

Spektroskopie 2 (NMR) SS 2026 Klausur

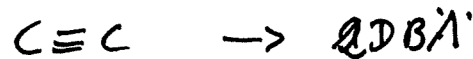
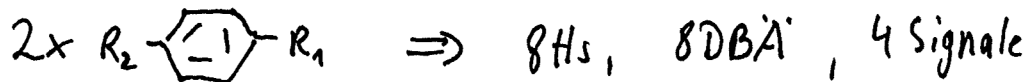
Lösung

14.8.2026

Frage 1: (9 Punkte)

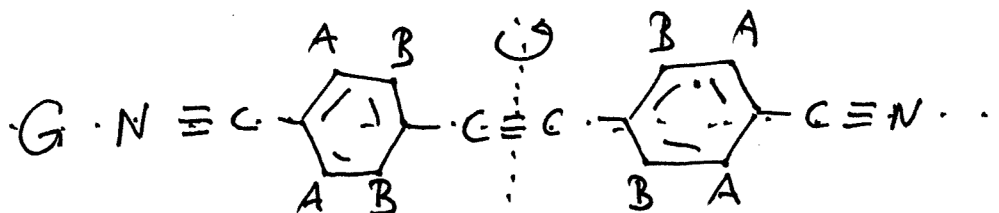
Auf Seite 2 sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_{16}H_8N_2$

- Bestimmen Sie die Doppelbindungsäquivalente. $1 + \frac{1}{2}(32 - 8 + 2) = \underline{14}$ (1 P)
- Welche Fragmente finden Sie? (Spektren, Summenformel, DBÄ) (3 P)

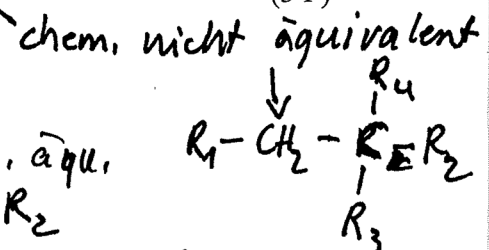
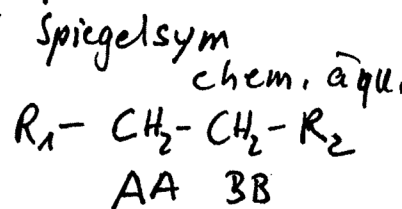
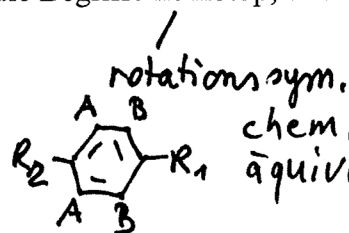


/ 14 DBÄ

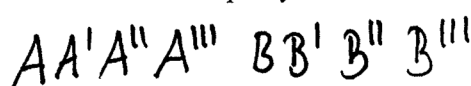
- Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)



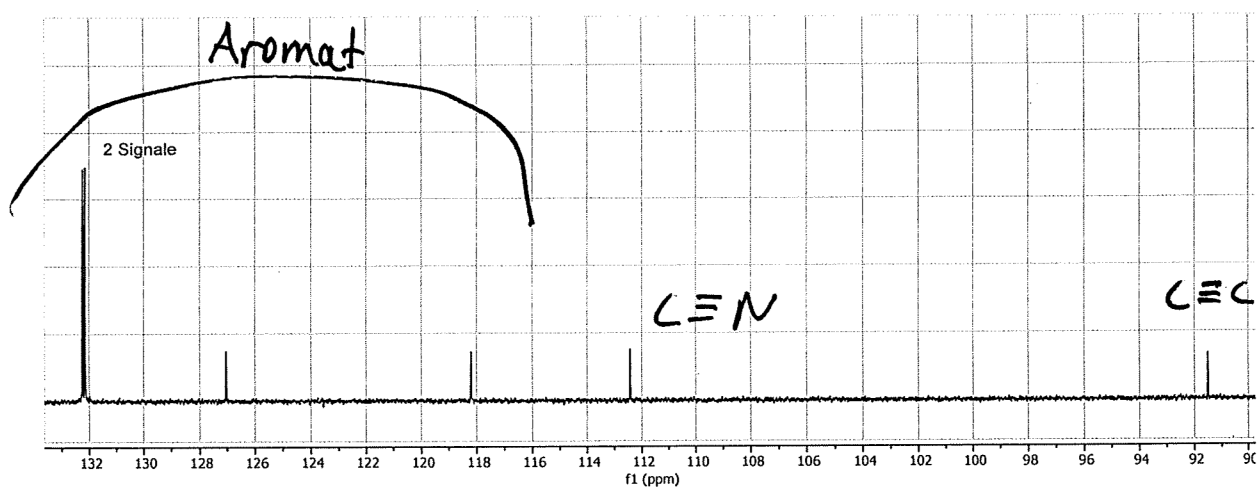
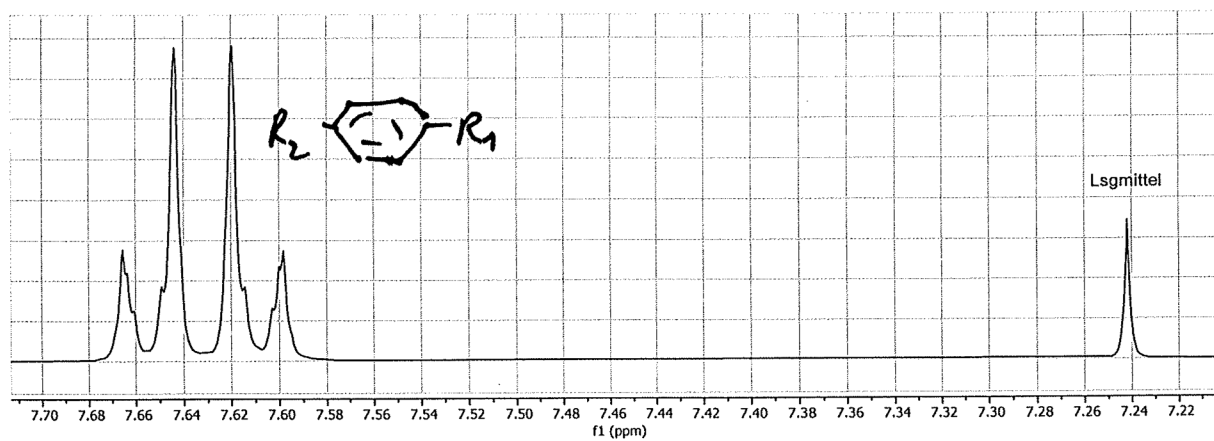
- Warum sieht man für dieses Molekül so wenig Signale? *symmetrie Umgeb. im Arom.*
Erklären Sie die Begriffe homotop, enantiotop und diastereotop anhand von jeweils einem Beispiel (3 P)



- Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen.



keine Symmetrie, oder chirales Zentr.



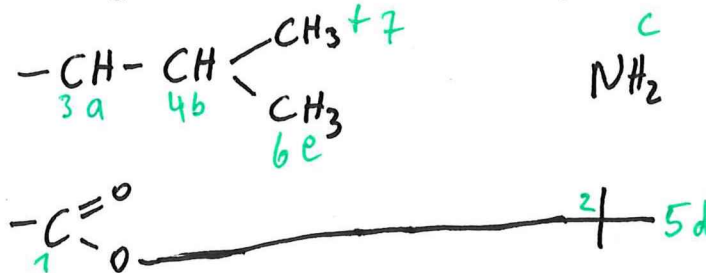
Frage 2: (9 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: $C_9H_{19}NO_2$.

$$1 + \frac{1}{2}(18 - 19 + 1) = 1$$

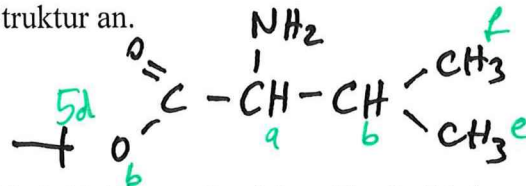
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren?

(4 P)



2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an.

(1 P)



3. Erklären Sie das 1H -Signal bei 1,94 ppm. Streichen Sie die Linien, die nicht zu dem Signal gehören (Verunreinigung). Begründen Sie kurz, warum sie nicht zum Signal gehören. Bestimmen Sie die enthaltenen Kopplungskonstanten ($J_{ab} = 4.8 Hz$).

