

Spektroskopie 2 (NMR)

SS 2025 Klausur

7.8.

23.12.2025

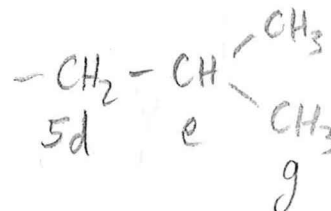
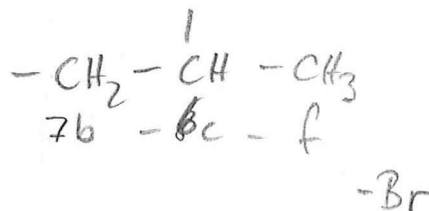
Frage 1: (10 Punkte)

Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{13}H_{19}Br$.

Hinweis: Das Signal bei 7.2 ppm ist ein paradisubst. Aromat !

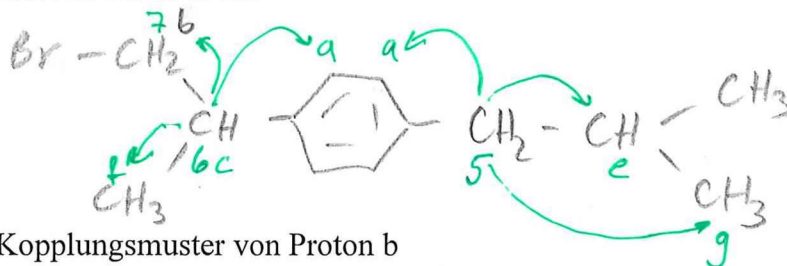
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren?

(5 P)



2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an.

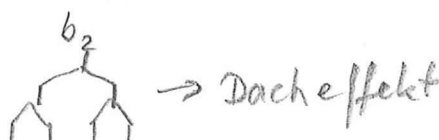
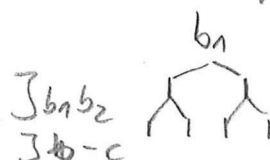
(1 P)



3. Erklären Sie das Kopplungsmuster von Proton b

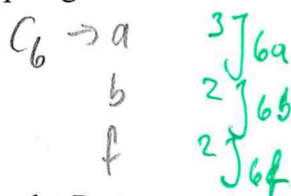
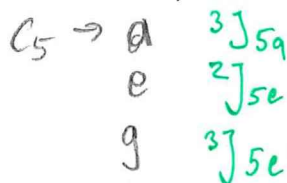
(2 P)

b: diastereotop CH₂-Gruppe



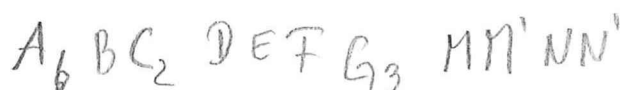
4. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbaren Kopplungen von C₅ und C₆ ein.
Geben Sie an, um welche Kopplung es sich handelt.

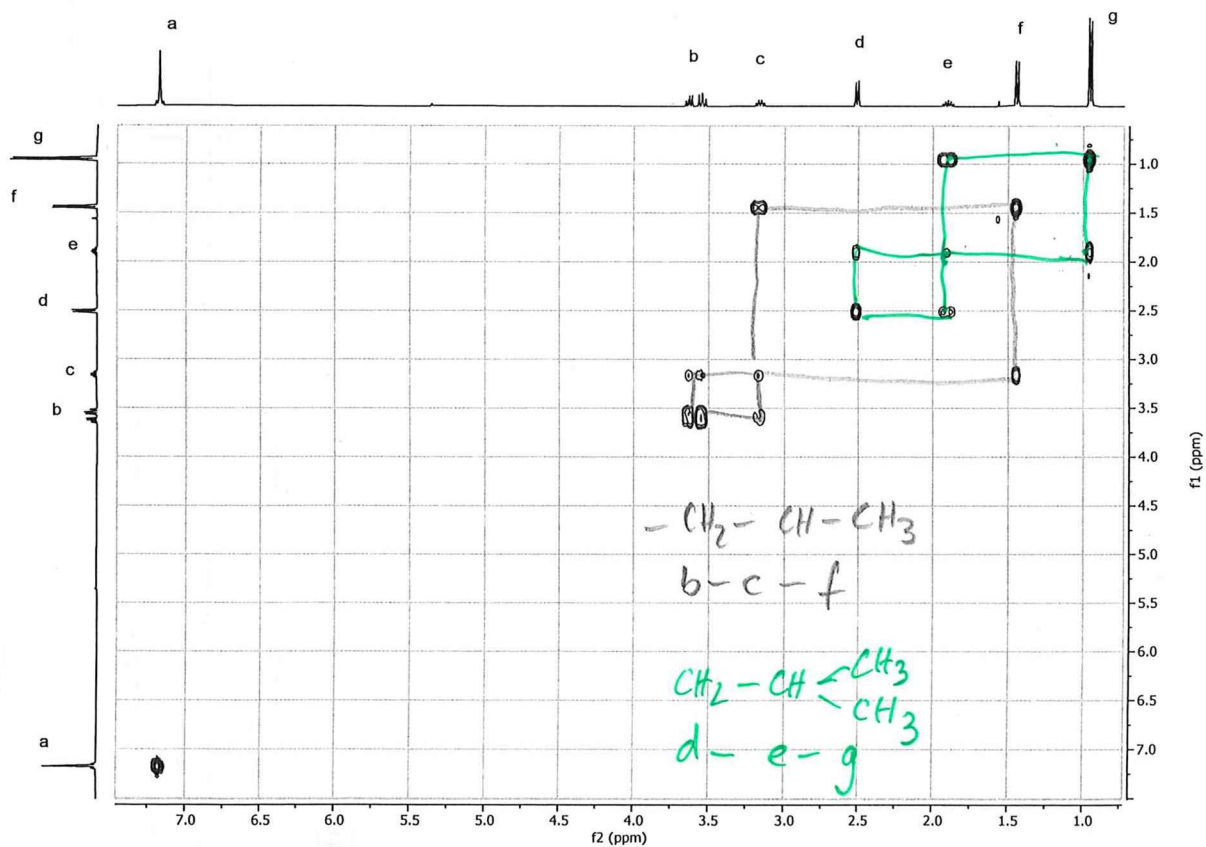
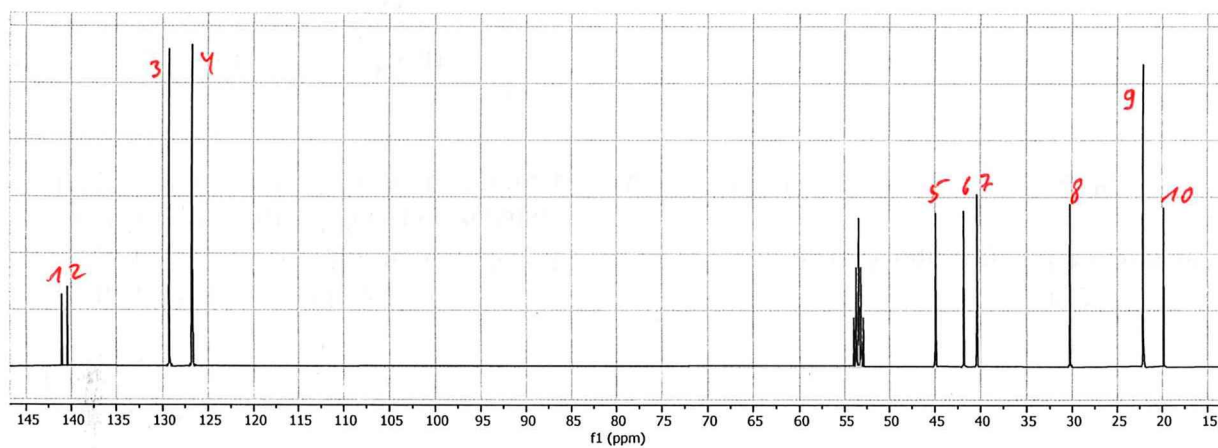
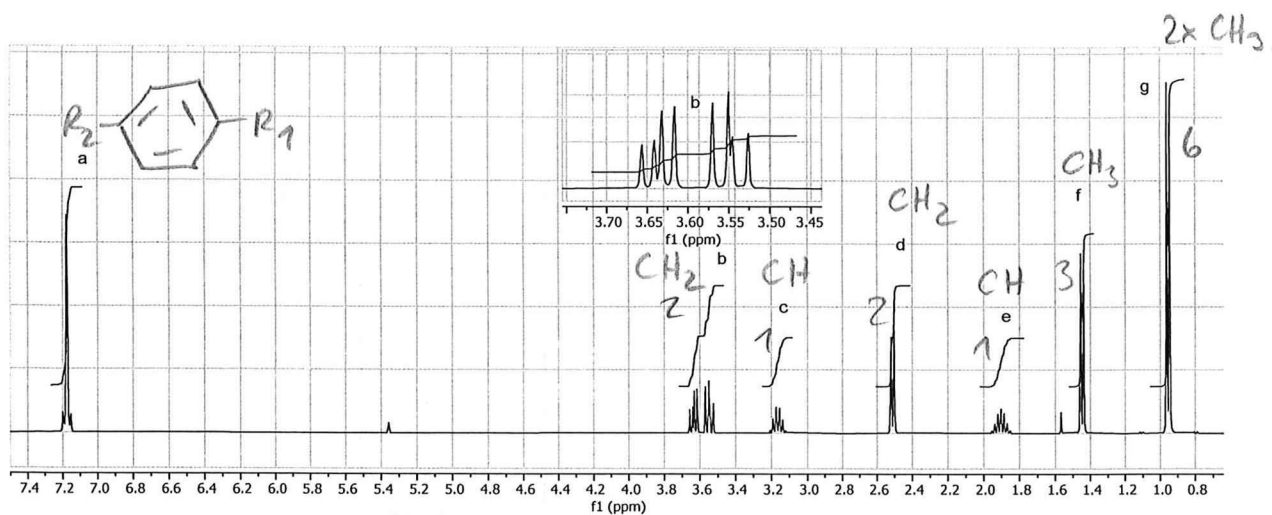
(3 P)

