

WS22 Name

Matrikelnr.....

Spektroskopie 2 (NMR)
WS 2022 Klausur

13.12.2022

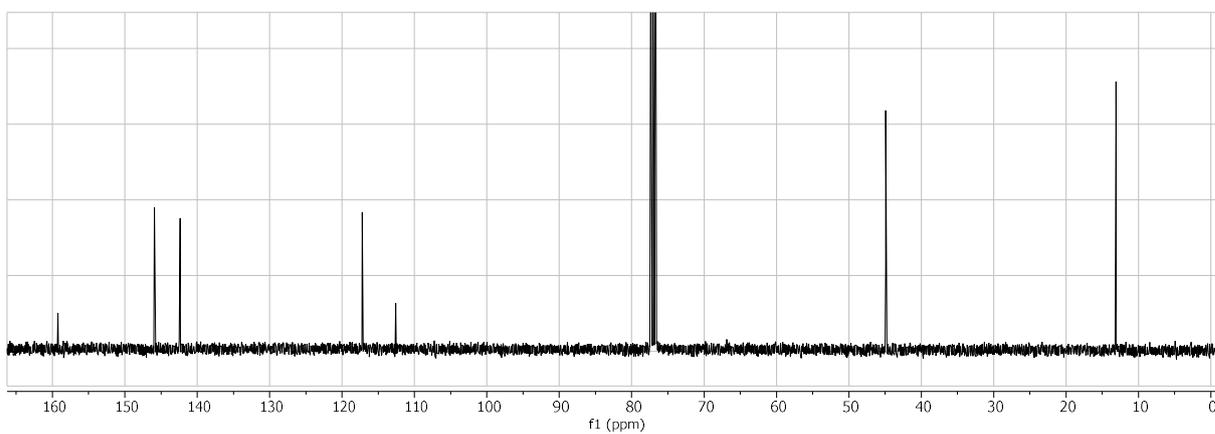
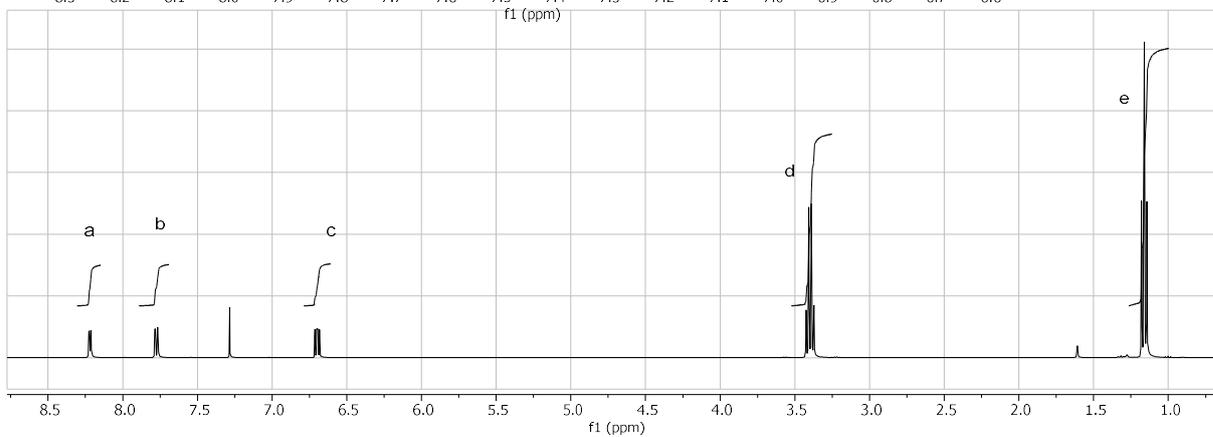
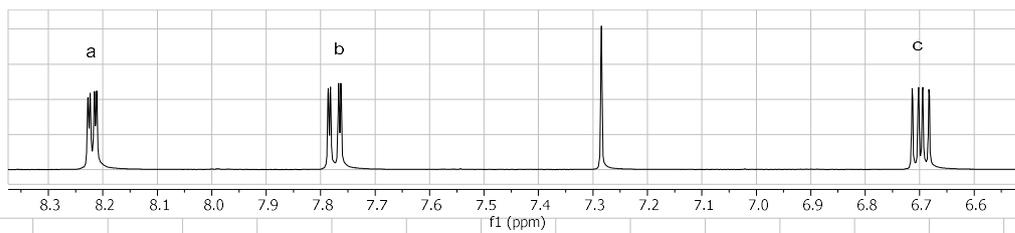
Frage 1: (9 Punkte)

