WS 2007 Name ……..

Spektroskopie und Beugung I (NMR)
WS 2007/08 Nachholklausur

11.12.2007

Frage 1: (9 Punkte)

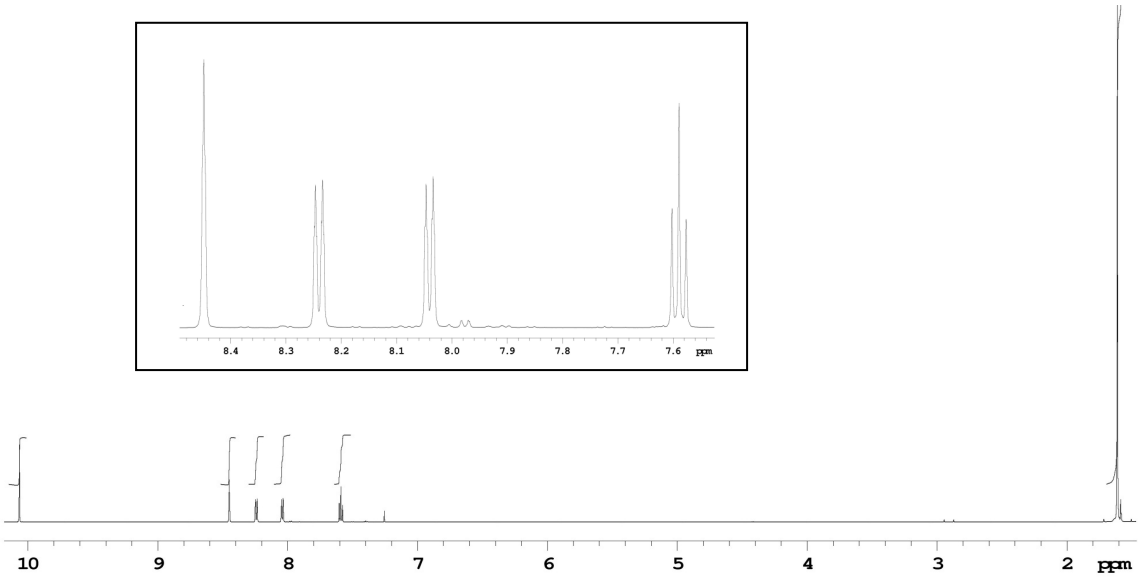
Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{12}H_{14}O_3$.

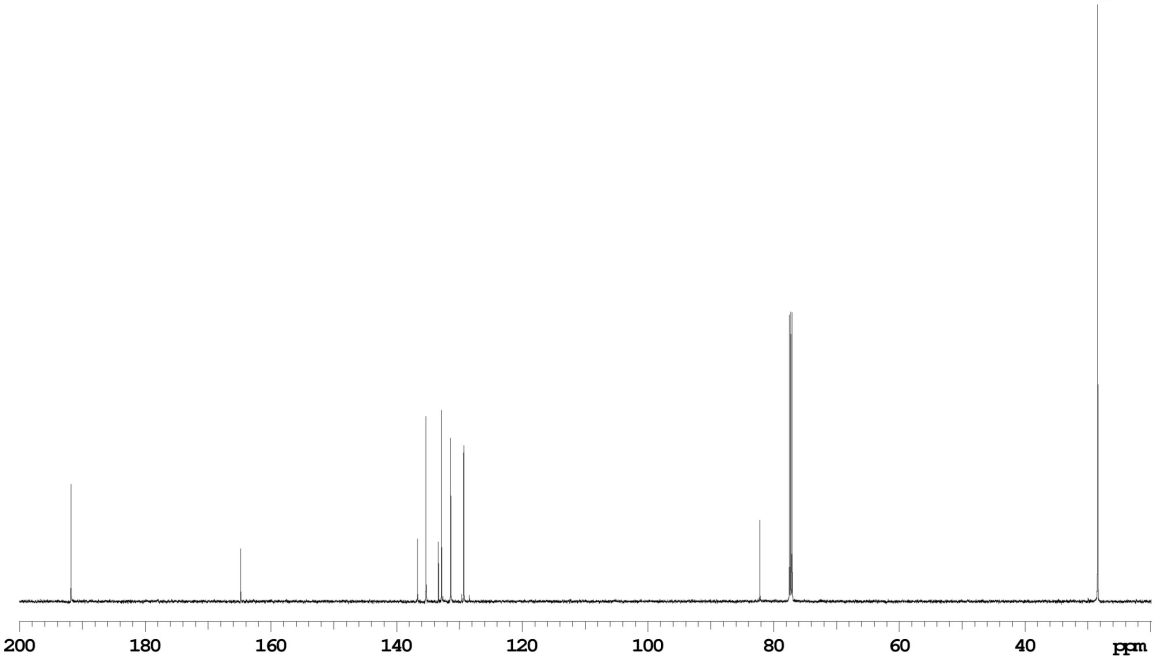
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des ^{1}H- , ^{13}C- und DEPT-Spektren? (4 P)

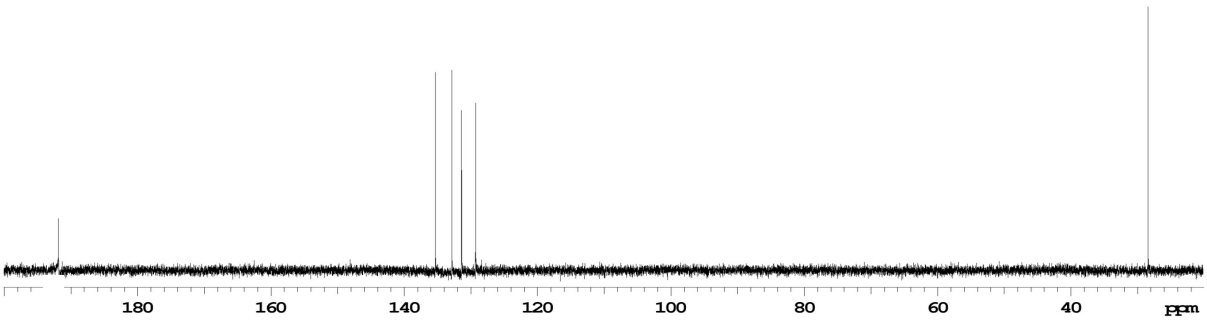
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

3. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für alle arom. Protonen incl. allen Fernkopplungen . (4 P)

8.4
8.3
8.2
8.1
8.0
7.9
7.8
7.7
7.6
ppm


10
9
8
7
6
5
4
3
2
ppm


200
180
160
140
120
100
80
60
40
ppm


180
160
140
120
100
80
60
40
ppm

Frage 2: (8 Punkte)

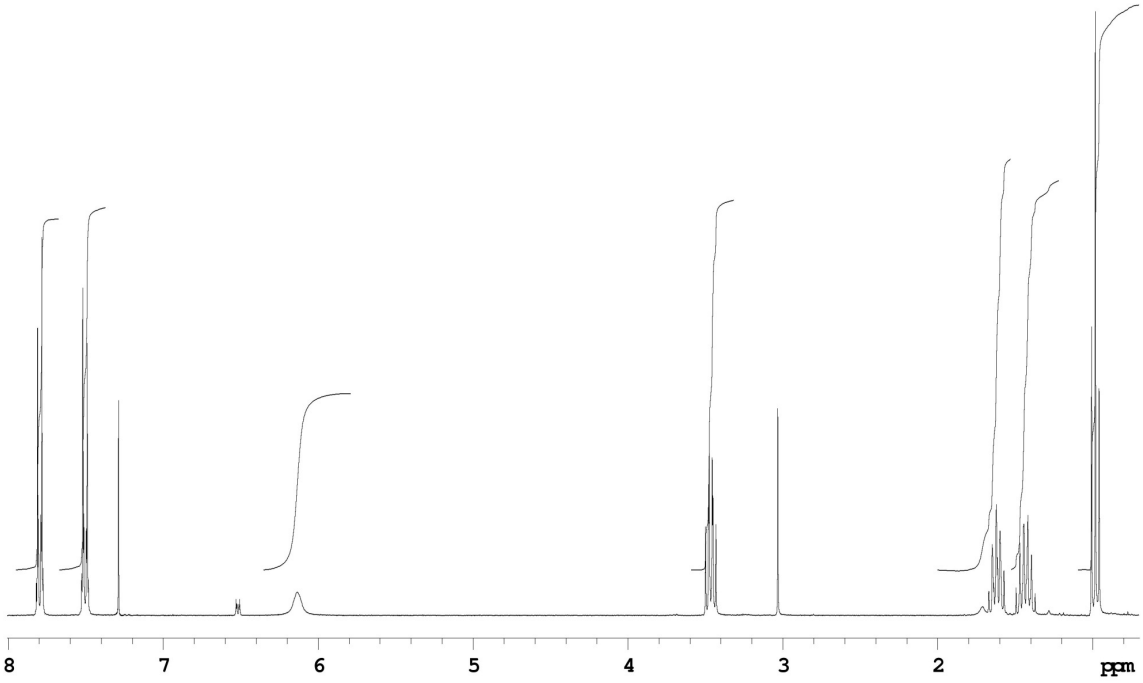
Auf Seite 4 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{11}H_{14}INO$.

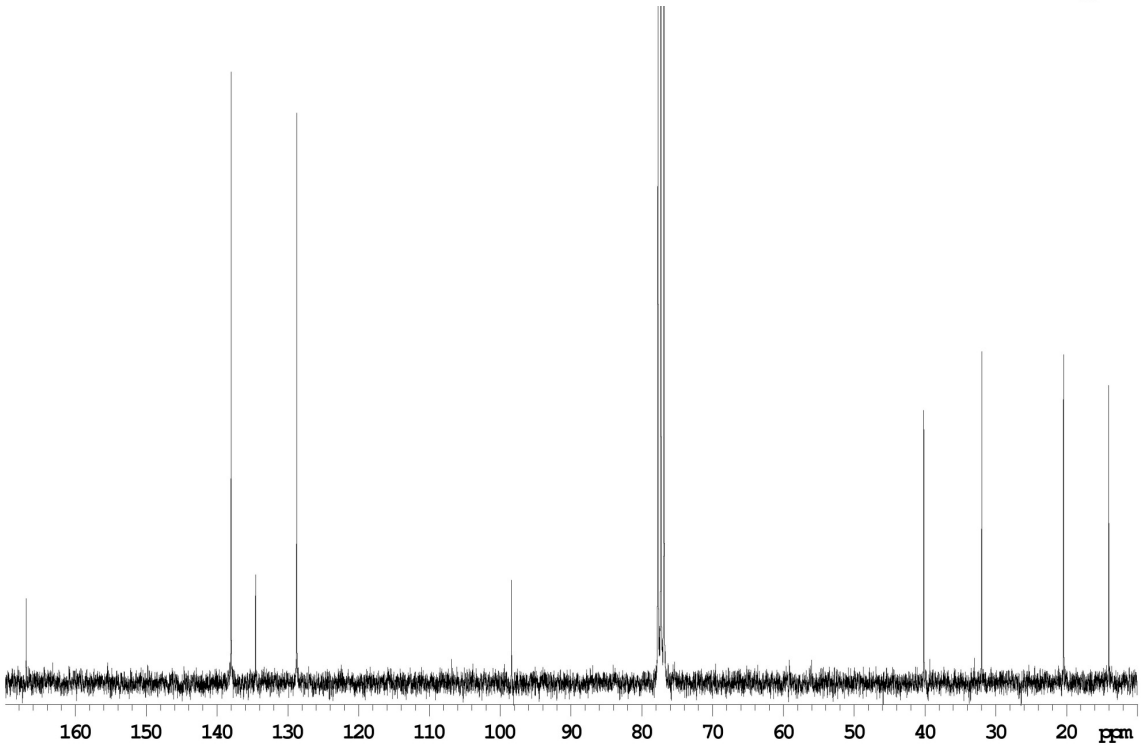
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund des ^{1}H- , ^{13}C- und DEPT-Spektren? (3 P)

