SS21 Name ……..……..

Matrikelnr……..…

Spektroskopie 2 (NMR)
SS 2021 Klausur

03.08.2021

Frage 1: (8 Punkte)

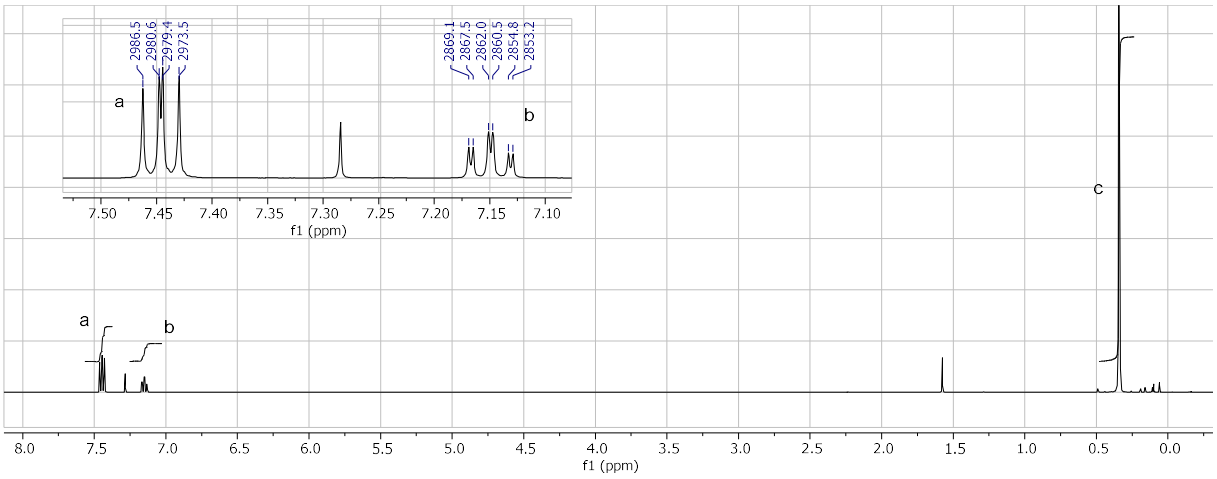
Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{12}H_{21}FSi_2$.

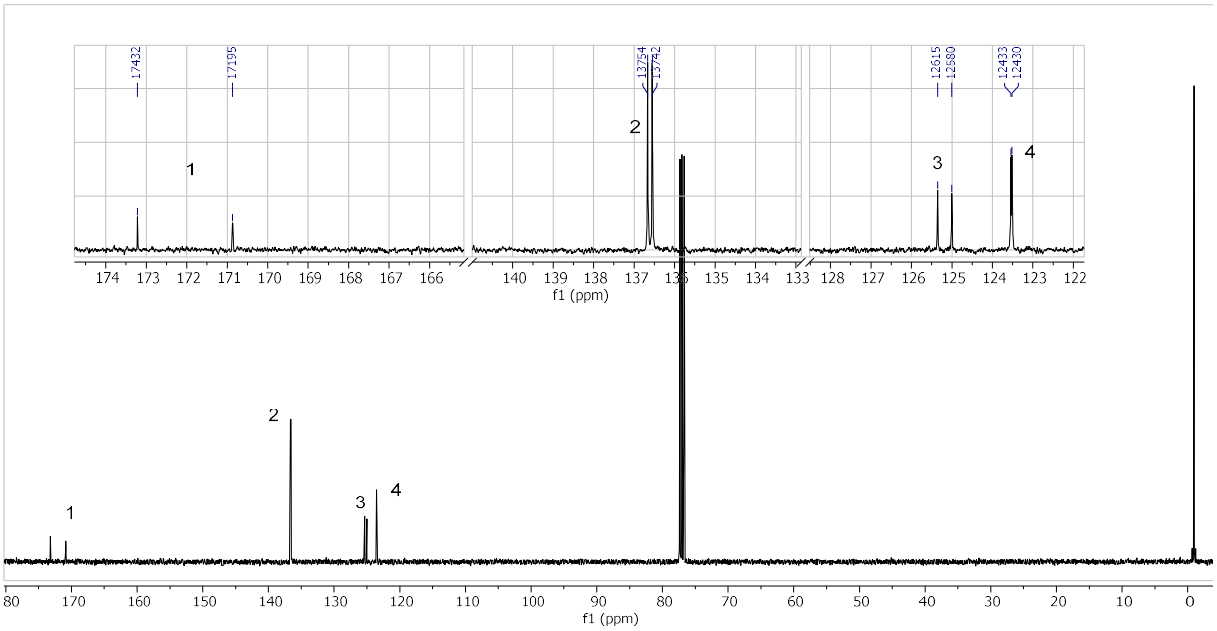
1. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)

2. Ordnen Sie die Kohlenstoff-Signale zu. (1 P)

3. Bestimmen Sie alle sichtbaren $^{x}J_{CF}$ und $^{x}J_{FH}$. Zeichnen Sie im Spektrum ein, wo Sie diese Kopplungskonstante finden. (3 P)

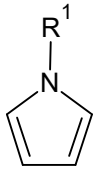
4. An welchem Gerät wurden die Spektren gemessen? Berechnen Sie die Lamor-Freqenzen, für ^{1}H und ^{13}C. Warum sind die Frequenzen unterschiedlich? (2 P)


2986.5
2980.6
2979.4
2973.5
2869.1
2867.5
2862.0
2860.5
2854.8
2853.2
a
b
c
7.50 7.45 7.40 7.35 7.30 7.25 7.20 7.15 7.10
f1 (ppm)
8.0 7.5 7.0 6.5 6.0 5.5 5.0 4.5 4.0 3.5 3.0 2.5 2.0 1.5 1.0 0.5 0.0
f1 (ppm)


17432
17195
13754
13742
12615
12580
12433
12430
1
2
3
4
174 173 172 171 170 169 168 167 166 140 139 138 137 135 134 133 128 127 126 125 124 123 122
f1 (ppm)
80 170 160 150 140 130 120 110 100 90 80 70 60 50 40 30 20 10 0
f1 (ppm)

Frage 2: (13 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_8H_{12}IN$.

