SS22 Name ……..……..

Matrikelnr……..…

Spektroskopie 2 (NMR)
SS 2022 Klausur

17.8.2022

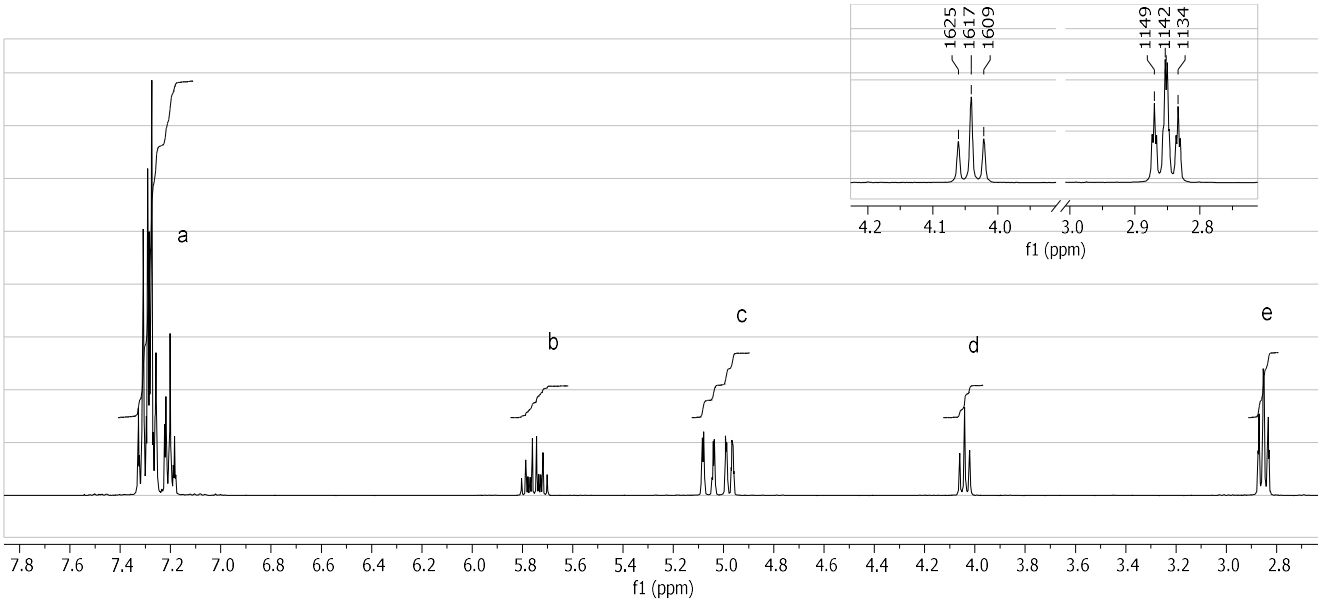
Frage 1: (10 Punkte)

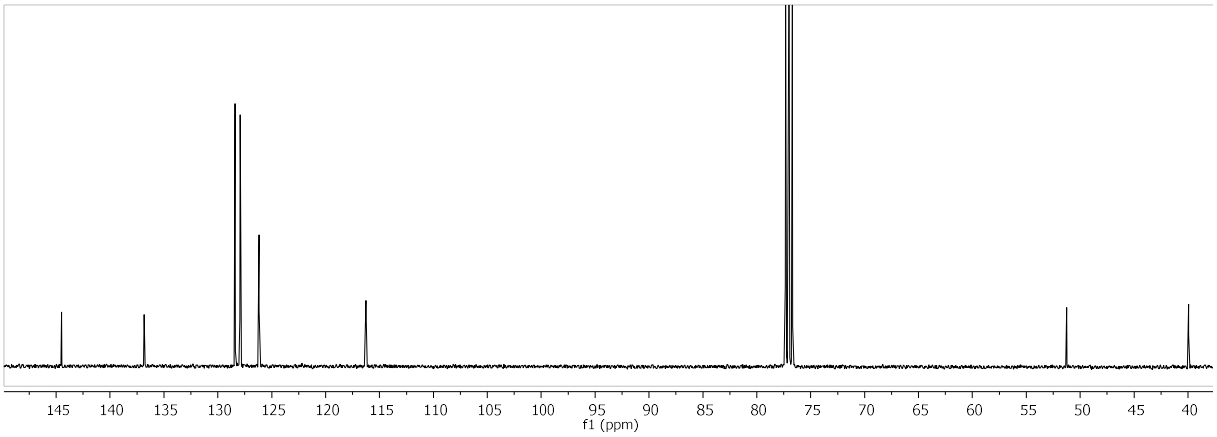
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{16}H_{16}$.

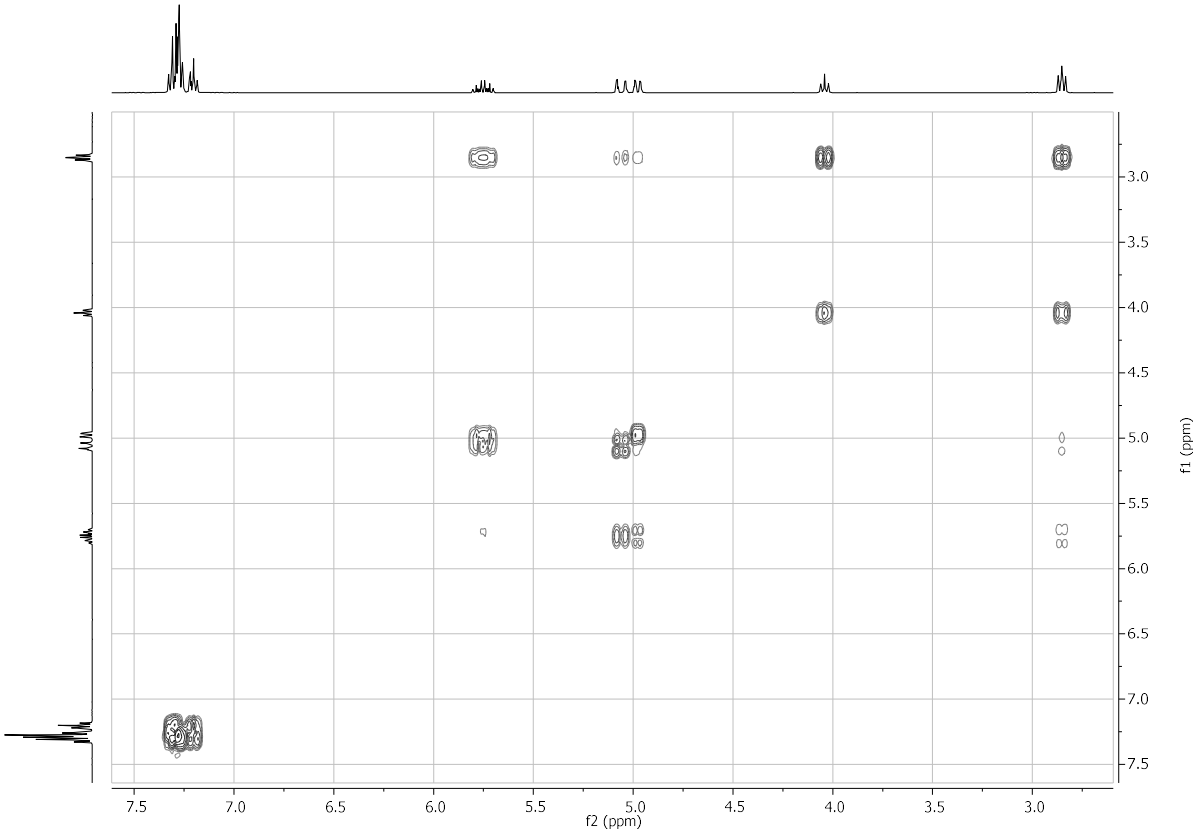
1. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (3 P)

