

# Übungen zur Spektroskopie 2

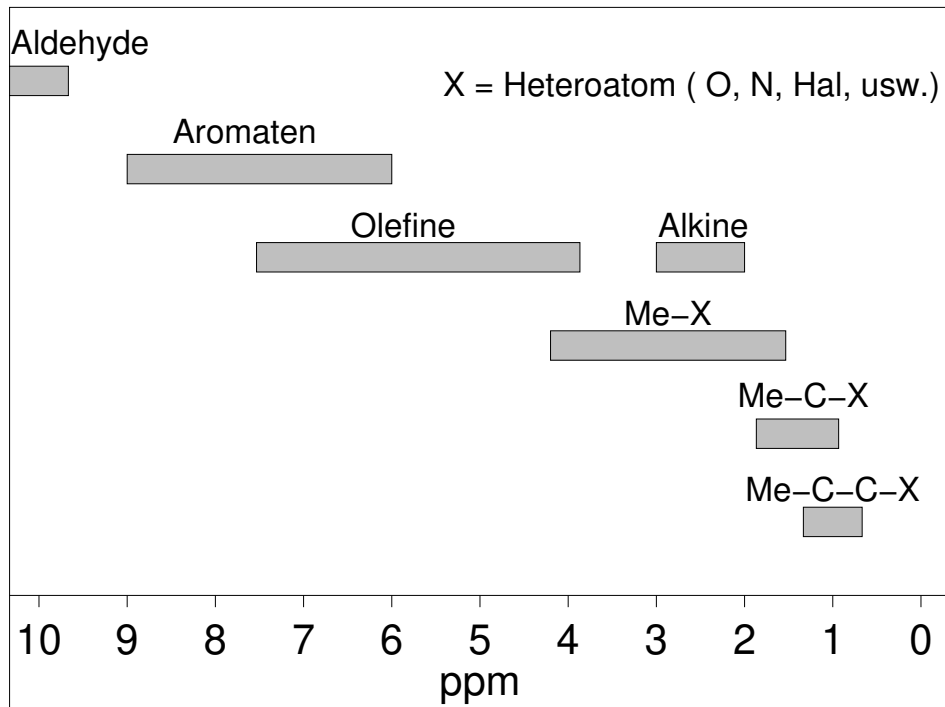
Claudia Ober und Dr. Julian Holzinger

Department Chemie, Universität München

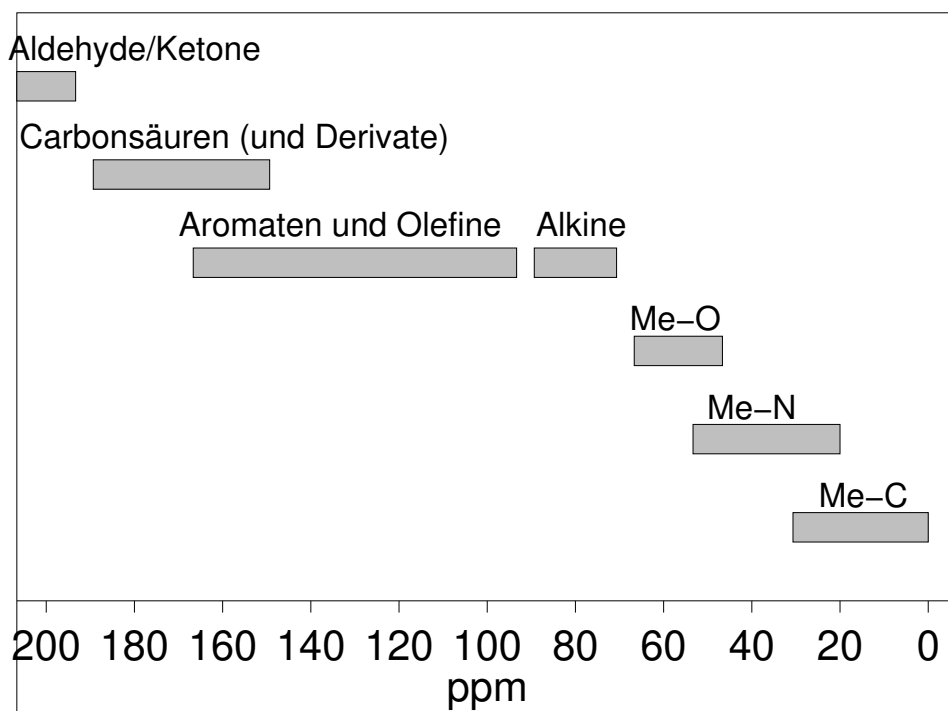
Kontakt: F0.055 [claudia.ober@cup.uni-muenchen.de](mailto:claudia.ober@cup.uni-muenchen.de)  
F0.052 [julian.holzinger@cup.lmu.de](mailto:julian.holzinger@cup.lmu.de)

Übungen und Altklausuren sind auf Moodle (Spektro II) oder hier zu finden:  
<https://www.cup.uni-muenchen.de/oc/nmr/uebungen/>  
<https://www.cup.uni-muenchen.de/oc/nmr/alte-klausuren/>

- Die  $^1\text{H}$  chemischen Verschiebungen liegen meistens zwischen 0 ppm und 10 ppm.



- Die  $^{13}\text{C}$  chemischen Verschiebungen liegen meistens zwischen 0 ppm und 200 ppm.

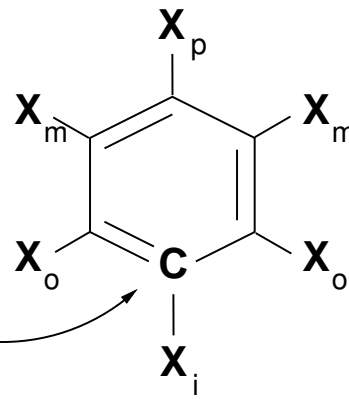


## 8. <sup>13</sup>C - „Inkremente“

- Benzole

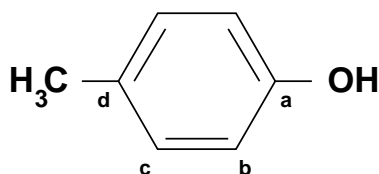
$$\delta_c = 128.5 + \sum_k S_k n_k$$

( k = i, o, m, p )



X	<i>S<sub>ipso</sub></i>	<i>S<sub>ortho</sub></i>	<i>S<sub>meta</sub></i>	<i>S<sub>para</sub></i>
CH <sub>3</sub>	9.2	0.7	-0.1	-3.1
CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	15.6	-0.5	0.0	-2.7
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20.1	-2.0	0.0	-2.5
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	22.1	-3.4	-0.4	-3.1
CH <sub>2</sub> Cl	9.3	0.3	0.2	0
CH <sub>2</sub> Br	9.5	0.7	0.3	0.2
CH <sub>2</sub> OH	12.4	-1.2	0.2	-1.1
CH=CH <sub>2</sub>	8.9	-2.3	-0.1	-0.8
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	13.1	-1.1	0.4	-1.1
C≡CH	-6.2	3.6	-0.4	-0.3
CHO	8.4	1.2	0.5	5.7
COCH <sub>3</sub>	8.9	0.1	-0.1	4.4
COOH	2.1	1.6	-0.1	5.2
COOCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2.1	1.0	-0.5	3.9
CONR <sub>2</sub>	5.0	-1.2	0.1	3.4
OH	26.9	-12.8	1.4	-7.4
OCH <sub>3</sub>	31.4	-14.4	1.0	-7.7
OCOCH <sub>3</sub>	22.4	-7.1	0.4	-3.2
CN	-15.7	3.6	0.7	4.3
NH <sub>2</sub>	18.2	-13.4	0.8	-10.0
NO <sub>2</sub>	19.9	-4.9	0.9	6.1
F	34.8	-13.0	1.6	-4.4
Cl	6.3	0.4	1.4	-1.9
Br	-5.8	3.2	1.6	-1.6
I	-34.1	8.9	1.6	-1.1

### – Beispiel: p-Kresol



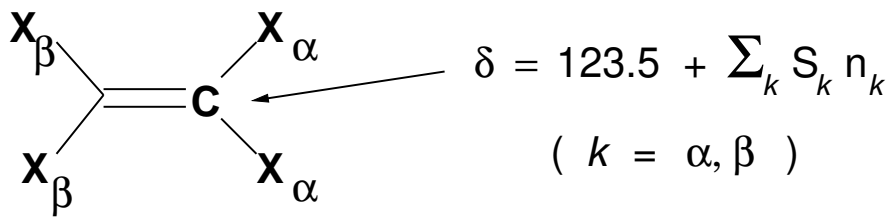
$$\delta_a = 128.5 + 26.9 - 3.1 = 152.3 \quad (\text{gem.: } 152.6)$$

$$\delta_b = 128.5 - 12.8 - 0.1 = 115.6 \quad (\text{gem.: } 115.3)$$

$$\delta_c = 128.5 + 1.4 + 0.7 = 130.6 \quad (\text{gem.: } 130.2)$$

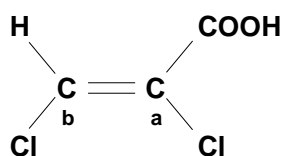
$$\delta_d = 128.5 - 7.4 + 9.2 = 130.3 \quad (\text{gem.: } 130.5)$$

- Olefine



X	$S_\alpha$	$S_\beta$
CH <sub>3</sub>	10.6	-7.9
CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	15.5	-9.7
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	14.0	-8.2
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	20.4	-11.5
C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	25.3	-13.3
CH <sub>2</sub> Cl	10.2	-6.0
CH <sub>2</sub> Br	10.9	-4.5
CH <sub>2</sub> I	14.2	-4.0
CH <sub>2</sub> OH	14.2	-8.4
CH=CH <sub>2</sub>	13.6	-7.0
C≡CH	-7.5	8.9
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	12.5	-11.0
CHO	13.1	12.7
COCH <sub>3</sub>	15.0	5.8
COOH	4.2	8.9
COOCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	6.3	7.0
OCH <sub>3</sub>	29.4	-38.9
OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	28.5	-39.8
OCOCH <sub>3</sub>	18.4	-26.7
CN	-15.1	14.2
NO <sub>2</sub>	22.3	-0.9
F	24.9	-34.3
Cl	2.6	-6.1
Br	-7.9	-1.4
I	-38.1	7.0

– Beispiel: Dichloracrylsäure



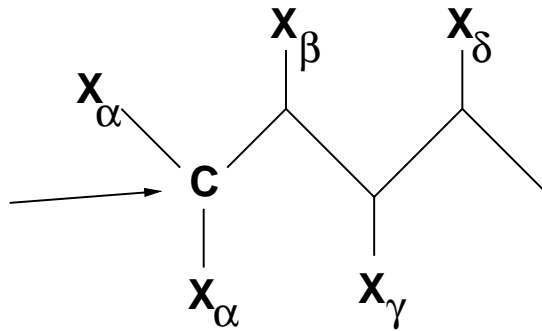
$$\delta_a = 123.5 + 4.2 + 2.6 - 6.1 = 124.2 \quad (\text{gem.: } 129.3)$$

$$\delta_b = 123.5 + 8.9 - 6.1 + 2.6 = 128.9 \quad (\text{gem.: } 132.6)$$

• Aliphaten

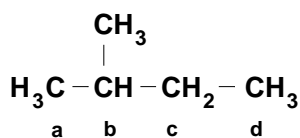
$$\delta = -2.3 + \sum_k S_k n_k$$

(  $k = \alpha, \beta, \gamma, \delta$  )



