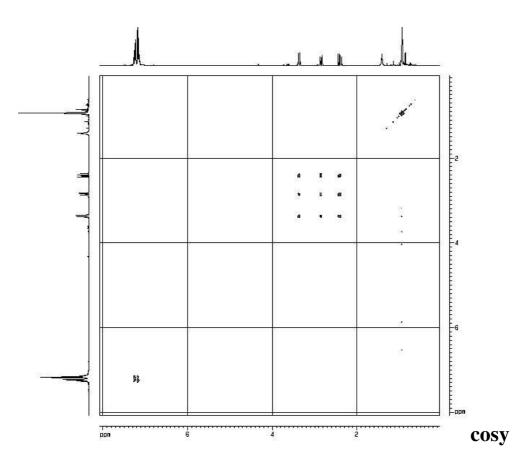
3. Entscheiden Sie sich mit Hilfe der 2D Spektren für eine Struktur. Begründen Sie Ihre Entscheidung, indem Sie mind. 6 relevante sichtbare C-H-Kopplungen in Ihre Struktur mit Pfeilen einzeichnen und im HMBC-Spektrum mit einem Kreis markieren. (6 P)

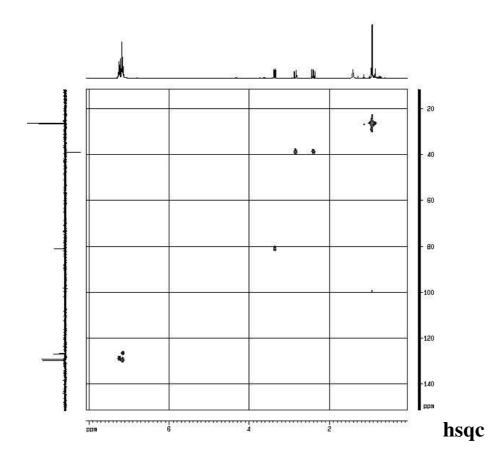


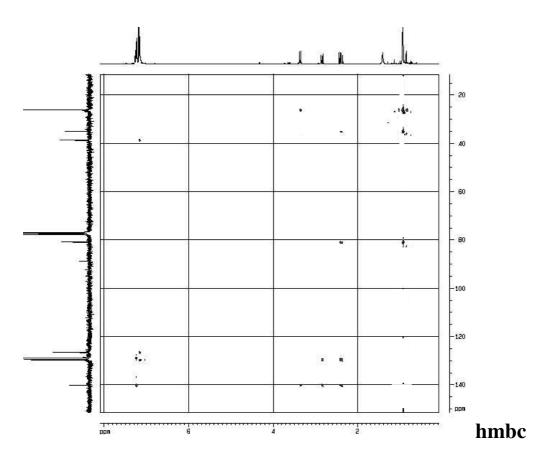












# Frage 4: (13 Punkte)

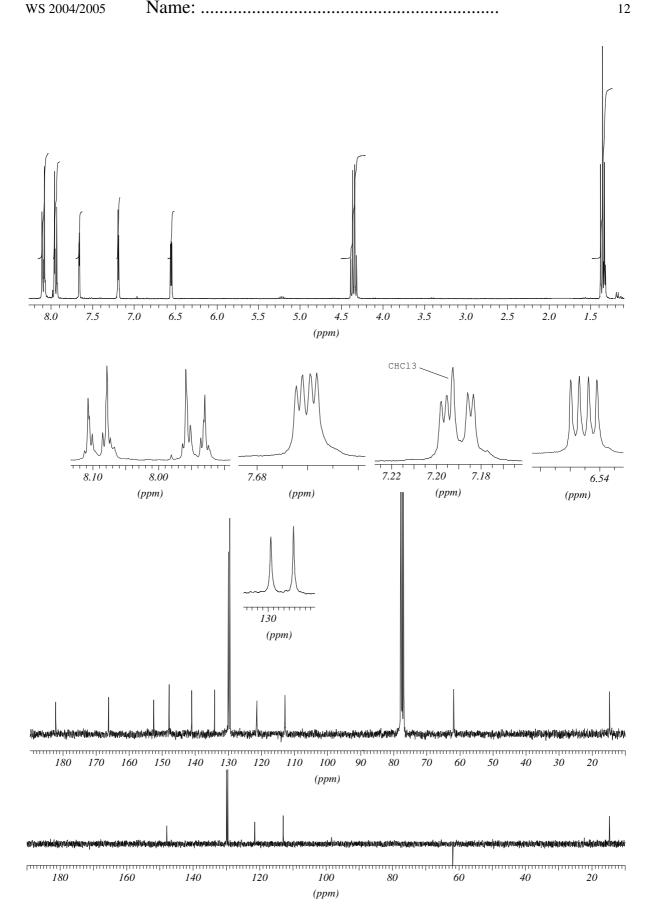
Auf Seite 12 ff sind die NMR-Spektren folgender Verbindung gegeben