Es sind 7 Doublets (gleicher Abstand) zu sehen (3 P)
 2 rote Verunreinig. haben anderen Abstand.

$$J_{ab} = 4.8 Hz \rightarrow \text{Doublet}$$

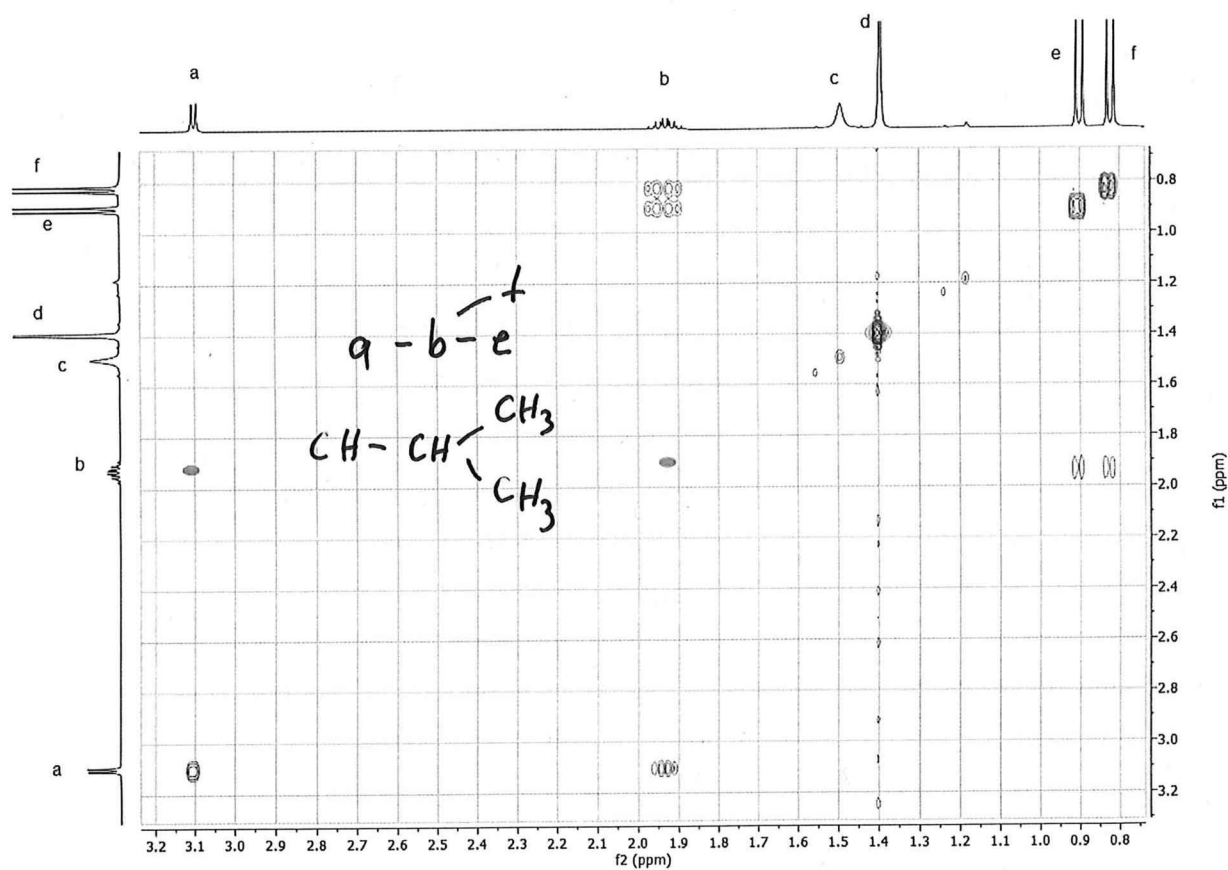
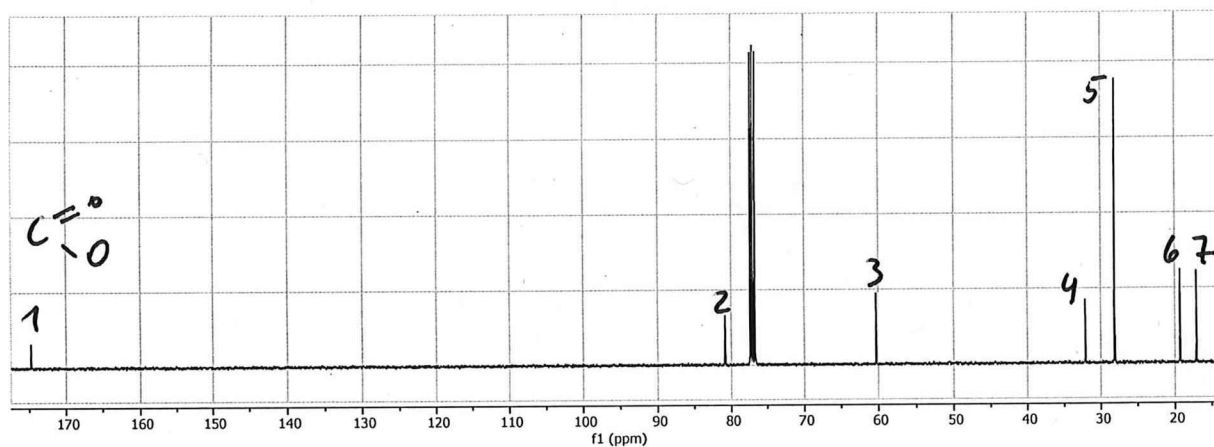
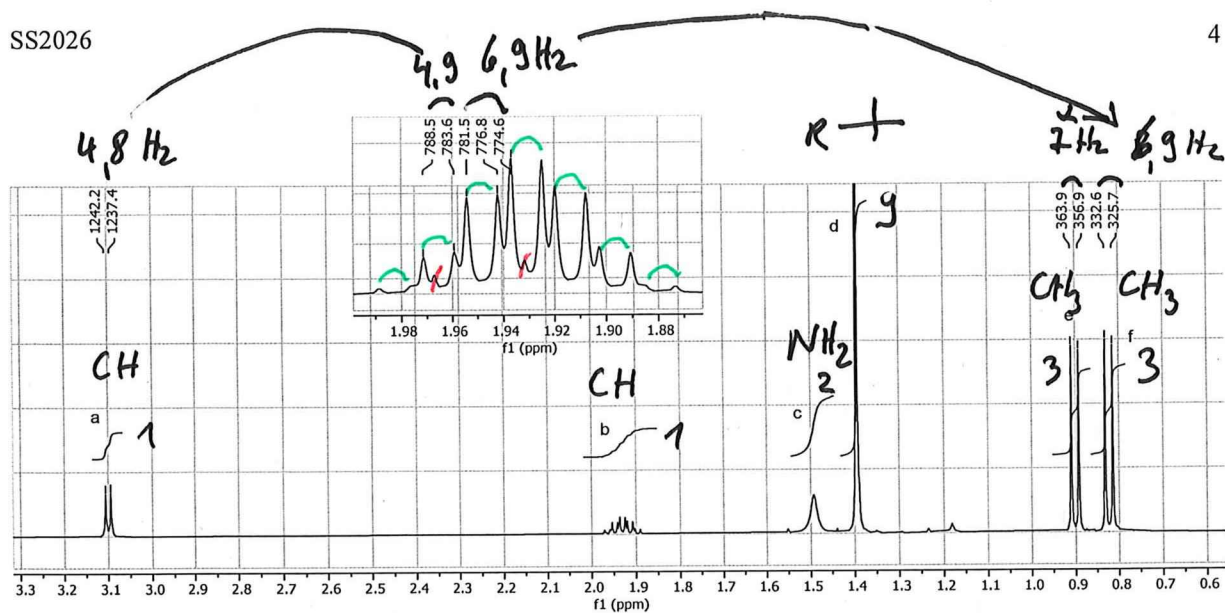
$J_{be} \approx J_{bf} \approx 7 Hz \rightarrow \text{Septett}$ (Quartett von Quartett, überlagert sich aber, da fast gleiche Kopplungskonstante.)