X	$S_\alpha$	$S_\beta$	$S_\gamma$	$S_\delta$
CH <sub>3</sub>	9.1	9.4	-2.5	0.3
CH=CH <sub>2</sub>	22.3	6.9	-2.2	0.2
CH=CH( <i>cis</i> )	14.2	7.3	-1.5	0
CH=CH( <i>trans</i> )	19.7	7.2	-1.6	0
C≡CH	4.5	5.5	-3.5	0
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	22.3	8.6	-2.3	0.2
CHO	31.9	0.7	-2.3	0
COCH <sub>3</sub>	30.9	2.3	-0.9	2.7
COOH	20.8	2.7	-2.3	1.0
COOCH <sub>3</sub>	20.4	2.3	-1.9	1.2
CONR <sub>2</sub>	22.0	2.6	-3.2	-0.4
CN	3.6	2.0	-3.1	-0.5
NH <sub>2</sub>	28.6	11.5	-4.9	0.3
NO <sub>2</sub>	64.5	3.1	-4.7	-1.0
OH( <i>prim</i> )	48.3	10.2	-5.8	0.3
OH( <i>sek</i> )	44.5	9.7	-3.3	0.2
OH( <i>tert</i> )	39.7	7.3	-1.8	0.3
OR	58.0	8.1	-4.7	1.4
OCOCH <sub>3</sub>	51.1	7.1	-4.8	1.1
SH	11.1	11.8	-2.9	0.7
SCH <sub>3</sub>	21.1	6.4	-3.0	0.5
F	70.1	7.8	-6.8	0
Cl	31.2	10.5	-4.6	0.1
Br	20.0	10.6	-3.1	0.1
I	-6.0	11.3	-1.0	0.2

– Beispiel: Isopentan



$$\delta_a = -2.3 + 1 * 9.1 + 2 * 9.4 - 1 * 2.5 = 23.1 \text{ (gem.: 21.9)}$$

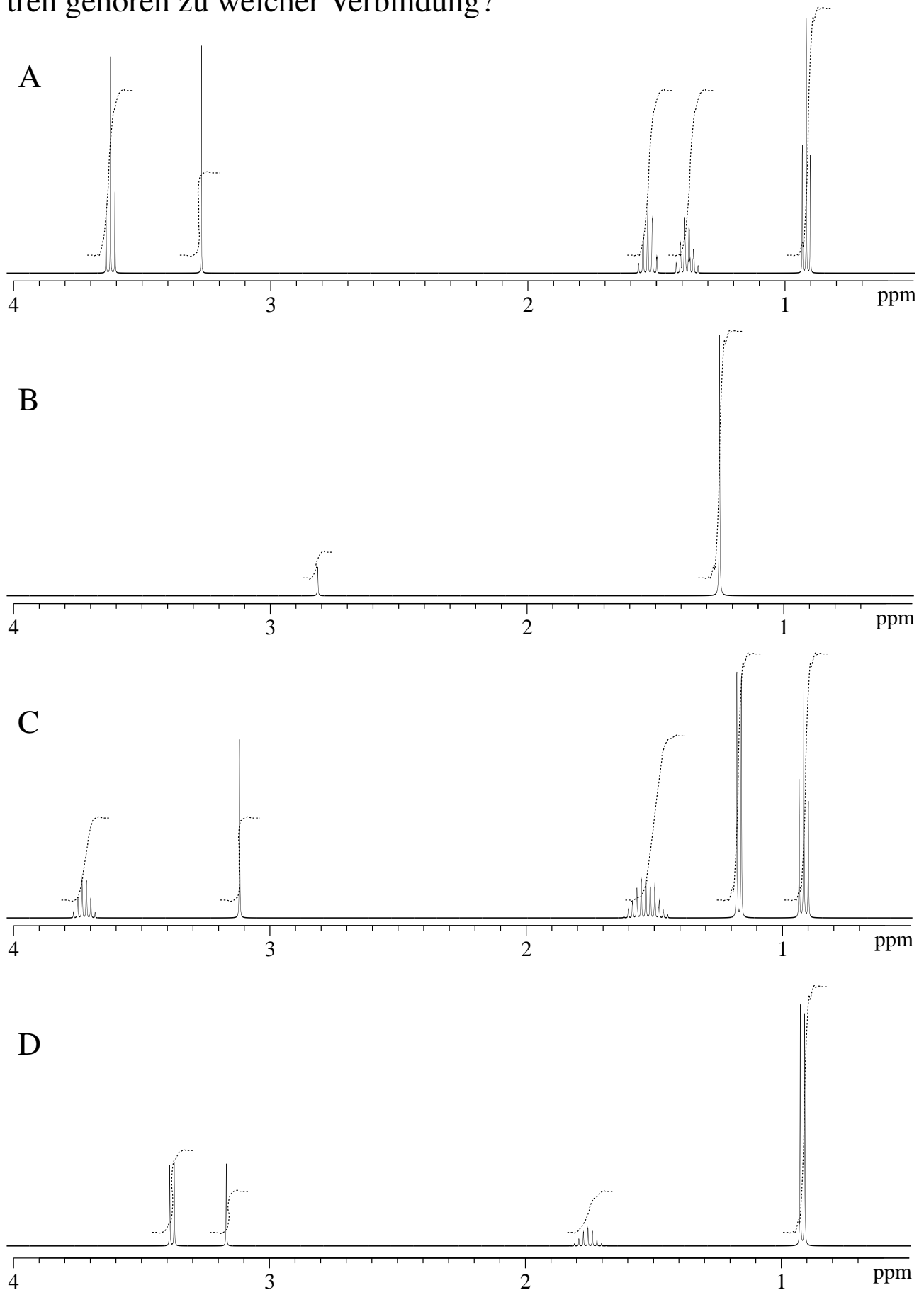
$$\delta_b = -2.3 + 3 * 9.1 + 1 * 9.4 - 0 * 2.5 = 34.4 \text{ (gem.: 29.7)}$$

$$\delta_c = -2.3 + 2 * 9.1 + 2 * 9.4 - 0 * 2.5 = 34.7 \text{ (gem.: 31.7)}$$

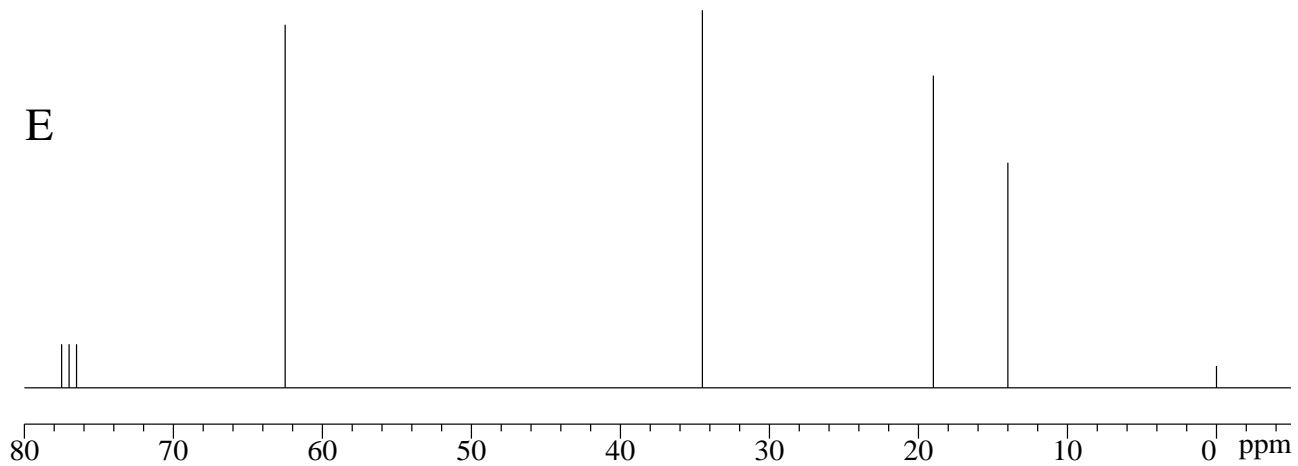
$$\delta_d = -2.3 + 1 * 9.1 + 1 * 9.4 - 2 * 2.5 = 11.2 \text{ (gem.: 11.4)}$$

# Übung 1

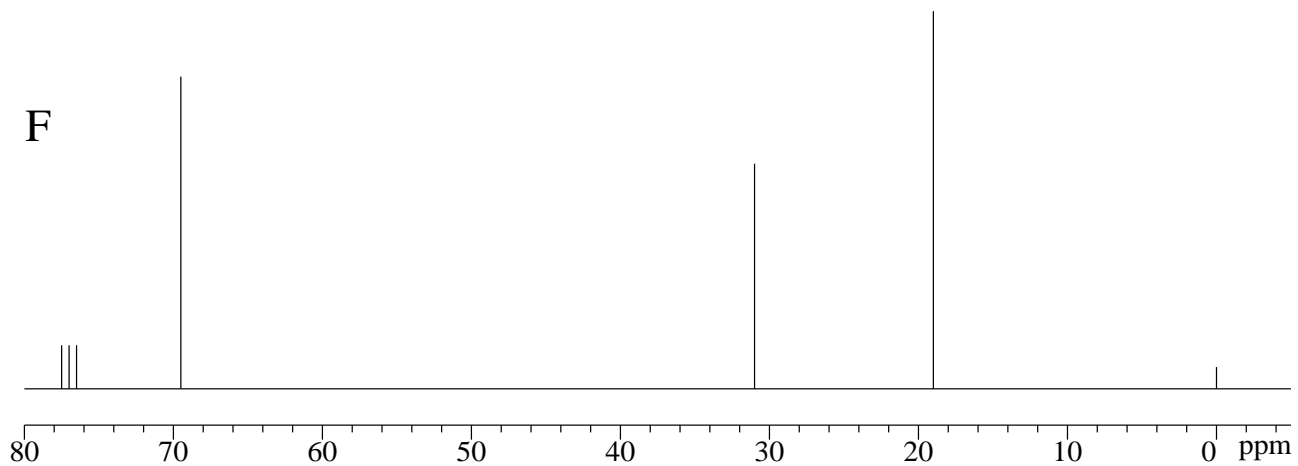
Es gibt 4 isomere Butanole mit der Summenformel  $C_4H_{10}O$ . Die  $^1H$ - und  $^{13}C$ -Spektren dieser Verbindungen sind abgebildet. Welche Spektren gehören zu welcher Verbindung?