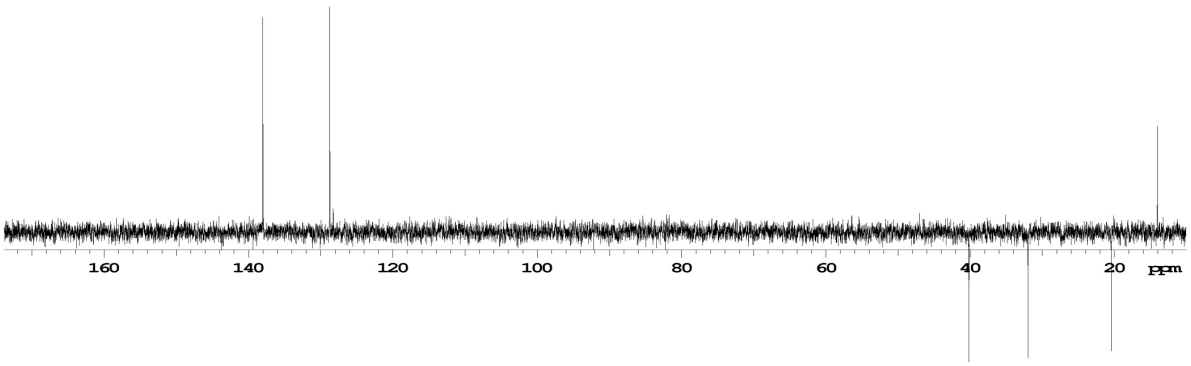
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

3. Ordnen Sie die C-Atome bei 98 ppm und 40 ppm zu und berechnen Sie die 13C-Verschiebung für diese 2 C-Atome. (2 P)

4. Geben Sie das Spinsystem der Protonen an (1 P)


8
7
6
5
4
3
2
ppm


160
150
140
130
120
110
100
90
80
70
60
50
40
30
20
ppm


160
140
120
100
80
60
40
20
ppm

Frage 3: (11 Punkte)

Auf Seite 6 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{12}H_{14}O_2$.
Hinweis: kein Carbonsäure-Derivat

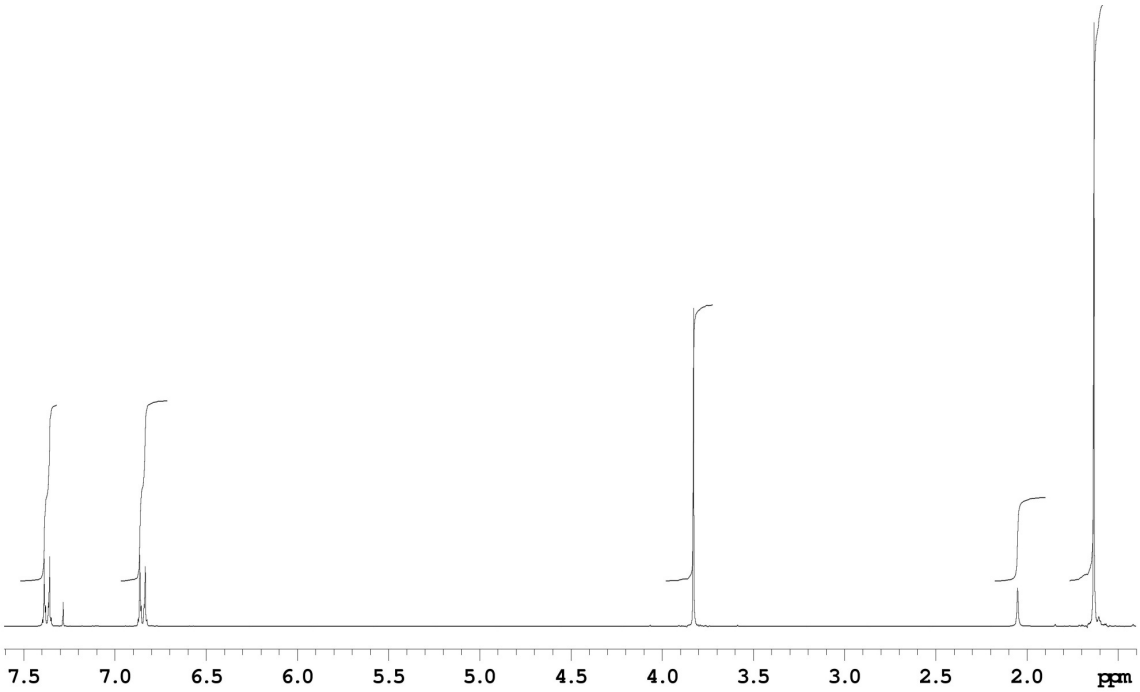
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der NMR-Spektren?. (5 P)

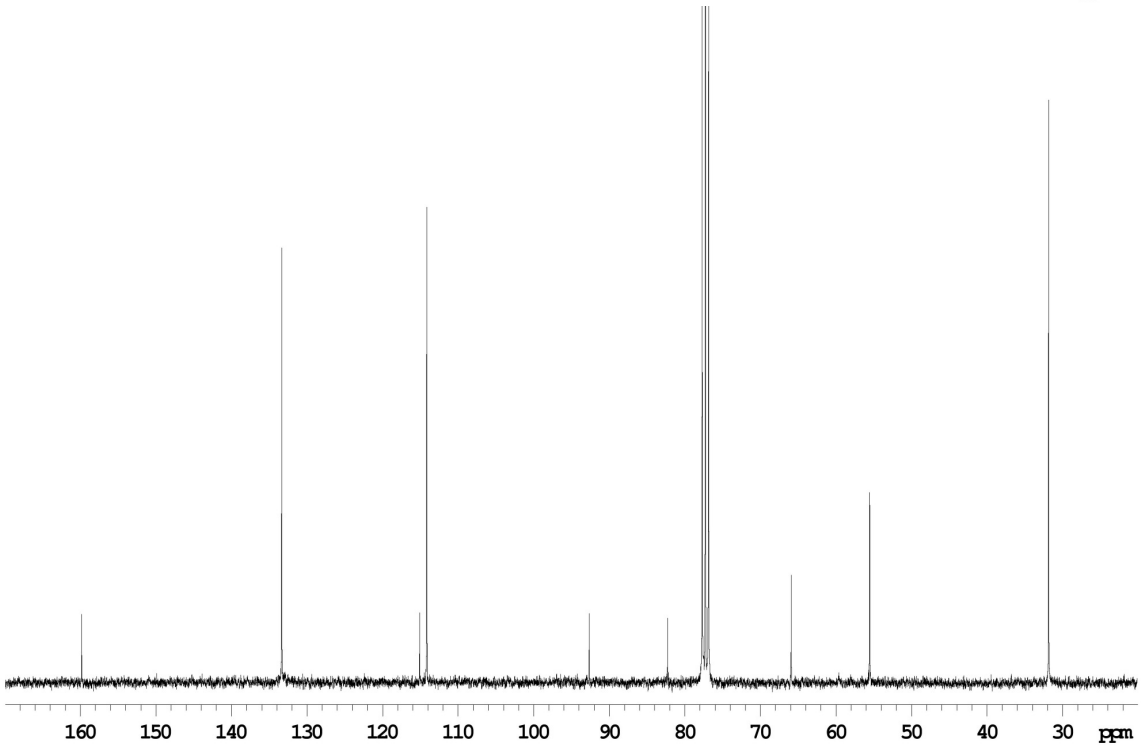
2. Ordnen Sie die ^{13}C-Signale 1, 5 und 6 zu und notieren Sie sich die sichtbaren Kopplungen im HMBC. (alles $^{3}J(C,H)$-Kopplungen) (3 P)