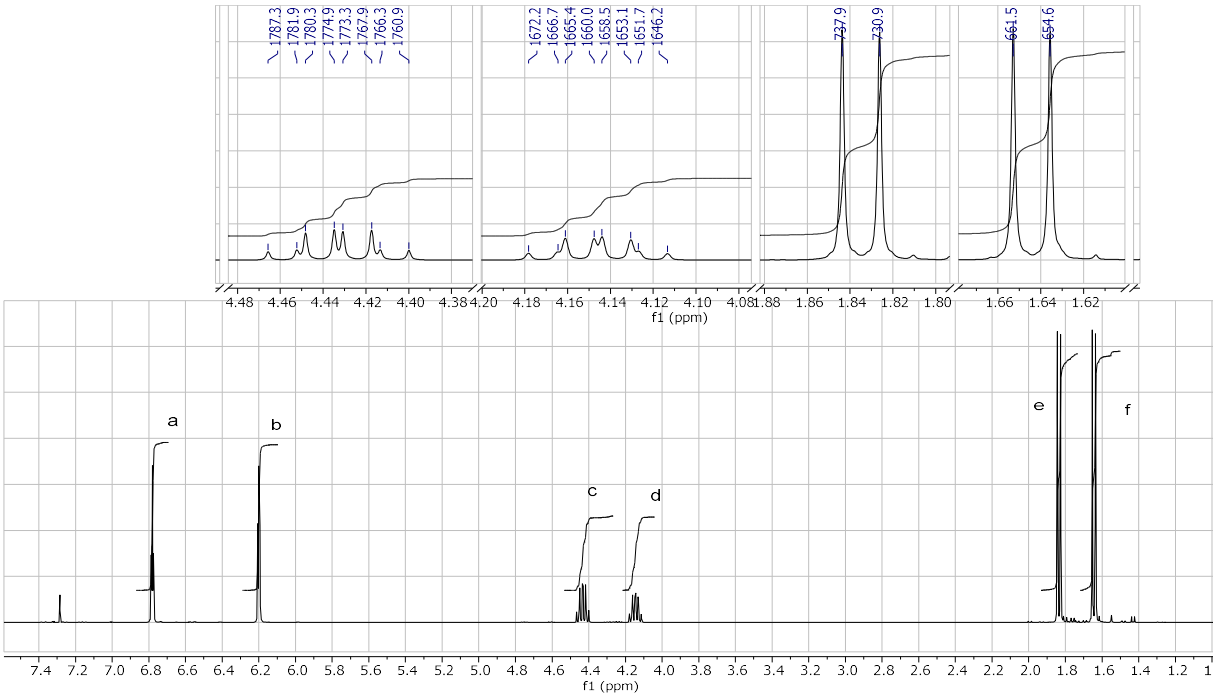


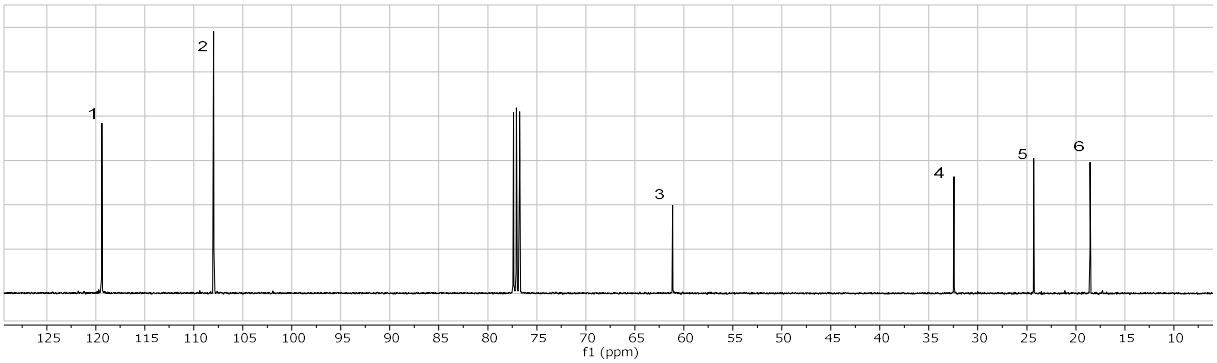
1. Bestimmen Sie den Rest R^1 (2 P)

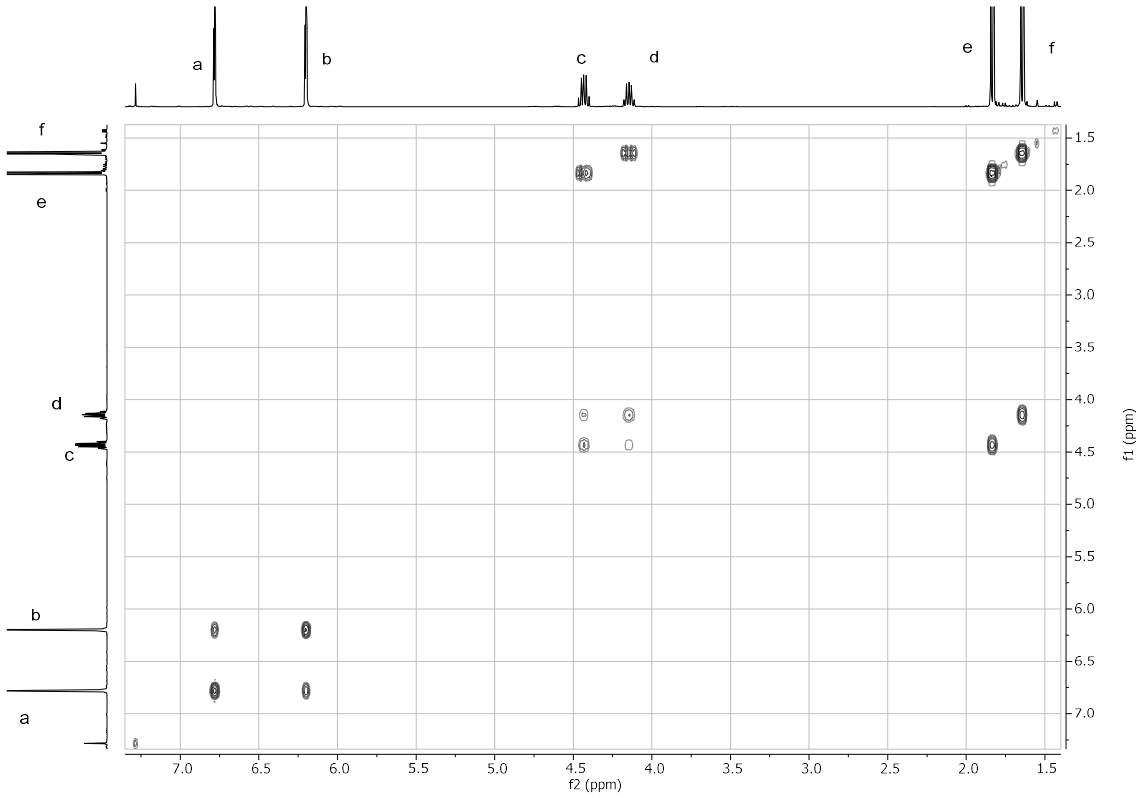
2. Ordnen Sie alle Signale zu (^1H + ^{13}C). (3 P)