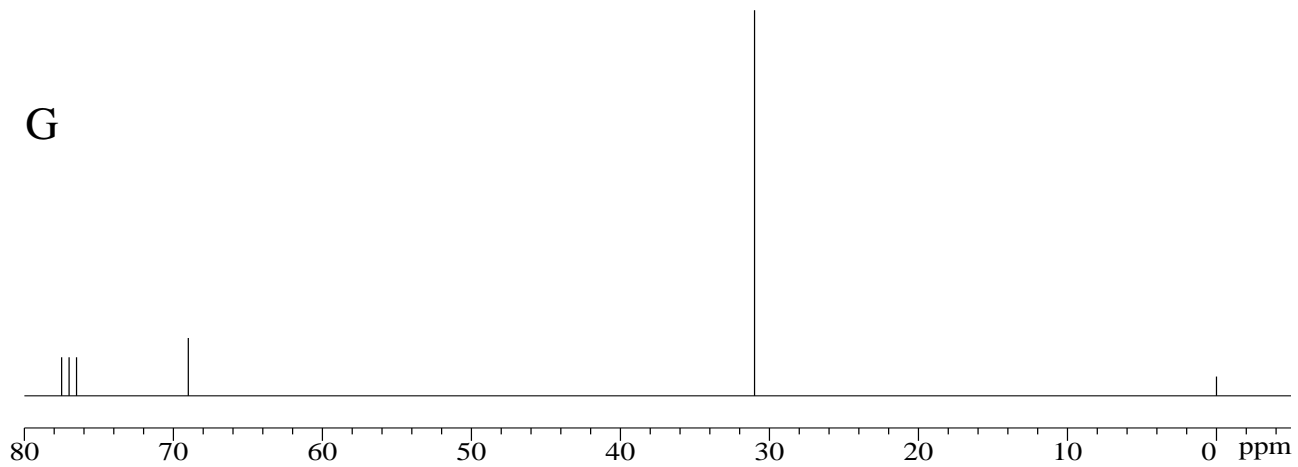
E



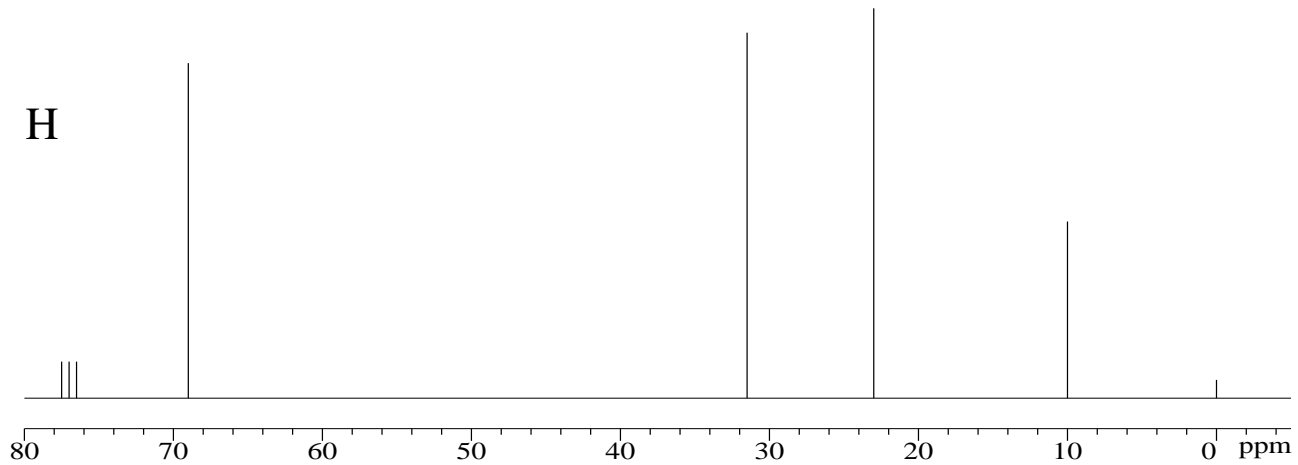
F



G

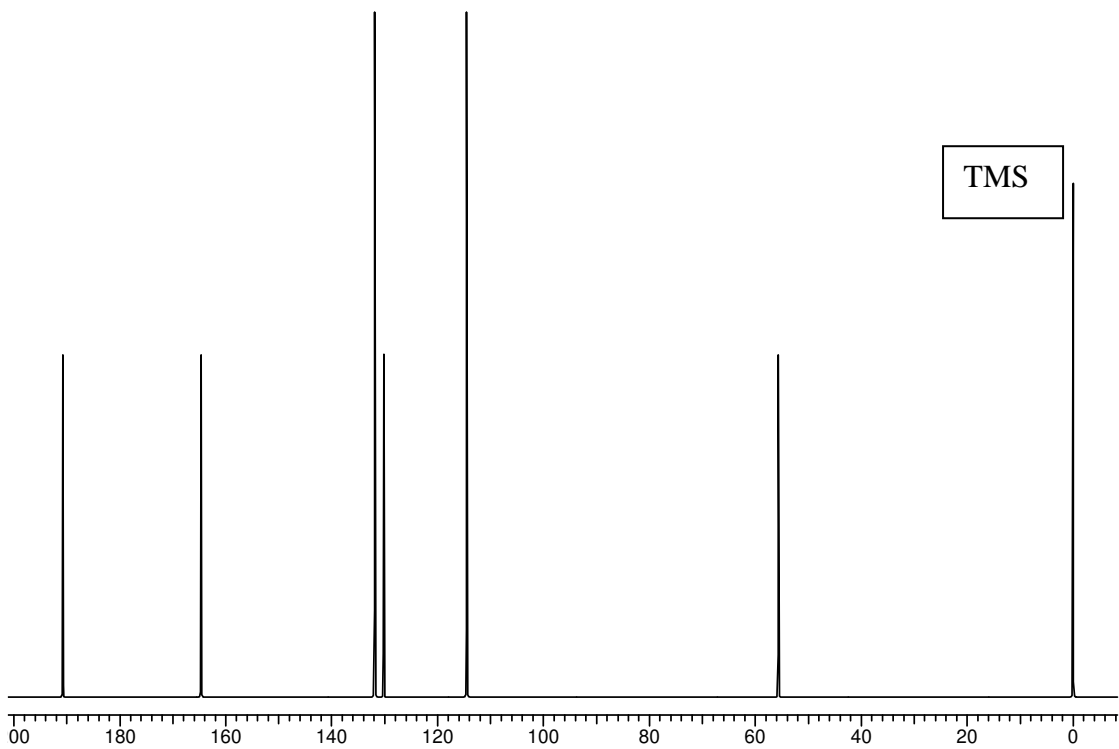
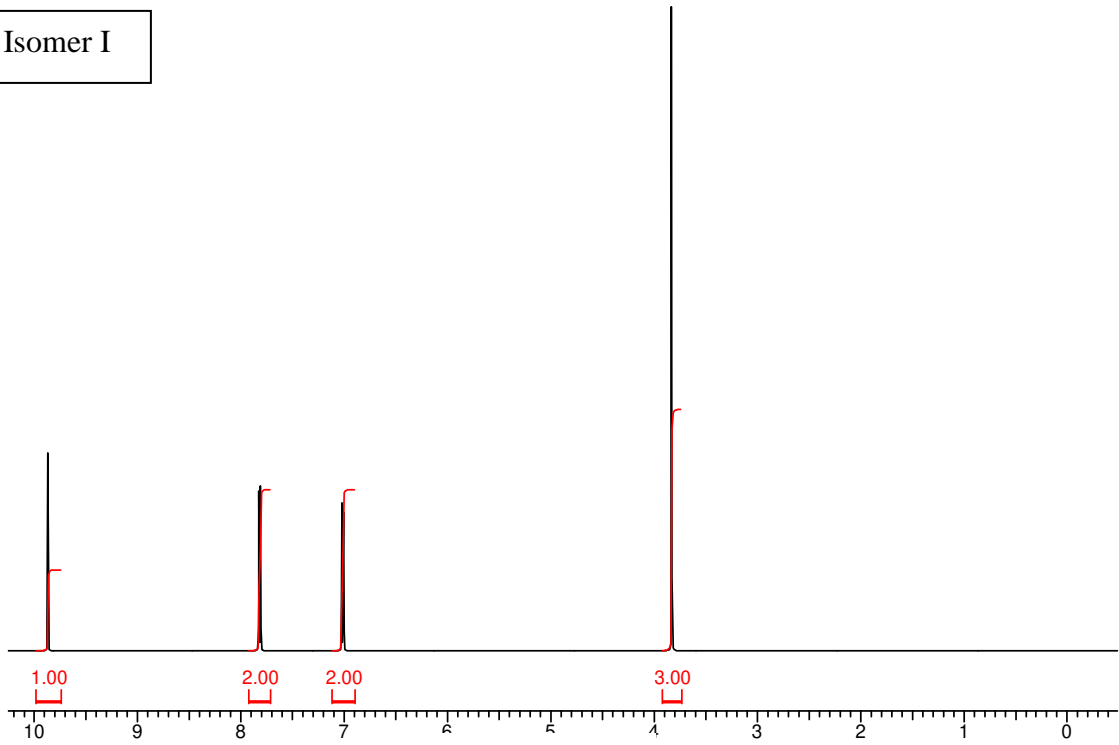