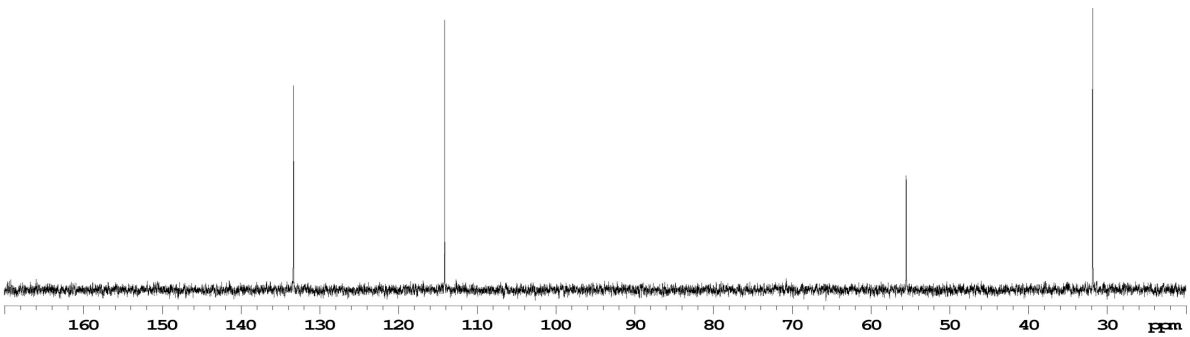
C-Atome	Koppelt mit
1	
5	
6	

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

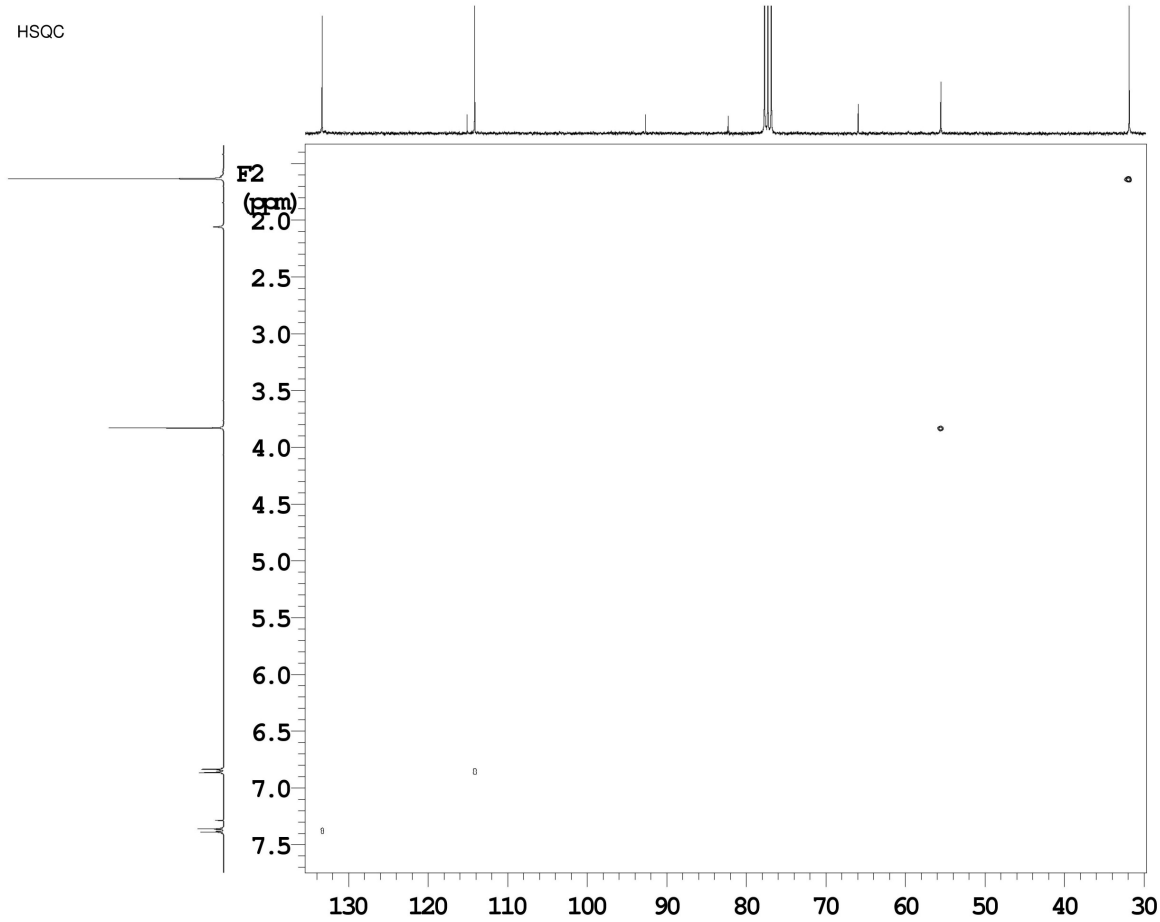
4. Ordnen Sie die ^{13}C-Atome 1, 5 und 6 zu. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie im HMBC sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül einzeichnen. (1 P)