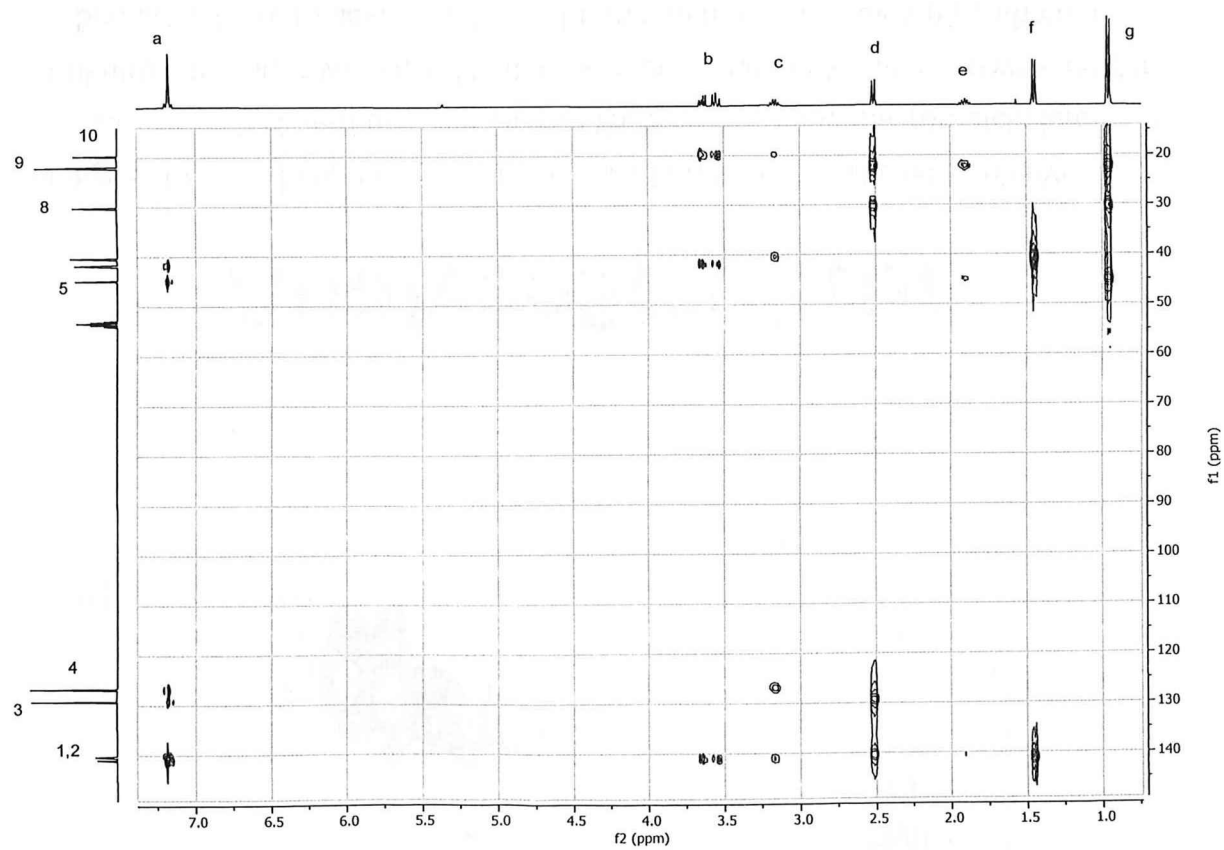
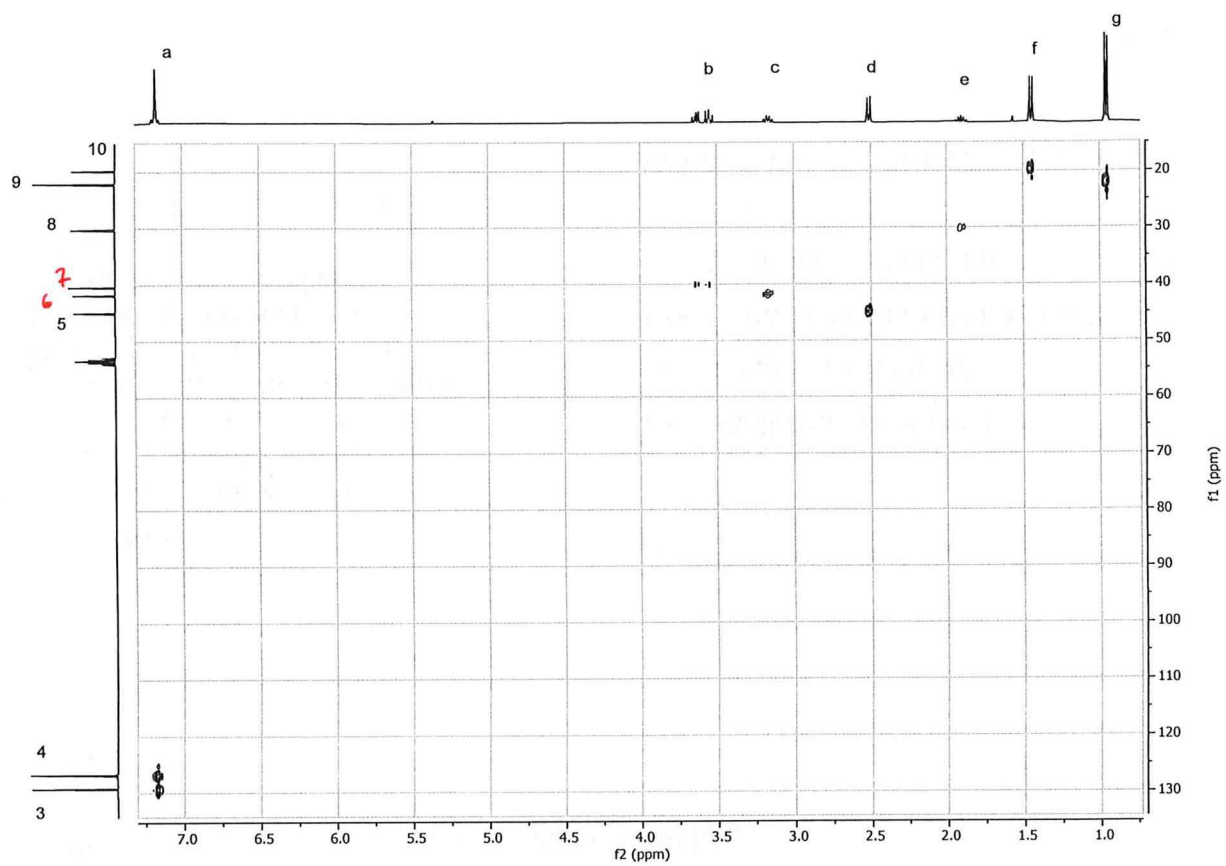


5. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen.

(1 P)





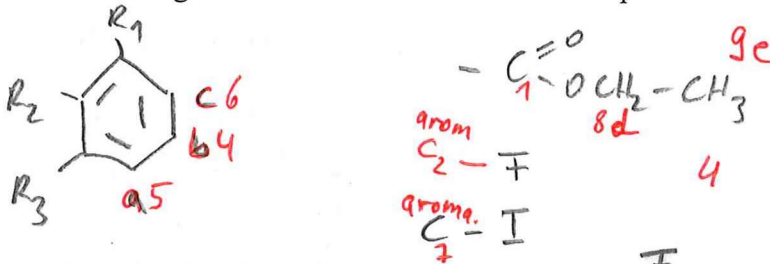


Frage 2: (12 Punkte)

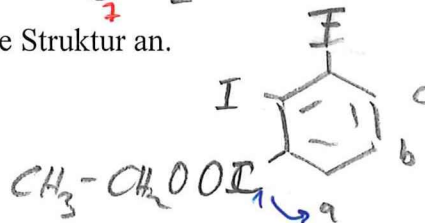
Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_9H_8FIO_2$.

$$1 + \frac{1}{2}(18 - 10) = 5$$

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



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



3. Markieren Sie im ^{13}C -Spektrum die Signale, an denen Iod bzw Fluor hängt. Woran erkennen Sie die Signale? (2 P)

I: verschiebt stark nach rechts $\delta_c = 85 \text{ ppm}$
im HMBC: Koppl zu a+c

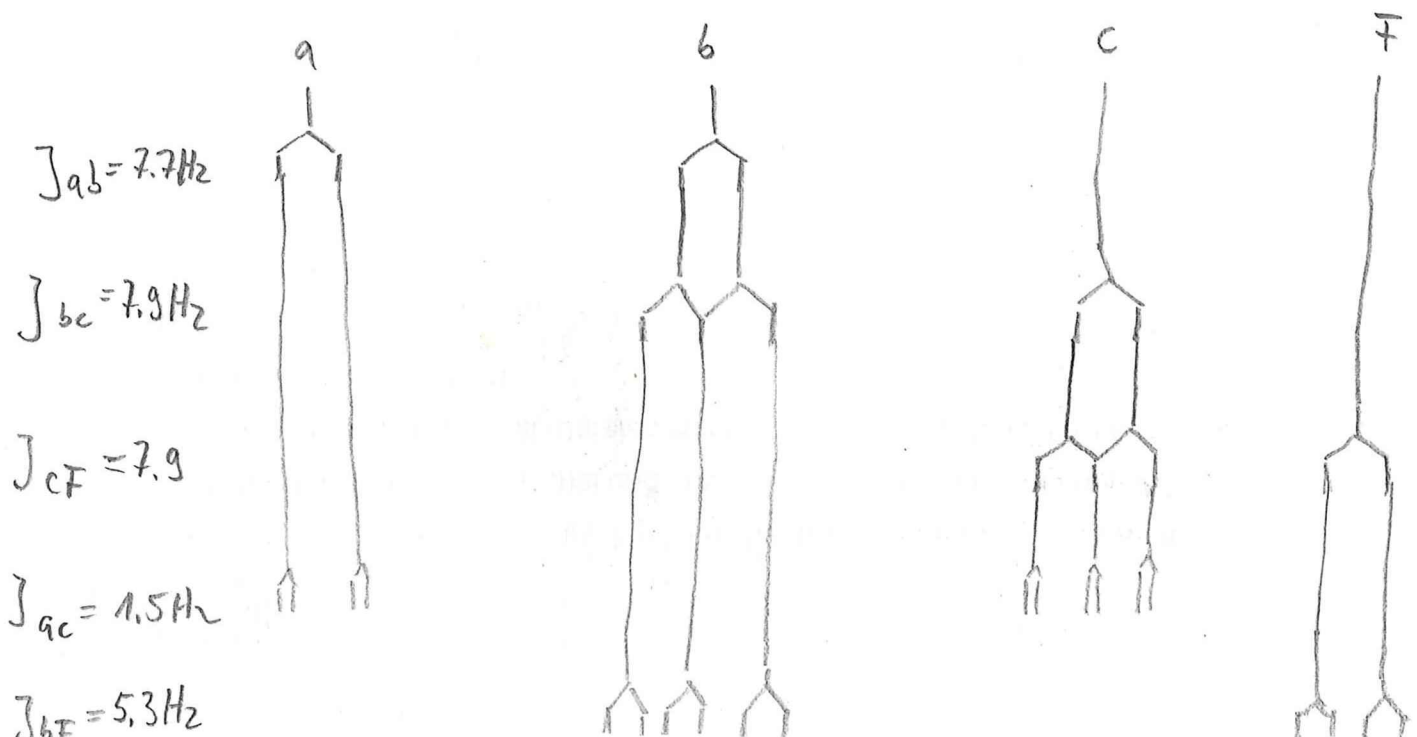
F: $I(^{19}F) = \frac{1}{2} \rightarrow C = \text{duplett}$