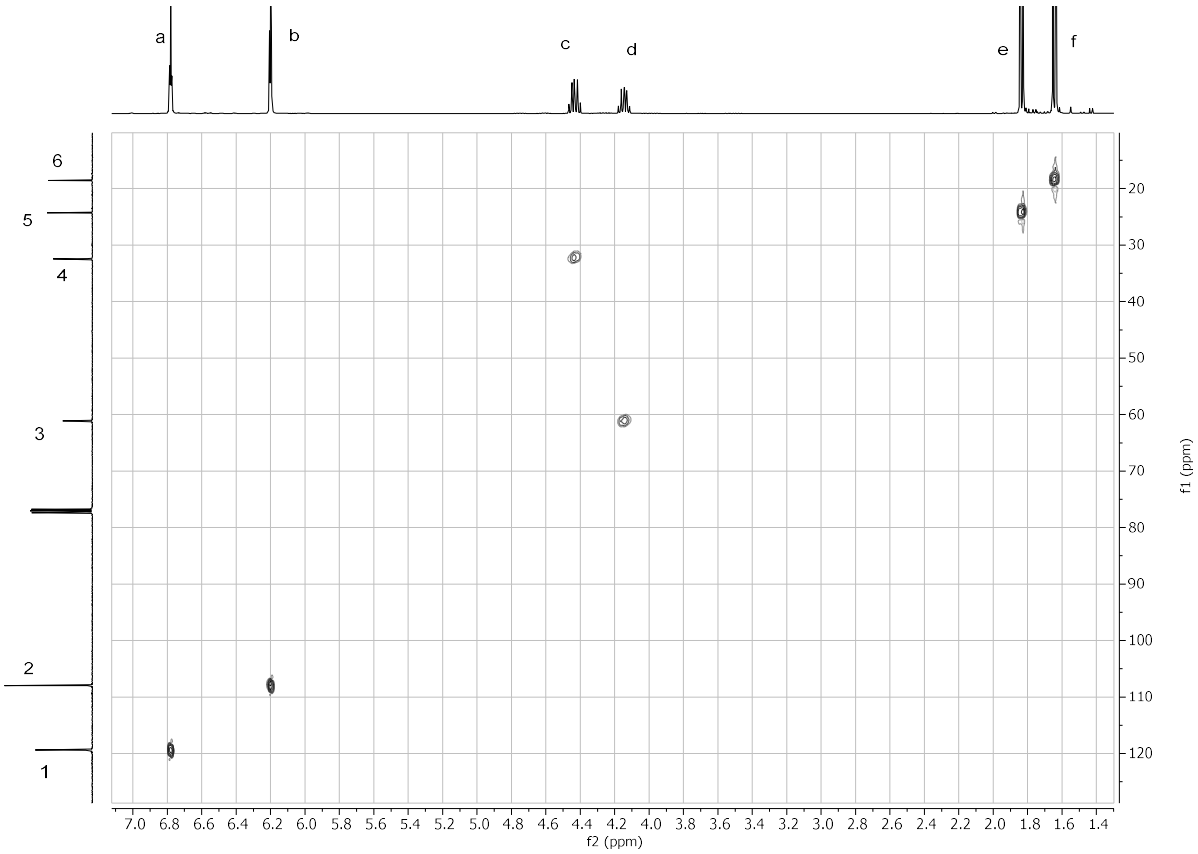
3. Berechnen Sie das Inkrement für Kohlenstoff C_3. (Inkrementenliste) (2 P)

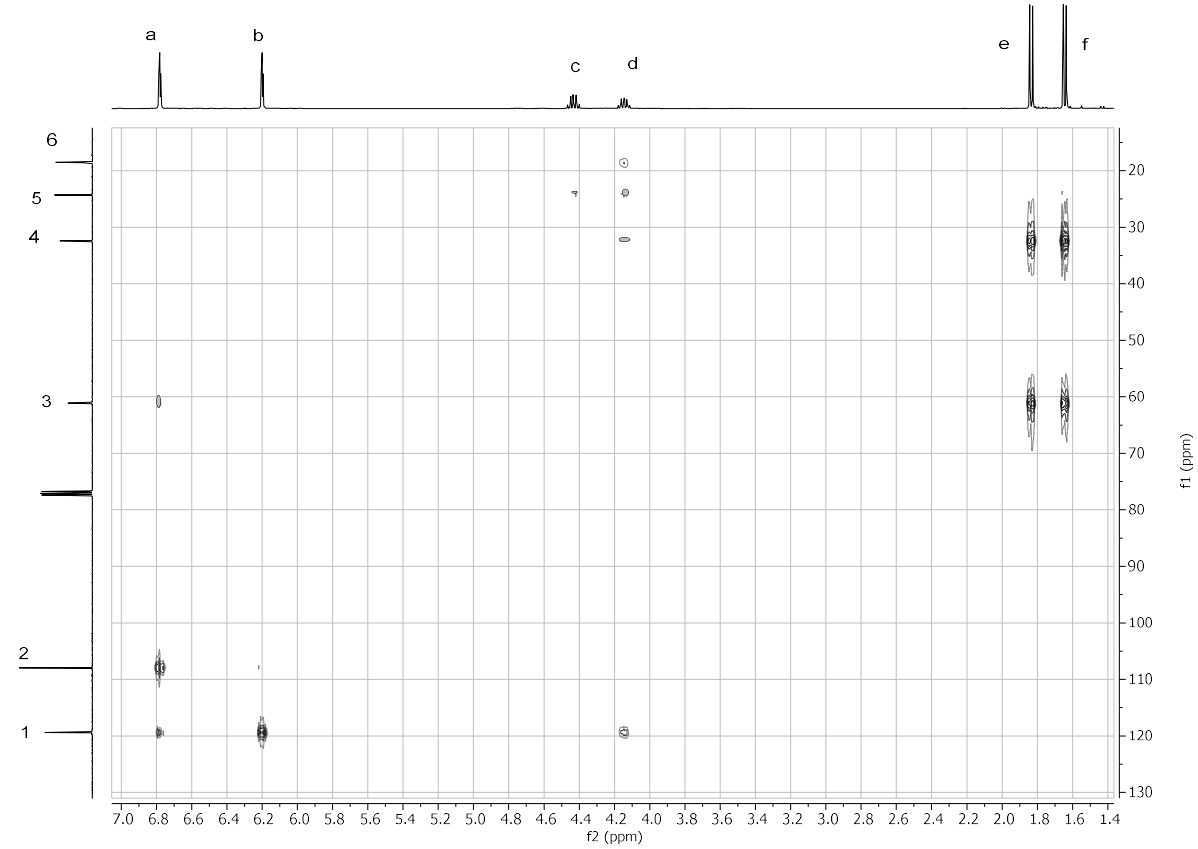
4. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die Protonen für den gefundenen Rest. Incl. allen Kopplungskonstanten. Maßstab: 1Hz = 1 mm (6 P)