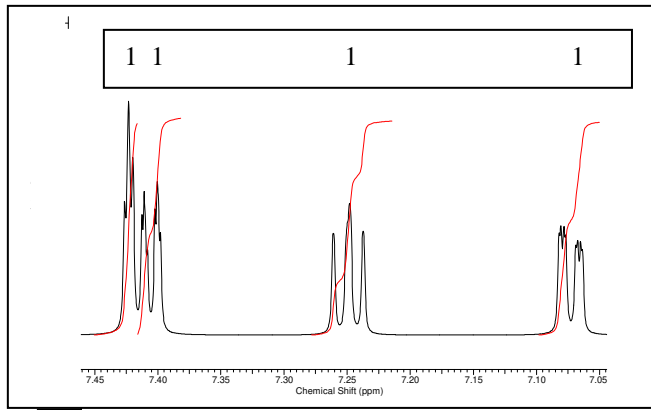
H



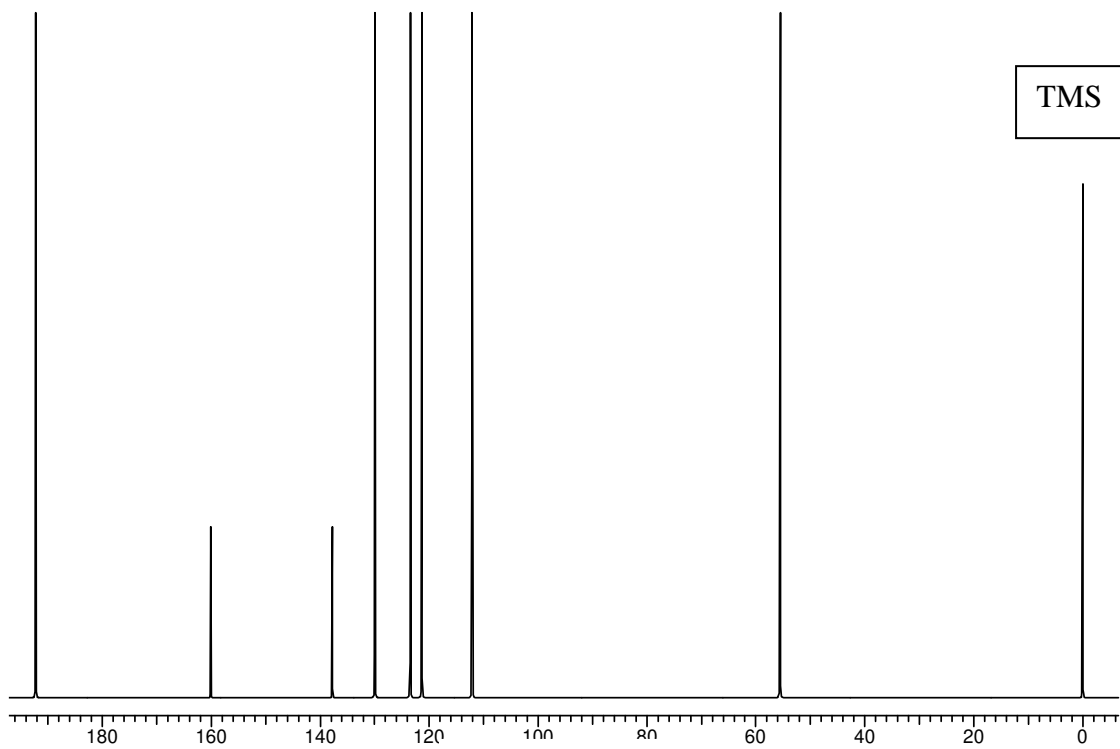
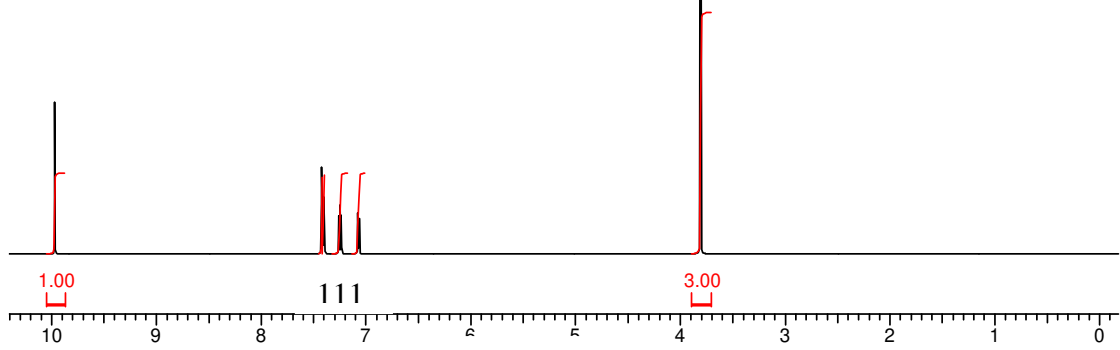
U2 Hier sind die Spektren von 2 Isomeren mit der Summenformel  $C_8H_8O_2$ .  
Bestimmen Sie die Strukturen.

Isomer I

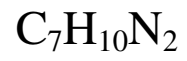




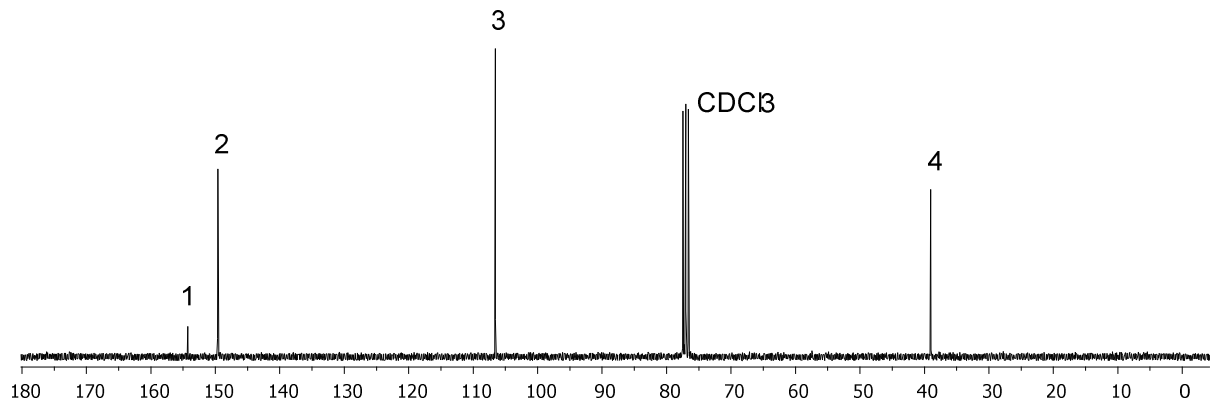
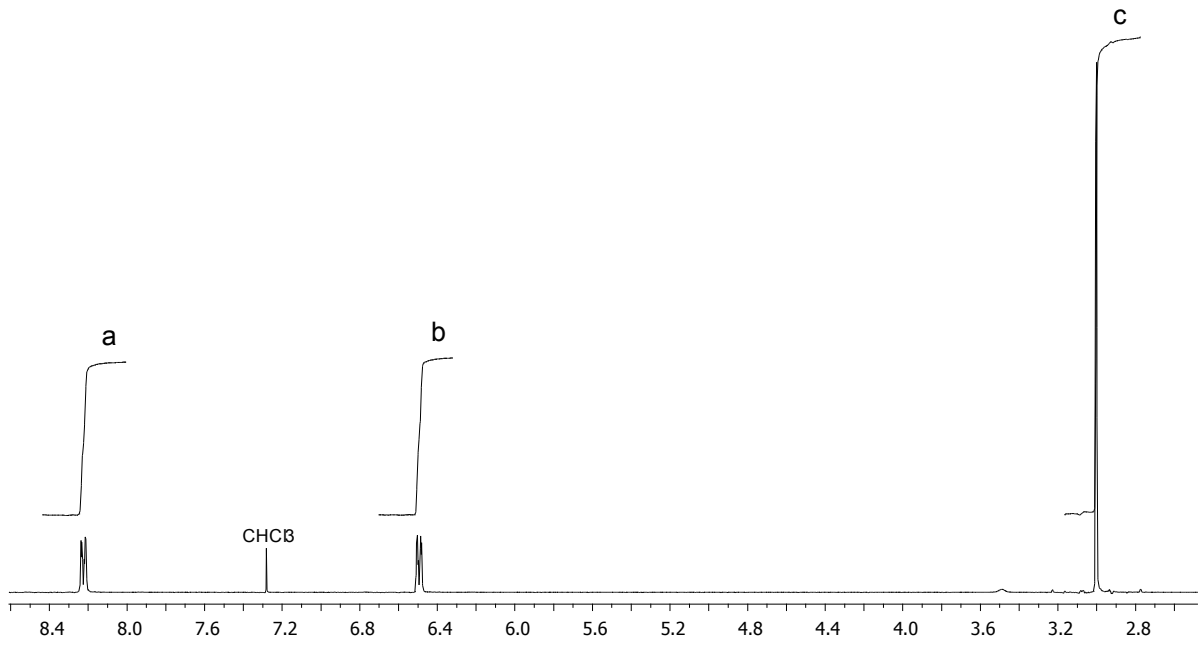
Isomer II



U3

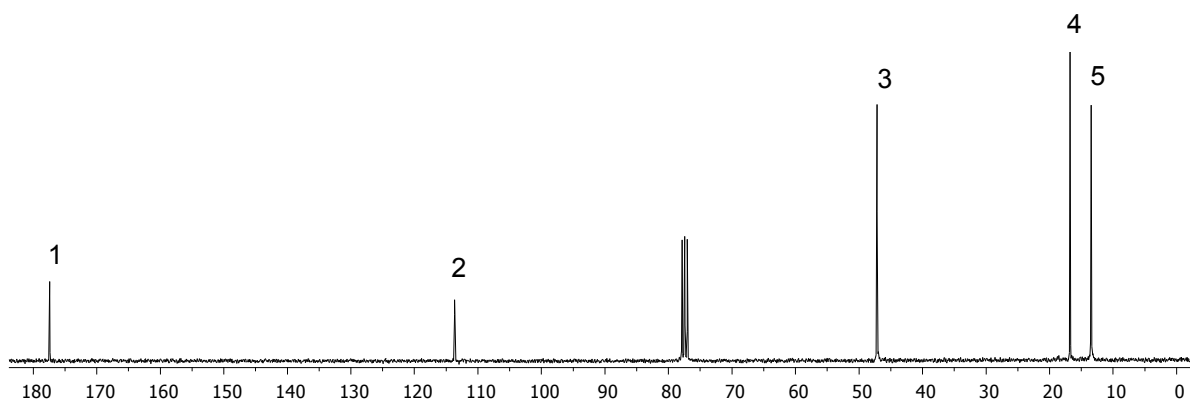
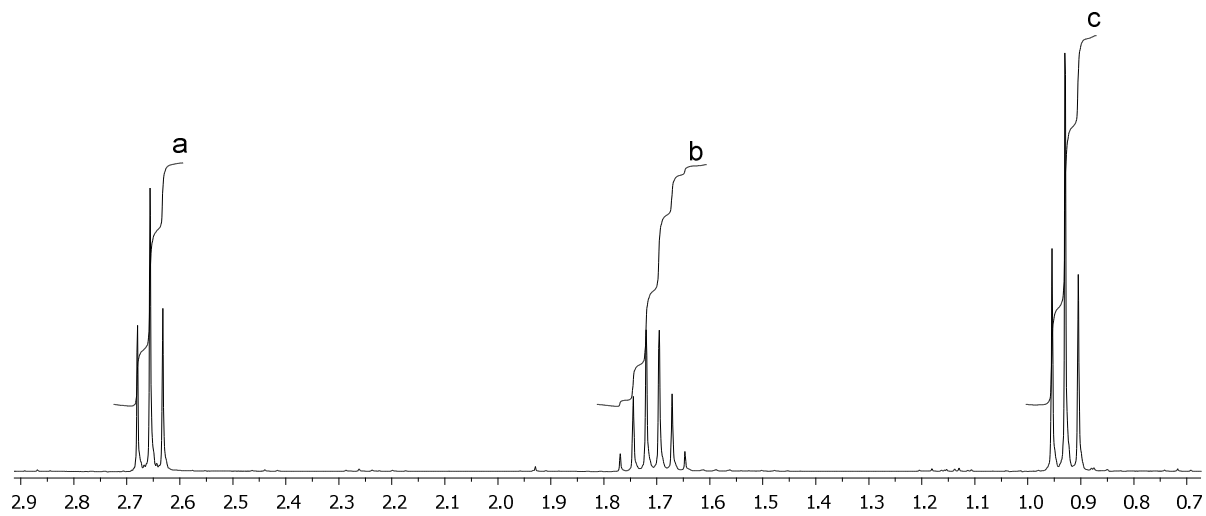