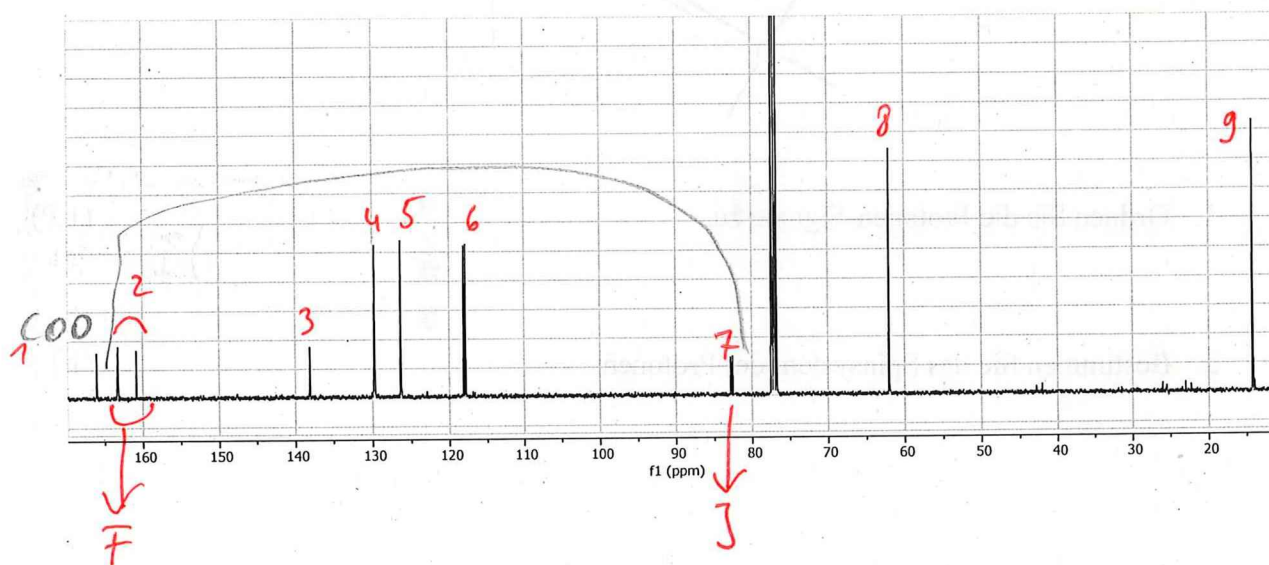
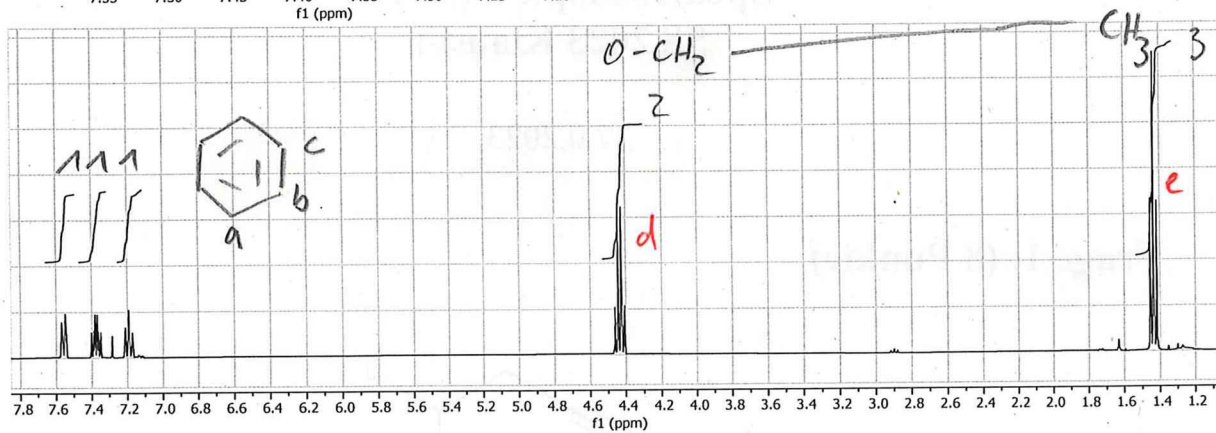
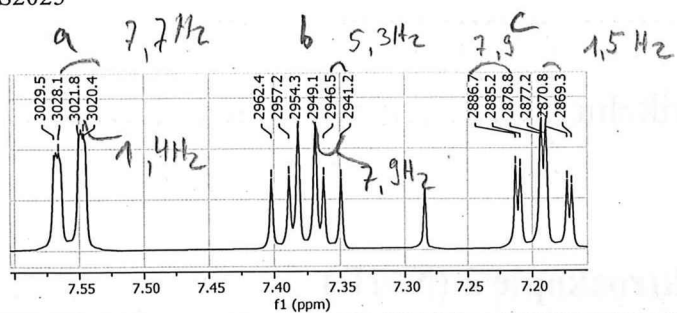
$\rightarrow$ verschiebt stark nach links

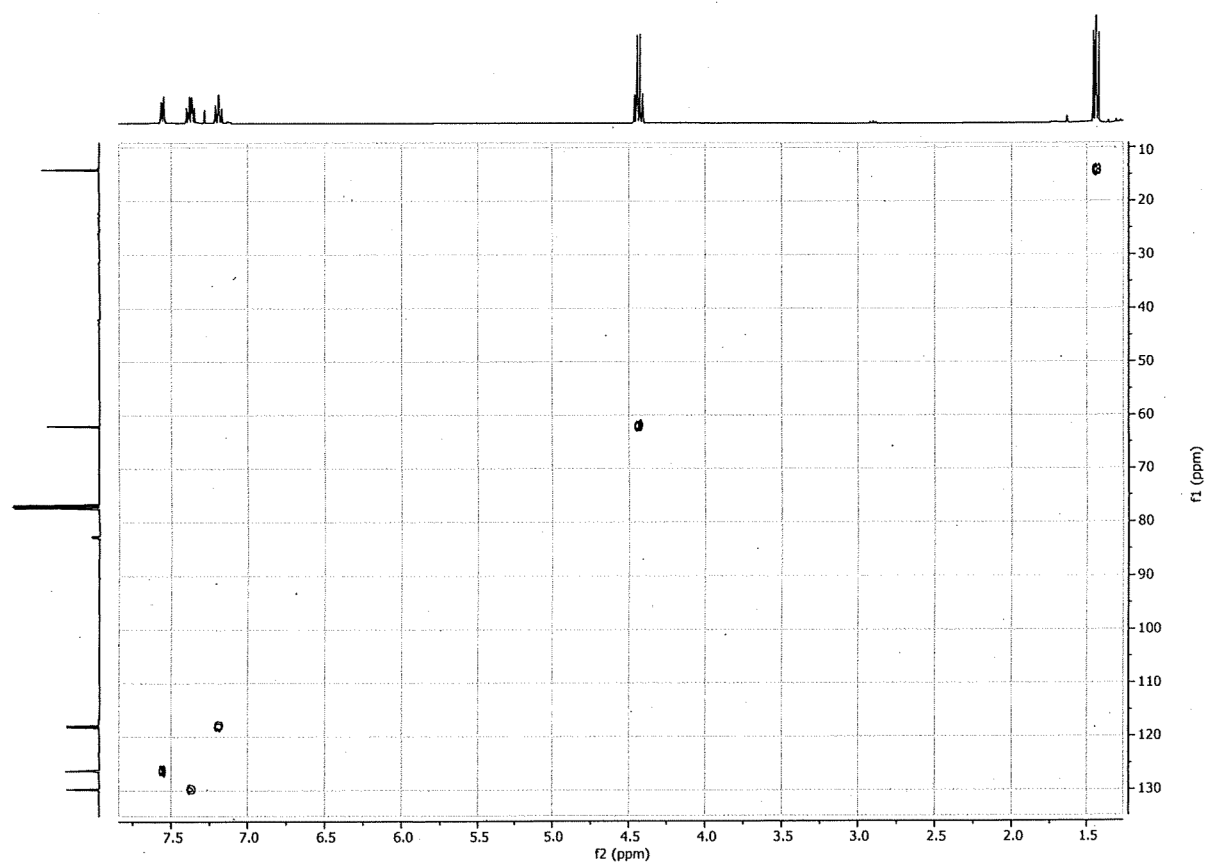
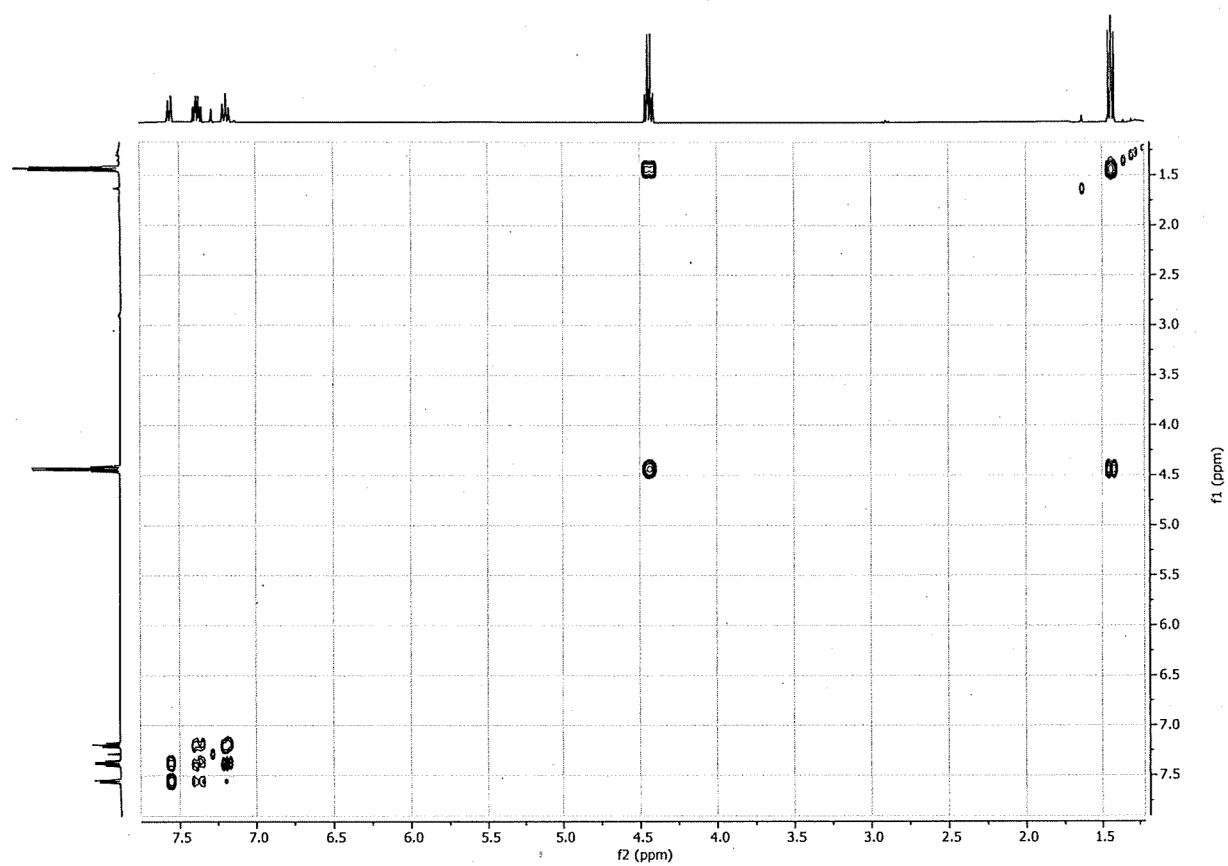
$$\delta_c = 165 \text{ ppm}$$