1787.3
1781.9
1780.3
1774.9
1773.3
1767.9
1766.3
1760.9
1672.2
1666.7
1665.4
1660.0
1658.5
1653.1
1651.7
1646.2
737.9
730.9
661.5
654.6
f1 (ppm)
a
b
c
d
e
f
f1 (ppm)


1
2
3
4
5
6
f1 (ppm)

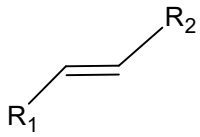

a
b
c
d
e
f
f2 (ppm)
f1 (ppm)


a
b
c
d
e
f
6
5
4
3
2
1
f1 (ppm)
f2 (ppm)


a
b
c
d
e
f
6
5
4
3
2
1
f1 (ppm)
f2 (ppm)

Frage 3: (15 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{14}H_{18}O_3$.

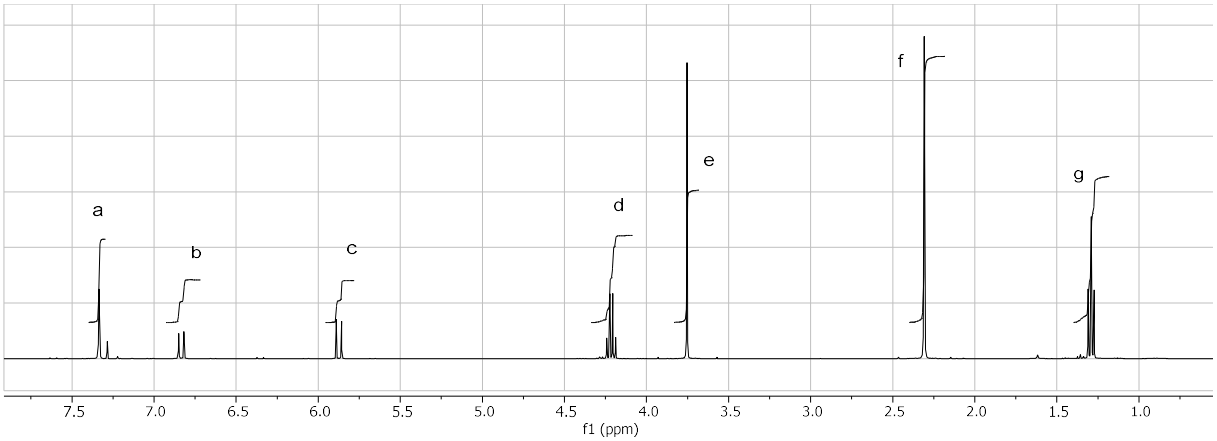


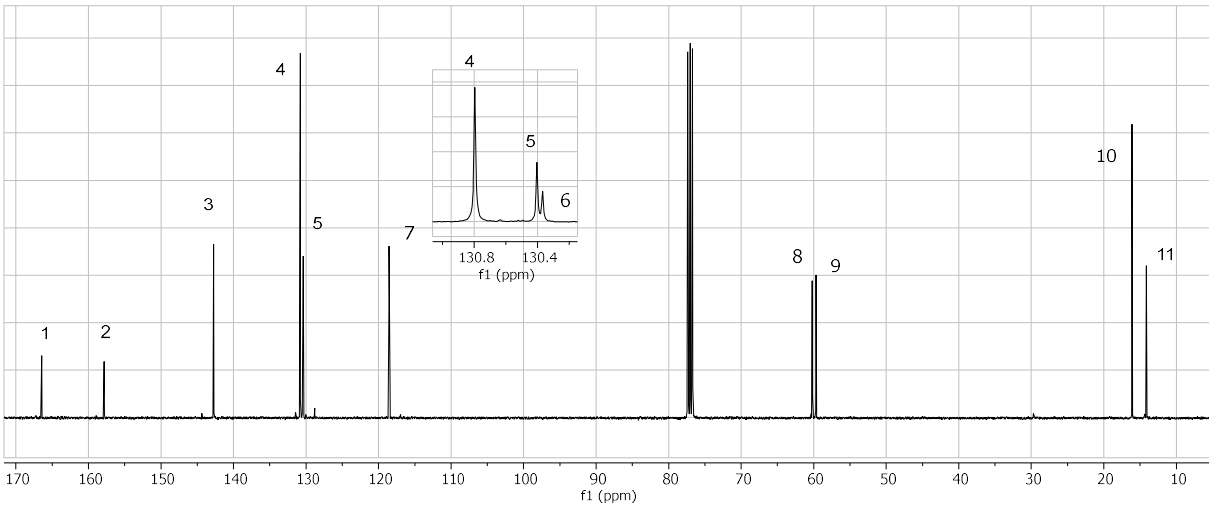
1. Bestimmen Sie die Struktur. (R_1 und R_2) (3 P)