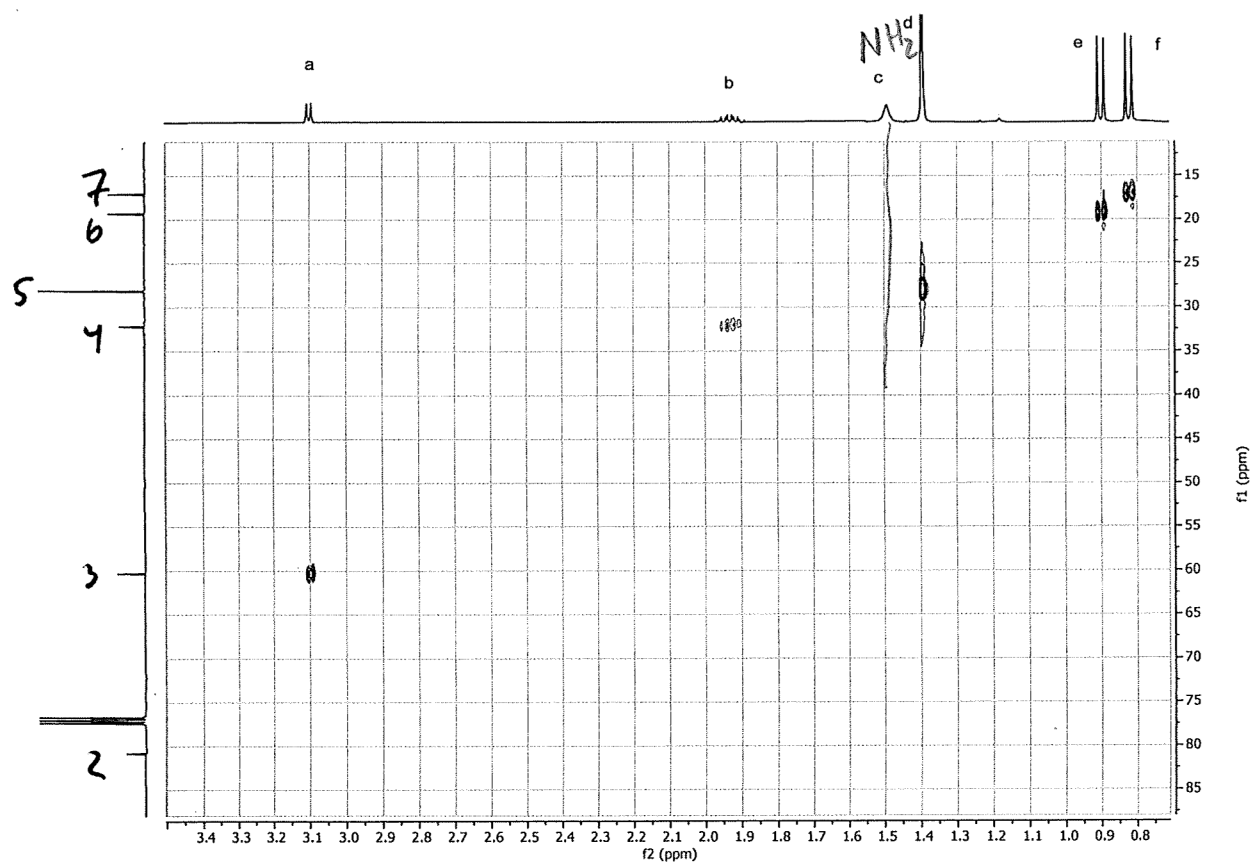
4. Sind die 5 Methyl-Gruppen homotop, enantiotop oder diastereotop?

(1 P)

$3 \times d-CH_3 \rightarrow \text{homotop}$

$2 \times f,e-CH_3 \rightarrow \text{diast.}$



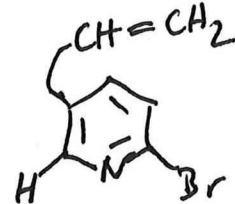
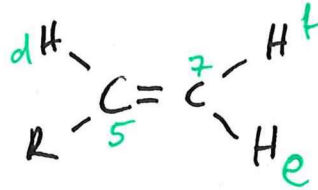
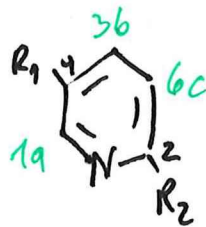


Frage 3: (10 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet: C_7H_6BrN .

$$1 + \frac{1}{2}(14 - 6 - 1 + 1) = 5$$

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

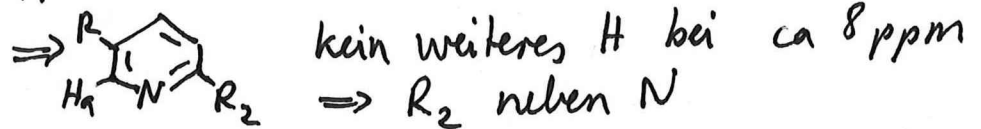


2. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (1 P)

3. Wie sind Sie auf die Struktur des Aromaten bzw. wo er substituiert wurde gekommen? Ordnen Sie die 1H -Signale dem Aromaten zu. (Mit kurzer Begründung) (3 P)

SF: C_7 : 2Cs für Olefin, für Aromat nur 5Cs

H_a bei 8.4ppm $\Rightarrow$ N daneben, H_a keine Nahkopplung



H_b : dd $\Rightarrow$ meta zu H_a | H_c : d $\Rightarrow$ ortho zu b

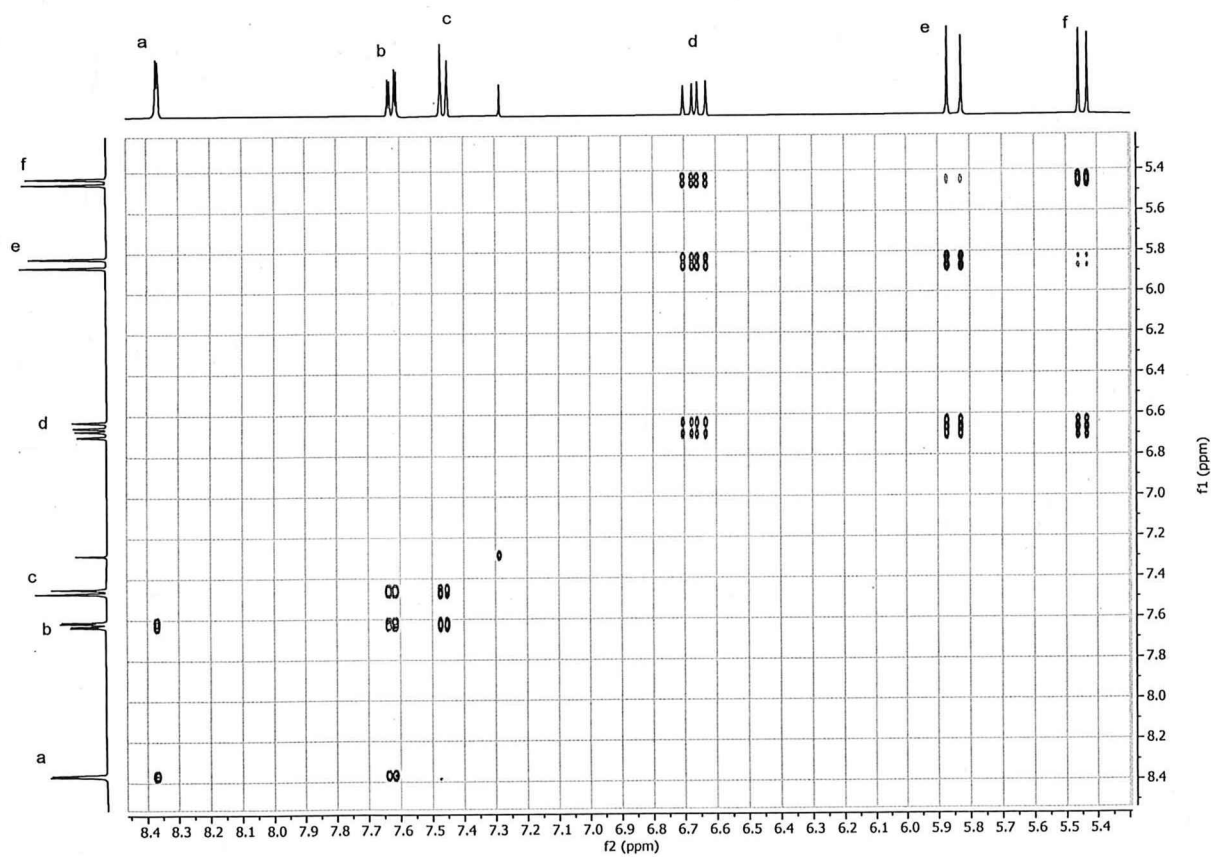
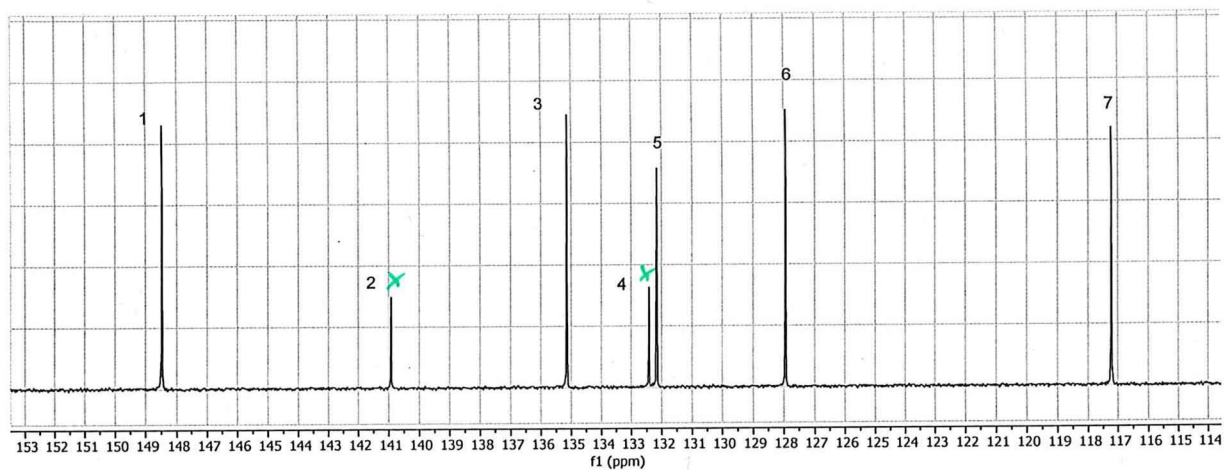
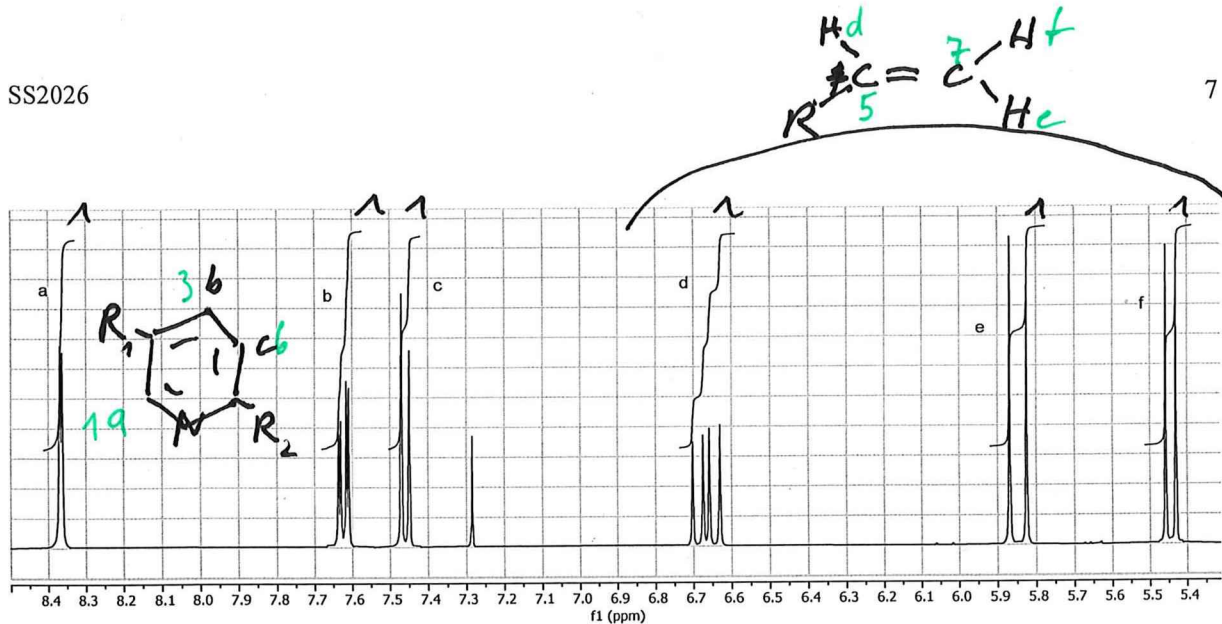
4. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)