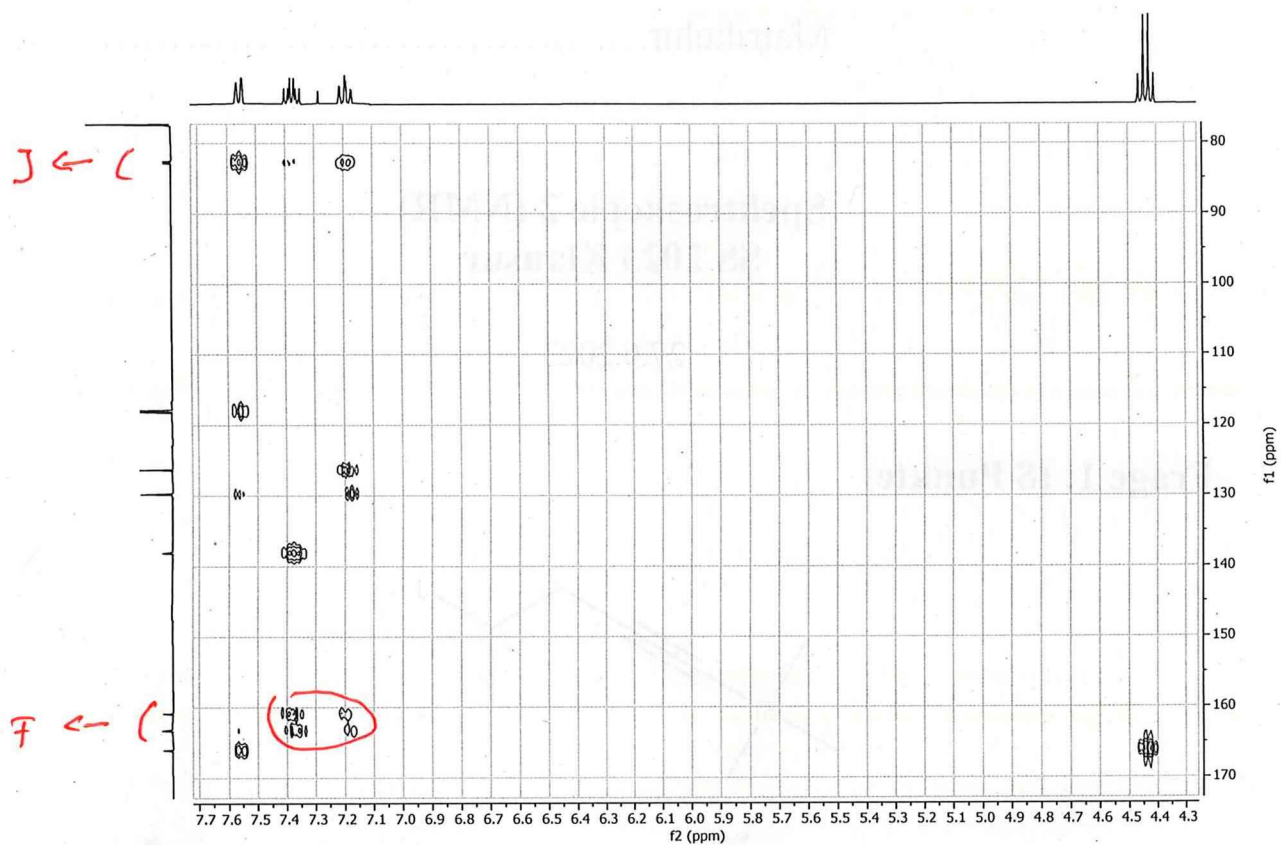
im HMBC: Koppl zu b+c

4. Ordnen Sie die 3 Protonen im Aromaten zu und fertigen Sie einen Splitting-Schlüssel davon an. (Mit Kopplungskonstanten) (6 P)







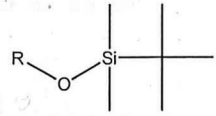


Frage 3: (12 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{14}H_{28}O_4Si$.

$$1 + \frac{1}{2}(28 - 28 + 2) = 2$$

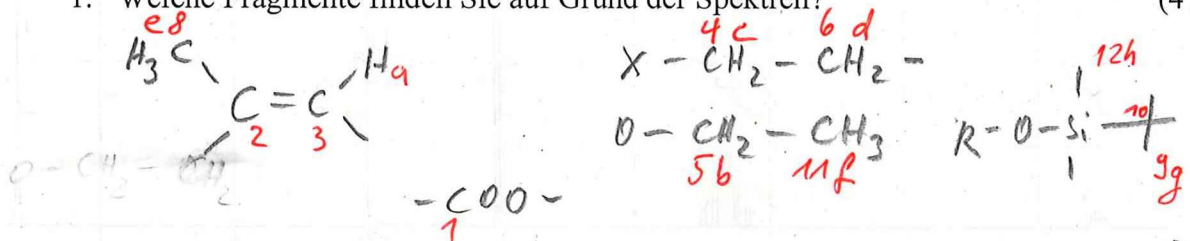
Hinweis: 1. Es ist nur 1 Carbonsäure-Derivat enthalten.