1. Bestimmen Sie die Struktur
2. Ordnen Sie die Signale zu.



U 4

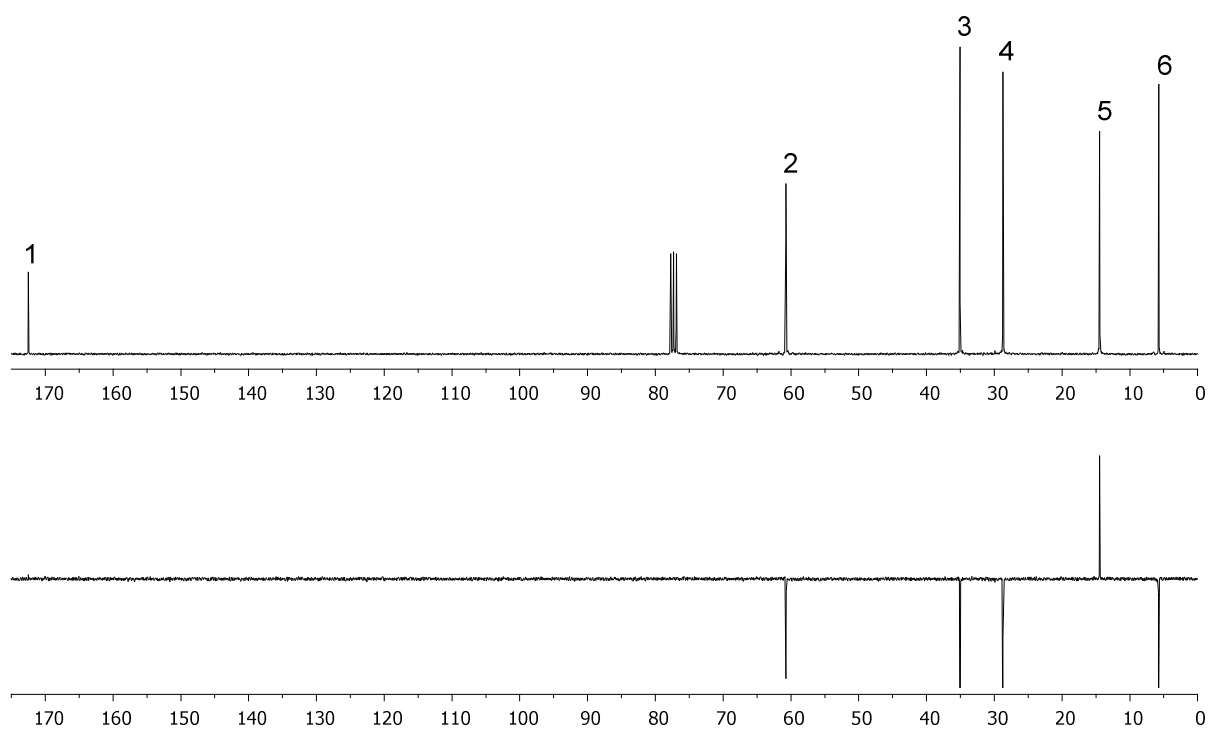
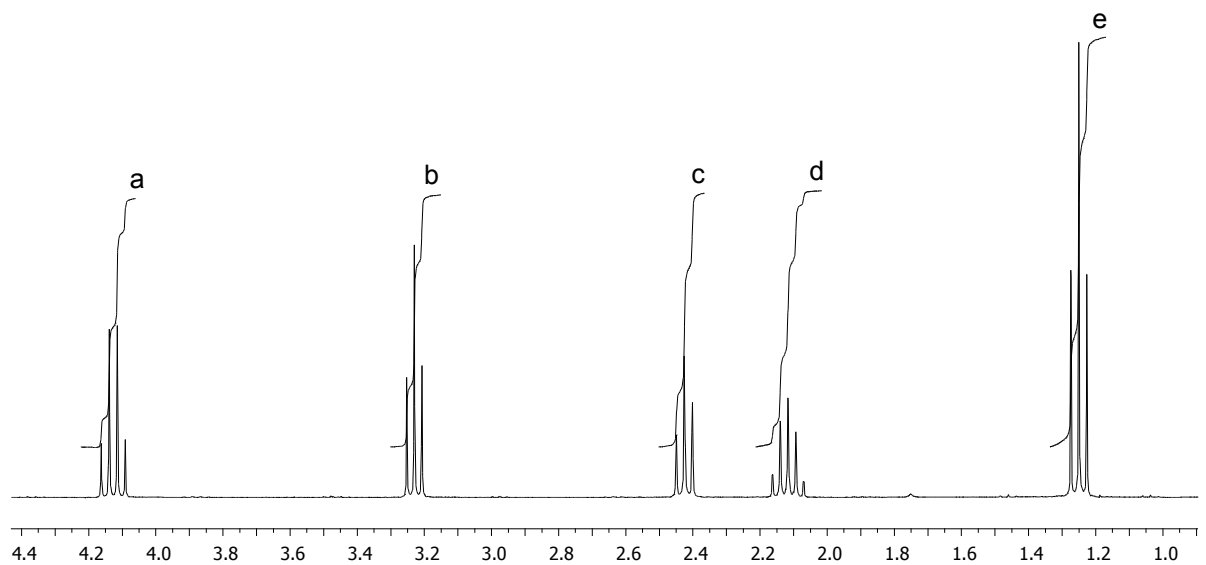
$C_5H_7ON$  (N – 3bindig)



U 5



1. Struktur ?



1. Struktur?
2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die aromatischen Protonen.
3. Auf welchem NMR-Gerät wurden diese Spektren aufgenommen? (200/300/400/600 MHz-Gerät)

Hinweis: Der Name des NMR-Geräts hängt von der Protonen-Frequenz ab.

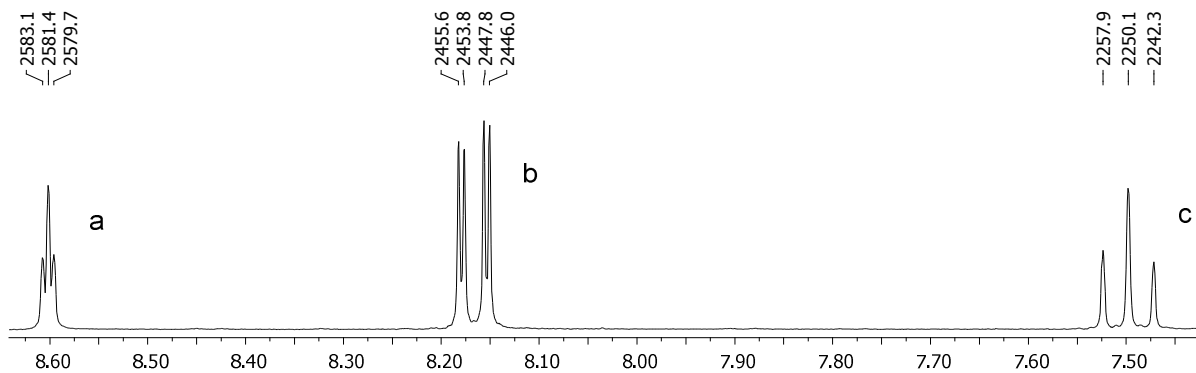
Die  $^{13}C$ -Frequenz ist immer  $\frac{1}{4}$  der Protonenfrequenz

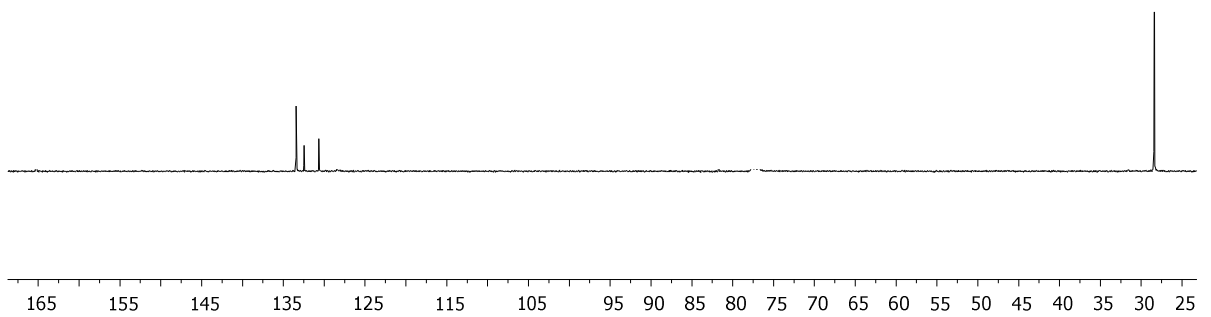
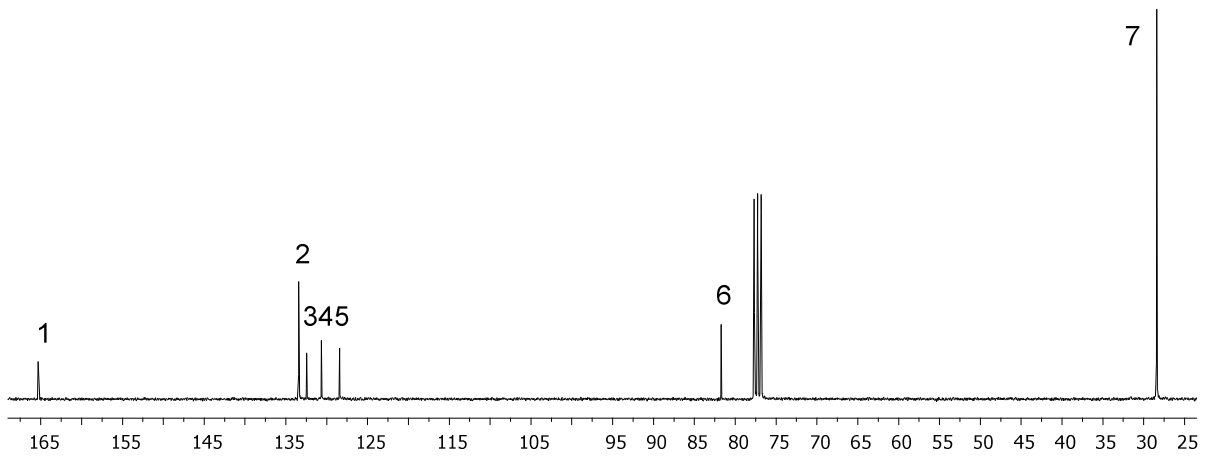
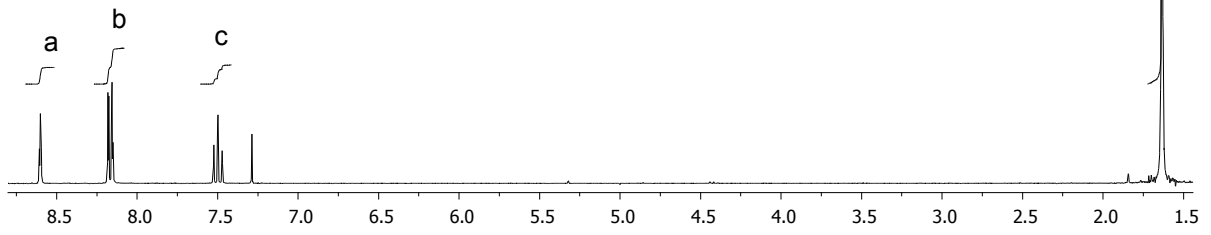
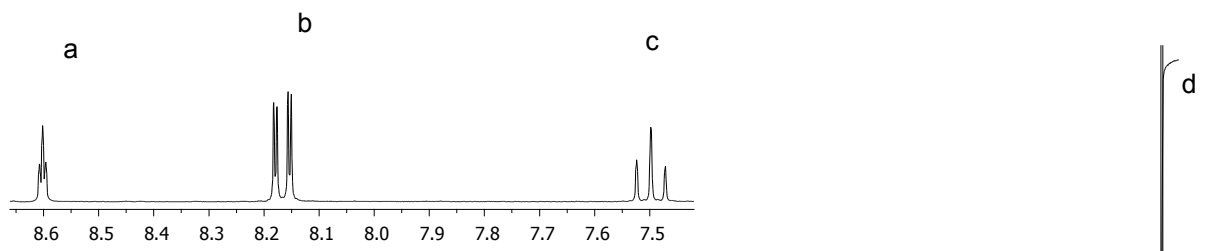
Die Achse (Frequenz in ppm) ist geräteunabhängig.