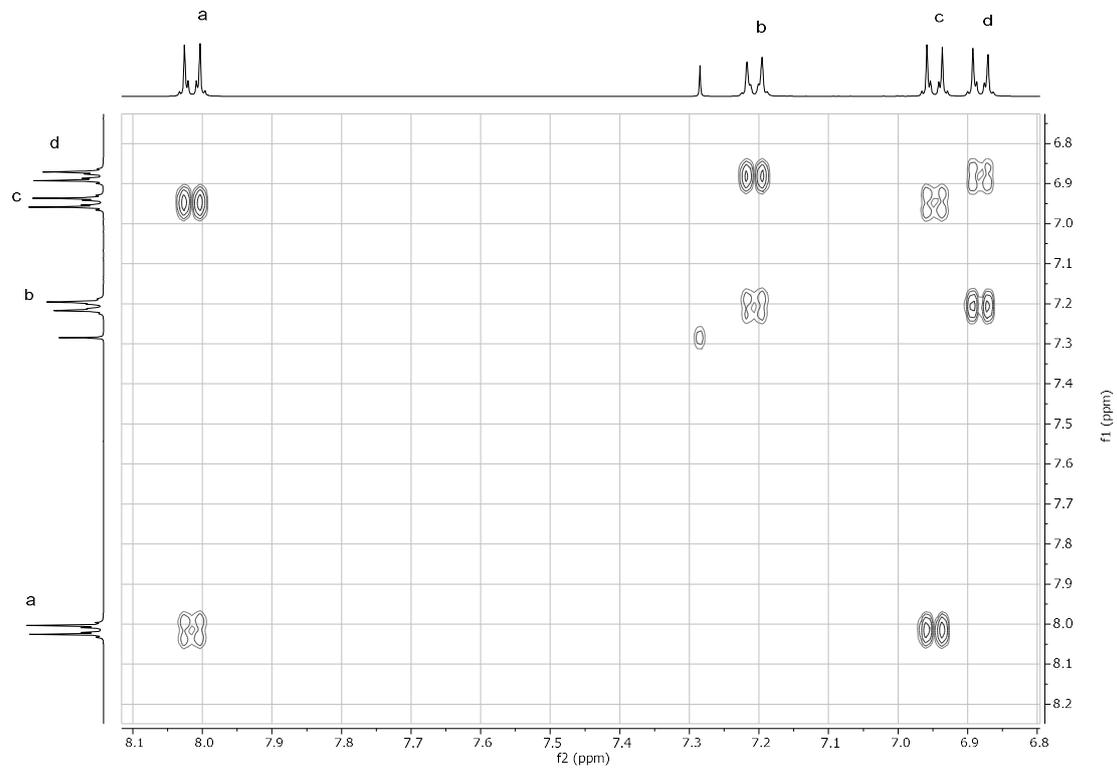
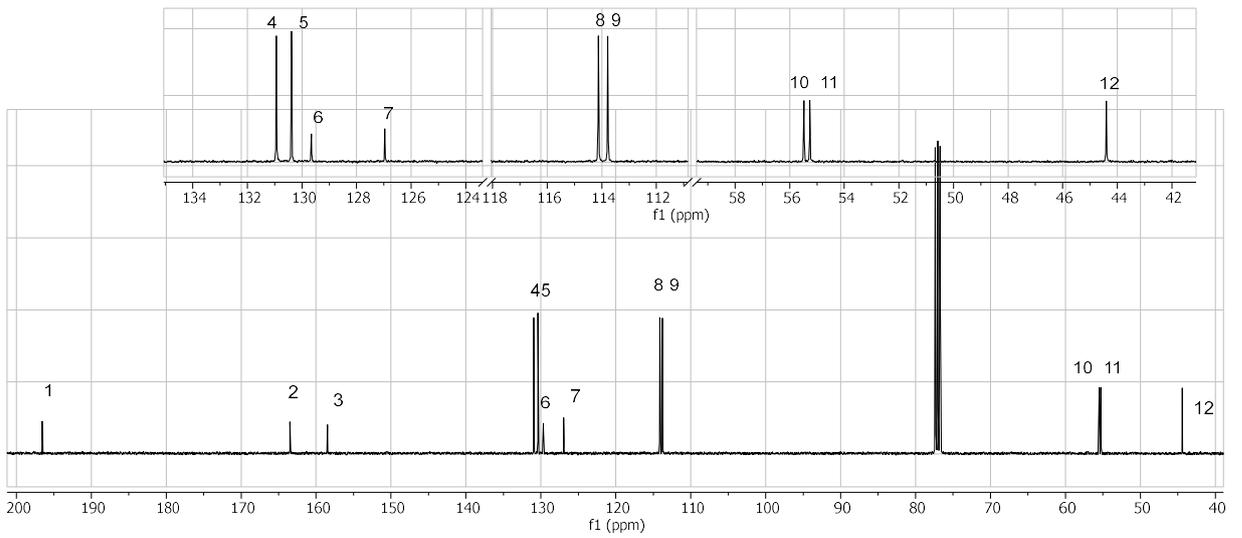
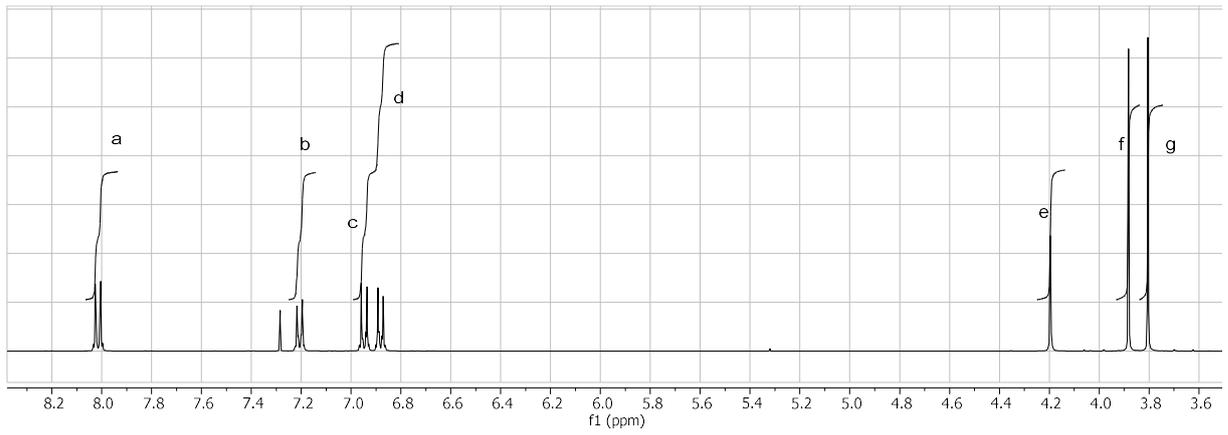
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_9H_{13}BrN_2$.