7.5
7.0
6.5
6.0
5.5
5.0
4.5
4.0
3.5
3.0
2.5
2.0
ppm

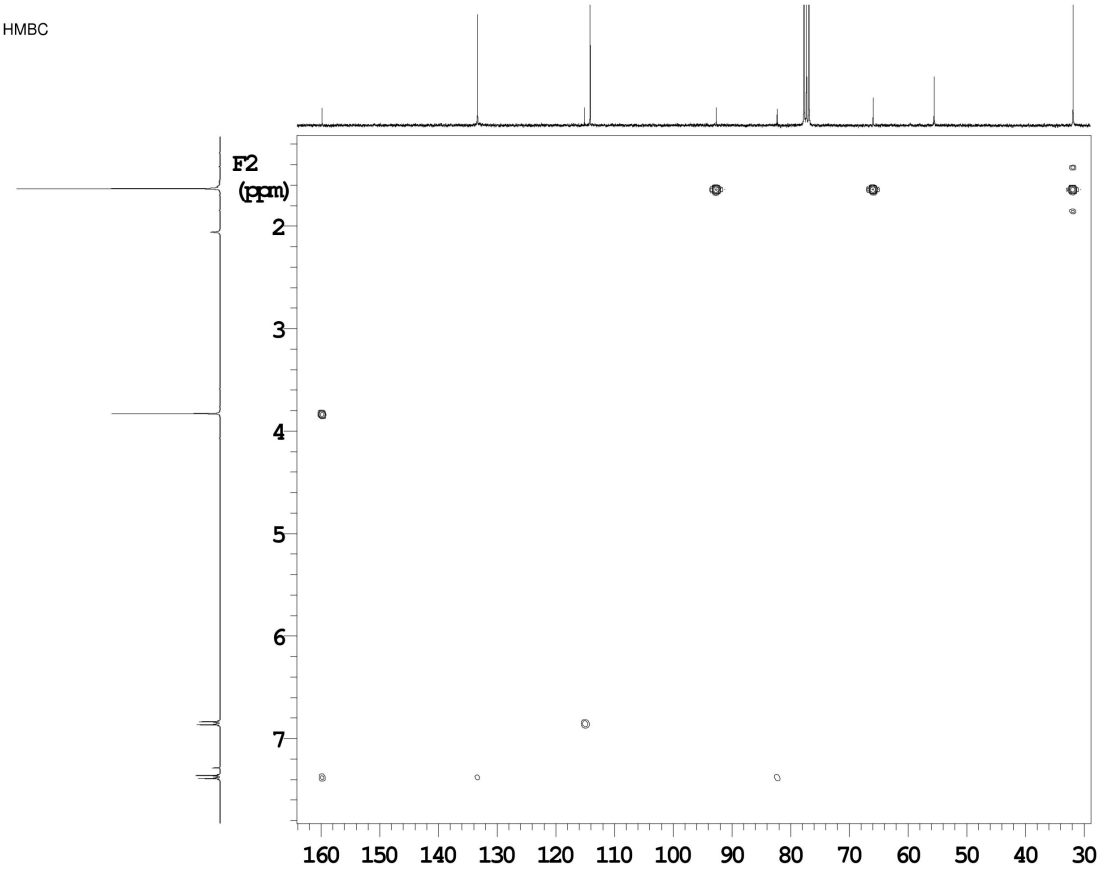

160
150
140
130
120
110
100
90
80
70
60
50
40
30
ppm


160
150
140
130
120
110
100
90
80
70
60
50
40
30
ppm

HSQC

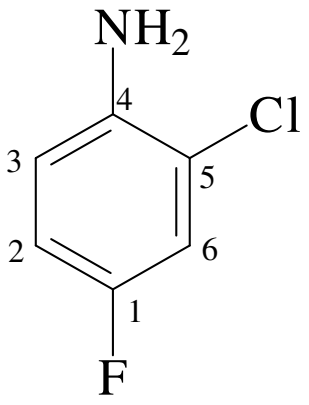

F2
(ppm)
2.0
2.5
3.0
3.5
4.0
4.5
5.0
5.5
6.0
6.5
7.0
7.5
130 120 110 100 90 80 70 60 50 40 30

HMBC


F2
(ppm)
2
3
4
5
6
7
160 150 140 130 120 110 100 90 80 70 60 50 40 30

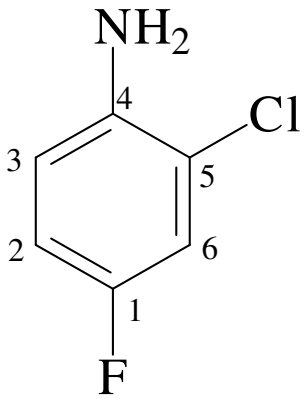
Frage 4: (13 Punkte)

Auf Seite 11 sind die NMR-Spektren dieser Verbindung gegeben:

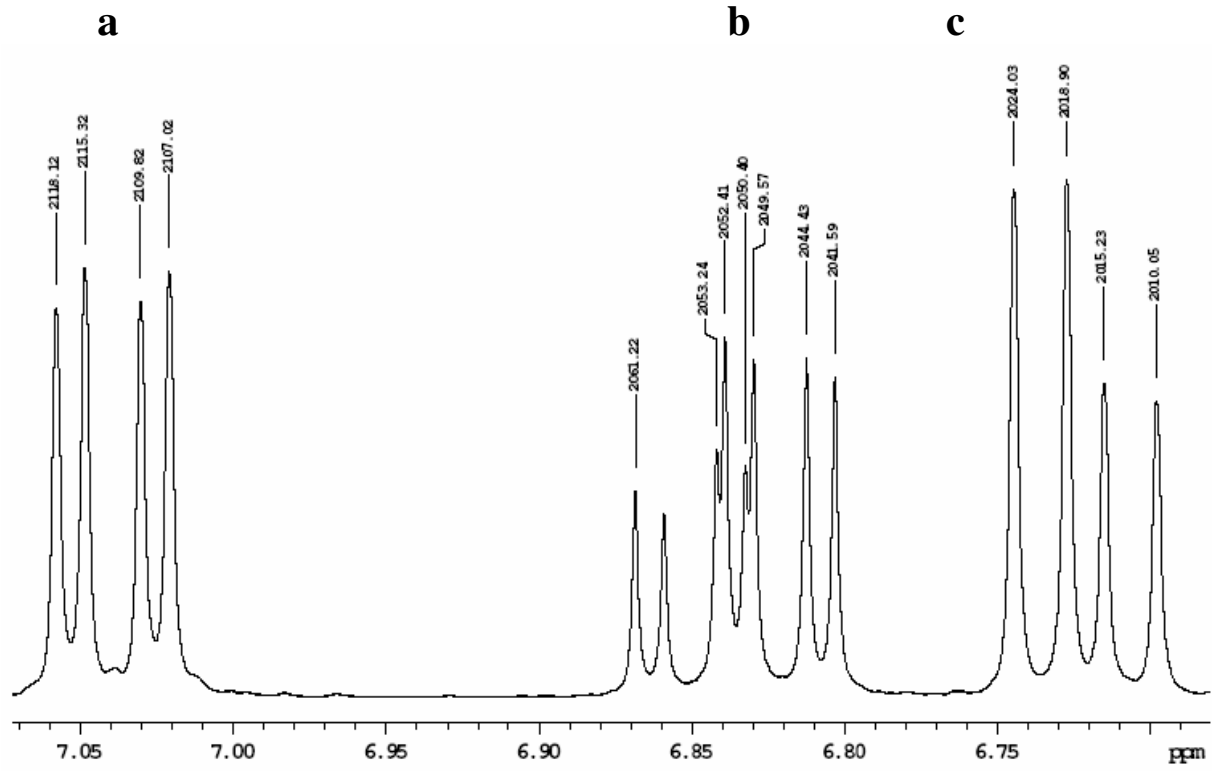


1. Ordnen Sie alle 6 C-Atome Ihrem ^{13}C-Spektrum zu. (6 P)

Signale von nächster Seite:
2118.12
2115.32
2109.82
2107.02
2061.22
2058.38
2053.24
2052.41
2050.40
2049.57
2044.43
2041.59
2024.03
2018.90
2015.23
2010.05