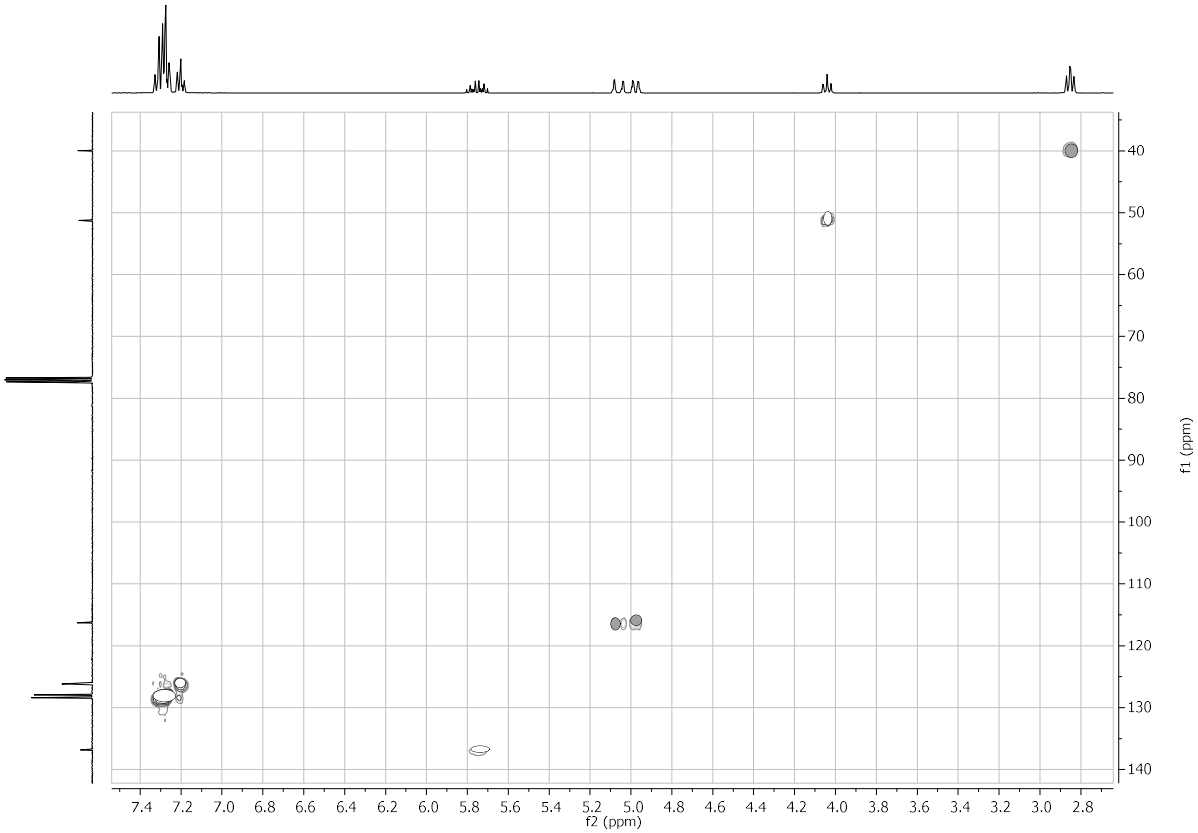
2. Erklären Sie kurz und stichpunktartig, wie Sie auf die Struktur gekommen sind. (3 P)

3. Erklären Sie die 4 Linien im 1H-Spektrum bei 5 ppm genau. (4 P)


1625
1617
1609
1149
1142
1134
4.2 4.1 4.0 3.0 2.9 2.8
f1 (ppm)
a
b
c
d
e
7.8 7.6 7.4 7.2 7.0 6.8 6.6 6.4 6.2 6.0 5.8 5.6 5.4 5.2 5.0 4.8 4.6 4.4 4.2 4.0 3.8 3.6 3.4 3.2 3.0 2.8
f1 (ppm)


145 140 135 130 125 120 115 110 105 100 95 90 85 80 75 70 65 60 55 50 45 40
f1 (ppm)


f1 (ppm)
f2 (ppm)


f1 (ppm)
f2 (ppm)

Frage 2: (10 Punkte)

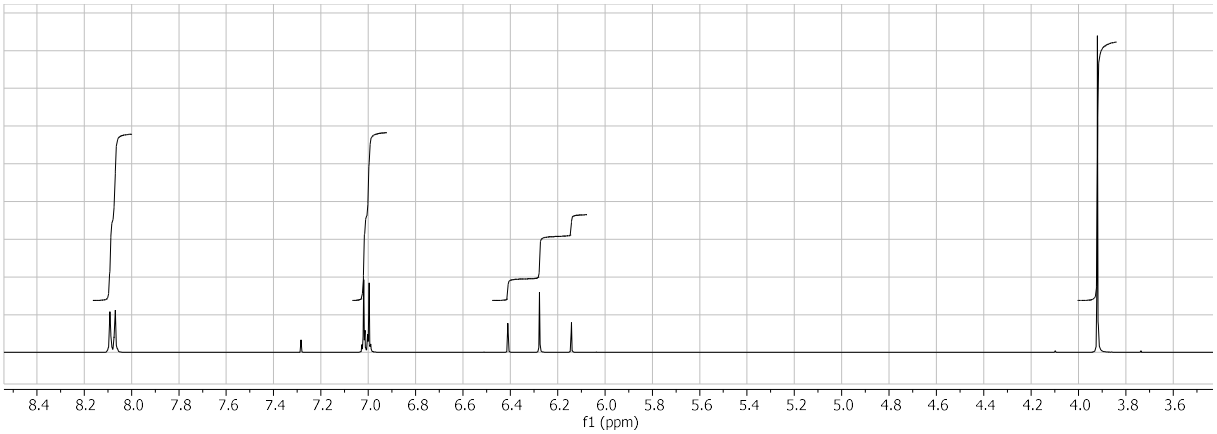
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_9H_8F_2O_2$.