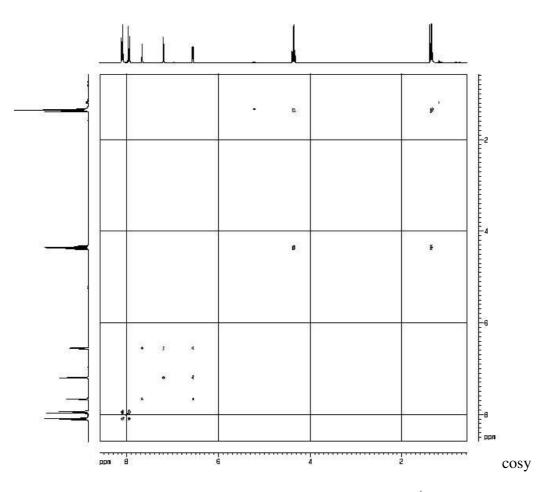
$$\bigcup_{O} \bigcup_{O} \bigcup_{O}$$

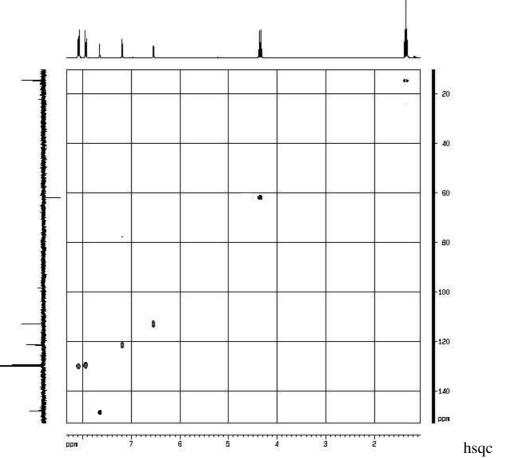
$$\bigcup_{O} \bigcup_{O} \bigcup_{O}$$

1. Ordnen Sie alle Signale (<sup>1</sup>H und <sup>13</sup>C) zu (8 P)

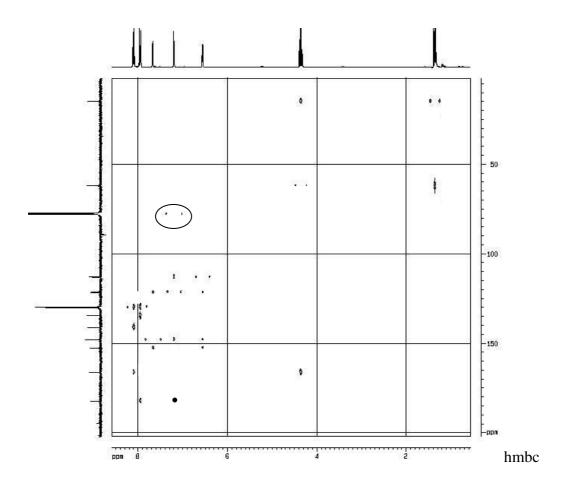
Name: WS 2004/2005







WS 2004/2005



2. Geben Sie die im HMBC sichtbaren 1J- und 2J-Kopplungen in folgender Tabelle an. (4 P) n=1,2,3,4

<sup>13</sup> C	<sup>1</sup> H	$^{ m n}J_{ m CH}$	<sup>13</sup> C	<sup>1</sup> H	$^{ m n}  m J_{ m CH}$

3. Was bedeutet die mit Kreis gekennzeichnete Kopplung im HMBC-Spektrum? (1 P)

WS 2004/2005	Name:	15
--------------	-------	----

## Frage 5: (10 Punkte)

1. Geben Sie je ein Beispiel für ein (2 P)

AX-System AX<sub>2</sub>-System

AX<sub>3</sub>-System ABC-System

2. Welche Signale liegen rechts im Spektrum? (1 P)

Signale bei: Höhere Felder Niedrige Felder

Höhere Frequenzen Niedrige Frequenz

3. Warum sind Signale von protonierten C-Atomen größer als die von quartären C-Atomen? Geben Sie 2 Gründe an. (2 P)

4. Folgende Verbindung ist gegeben:

$$\bigvee_{F}^{O}$$

Berechnen Sie soweit möglich die <sup>13</sup>C-Verscheibungen mit Hilfe der Inkrement-Tabellen. a) (1 P)

Zeichnen Sie das <sup>13</sup>C(<sup>1</sup>H(entkoppelt))-Spektrum (1 P) b)

Zeichnen Sie das <sup>13</sup>C(<sup>1</sup>H(gekoppelt))-Spektrum (1 P) c)

Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel (Protonen) (2 P) d)