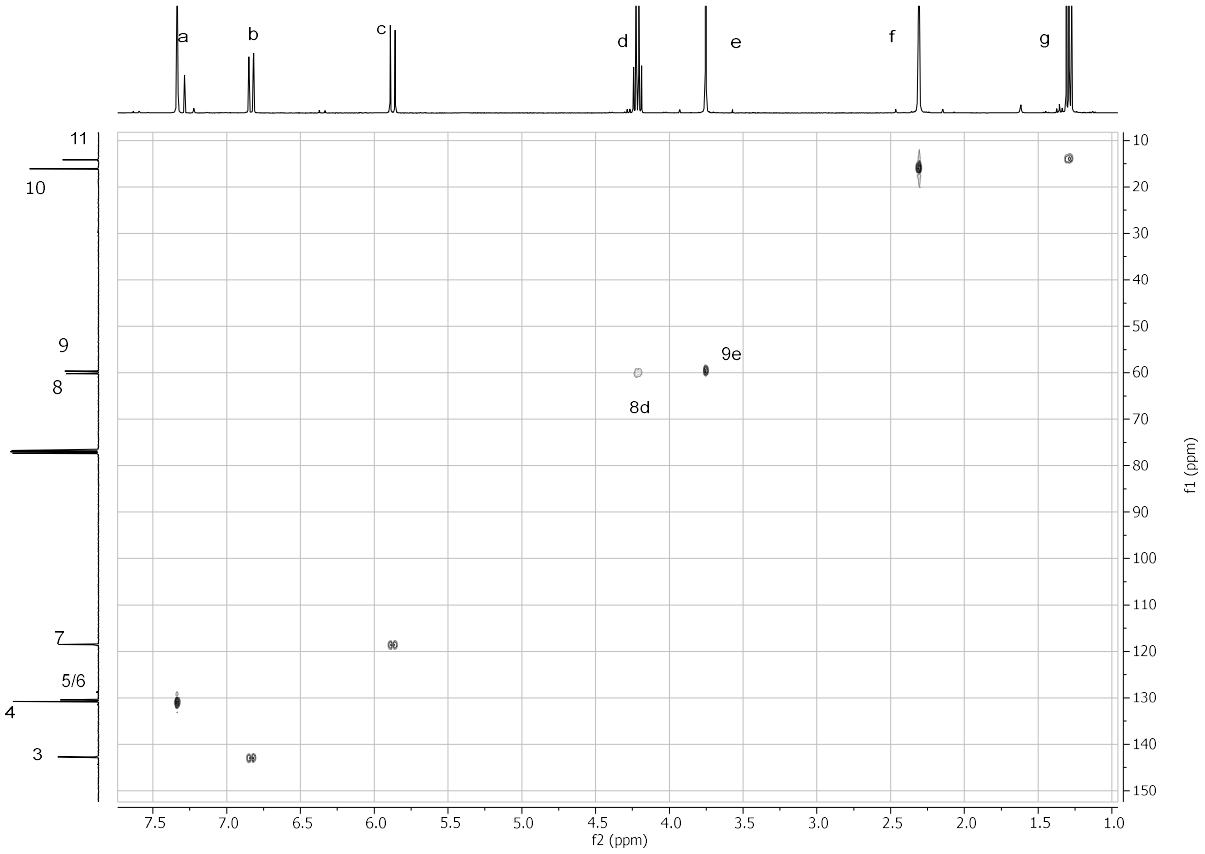
2. Ordnen Sie alle Signale zu (9 P)

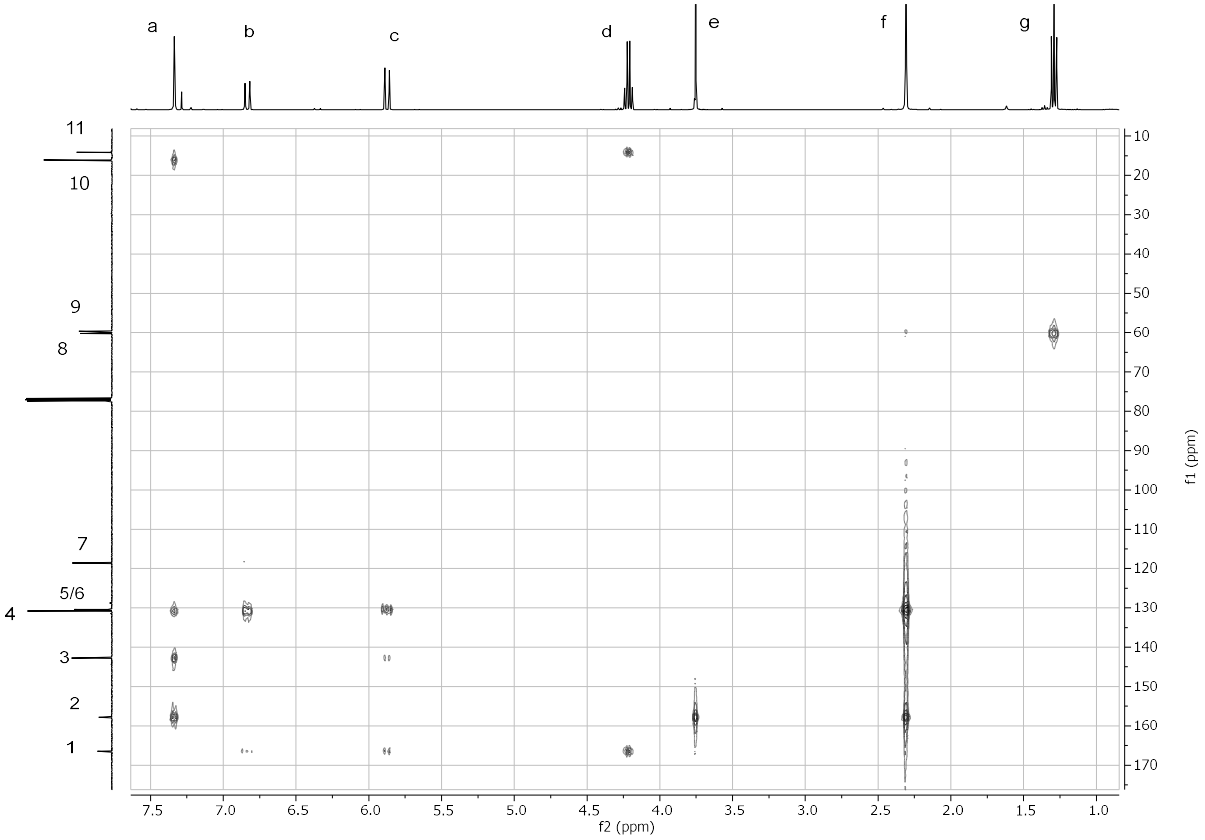
3. Berechnen Sie das Inkrement für Kohlenstoff C3 (Inkrementtabelle). (1 P)