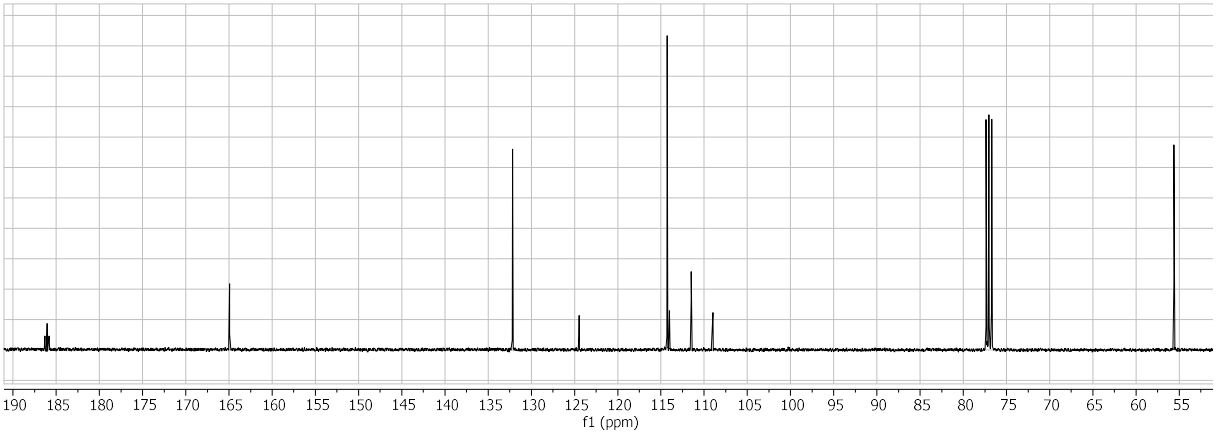
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4 P)

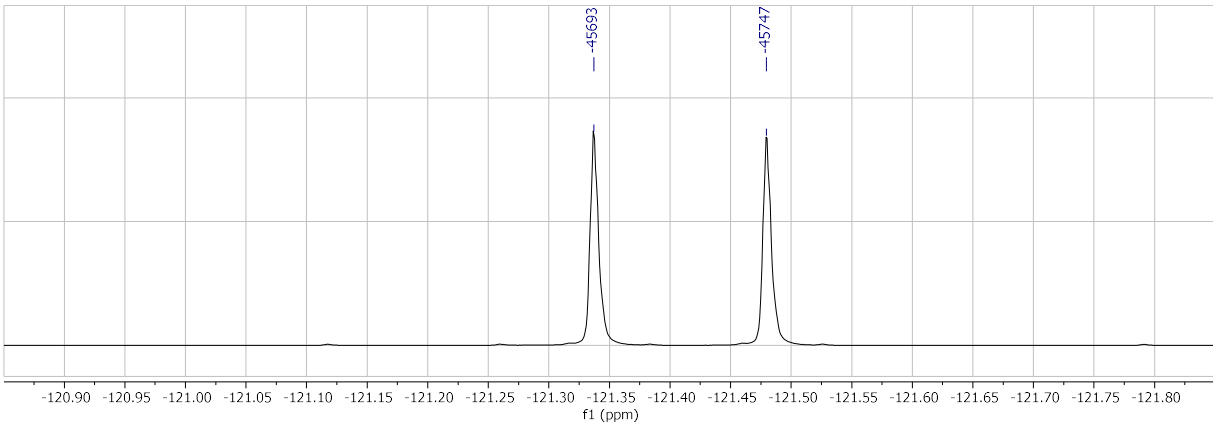
2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

3. Markieren Sie im ^{1}H und ^{13}C-Spektrum die Signale, bei denen man eine Kopplung zu ^{19}F sieht. Erklären Sie die Aufspaltung. (2 P)

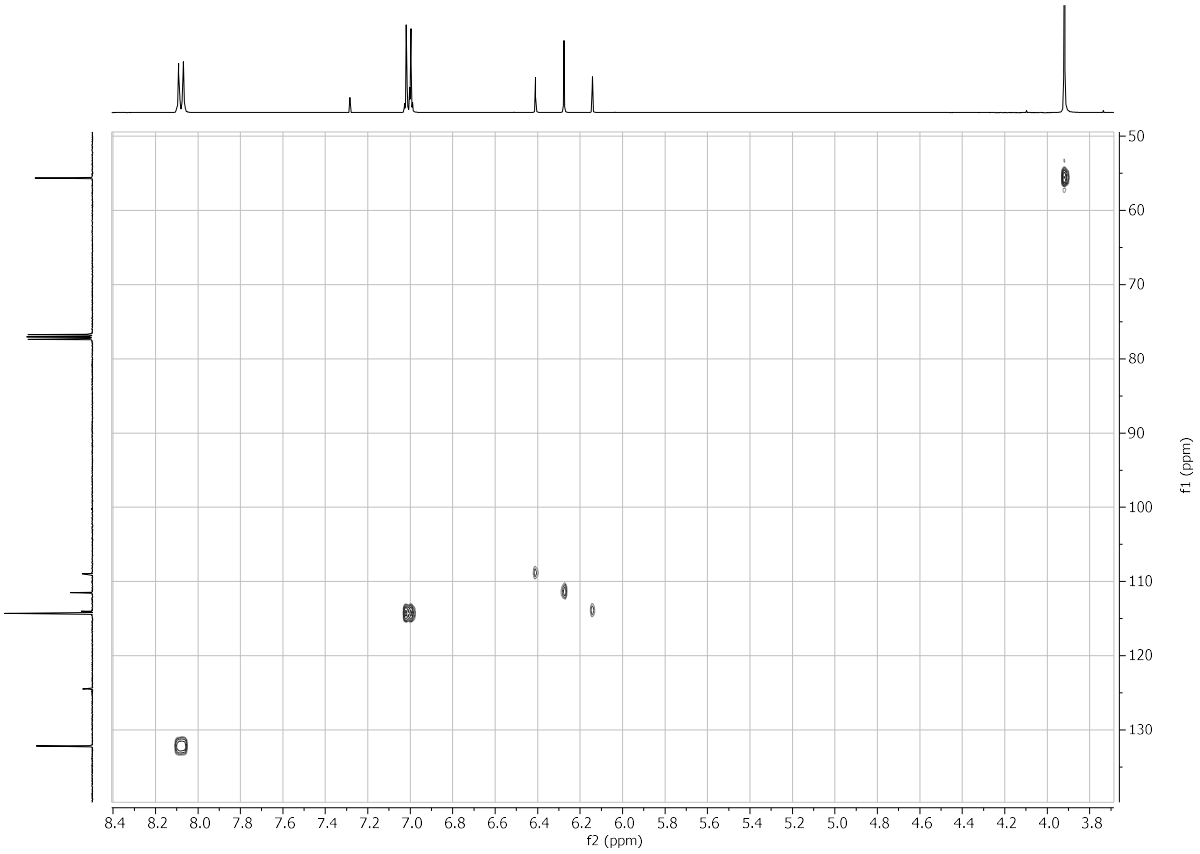
4. Warum sieht man im ^{19}F-Spektrum ein Dublett? Bestimmen Sie die Kopplungskonstante. Bei welcher Frequenz wurde ^{19}F gemessen? (3 P)







19F-Spektrum


f1 (ppm)
f2 (ppm)

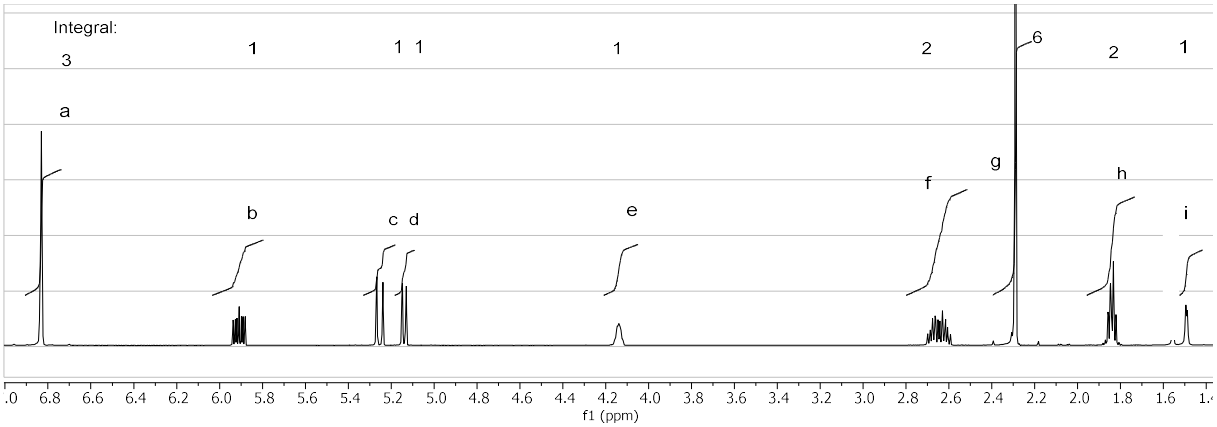
Frage 3: (8 Punkte)