Das Peakpicking (Frequenz in Hz) ist geräteabhängig (hier: 1 ppm = 300 Hz)

Kopplungskonstanten (in Hz angegeben) sind geräteunabhängig

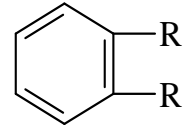
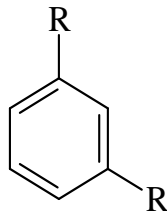
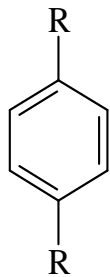
Achten Sie auf die richtige Einheit Messfrequenz: MHz, Spektrum: Hz





# U7

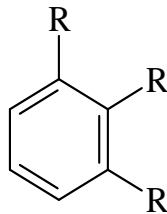
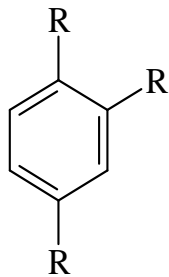
- a) Wieviele Signale erhalten Sie im  $^1\text{H}$  bzw.  $^{13}\text{C}$ -Spektrum?  
 b) Geben Sie das Aufspaltungsmuster der Protonen an.



$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signale

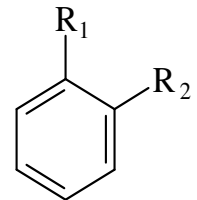
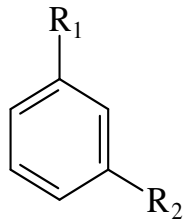
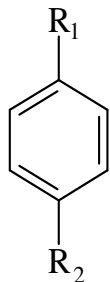
---



$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signale

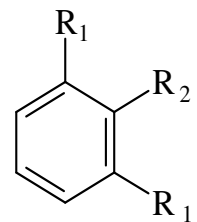
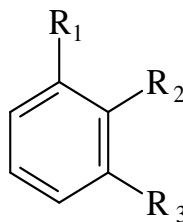
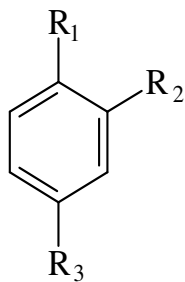
---



$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signale

---

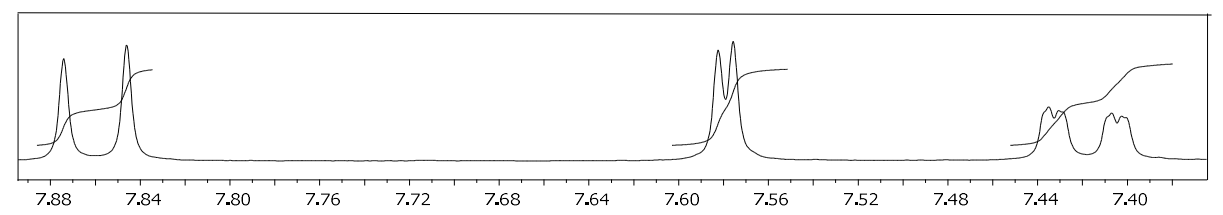
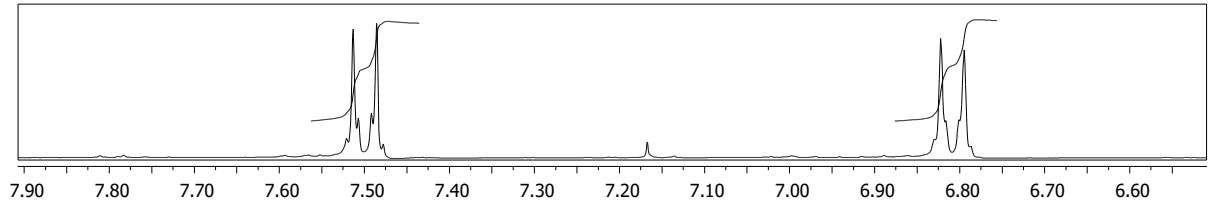
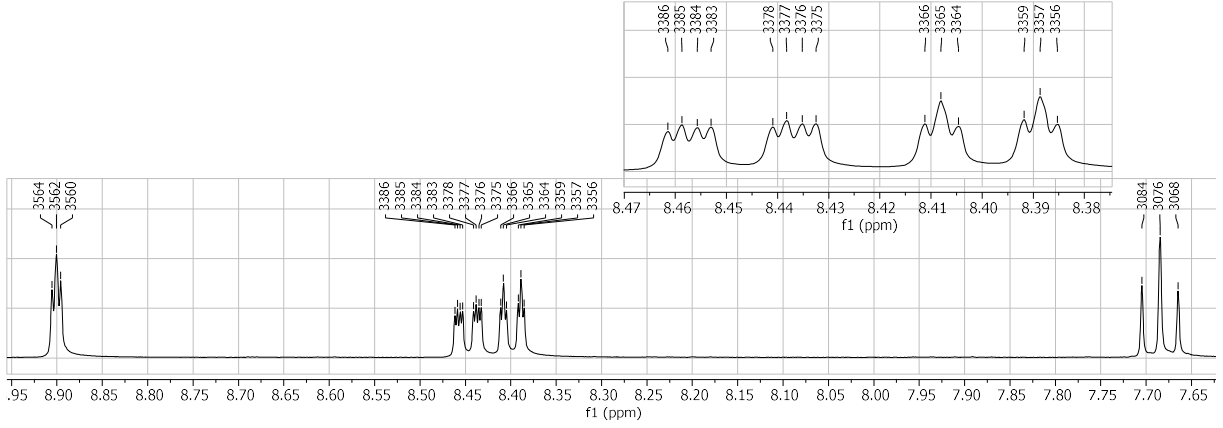
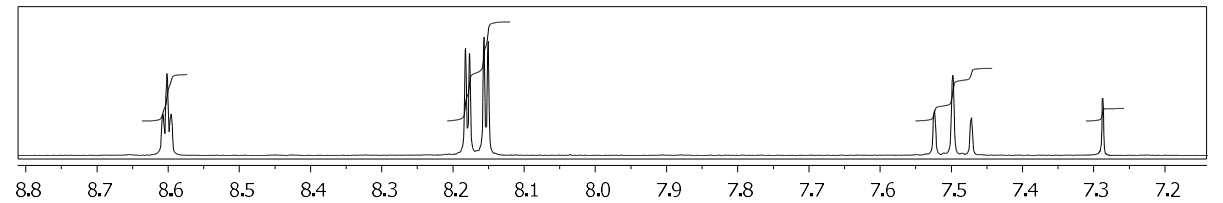
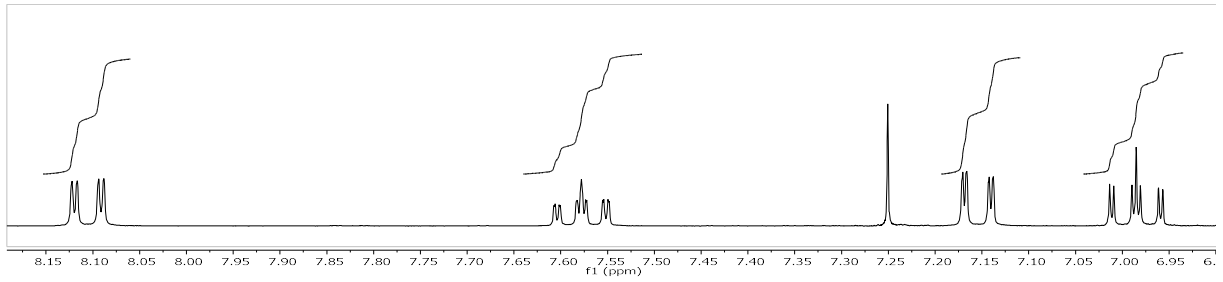


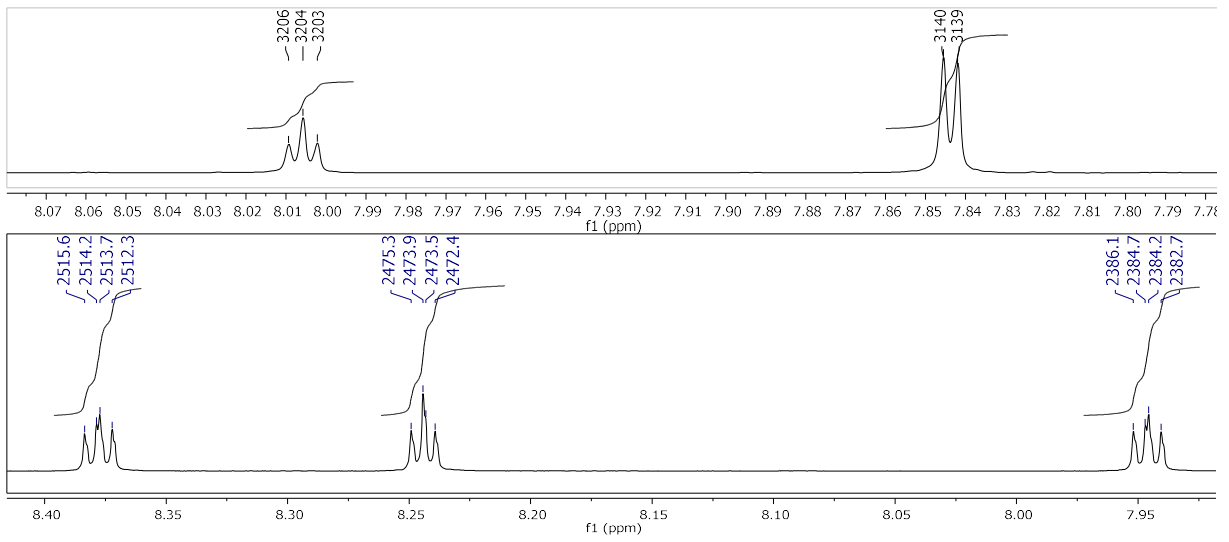
$^1\text{H}$ -Signale

$^{13}\text{C}$ -Signal

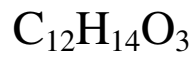
Wie sind die Aromaten in folgenden Spektren substituiert?