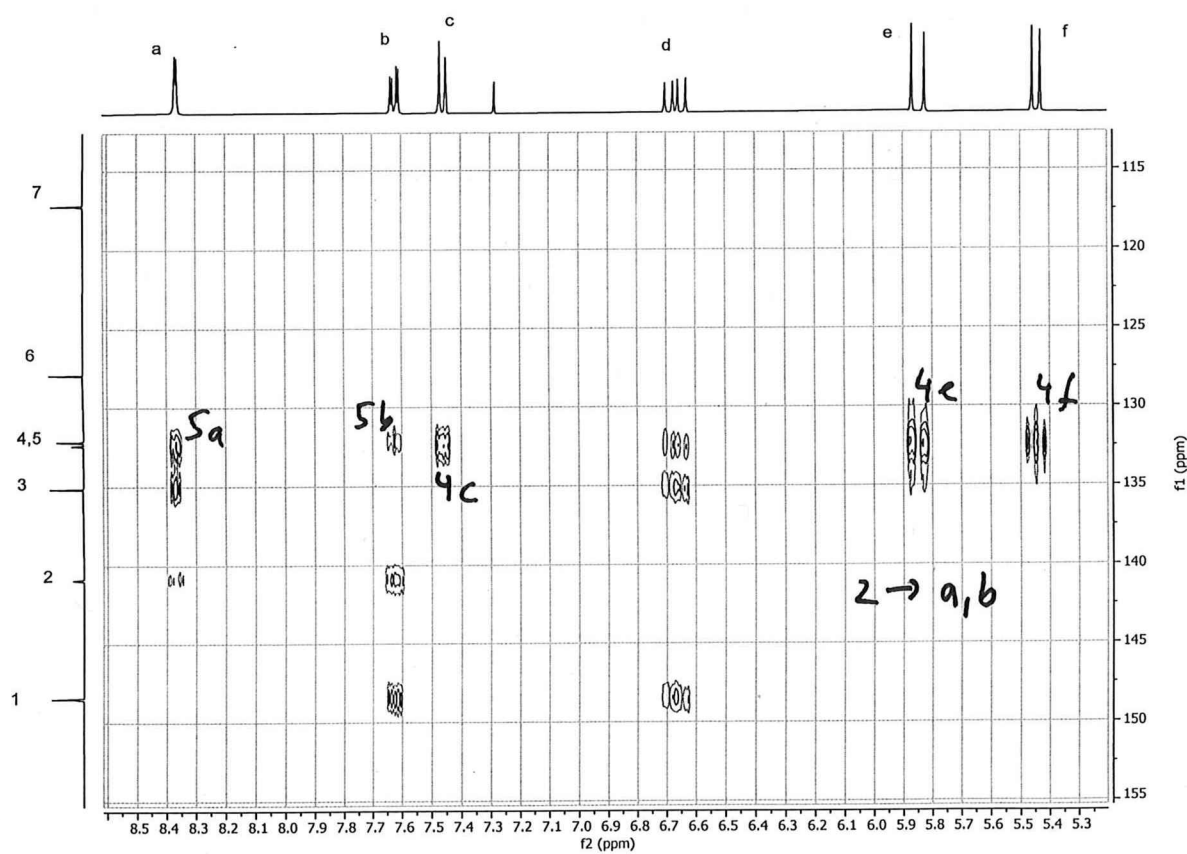
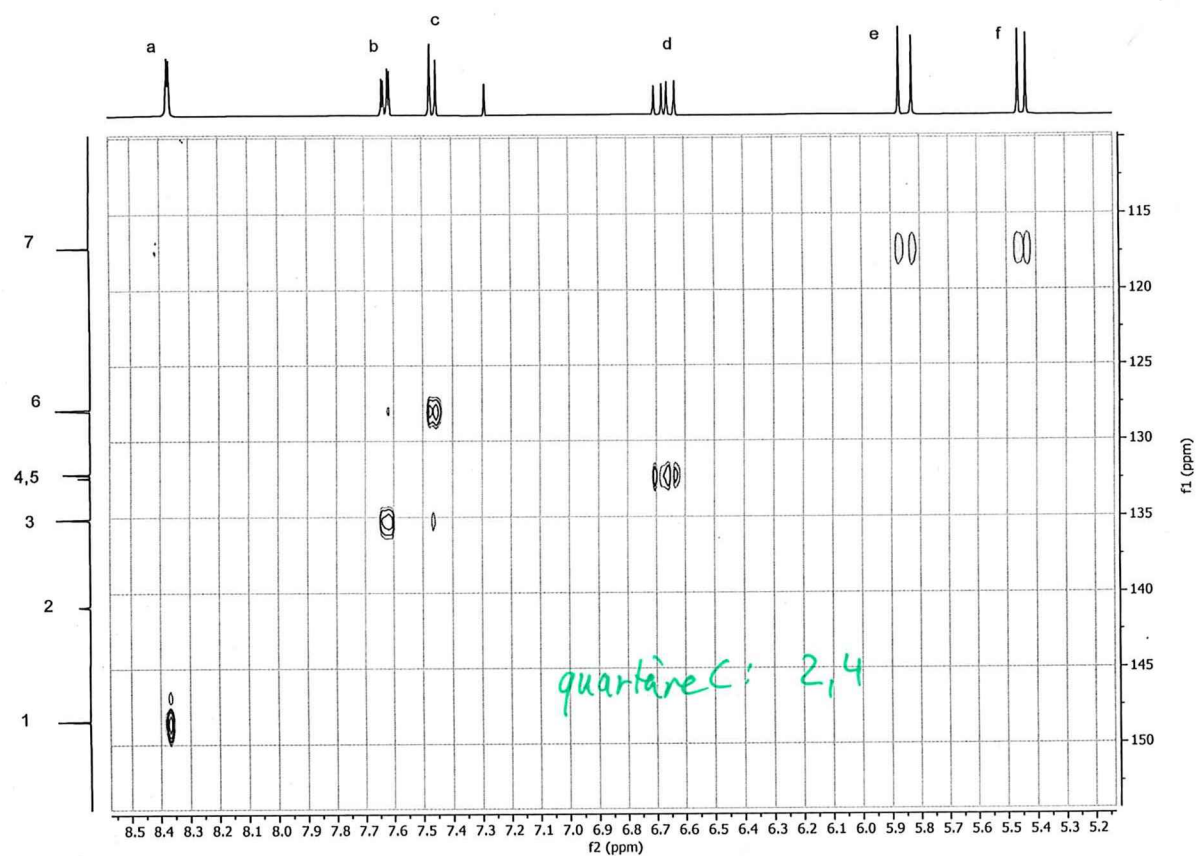
ABC DEF