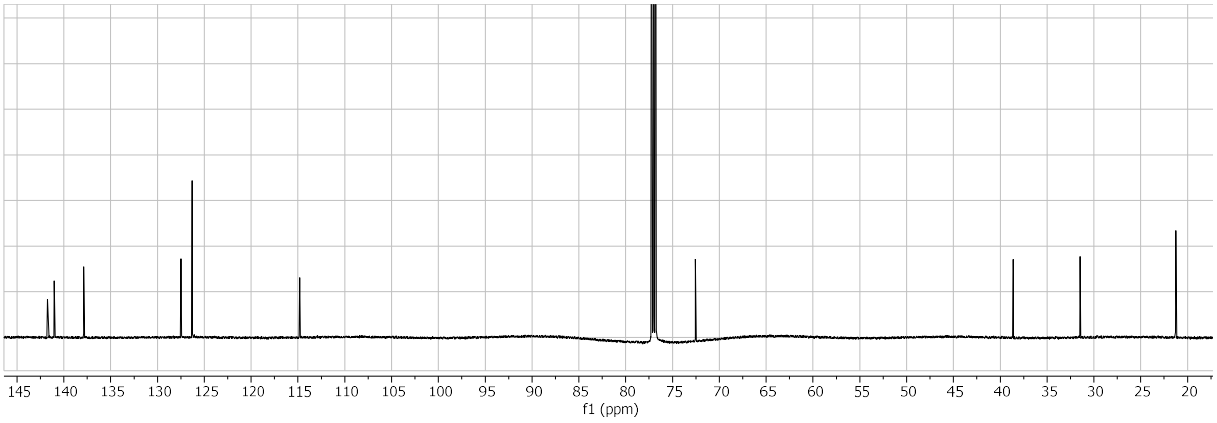
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{13}H_{18}O$.

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

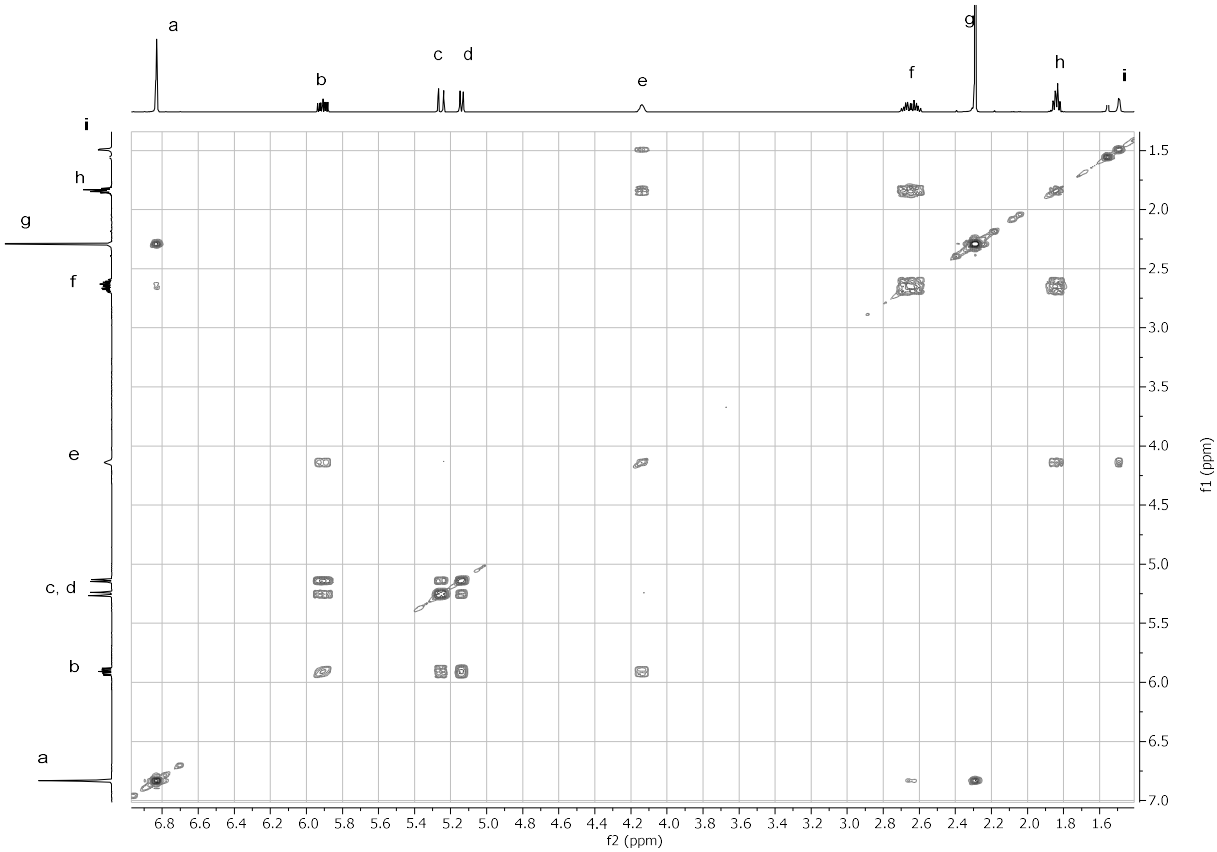
2. Erklären Sie stichpunktartig, wie Sie auf die Fragmente gekommen sind. (3 P)