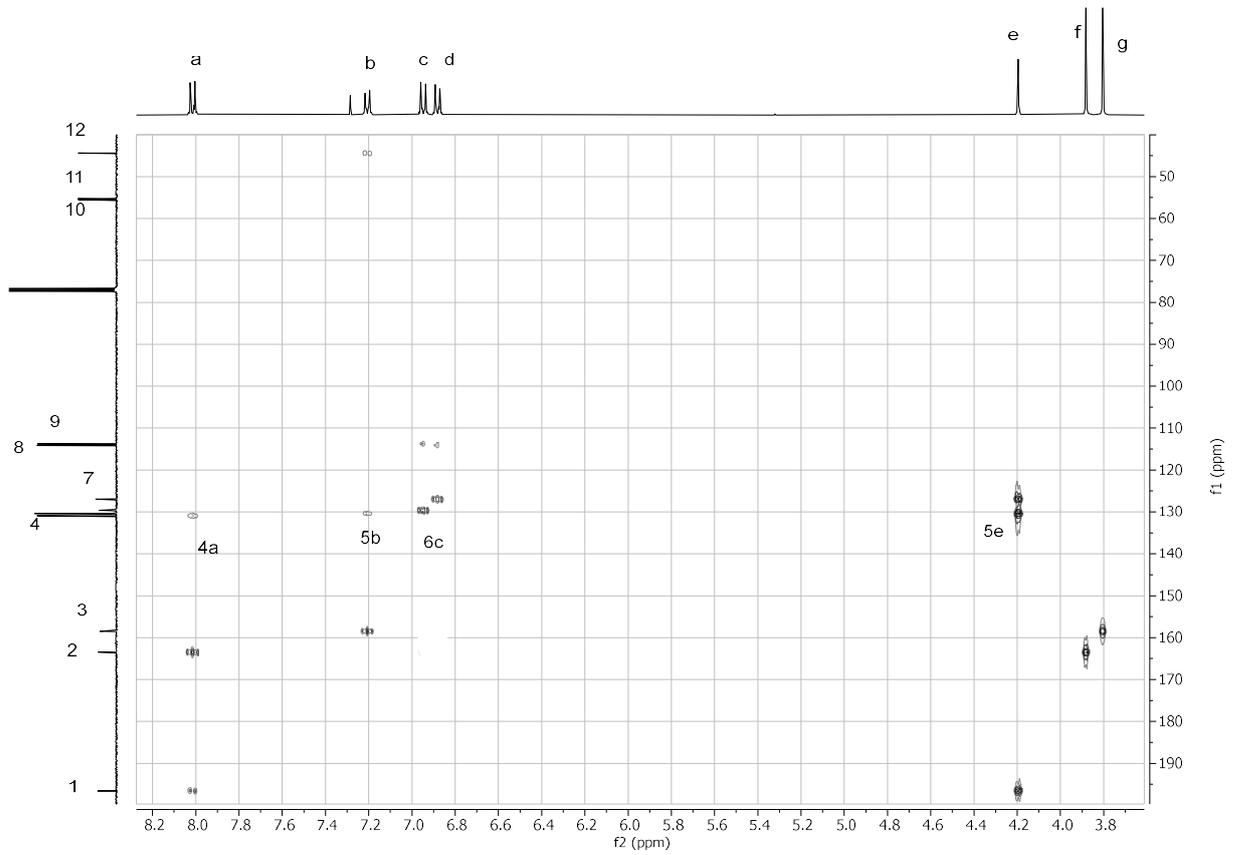
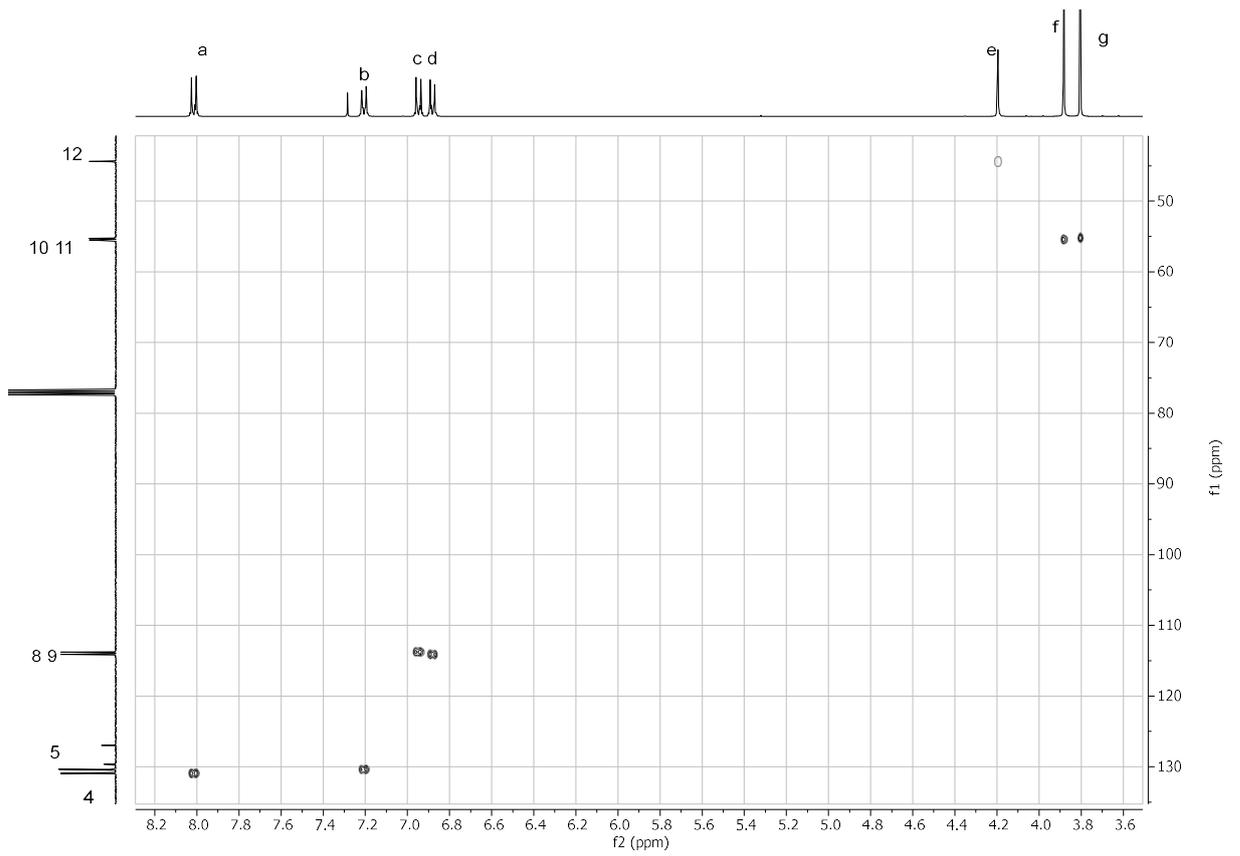
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (3 P)

2. Mit diesen Fragmenten sind 2 sinnvolle Struktur möglich. Welche? (2 P)

3. Was würden Sie messen lassen, um sich für eine Struktur entscheiden zu können. Erklären Sie auch warum und was Sie in beiden Fällen sehen sollten. (4 P)







Frage 3: (13 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{11}H_{11}BrO_2$.

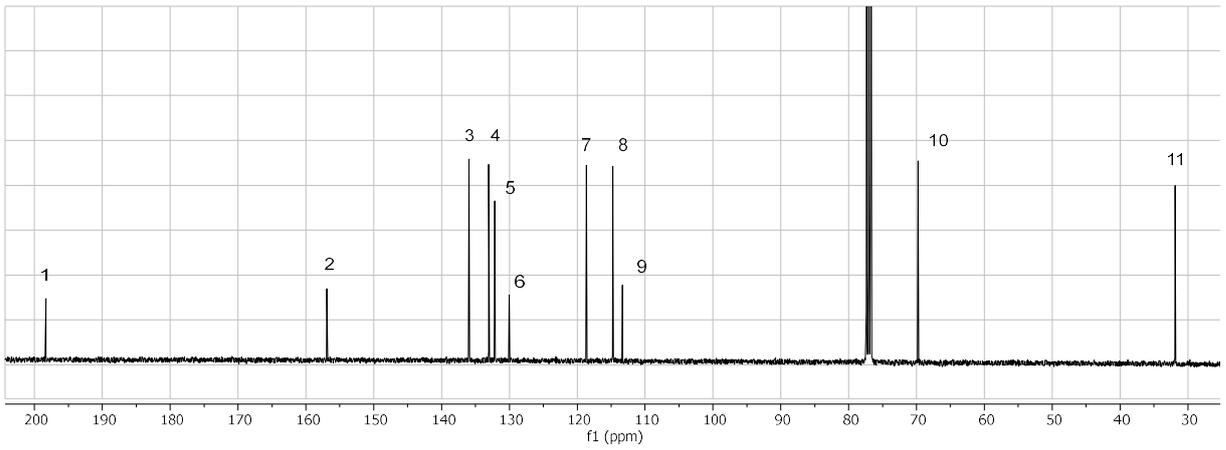
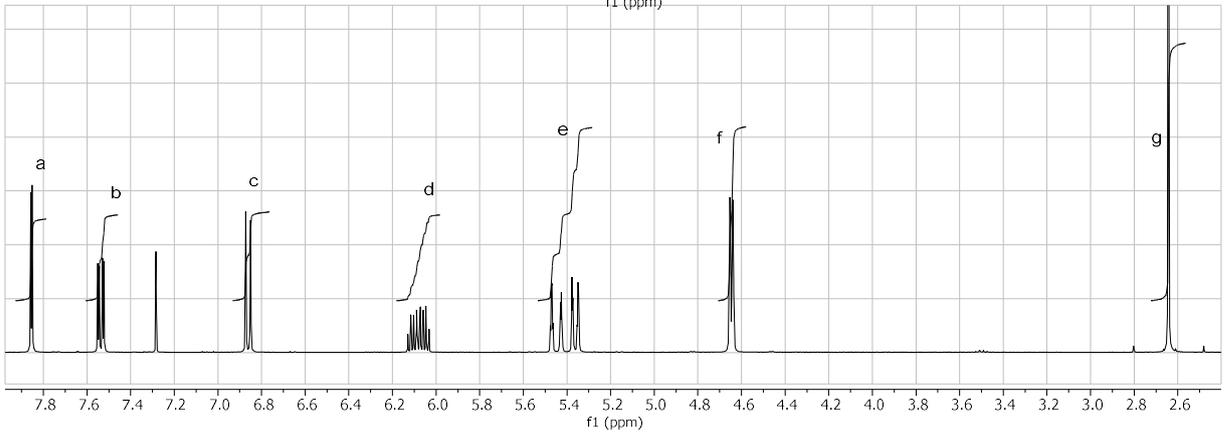
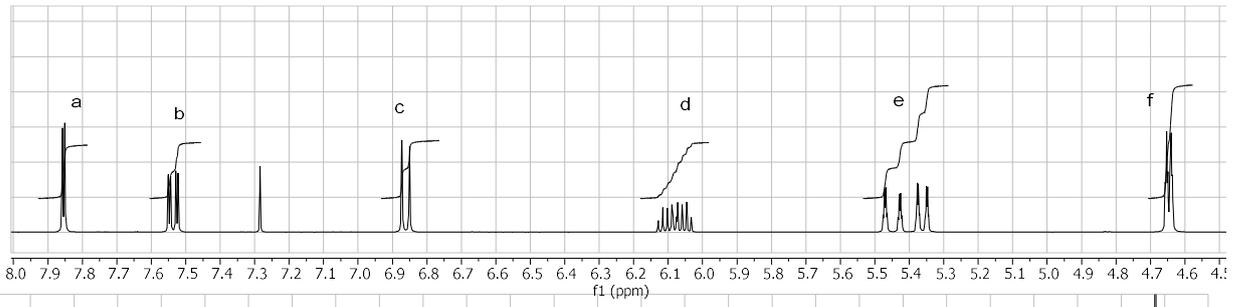
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (4 P)