4. Wie kann man mit Hilfe der NMR-Spektroskopie. bestimmen, ob die beiden Alken-Protonen cis oder trans stehen? Geben Sie 2 Methoden an. (2 P)

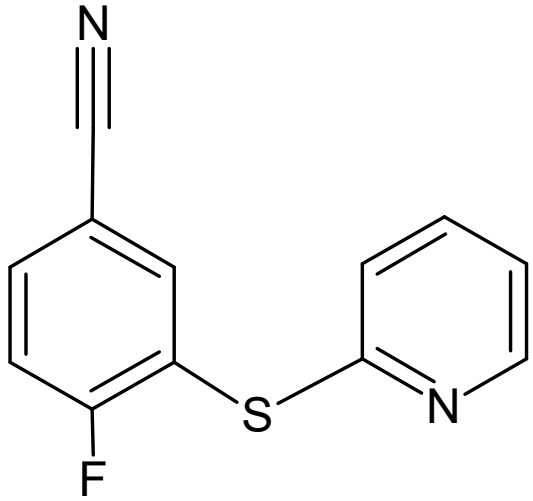

a
b
c
d
e
f
g
7.5
7.0
6.5
6.0
5.5
5.0
4.5
4.0
3.5
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
f1 (ppm)


1
2
3
4
5
7
8
9
10
11
4
5
6
130.8
130.4
f1 (ppm)
170
160
150
140
130
120
110
100
90
80
70
60
50
40
30
20
10
f1 (ppm)


a
b
c
d
e
f
g
11
10
9
8
7
5/6
4
3
9e
8d
f2 (ppm)
f1 (ppm)

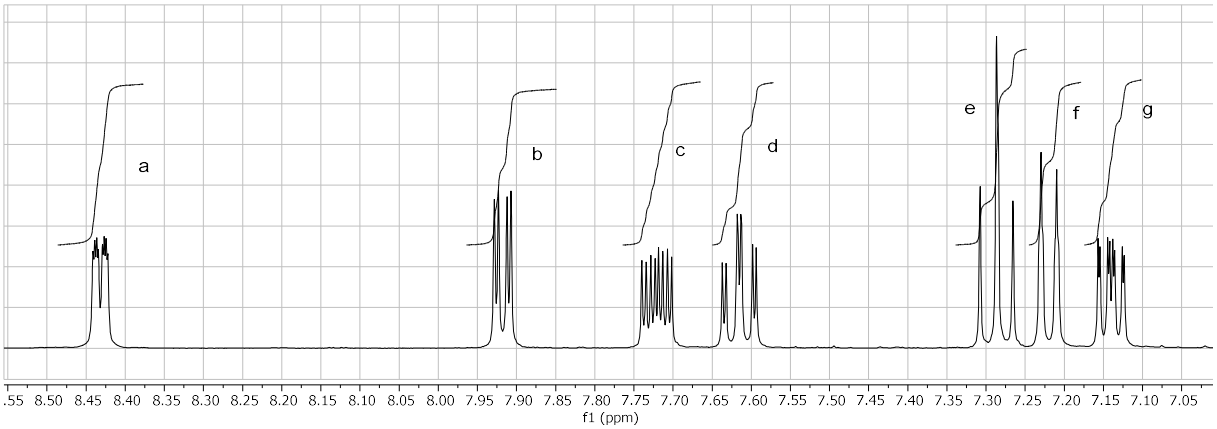

a
b
c
d
e
f
g
11
10
9
8
7
5/6
4
3
2
1
f2 (ppm)
f1 (ppm)

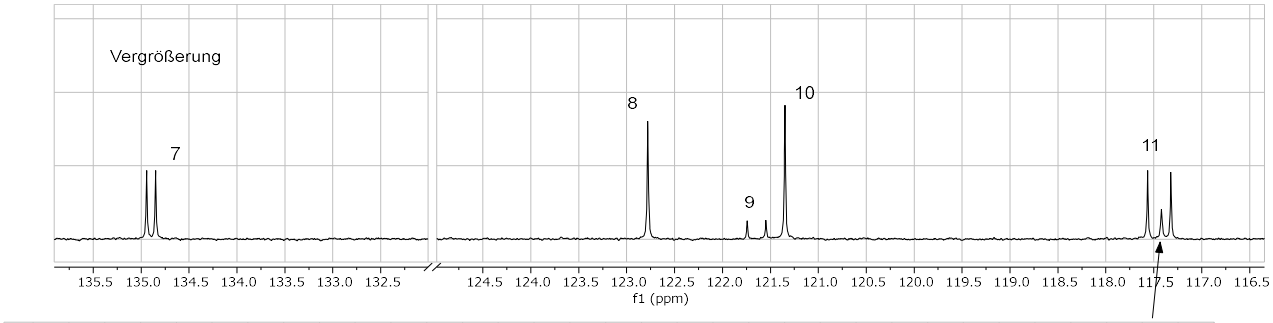
Frage 4: (16 Punkte)