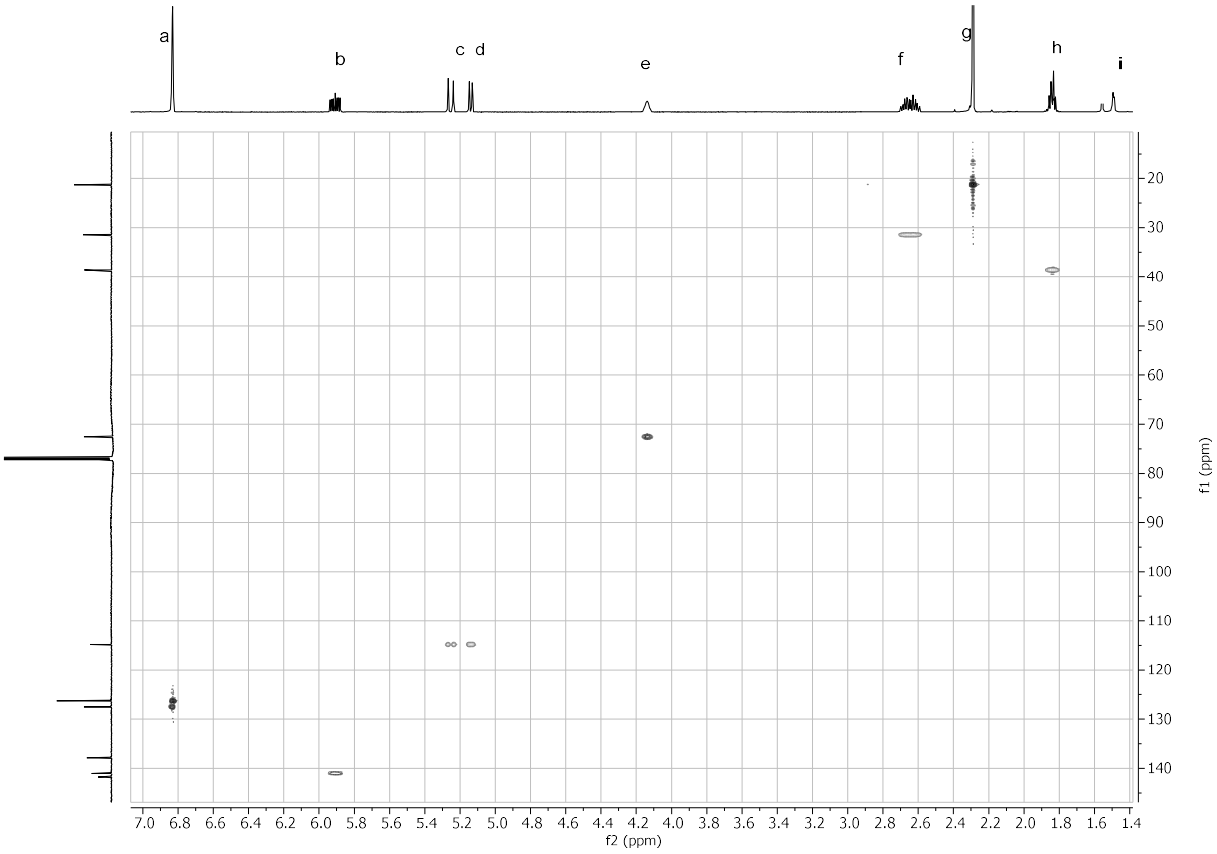
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

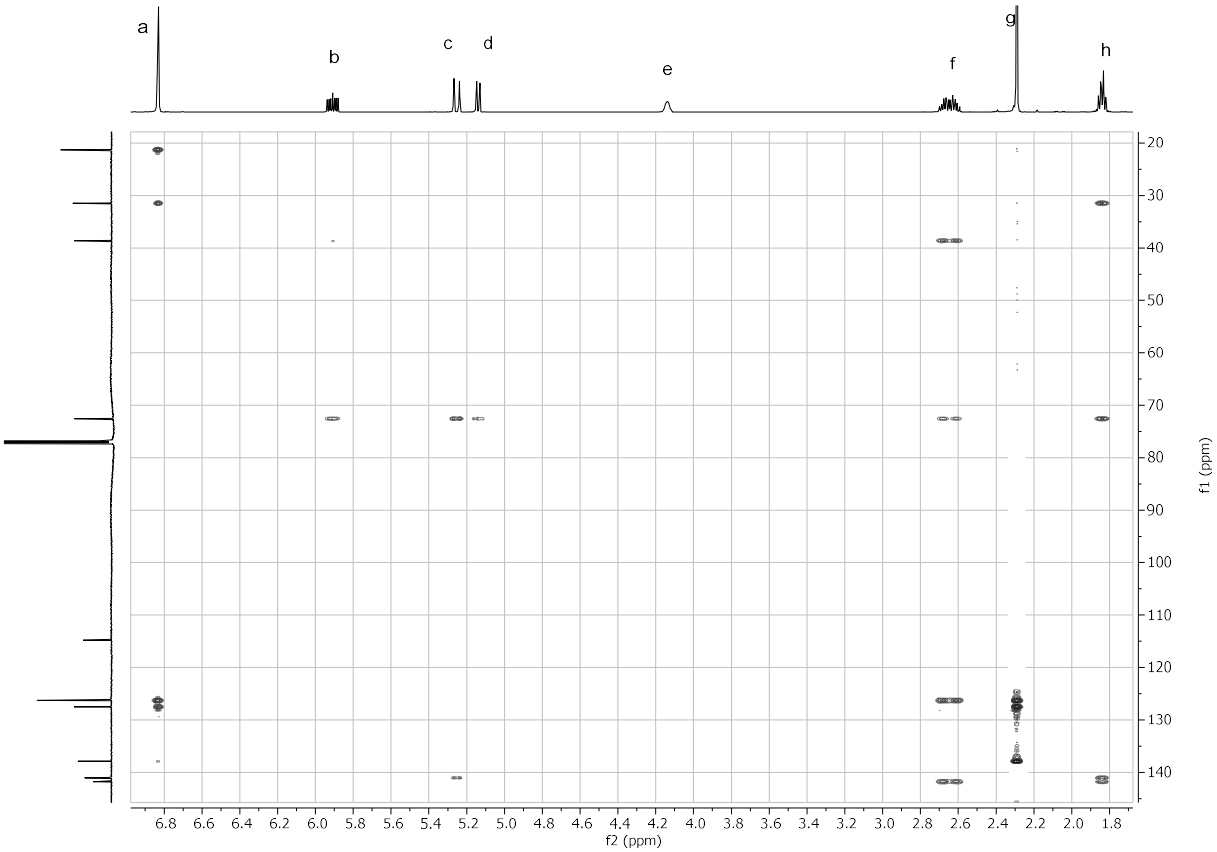




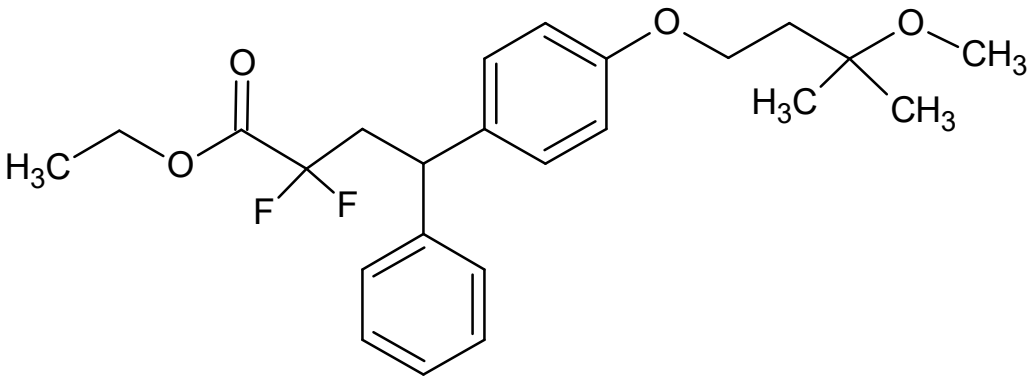
Lassen Sie sich von der krummen Grundlinie nicht stören !!