5. Ordnen Sie die Signale H_e und H_f genau zu. Erklären Sie. (2 P)

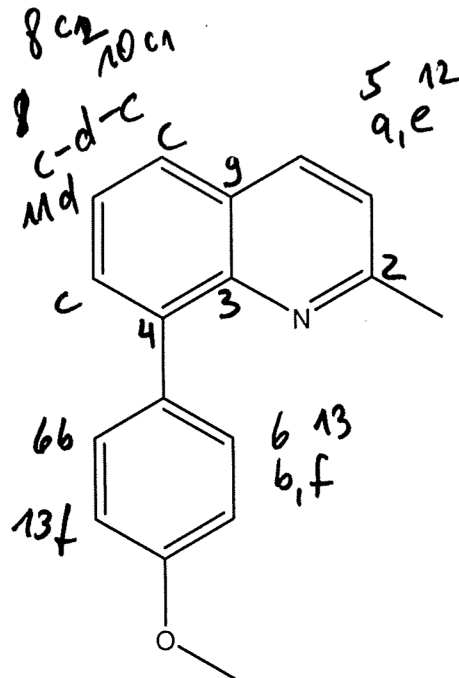
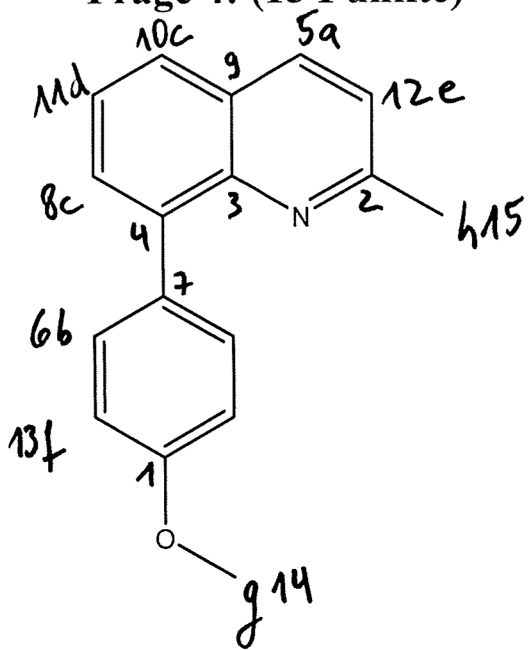
trans
größere Kopplung

cis





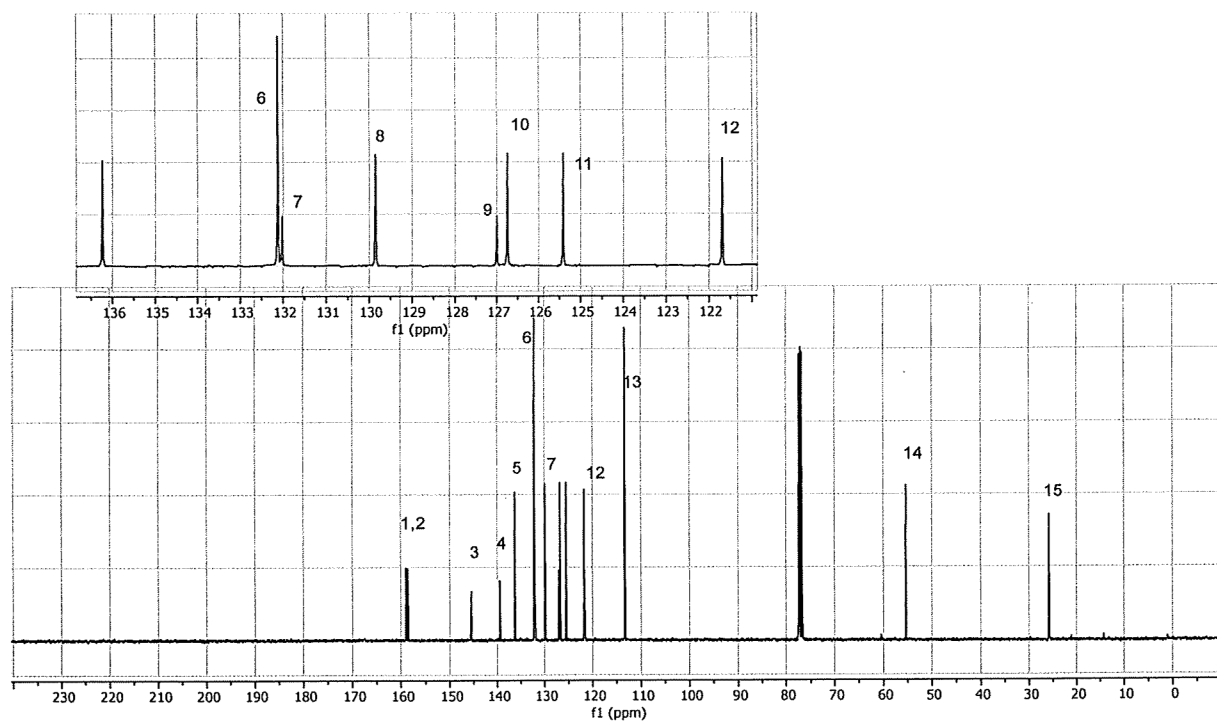
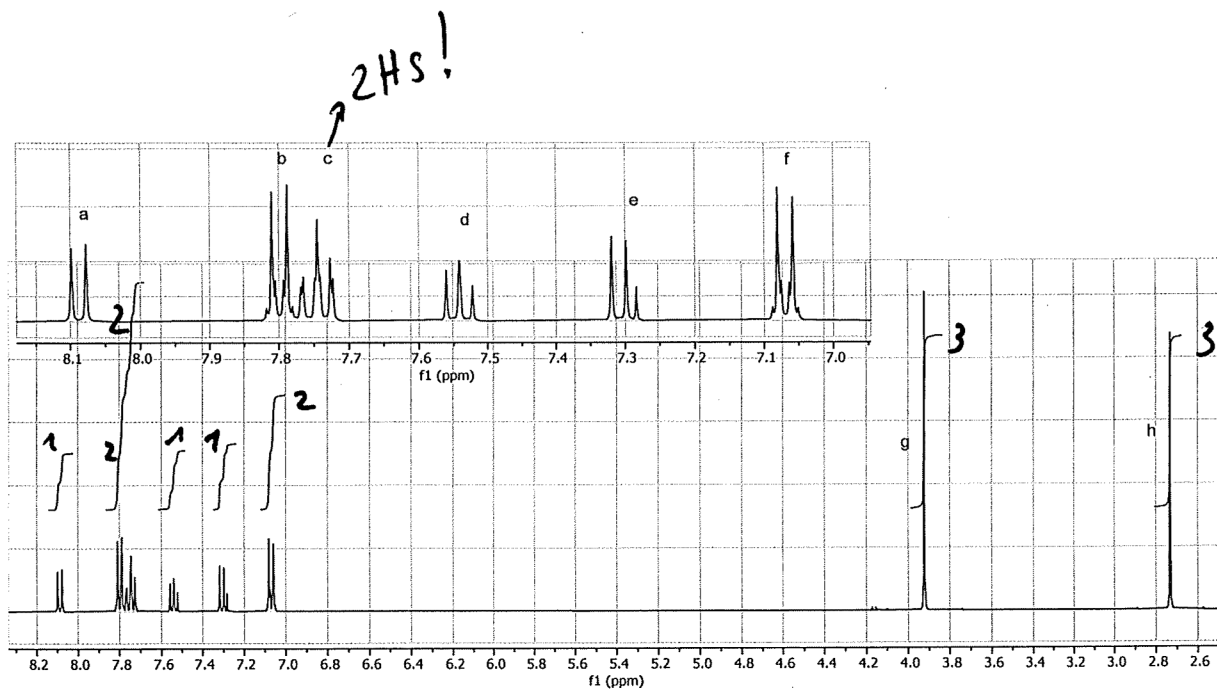
Frage 4: (15 Punkte)