U7/2

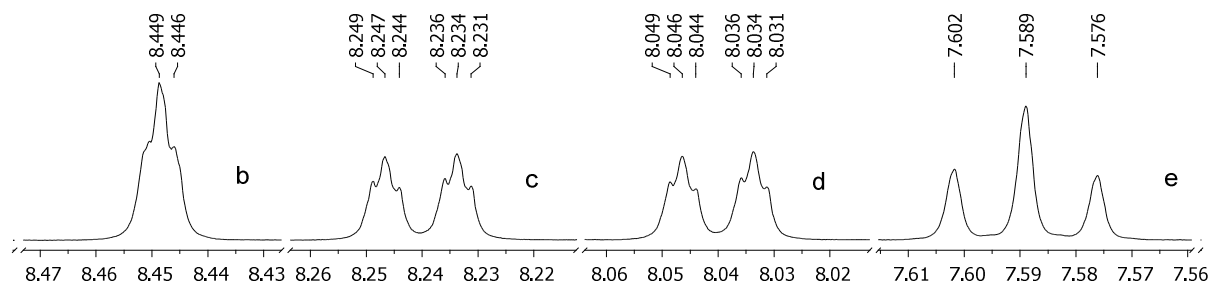


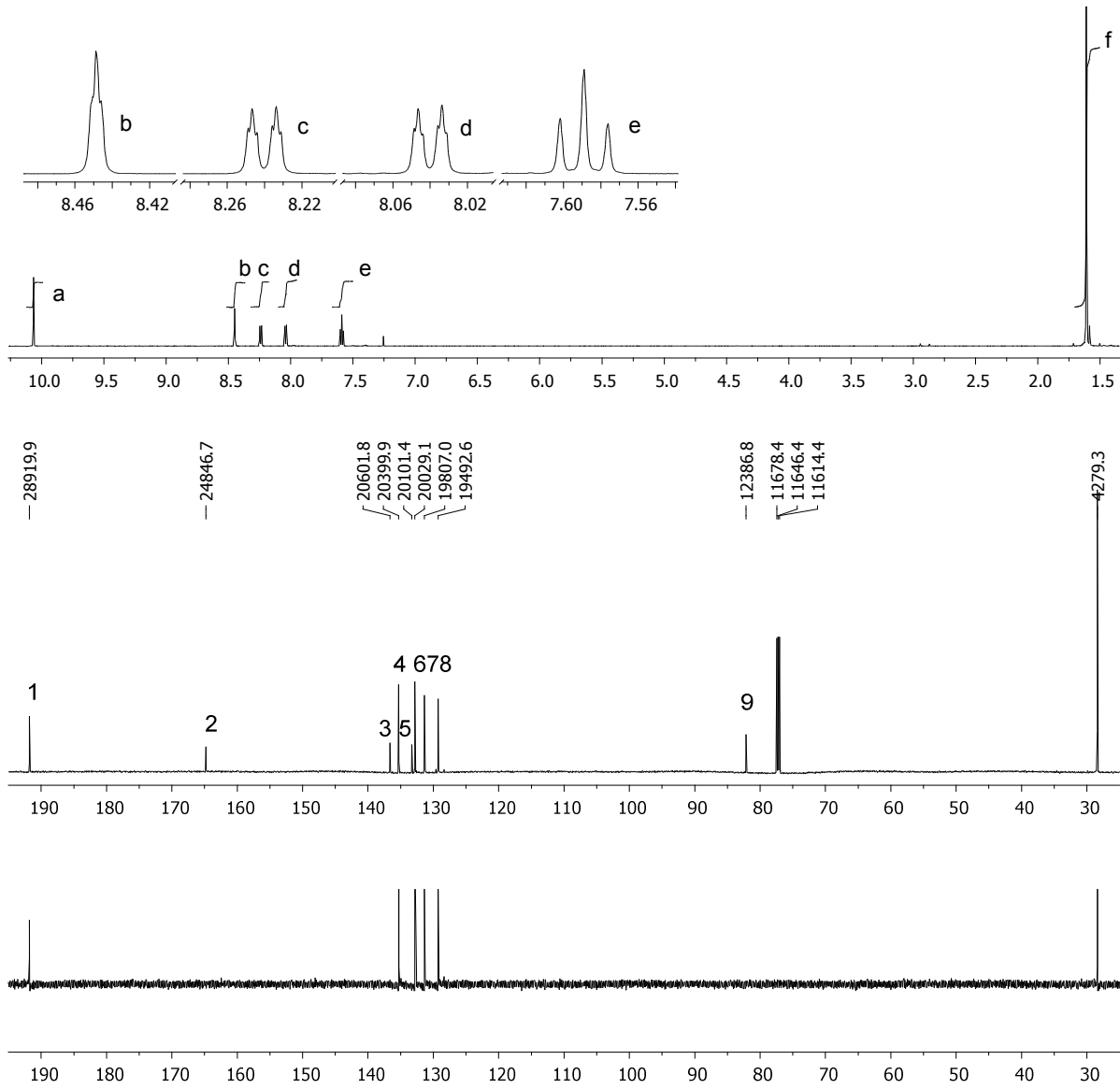


U 8

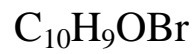


1. Struktur?
2. Auf welcher Maschine wurden die Spektren gemessen?
3. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für alle arom. Protonen incl. allen Kopplungskonstanten.



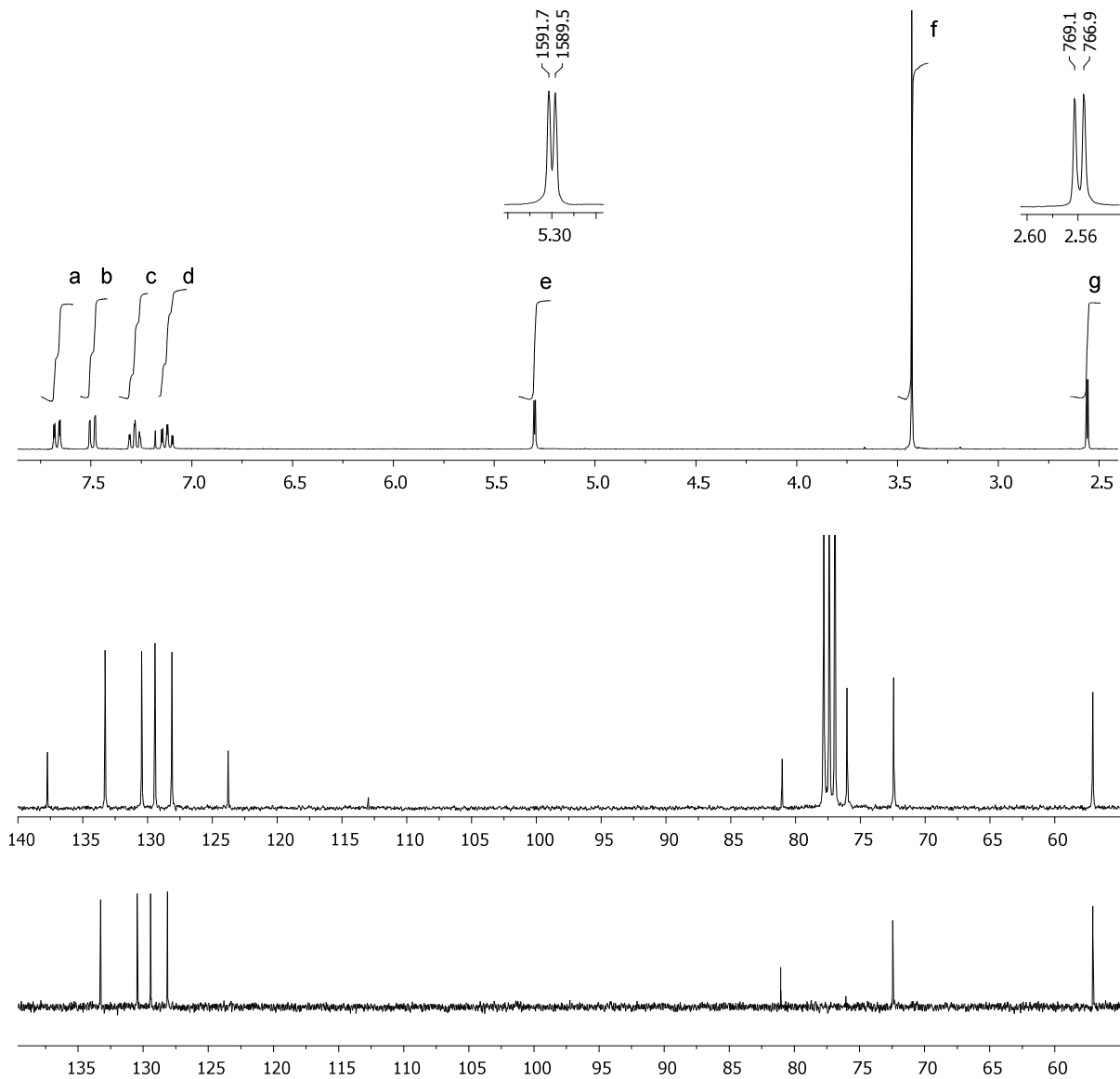


# U9



Hinweis:  $\delta(\text{Acetylen}, ^1\text{H}) = 1,8 \text{ ppm}$  ,  $\delta(\text{Acetylen}, ^{13}\text{C}) = 71,9 \text{ ppm}$

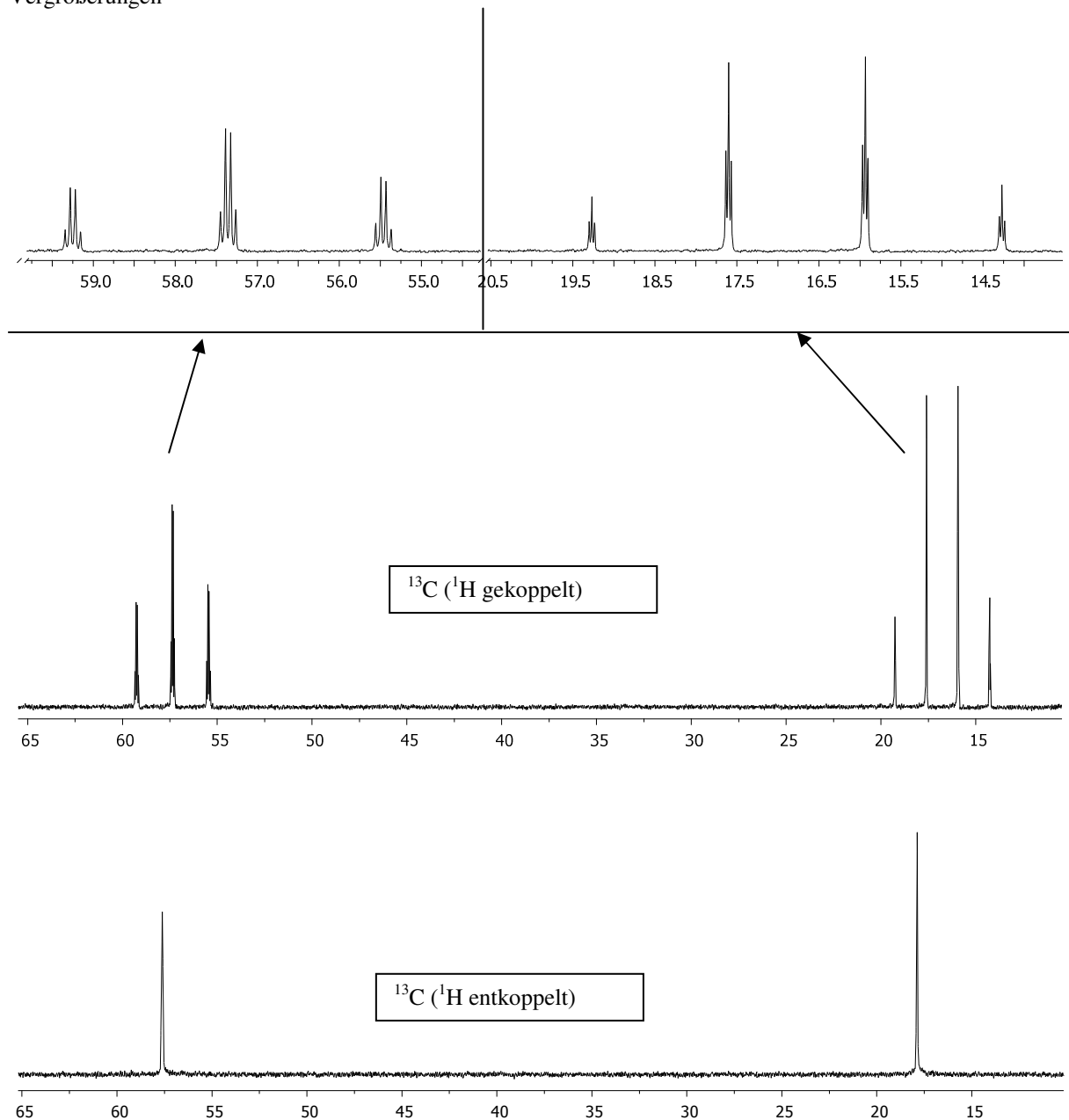
1. Struktur?
2. Im Protonenspektrum haben die 2 Peaks bei 5,3 ppm und 2,56 ppm die gleiche Kopplungskonstante. Was schließen Sie daraus?