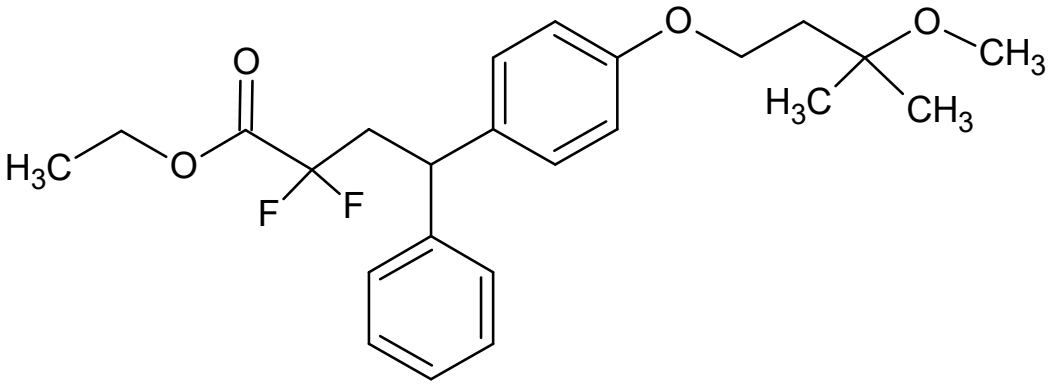



a
b
c d
e
f
g
h
i
f1 (ppm)
f2 (ppm)


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

Frage 4: (14 Punkte)

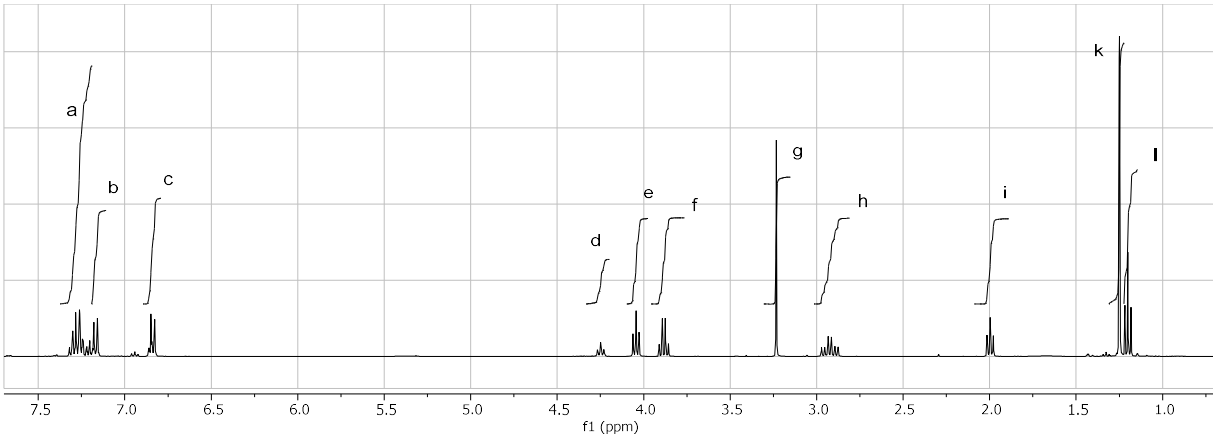


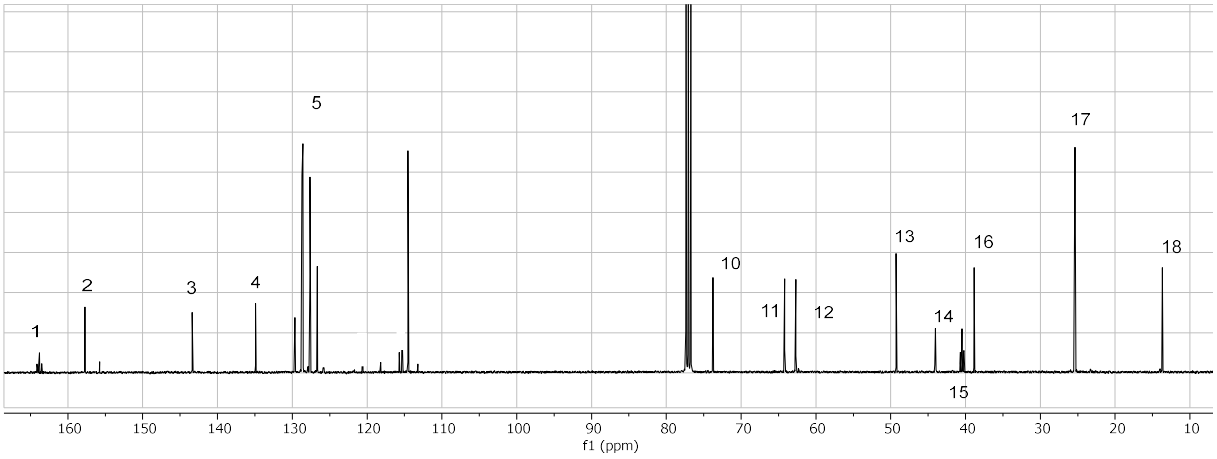


1. Ordnen Sie alle nicht aromatischen Signale zu. (11 P)
   (Die beiden Strukturen sind nur da, falls Sie eine verschmieren)

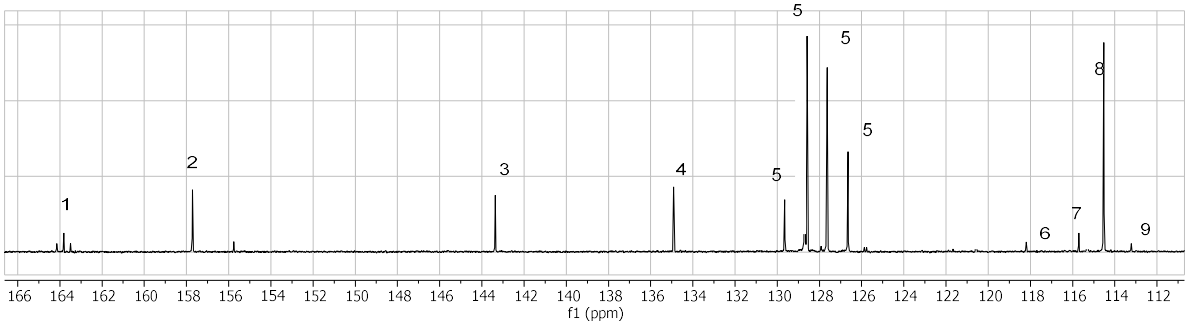
2. In den Spektren gibt es 2 verschiedene Triplett-Arten:
   z. B. Signal im 19F-Spektrum: Triplett mit Intensität 1:2:1
   z. B. Signal im 13C-Spektrum: Triplett mit Intensität 1:1:1.