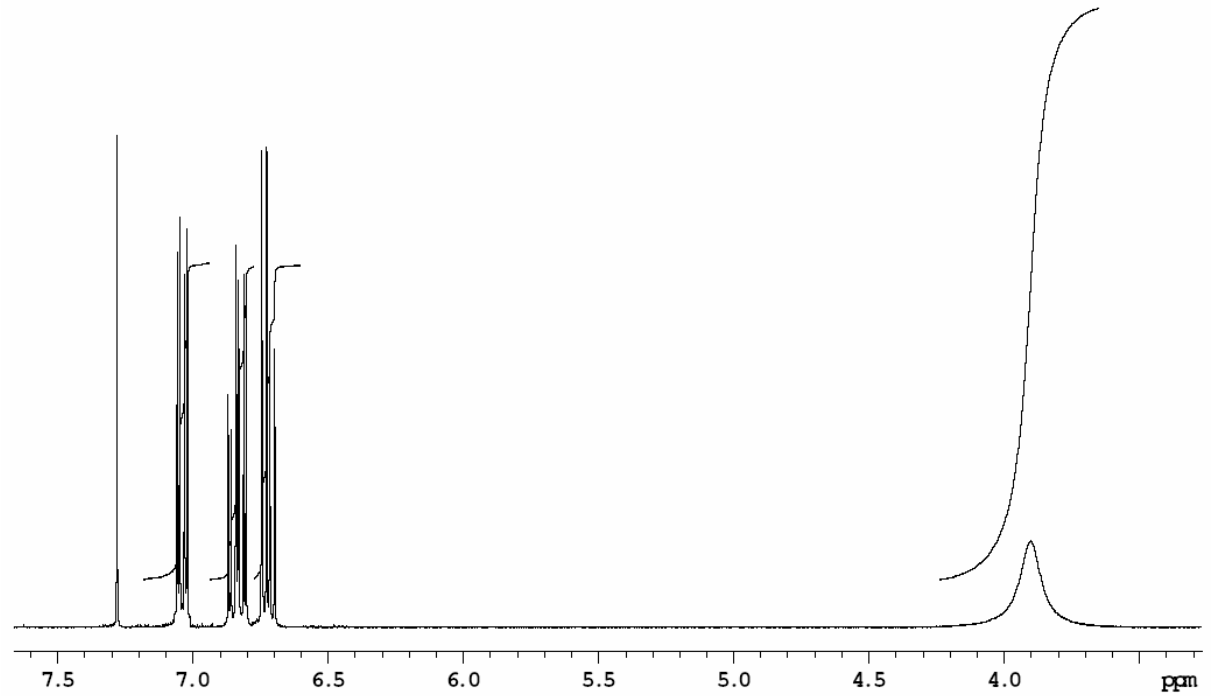


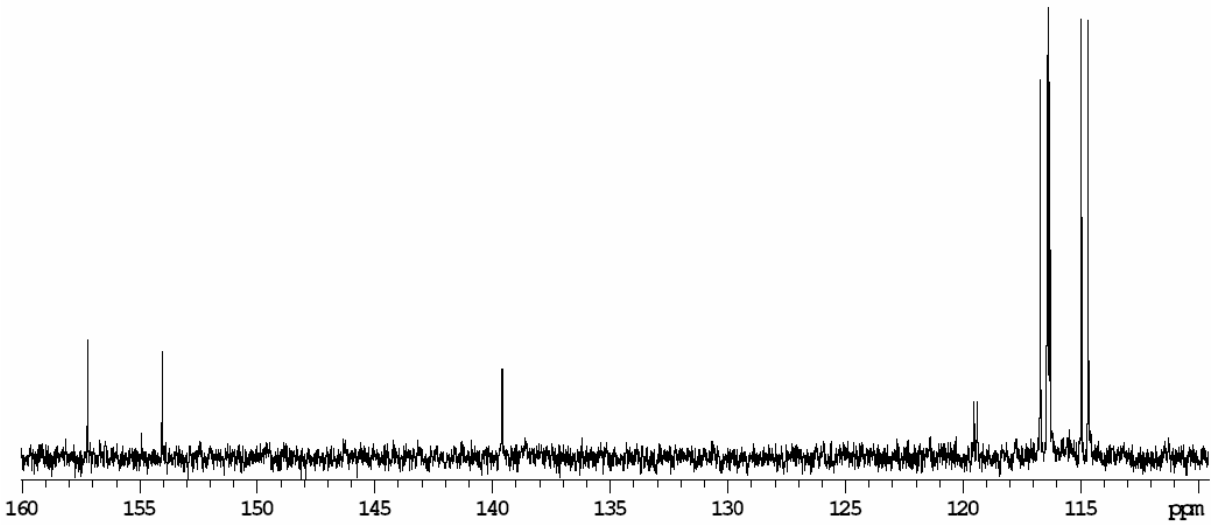
2. Ordnen Sie die Protonen zu. (1 P)
3. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die Protonen (1 Hz = 1mm). Bestimmen Sie alle Kopplungskonstanten. ($^3J_{F,H}$ = 8 Hz, $^4J_{F,H}$ = 5 Hz) (5 P)
4. Auf welchem Gerät wurde das Spektrum gemessen? (1 P)

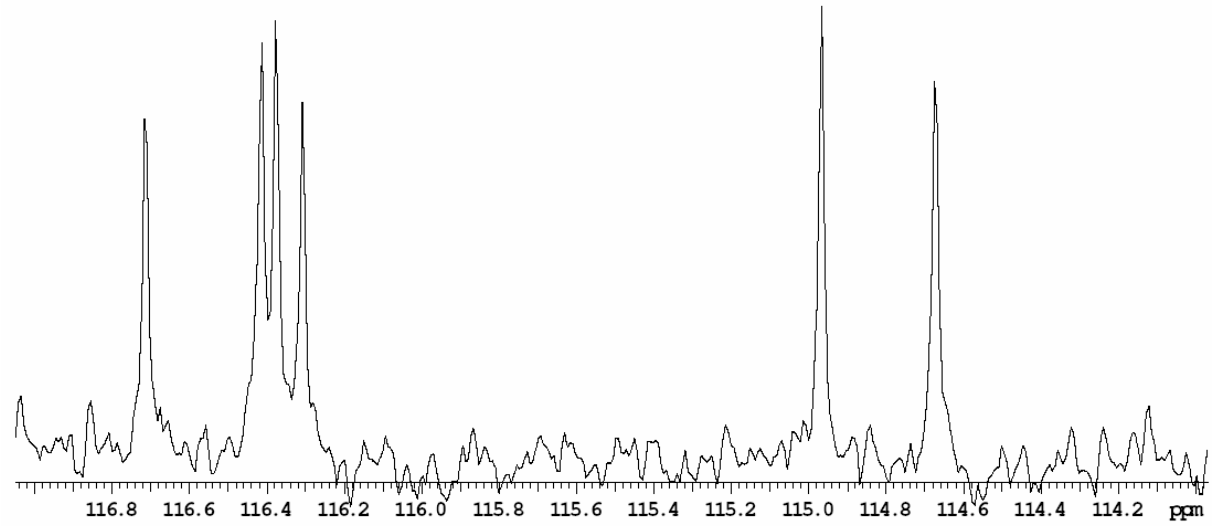


5. Zeichnen Sie das F-Spektrum (Ohne und mit Protonen-Entkopplung, δ=100 ppm)
   → 2 Spektren zeichnen. (4 P)

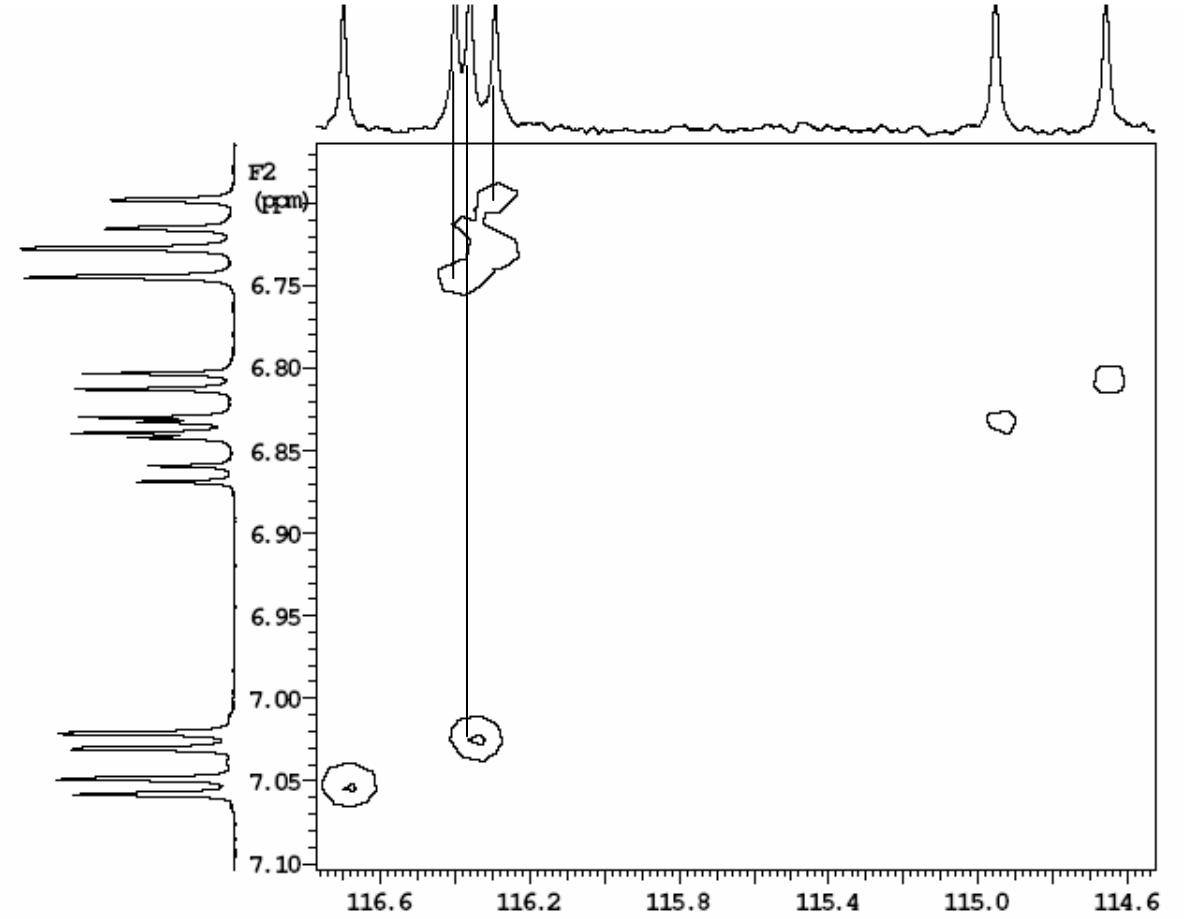
6. Warum sieht man die Kopplung zu F, aber nicht zu Cl? (1 P)