2. In der org. Chemie wird oft eine Schutzgruppe verwendet:

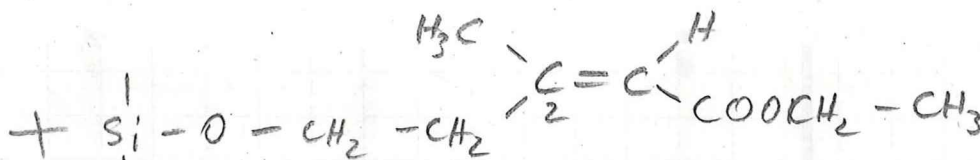
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren?

(4 P)



2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an.

(1 P)



3. Warum kommt das Signal von C2 so weit links?

(2 P)

Handwritten calculation:

$$\delta_{C_2} = 123.5 + 10.6 + 15.5 + 7 = 156.6 \text{ ppm}$$

(Contributors: CH_3 , Et)

4. Zeichnen Sie die von Proton a sichtbaren 3J -Kopplungen ein.

(2 P)

S, U, E

5. Zeichnen Sie die im NOESY sichtbaren Wechselwirkungen ein.

(1 P)

S, U,

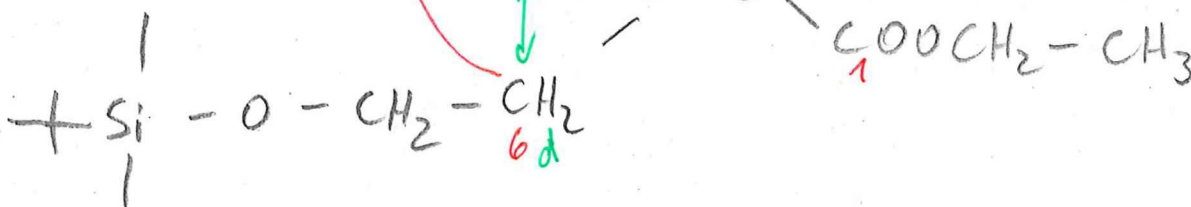
6. Warum redet man im NOESY nicht von Kopplungen?

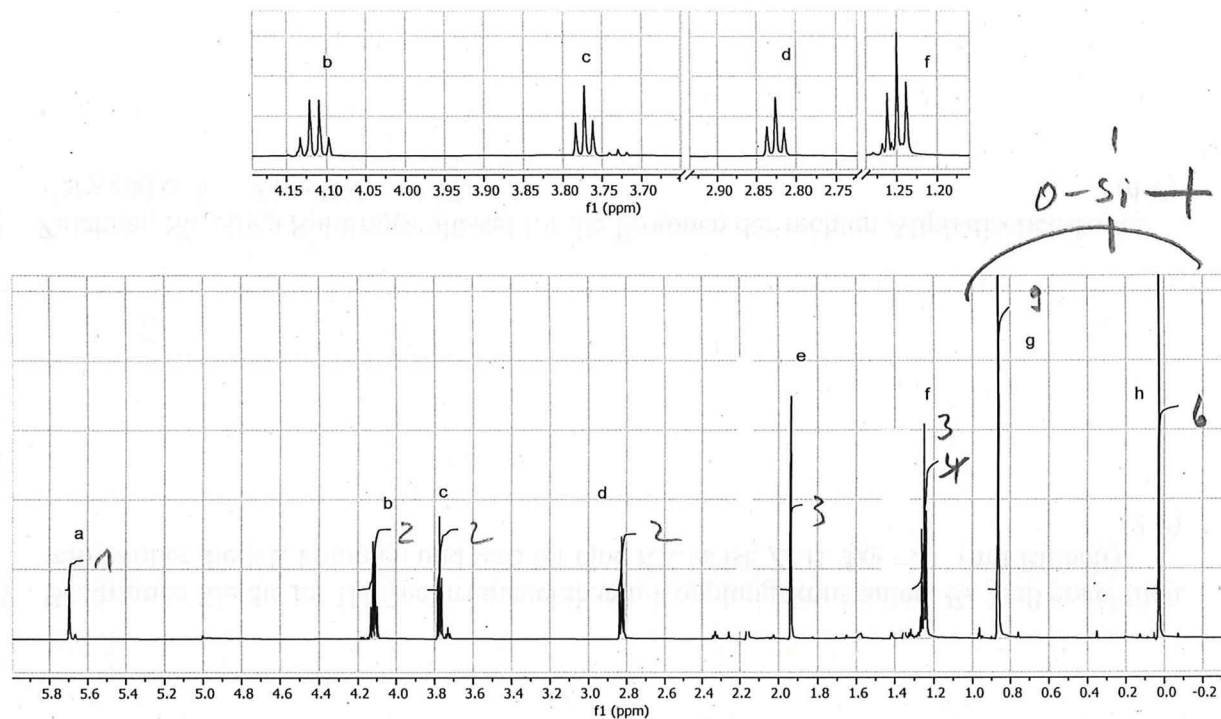
(2 P)