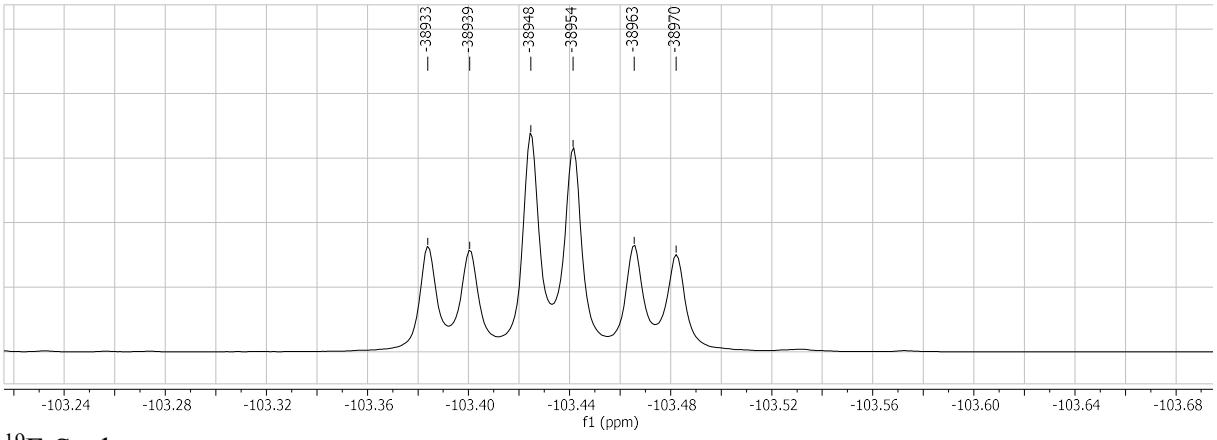
   Wie/warum kommt es zu diesen beiden verschiedenen Intensitätsverhältnissen? (3 P)



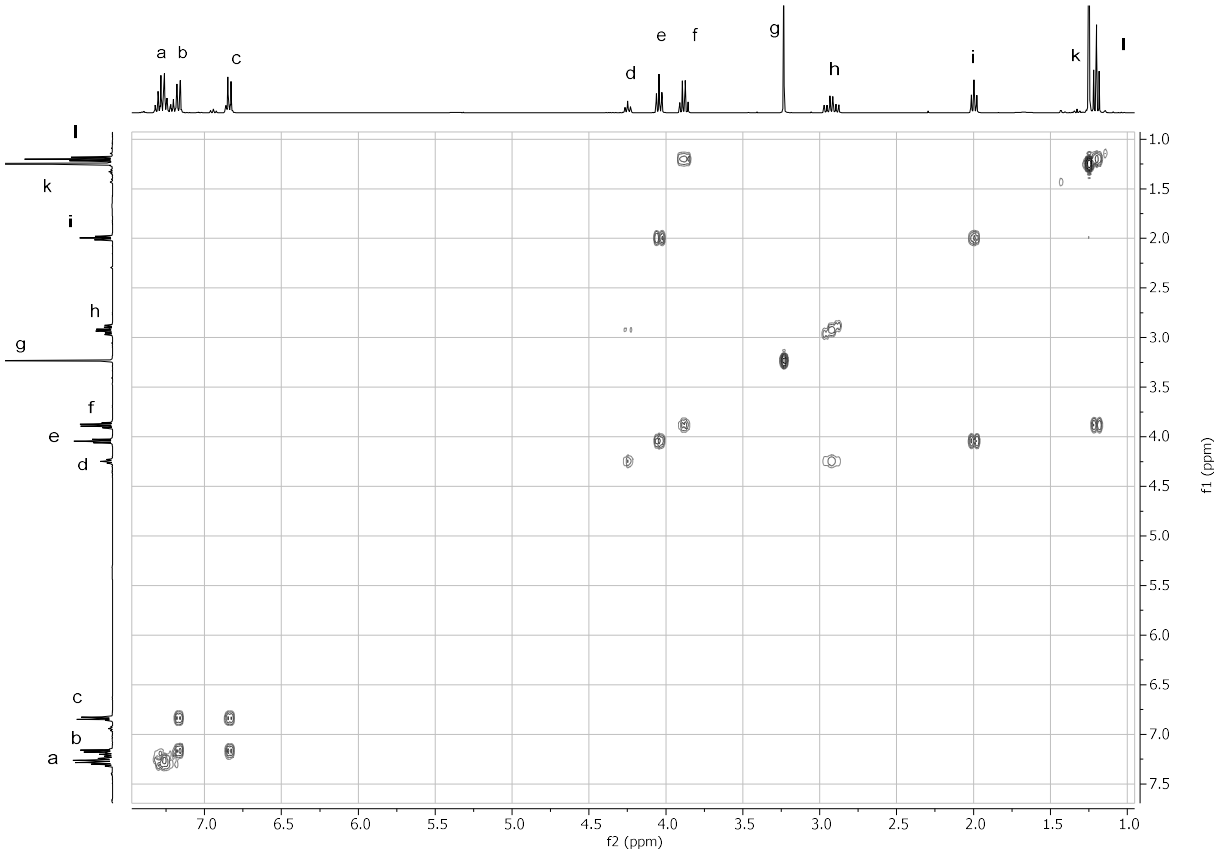


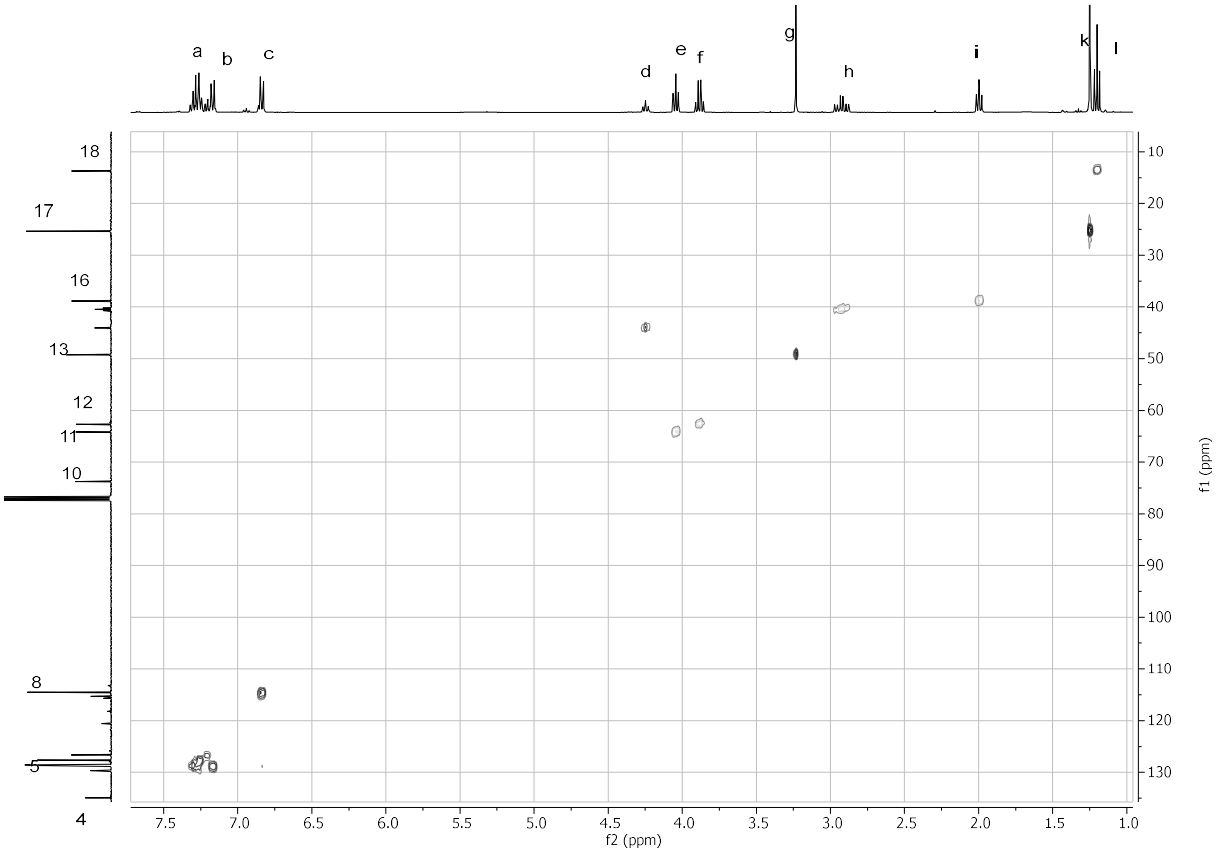
Vergrößerungen:

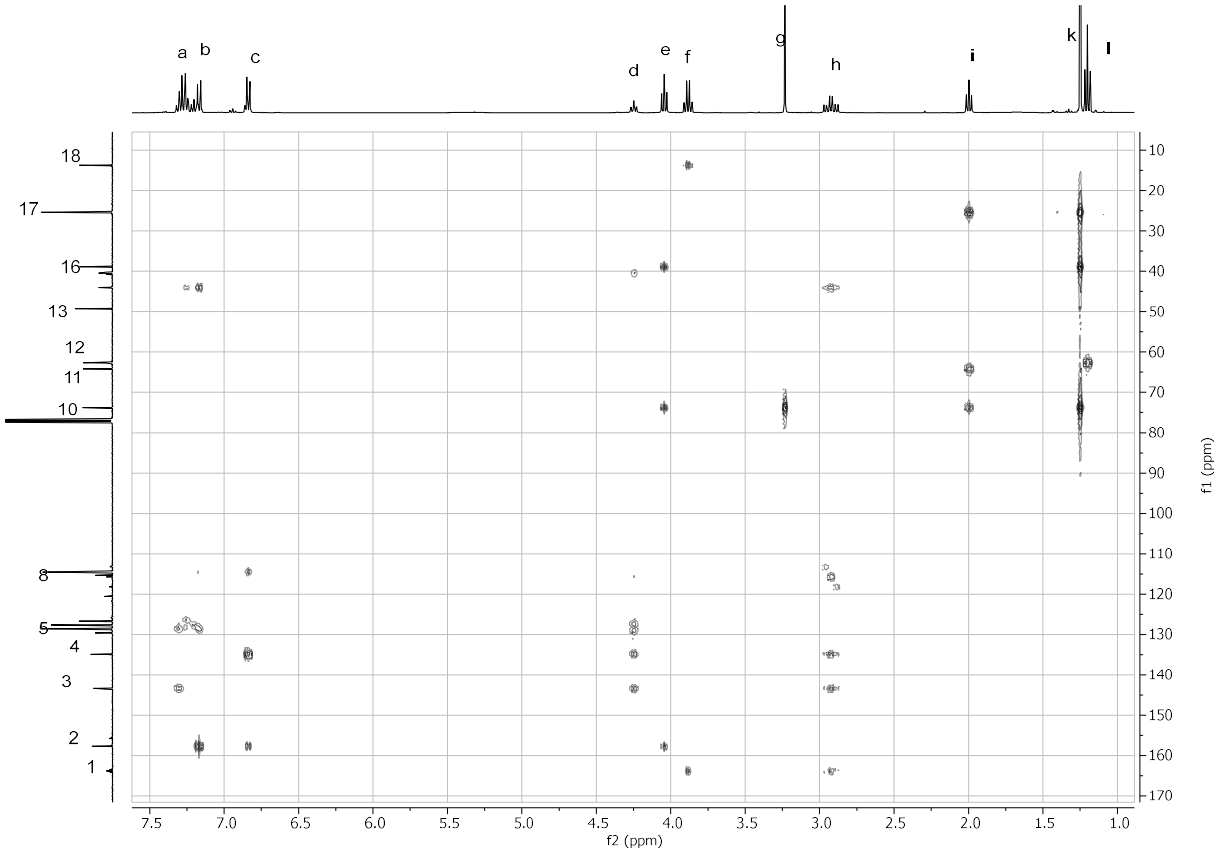




^{19}F-Spektrum


a b c d e f g h i k l
f2 (ppm)
f1 (ppm)

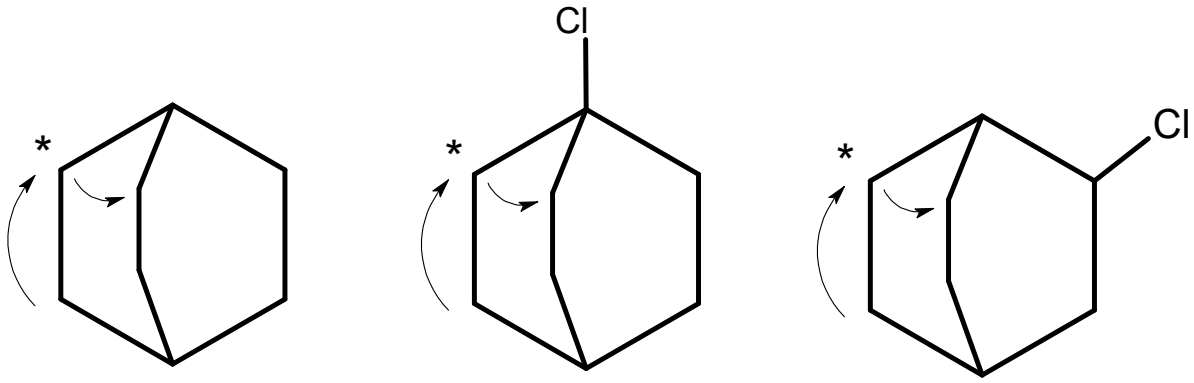

a b c d e f g h i k l
18 17 16 13 12 11 10 8 5 4
f2 (ppm)
f1 (ppm)


a
b
c
d
e
f
g
h
i
k
l
18
17
16
13
12
11
10
8
5
4
3
2
1
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
f2 (ppm)
10
20
30
40
50
60
70
80
90
100
110
120
130
140
150
160
170
f1 (ppm)

Frage 5: Theorie (28 Punkte)

1. Bestimmen Sie, ob die Protonen der mit * gekennzeichneten CH_2-Guppen homotop, enantiotop oder diastereotop sind.
   Bestimmen Sie, ob die mit. Pfeil gekennzeichneten Guppen homotop, enantiotop oder diastereotop sind. (3 P)

   Wieviele Signale erwarten Sie im ^{1}H-Spektrum (3 P)



Anzahl
Signale:

2. Probenvorbereitung:
   a) Warum verwendet man deuterierte Lösungsmittel
      2 Gründe, mit Erklärung (4 P)
   b) Warum muß man eine bestimmte Füllhöhe einhalten? (2 P)
   c) Was muß man tun, wenn man nur sehr wenig Substanz hat, um ein gutes Spektrum zu bekommen? (3 P)

3. Zeichnen Sie ein Spektrum (^{1}H , ^{13}C (1H entk.) und ^{13}C (1H gek.)) für folgende Verbindungen: (6 P)
   Erklären Sie kurz die Aufspaltung.

	^{1}H	^{13}C (entk)	13C(gek)
$^{13}CHCl_3$			
$^{13}CDCl_3$			

4. Was verstehen Sie unter dem Begriff ‚Relaxation' in der NMR-Spektroskopie (3 P)

5. Ein Proton sitzt in der Nähe einer e^--ziehenden Gruppe und kommt darum weiter links im Spektrum. Warum? Erklären Sie. (4 P)