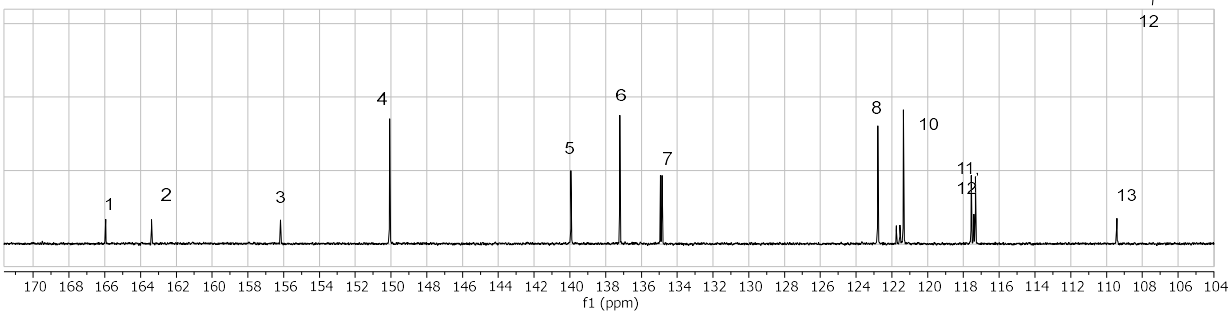


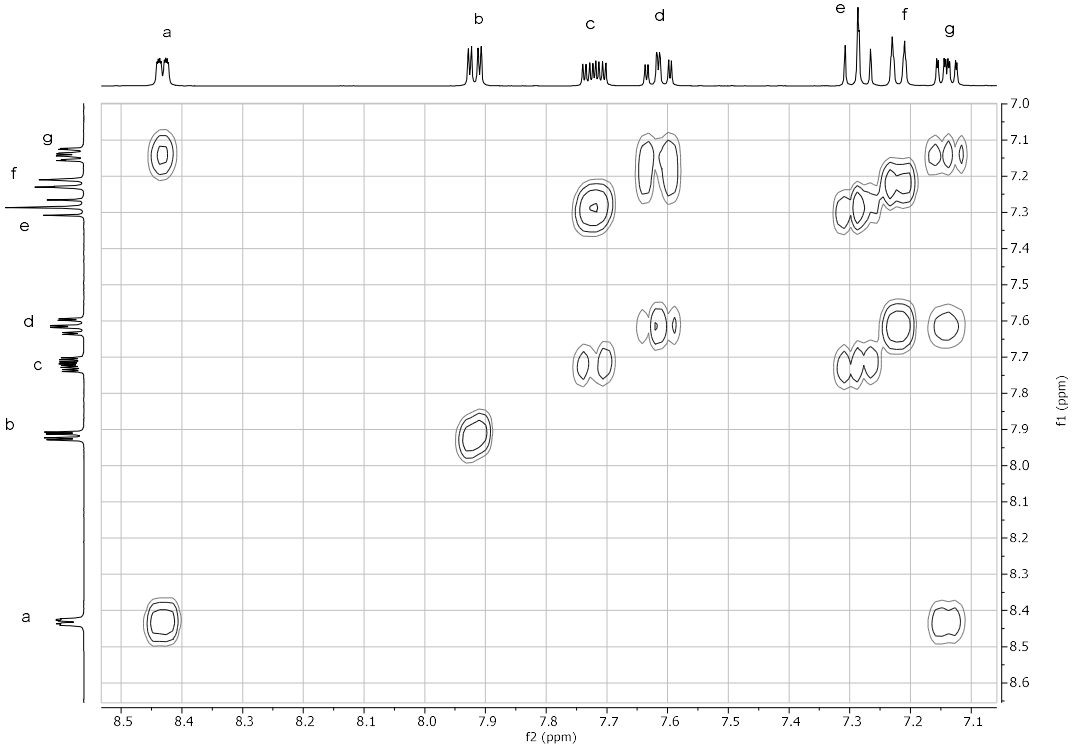
1. Ordnen Sie die alle Signale zu. (10 P)
2. Begründen Sie Ihre Zuordung, indem Sie im HMBC für die C-Atome 1,2,3,9,10 und 12 sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül einzeichnen.
   HMBC: Füllen Sie für diese C-Atome folgende Tabelle aus. (6 P)