- Kopplungen gehen über Bindungen
- NOESY zeigt WW über den Raum

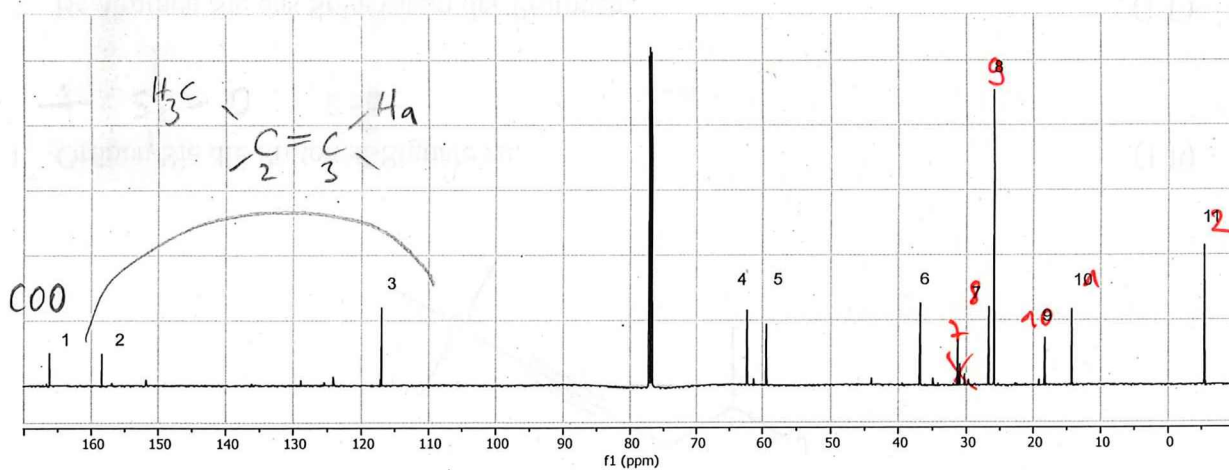
4: a → 8
a → 6

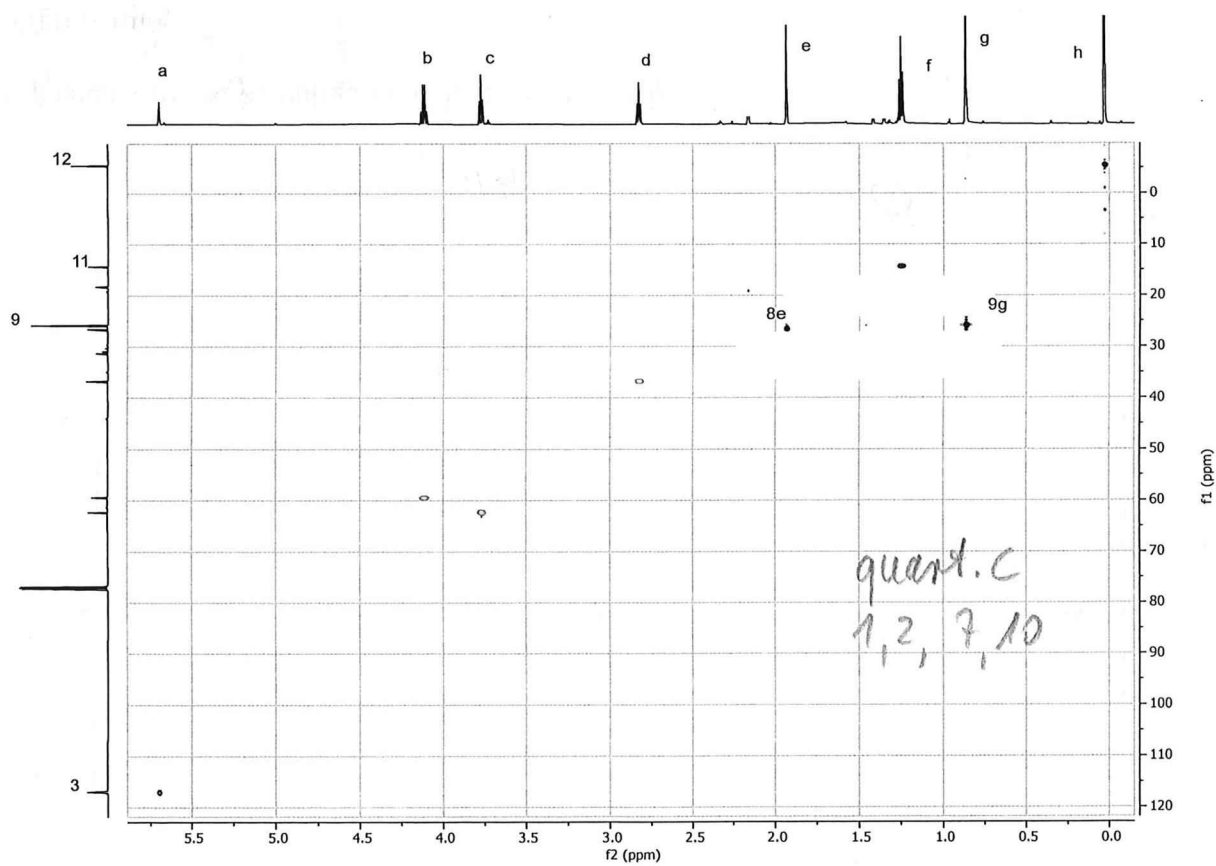
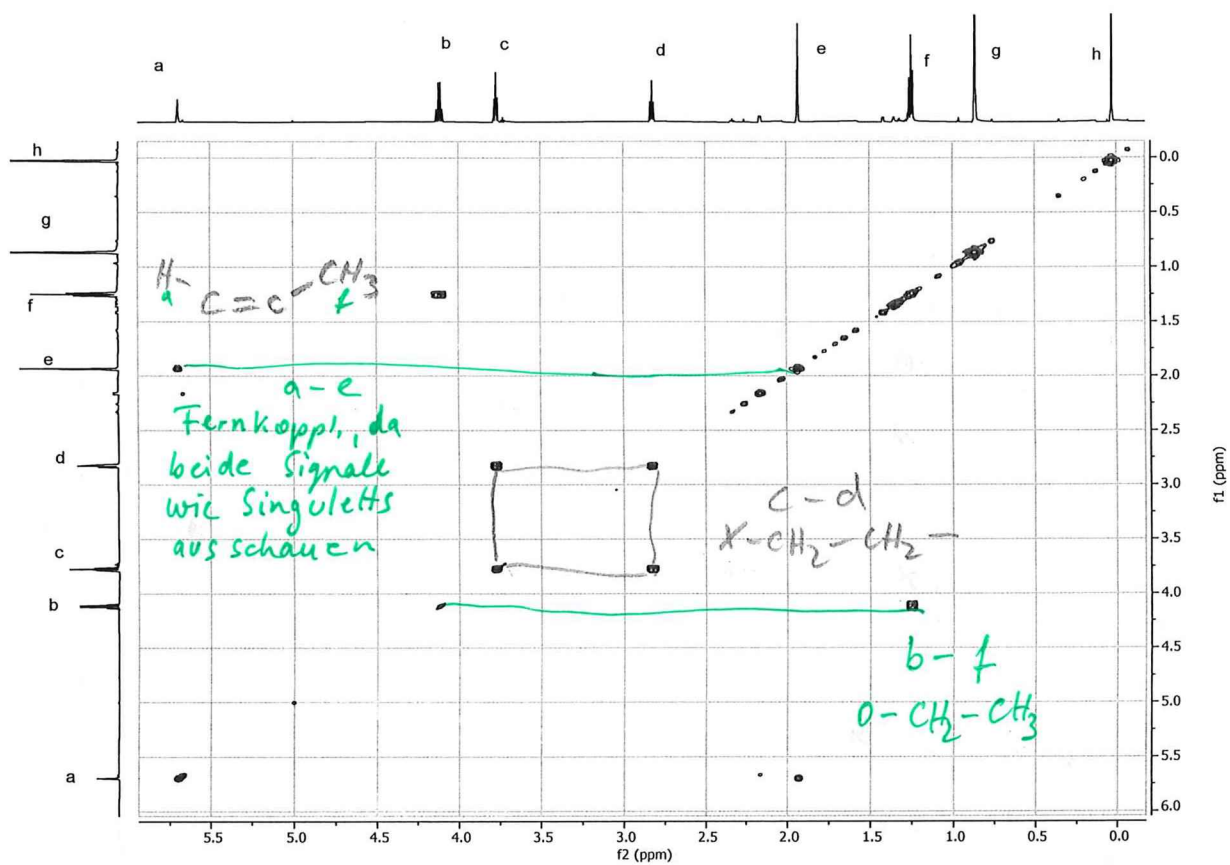
5: NOESY
a-e
e-d