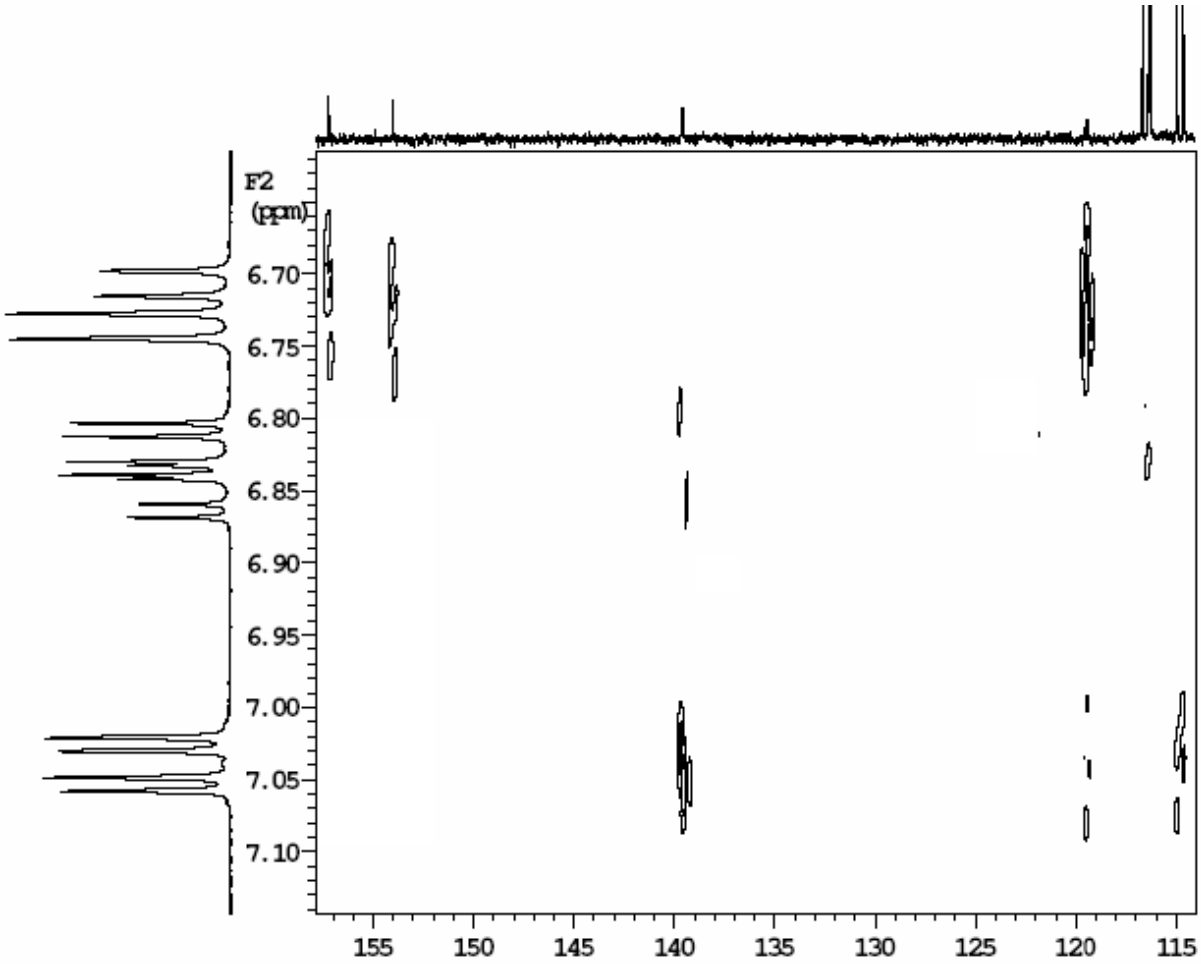






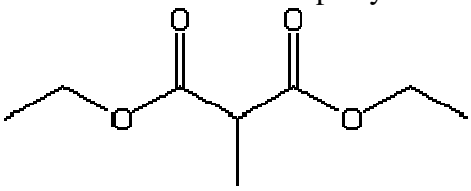
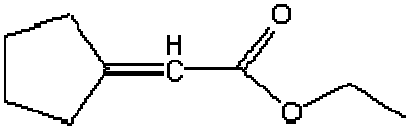
^{13}C-Vergrößerung und Dept


F2
(ppm)
6.75
6.80
6.85
6.90
6.95
7.00
7.05
7.10
116.6
116.2
115.8
115.4
115.0
114.6


F2
(ppm)
6.70
6.75
6.80
6.85
6.90
6.95
7.00
7.05
7.10
155
150
145
140
135
130
125
120
115

Frage 5: Theorie (9 Punkte)

1. Warum sollte das Lösungsmittel in der NMR-Spektroskopie deuteriert sein? Nennen Sie zwei wichtige Gründe (2 P)

2. Was sind Einstrahlexperimente? Nennen Sie 2 Anwendungsbeispiele (4 P)

3. Bestimmen Sie das Spinsystem folgender Verbindungen (3P)