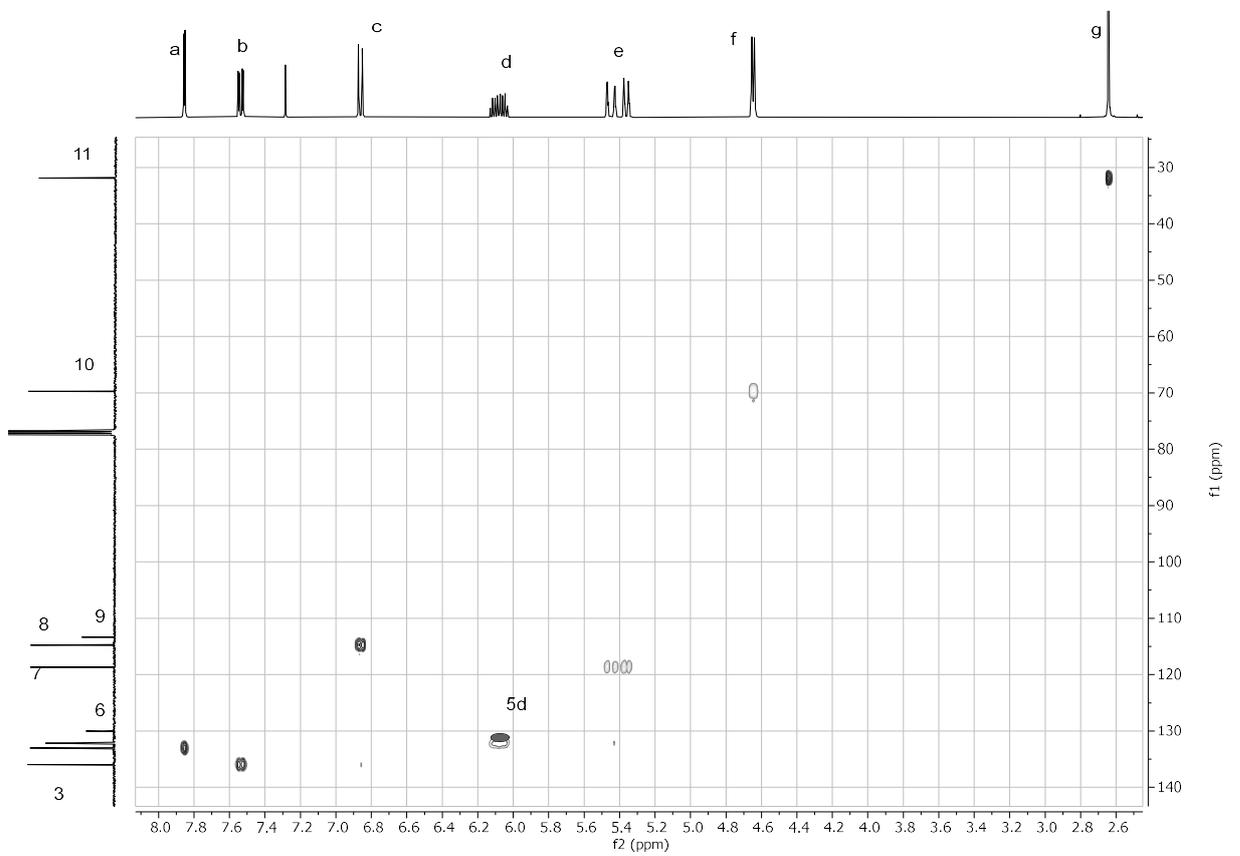
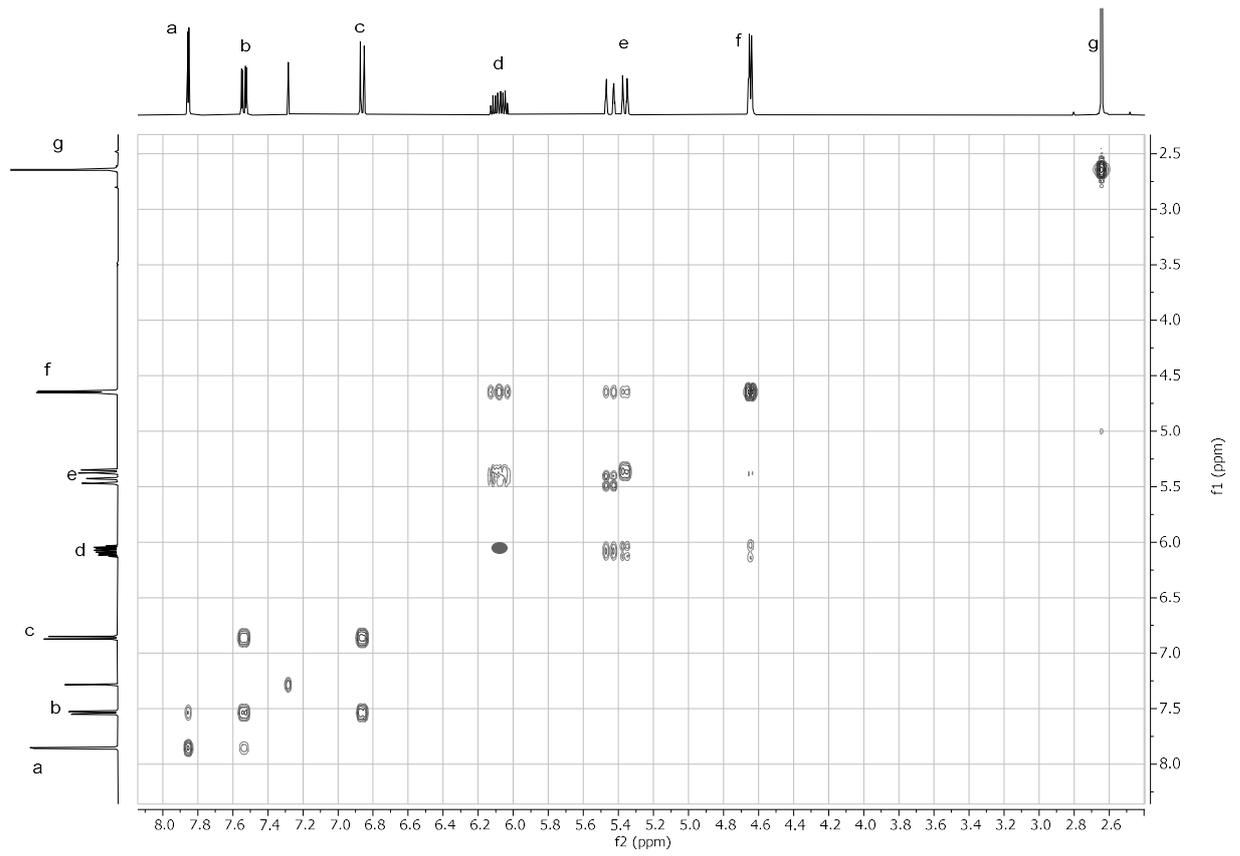
2. Ordnen Sie alle Protonen incl. dazugehörigem C zu. (4 P)