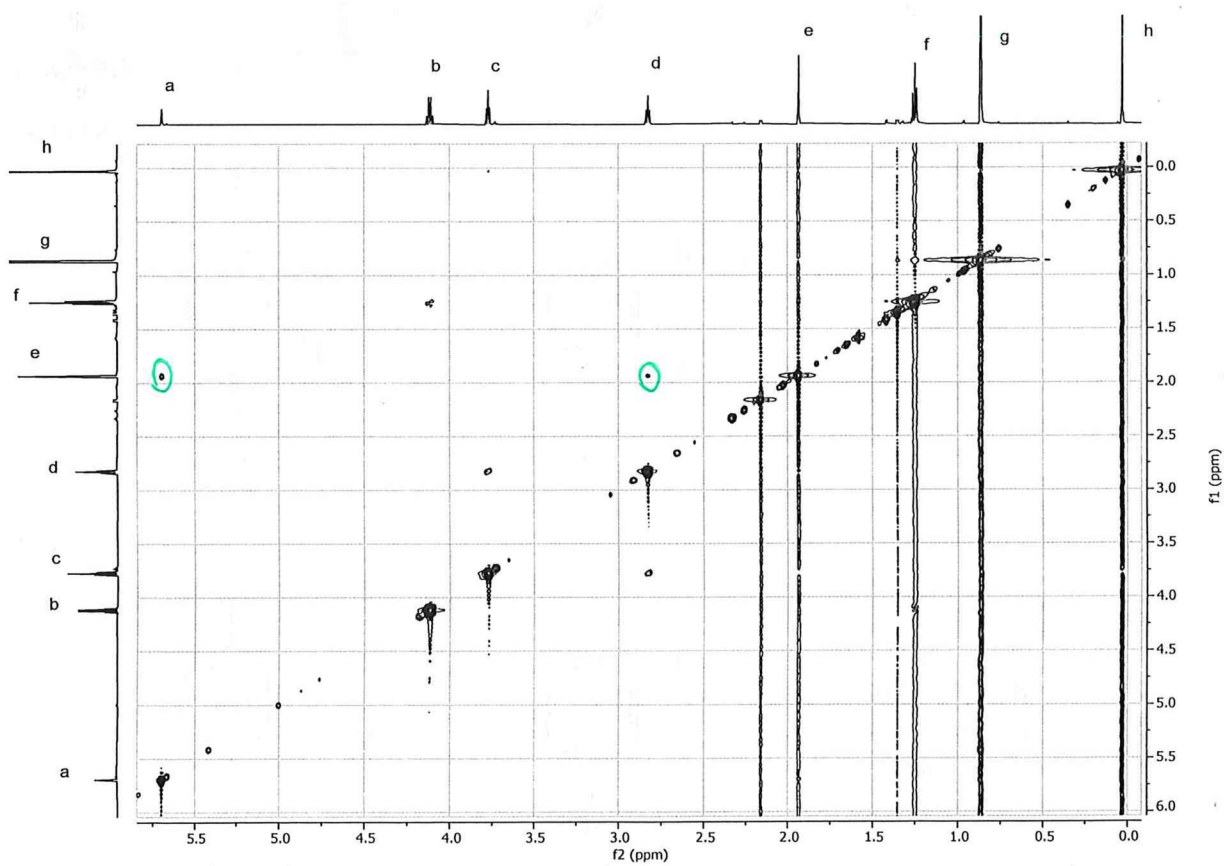
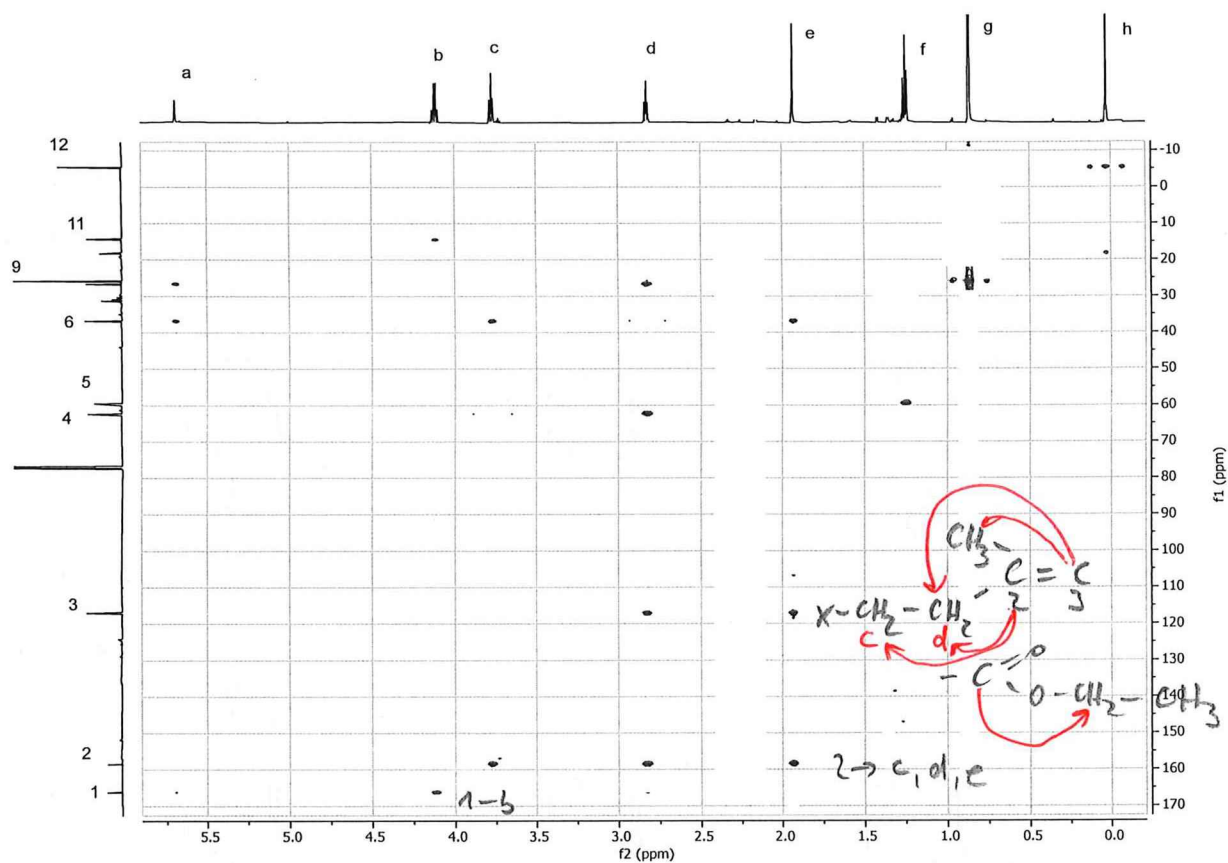




Hinweis: Integral von Signal f = 3. Es schaut größer aus, da eine Verunreinigung enthalten ist.!

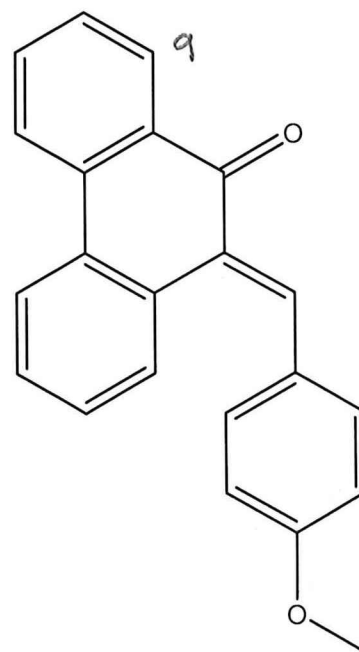
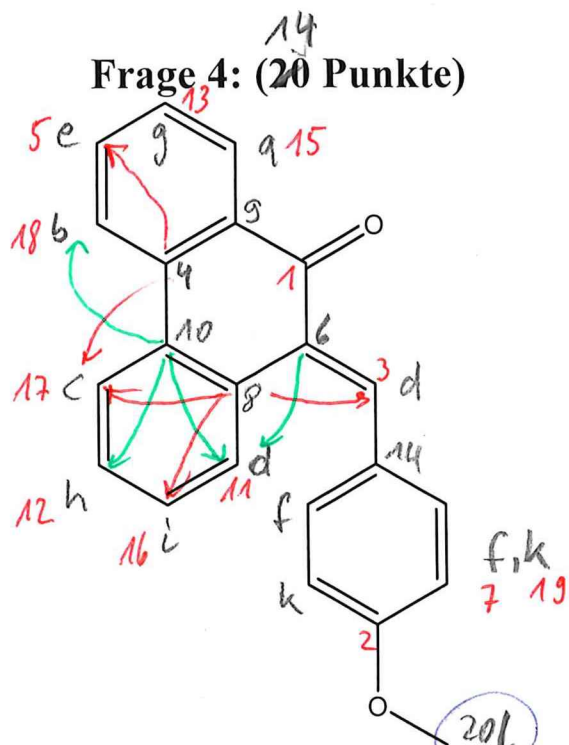






NOESY

Frage 4: (20 Punkte)



Hinweis: Signal d sind 2 chem. nicht äquivalente Protonen, die sich überlagern.

1. Ordnen Sie die alle Signale zu. (10P)
2. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie im HMBC für die C-Atome 1,3,6,7,9 und 11 sichtbare Kopplungen in Ihr Molekül einzeichnen. (6P)

^{13}C	^1H	$^n\text{J}_{\text{CH}}$
1		$^3\text{J}_{\text{CH}}$