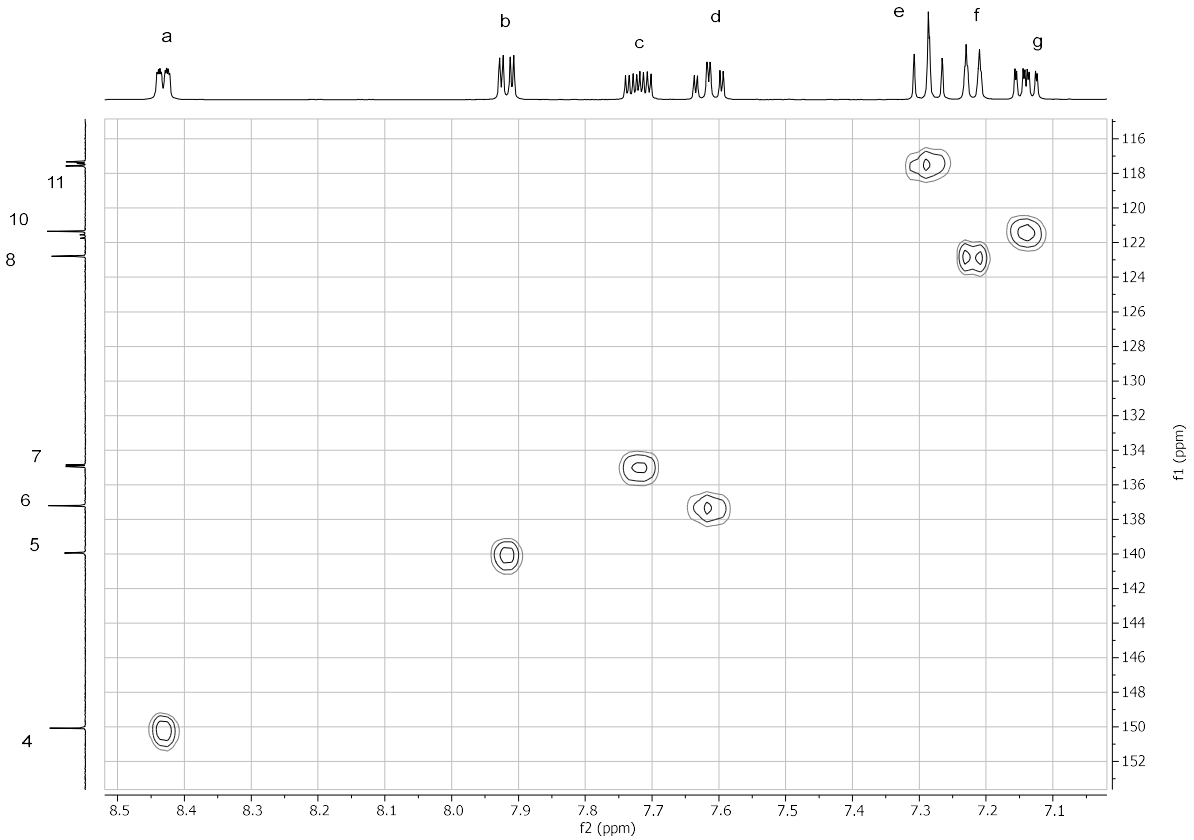
13C	1H	$^{n}J_{CH}$
1		$^{3}J_{CH}$

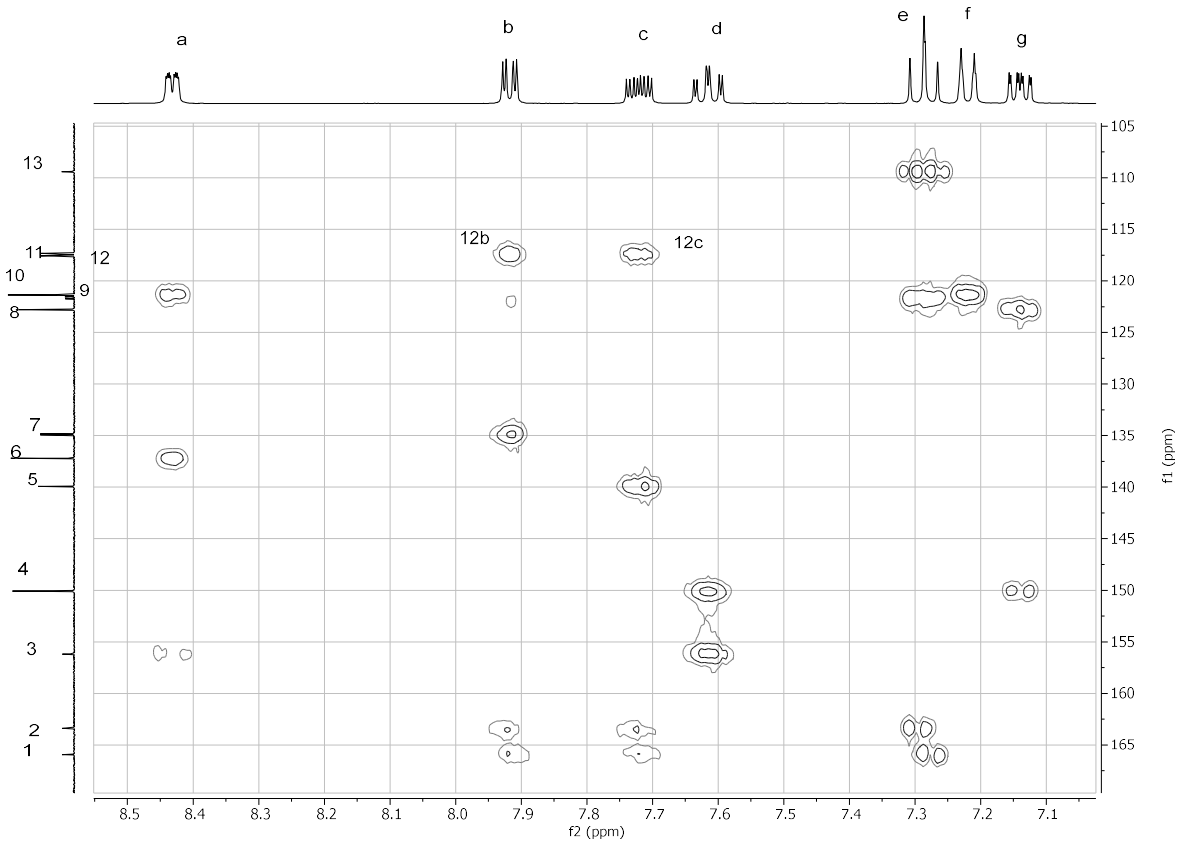

a
b
c
d
e
f
g
f1 (ppm)


Vergrößerung
7
8
9
10
11
f1 (ppm)


12
1
2
3
4
5
6
7
8
10
11
12
13
f1 (ppm)


a
b
c
d
e
f
g
f2 (ppm)
f1 (ppm)


a
b
c
d
e
f
g
11
10
8
7
6
5
4
f1 (ppm)
f2 (ppm)


a
b
c
d
e
f
g
13
11
12
10
9
8
7
6
5
4
3
2
1
12b
12c
f1 (ppm)
f2 (ppm)

Frage 5: Theorie (18 Punkte)

1. Quadrupolare Kerne spalten die skalar gekoppelten Partner nur dann auf, wenn eine hohe Symmetrie im Molekül vorliegt. Das Ammonium-Ion ist hochsymmetrisch, daher konnte man solche Aufspaltungen beobachten.
Zeichnen Sie die erwarteten Signalmultipletts, die in Wasserstoff ($^{1}H/^{2}H$) und Stickstoff ($^{14}N/^{15}N$) Spektren auftreten, für die folgenden Moleküle. Geben Sie die Intesitätsverhältnisse zwischen den Signalen in den Multipletts an.
$I(^{14}N) = 1$ $I(^{15}N) = ½$

	$[^{14}NH_4]^+$	$[^{15}NH_4]^+$	$[^{14}ND_4]^+$	$[^{15}ND_4]^+$
$^{1}H/^{2}H$ Spektrum				
	_____	_____	_____	_____
$^{14}N/^{15}N$ Spektrum				
	_____	_____	_____	_____

2. Zeichnen Sie die Protonenspektren von zwei Protonen, die mit einer ^{3}J-Kopplung von 10 Hz aneinander gekoppelt sind. Proton A hat eine chemische Verschiebung von 1 ppm, und Proton B hat eine chemische Verschiebung von 1,2 ppm. Zeichnen Sie die Spektren so ein, wie sie aussehen würden, wenn sie mit einem 200-MHz-, 400-MHz- und 800-MHz-NMR-Spektrometer aufgenommen worden wären. Zeichnen Sie zwei Sätze von Spektren, eines mit einer ppm-Skala (zwischen 0 und 1,5 ppm) und ein weiteres mit einer Hz-Skala (zwischen 0 und 1000 Hz). Geben Sie alle Veränderungen gegenüber dem reinen Verhalten erster Ordnung an. Wie ändert sich dies, wenn die Magnetfeldstärke zunimmt?

	ppm Skala	Hz Skala
200 MHz		
400 MHz		
800 MHz		