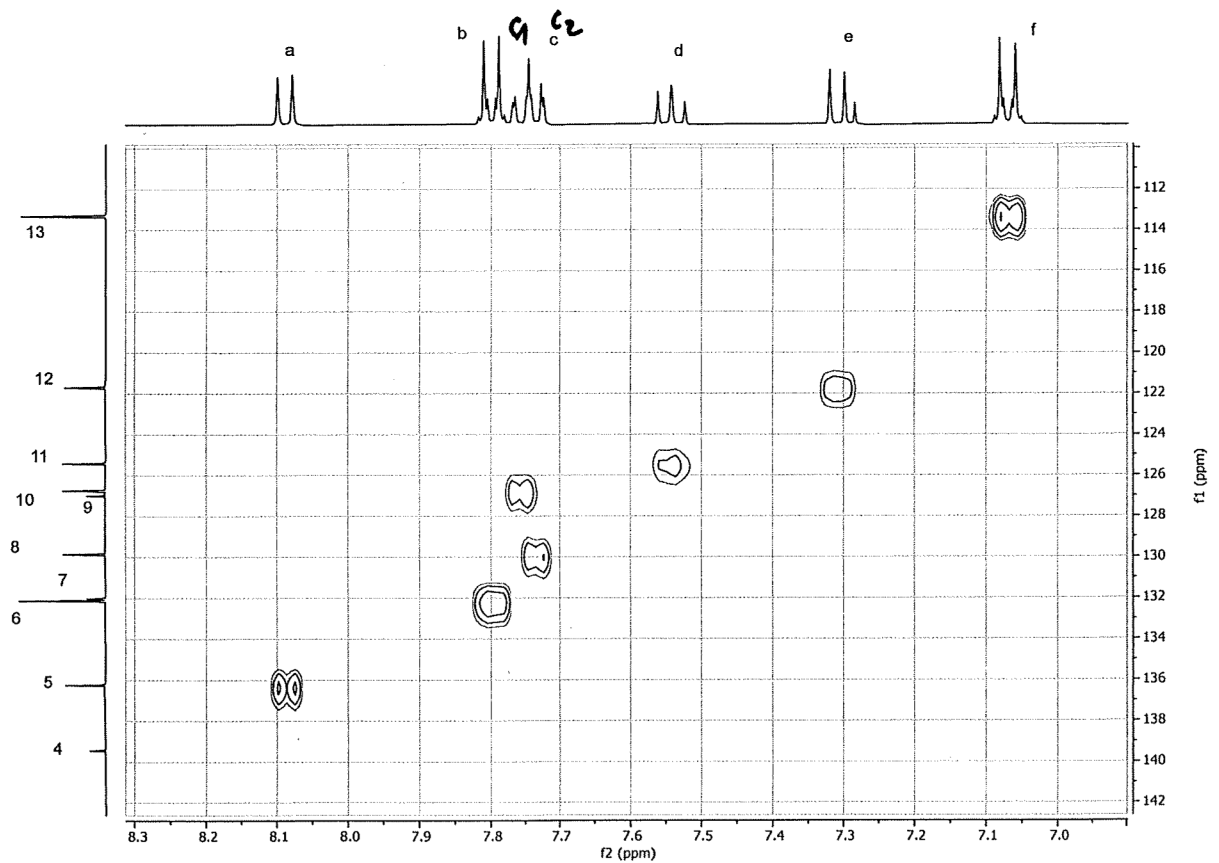
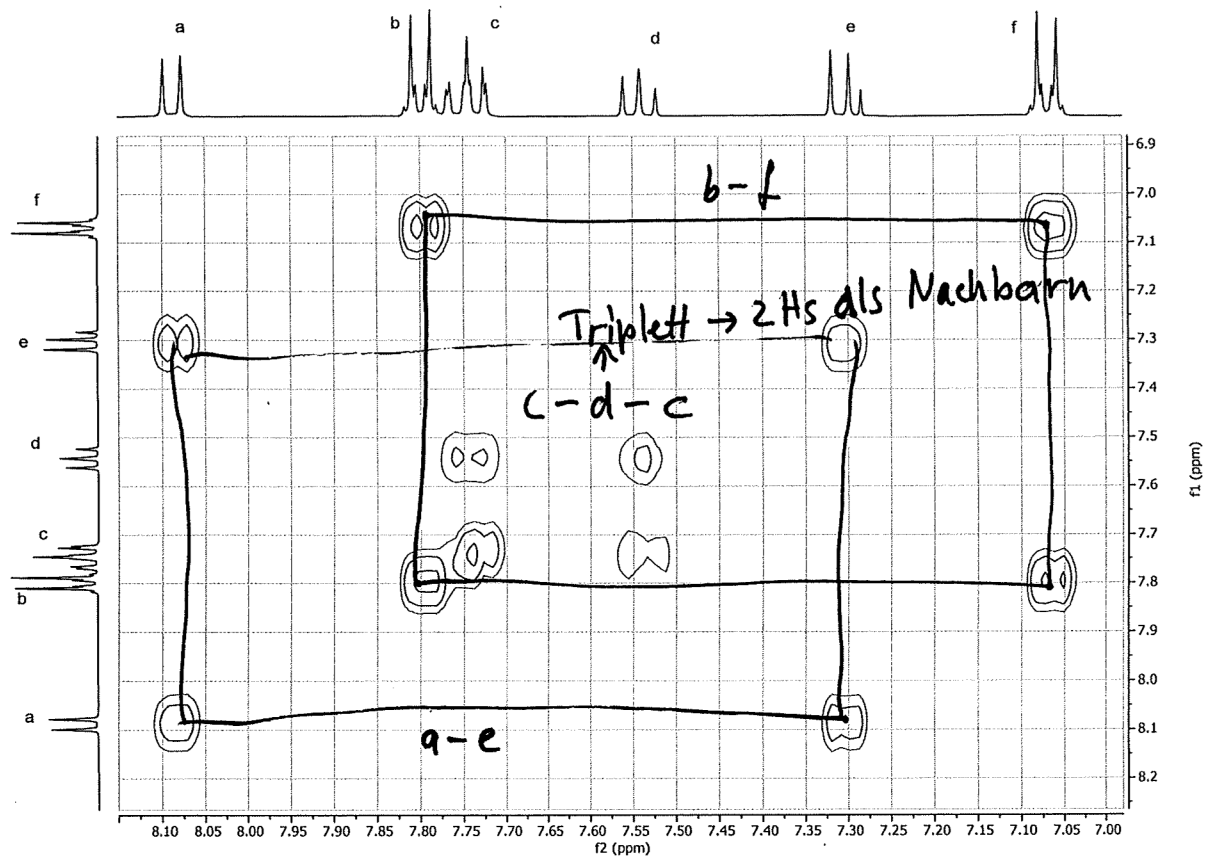