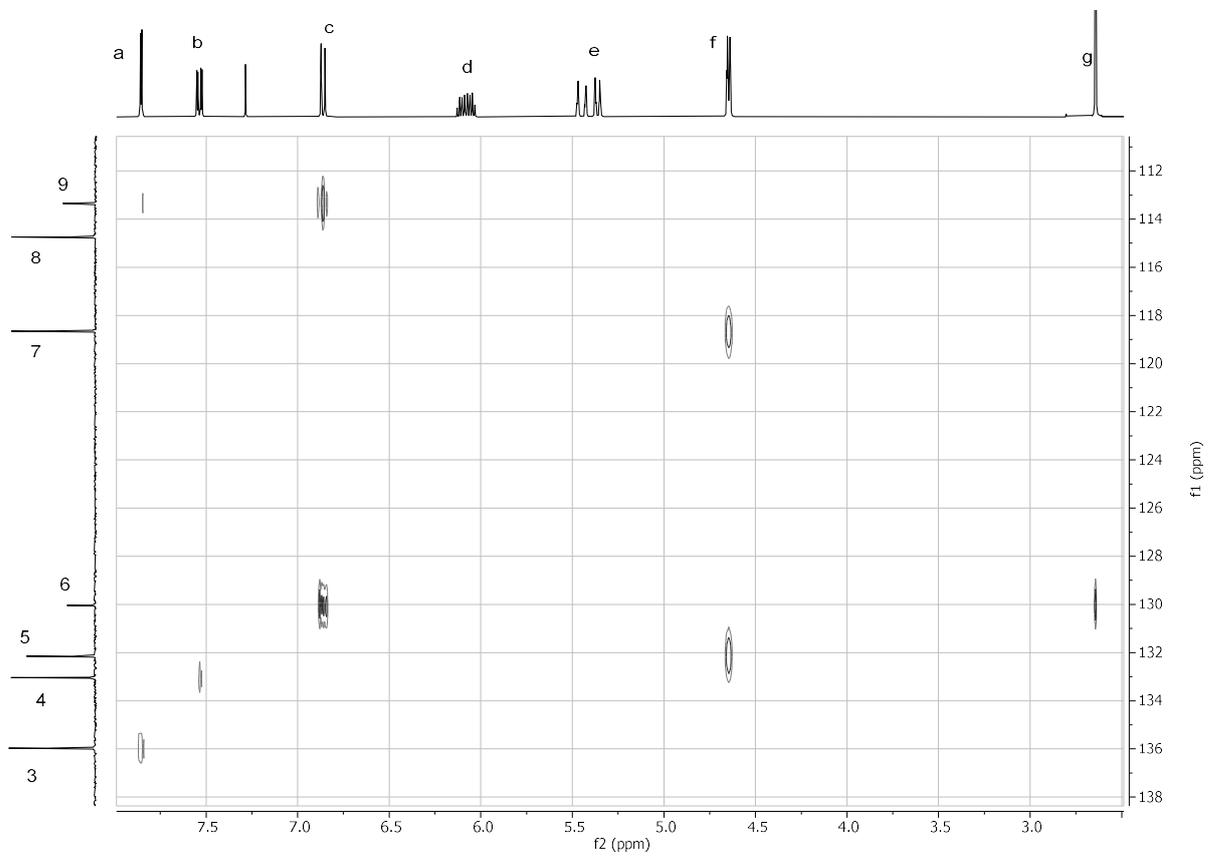
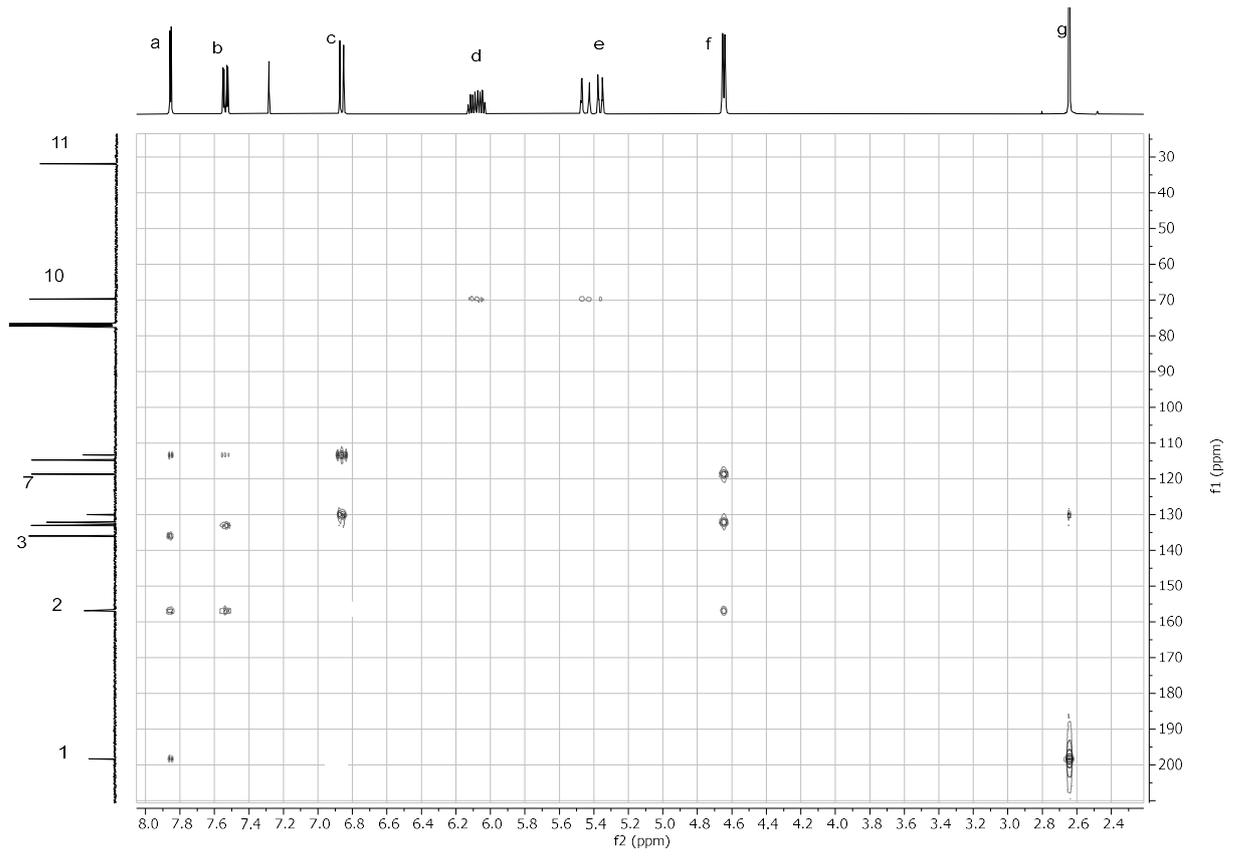
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

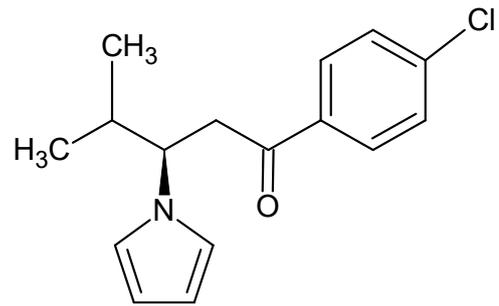
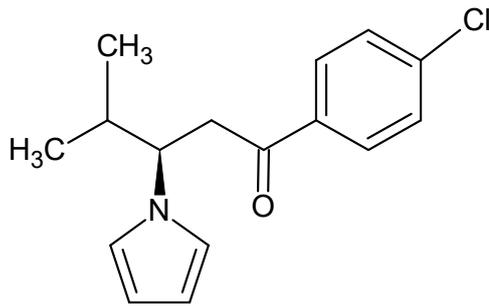
4. Erklären Sie die Aufspaltung von Proton e. Warum sind es 4 Signale mit unterschiedlichem Abstand? (2 P)

5. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbaren Kopplungen für Kohlenstoff 1 und 2 ein. Erstellen Sie eine Tabelle für C_1 und C_2 , ähnlich wie in Frage 2. (2 P)

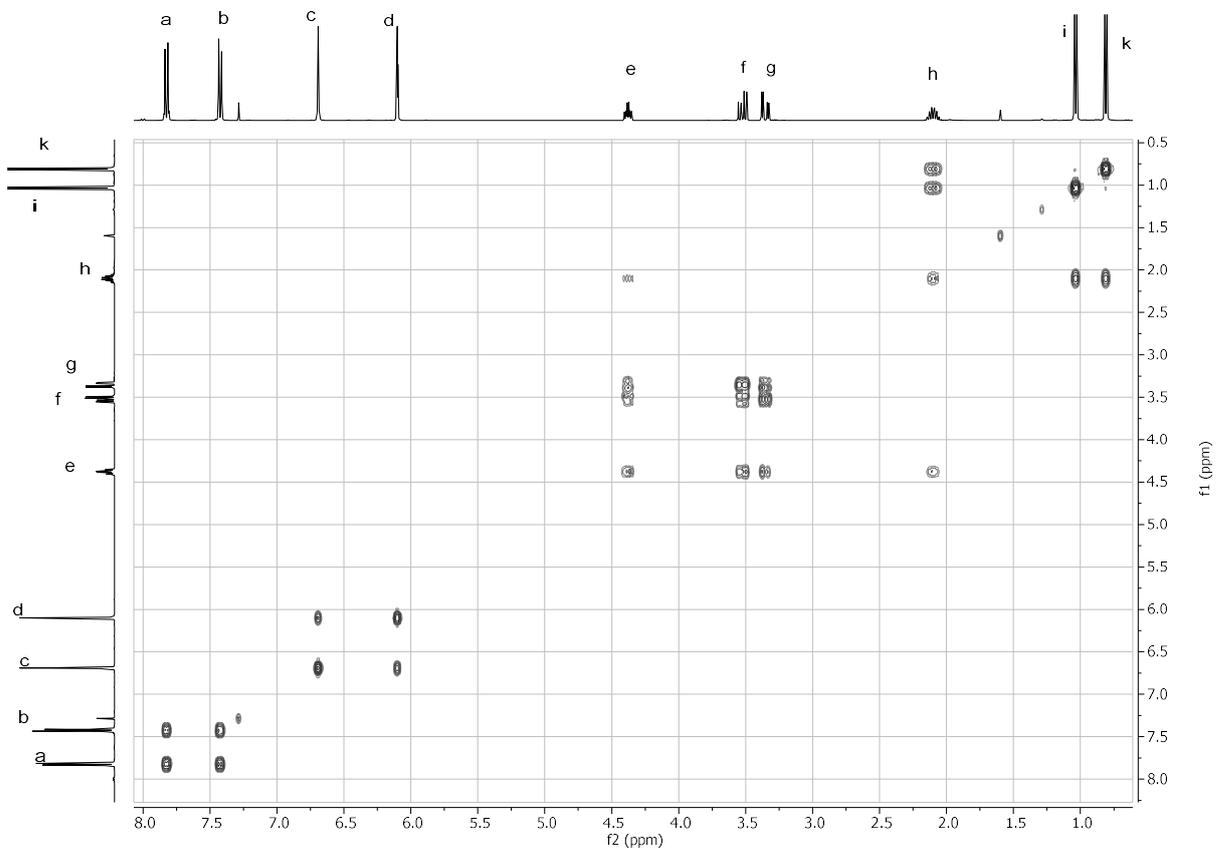
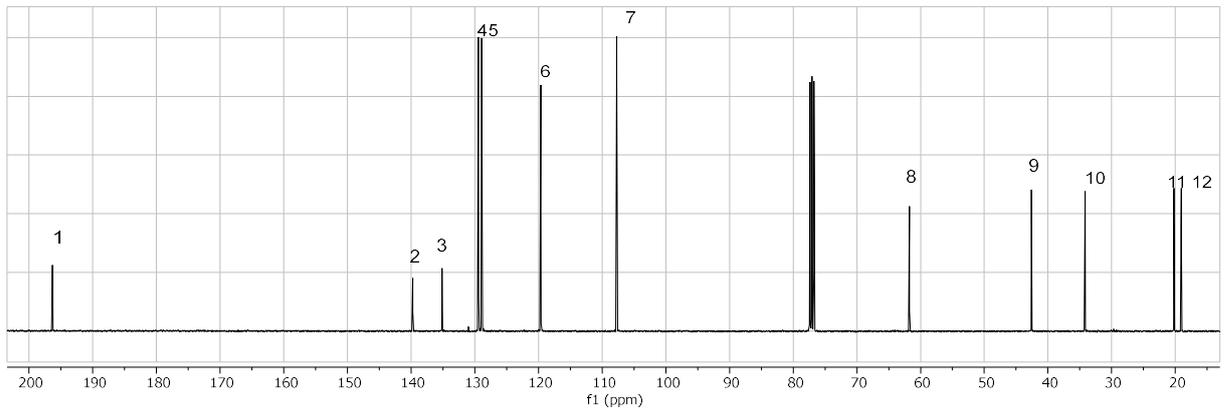
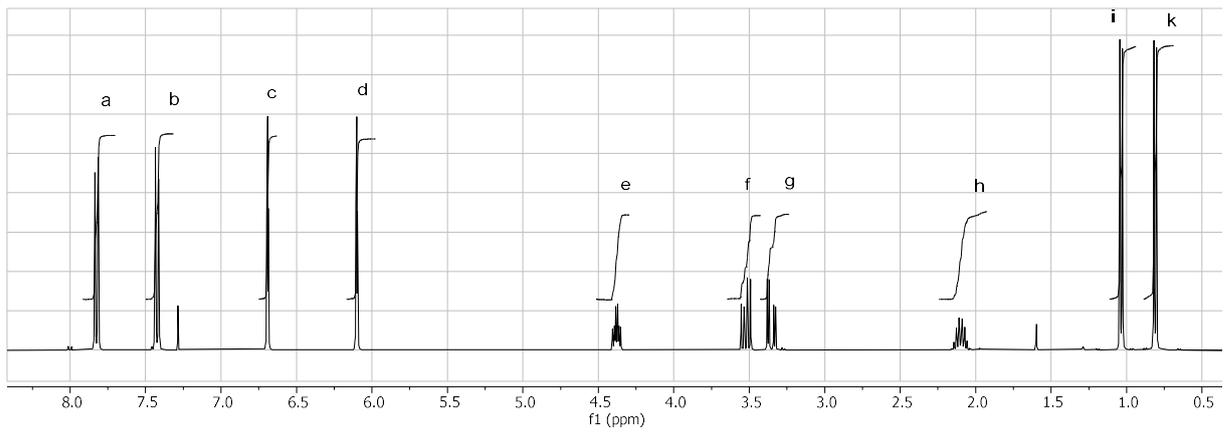