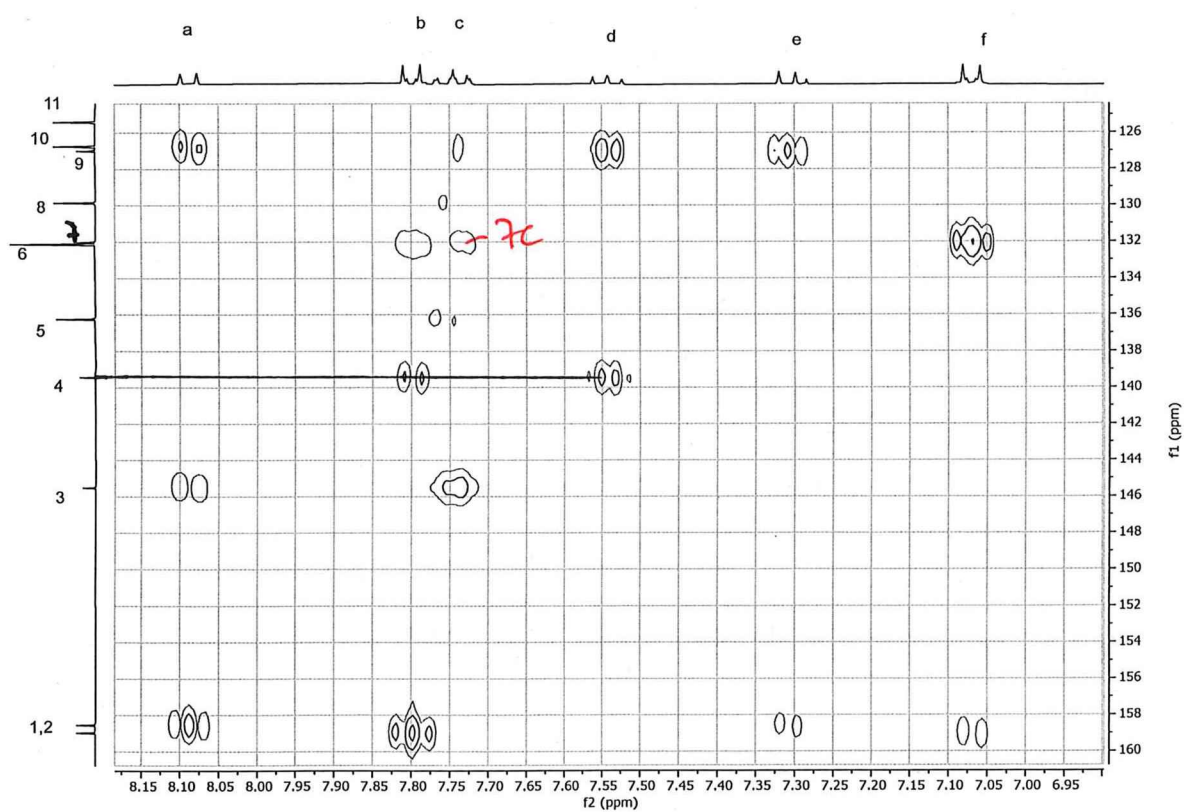
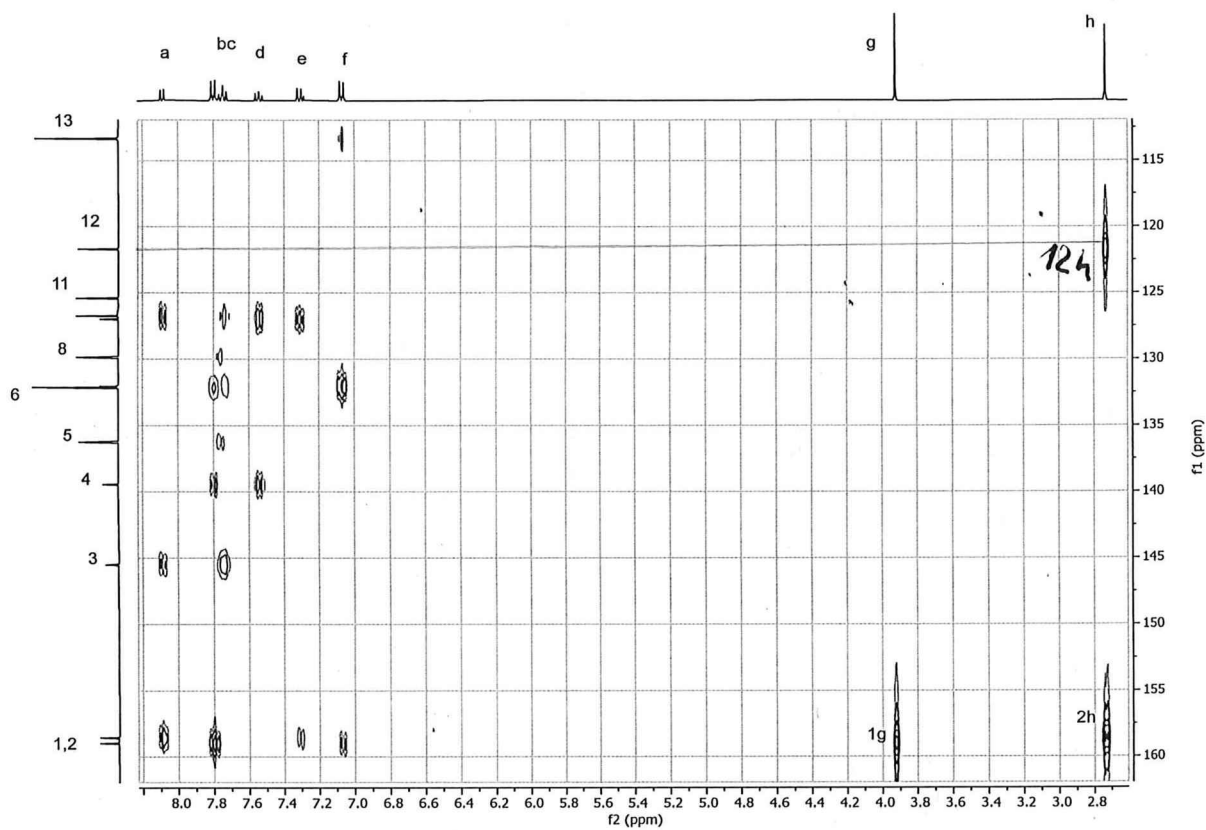
quart
1,2,3,4,7,9

1. Ordnen Sie die Signale zu.

(15 P)





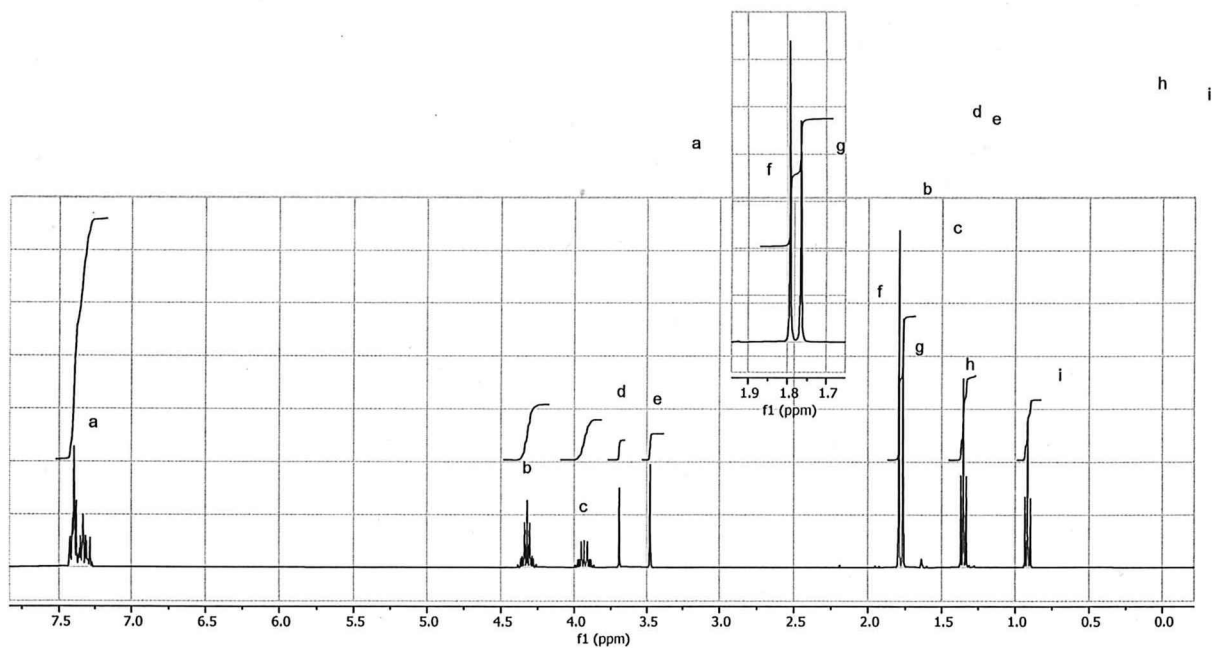
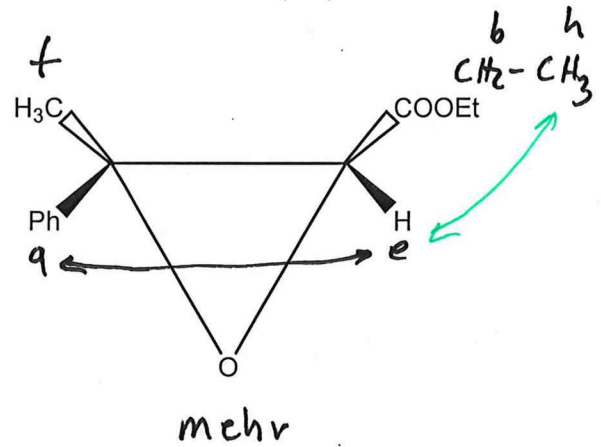
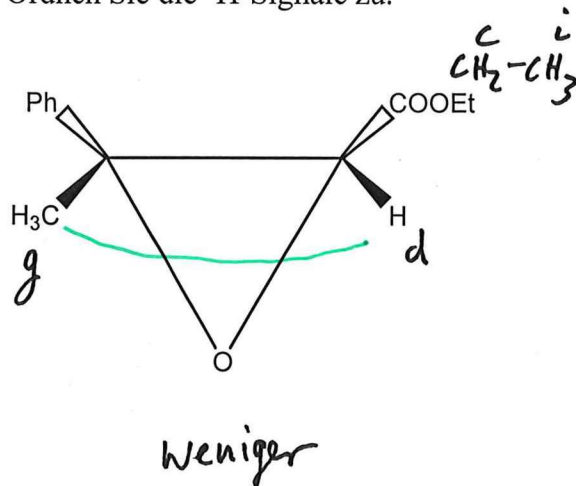