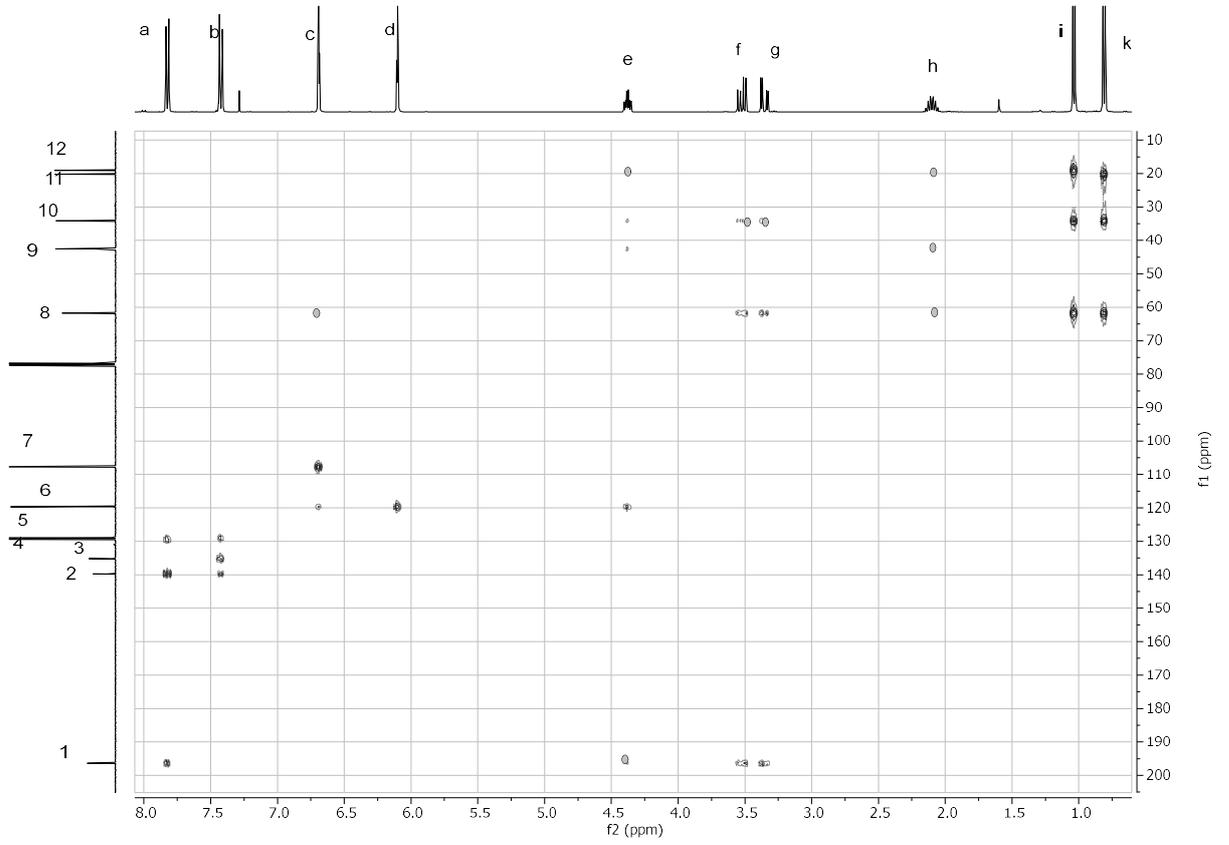
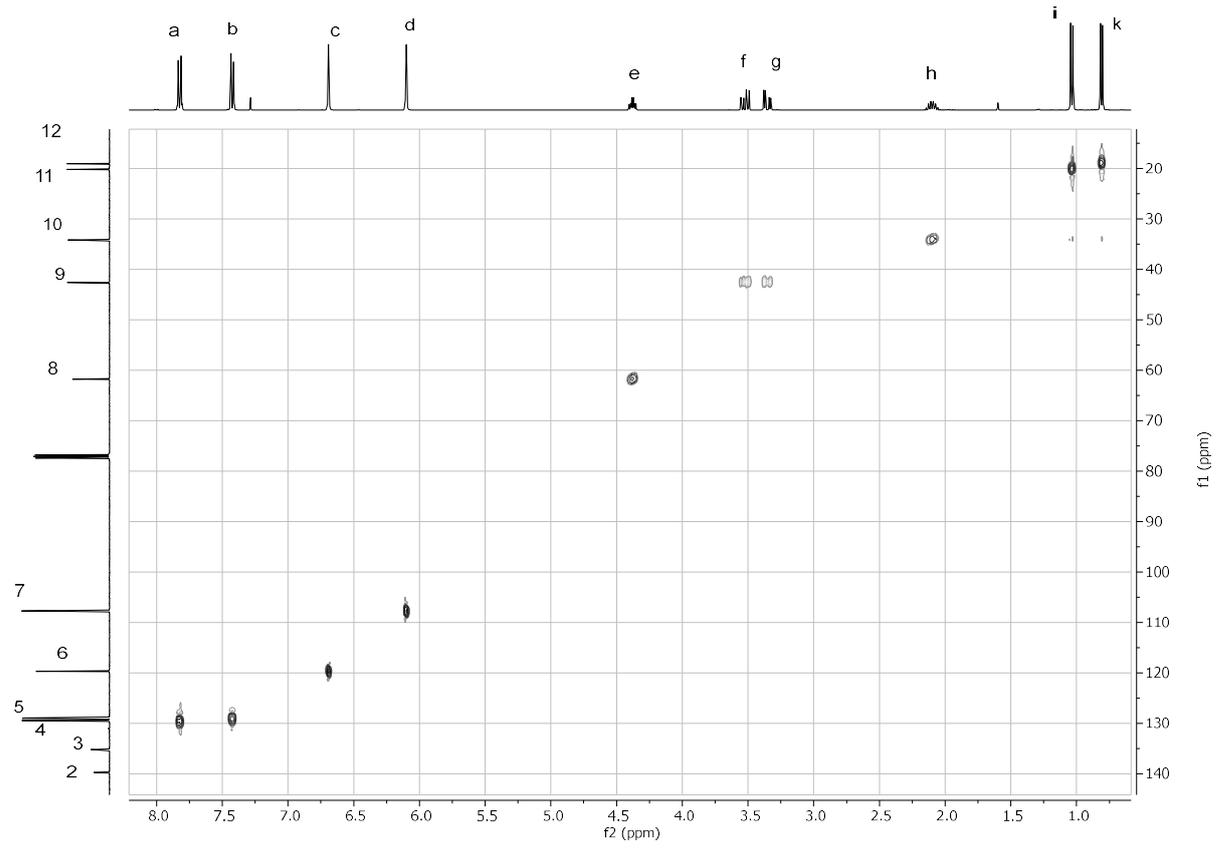


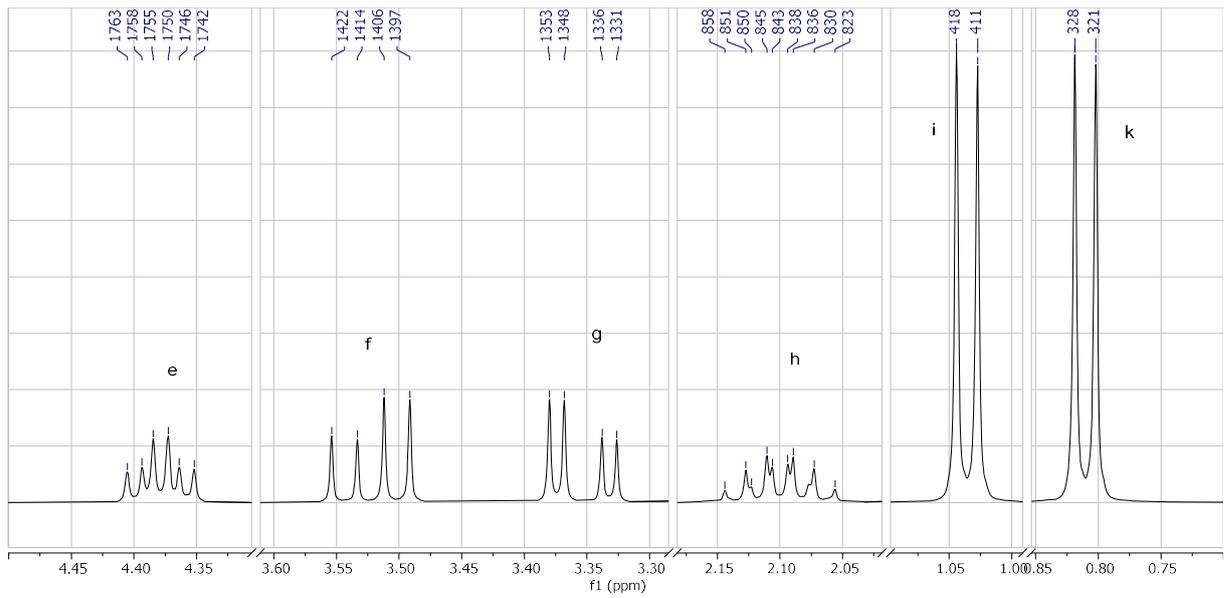


Frage 4: (16 Punkte)

1. Ordnen Sie alle Signale zu. (6 P)
(Die beiden Strukturen sind nur da, falls Sie eine verschmieren)
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für alle aliphatischen Protonen (9 P)
incl. den Kopplungskonstanten. Es muß ersichtlich sein, woher Sie den Wert der
Kopplungskonstante haben. Zeichnung auf Seite 13
3. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)







Frage 4.2 Splittingschlüssel:

Frage 5: Theorie (19 Punkte)

1. Die NMR-Frequenz ν wird berechnet mit der Formel

$$\nu = \frac{\gamma * B_{\text{eff}}}{2 * \pi}$$

- Was bedeuten die Parameter γ und B_{eff} (1 P)

- Was passiert mit der Frequenz eines Signals, wenn man die Magnetfeldstärke verdoppelt? (1 P)

- Ein Signal, das auf einem 300 MHz-Gerät bei 1 ppm kommt, hat die gleiche Verschiebung bei 600 MHz. Warum? (1 P)

- Warum ist die Messfrequenz für Protonen 4 x so groß wie die von ^{13}C ? (1 P)

- Was ist der Unterschied zwischen B_0 und B_{eff} ? Ist B_{eff} größer oder kleiner als B_0 ? (4 P)

2. Wie schauen die Spektren zu folgenden Spinsystemen aus? Geben Sie auch je ein Beispiel. (4 P)

AB₂

ABC ($J_{AB} > J_{AC}$)

3. ¹³C (¹H-entkoppelte) Spektren

a) Was bedeutet ‚entkoppelt‘? Was tut man dabei?

(2 P)

b) Welche Vor-/bzw. Nachteile haben sie?

(2 P)

c) Zeichnen Sie zwei Spektren von Isopropanol:
 ^{13}C (1H-entk.)

(2 P)

^{13}C (1H-gekoppelt)