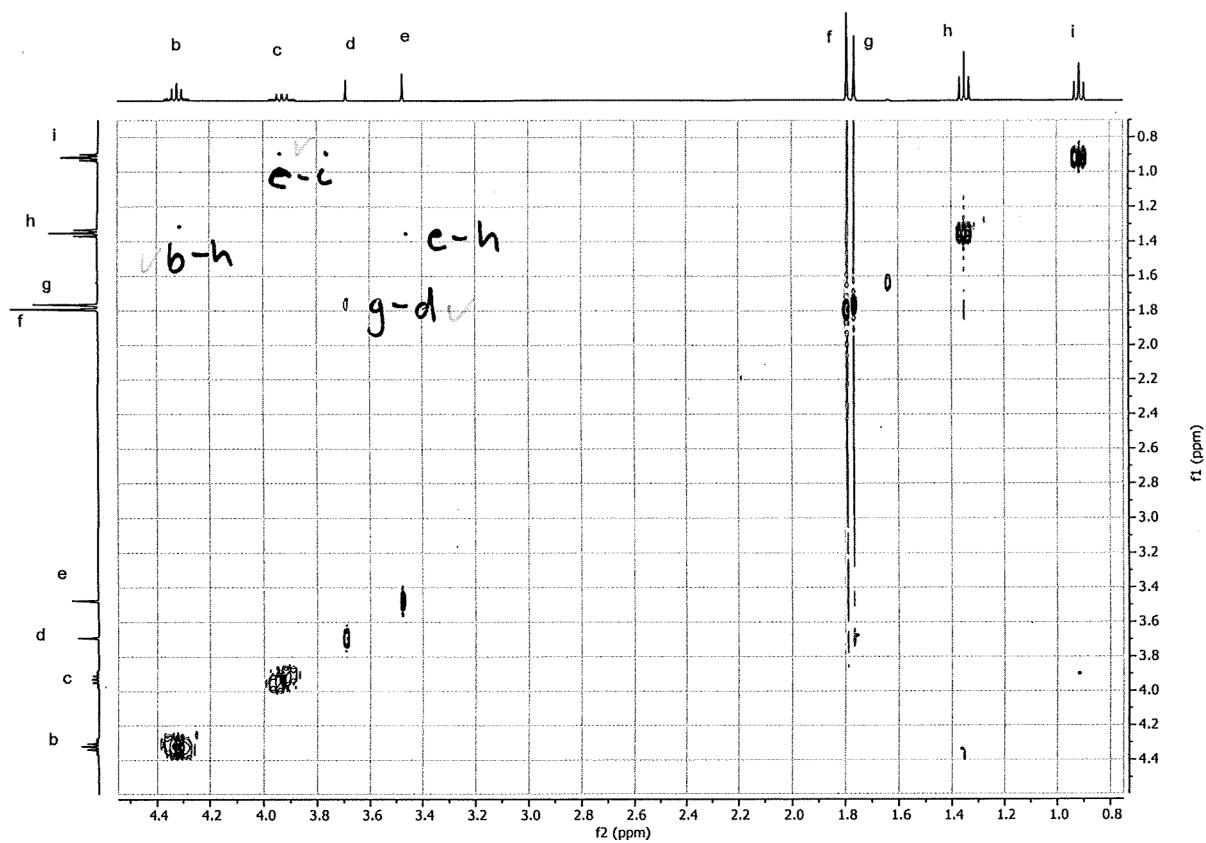
Vergrößerung HMBC

$1 \rightarrow b, f$
 $2 \rightarrow g, e$
 $4 \rightarrow b, d$
 $3 \rightarrow a, c$
 $g \rightarrow d, e$
 $7 \rightarrow c, f$

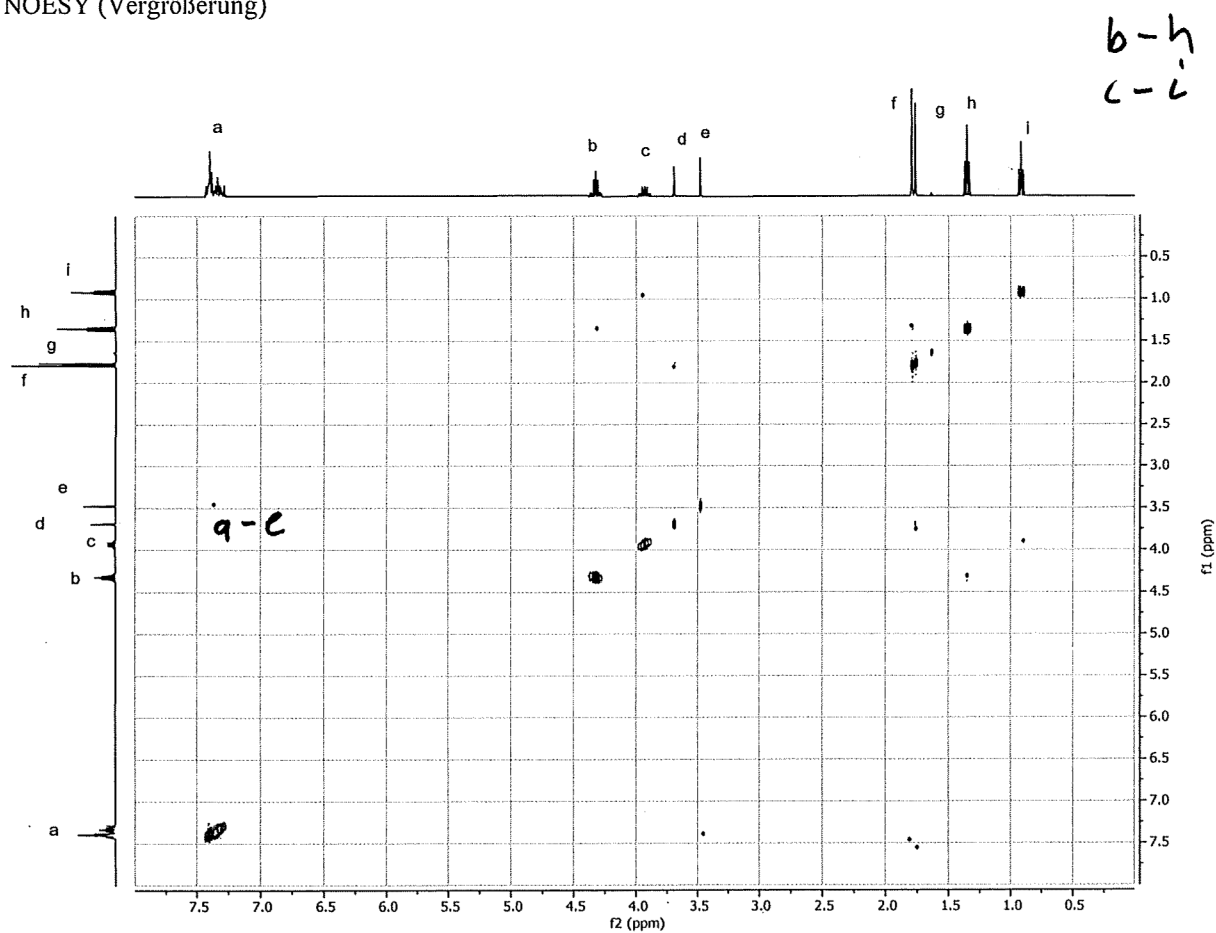
Frage 5: (7 Punkte)

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren eines diastereomeren Gemischs aus folgenden zwei Substanzen. (nicht 1 : 1 !!)
Ordnen Sie die ^1H -Signale zu. (7 P)





NOESY (Vergrößerung)



NOESY