## U 10: Entkopplung

- Um welchen Alkohol handelt es sich?
- Erklären Sie das Kopplungsmuster
- Warum entkoppelt man normalerweise das  $^{13}\text{C}$ -Spektrum?
- Wenn man nicht entkoppelt, sieht man in  $^{13}\text{C}$ -Spektren die Protonenkopplungen. Warum sieht man im  $^1\text{H}$ -Spektrum keine  $^{13}\text{C}$ -Kopplungen?

Vergrößerungen

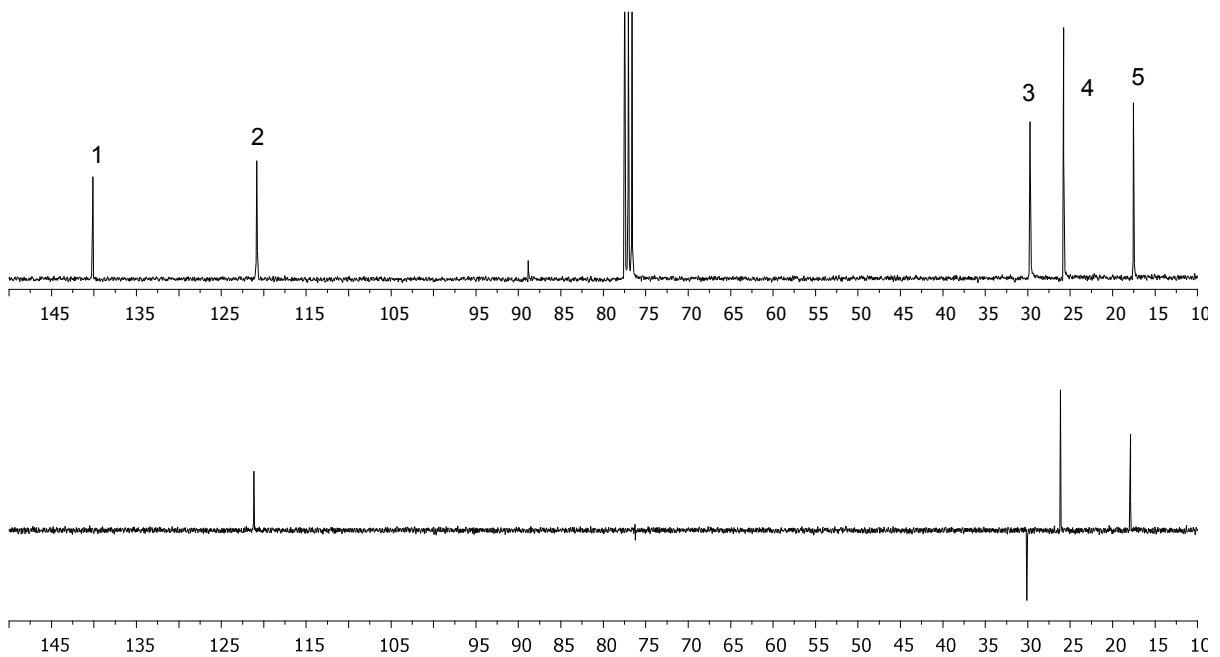
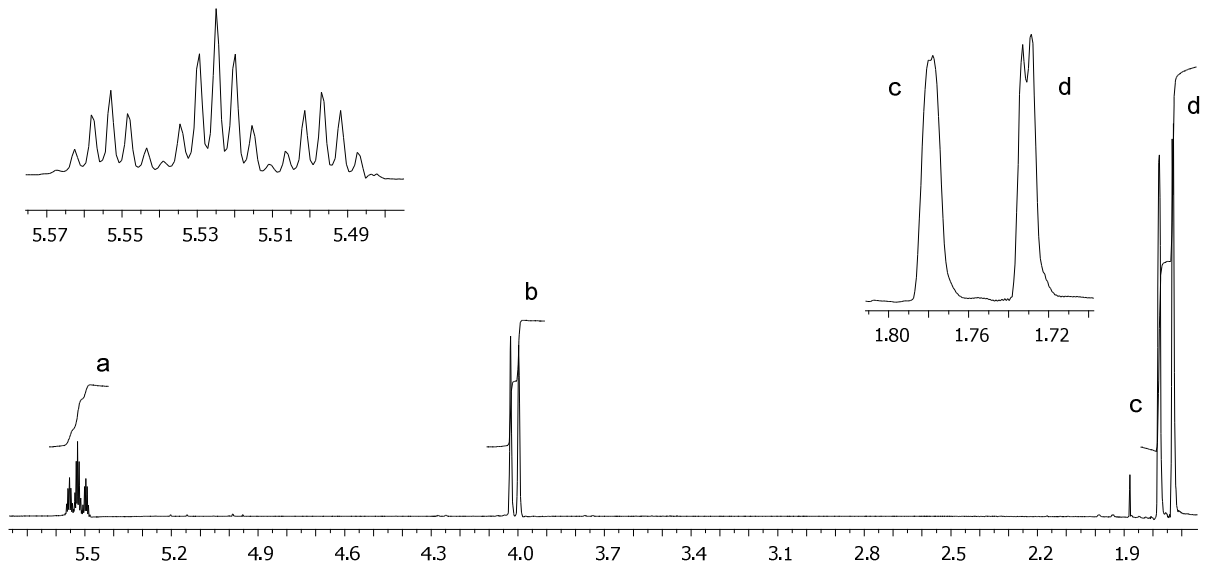


U 11

$C_5H_9Br$

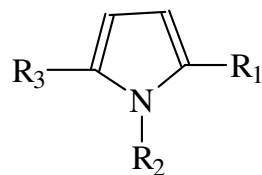
1. Struktur ?

2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für alle  $^1H$ -Signale.

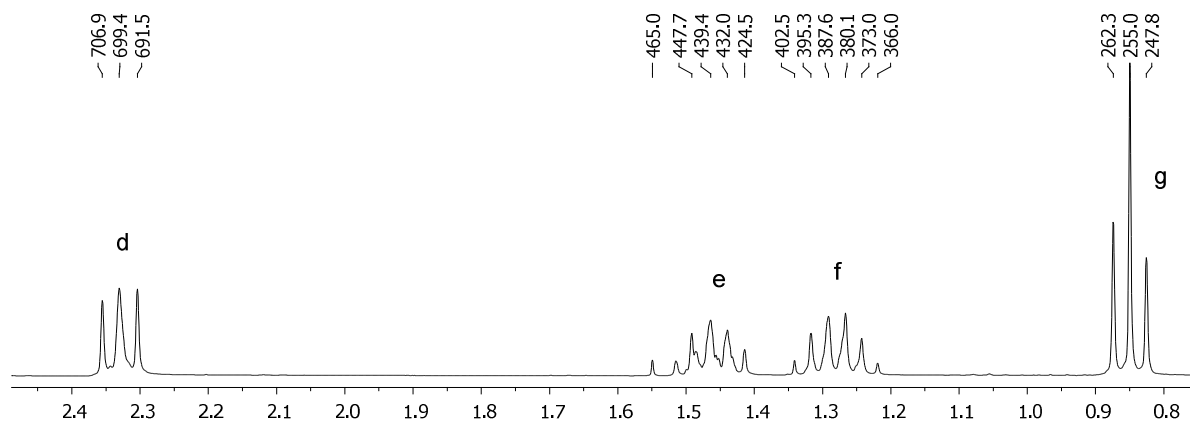


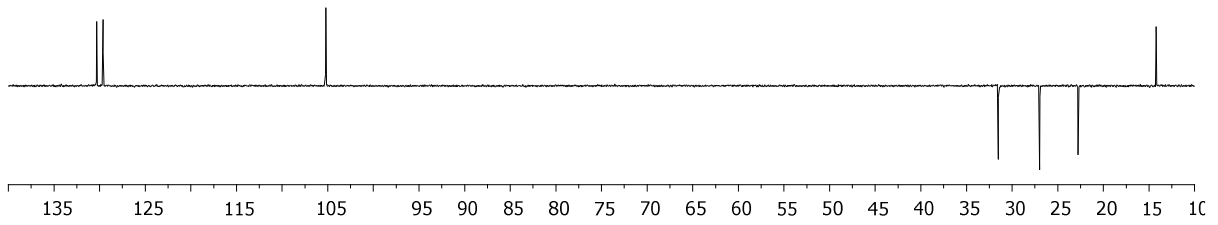
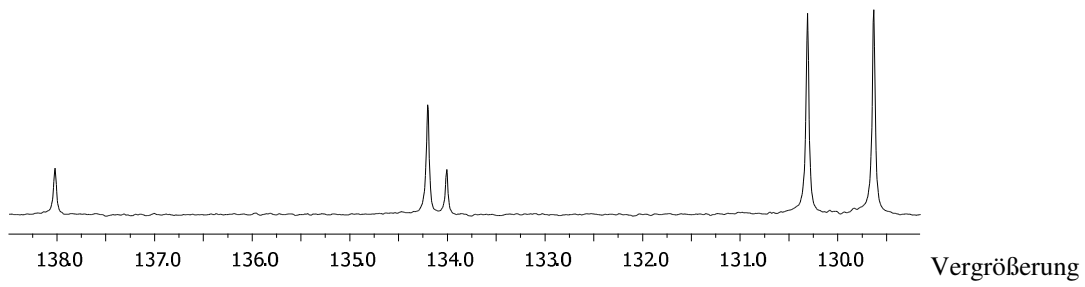
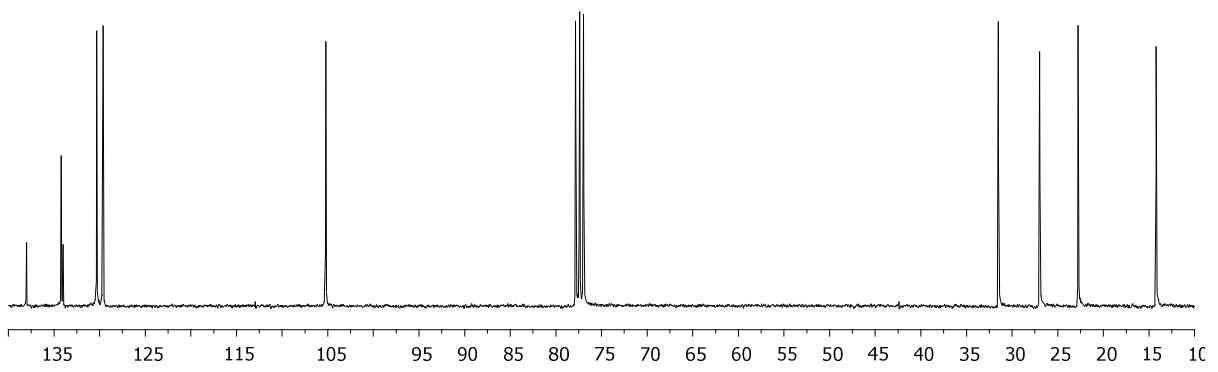
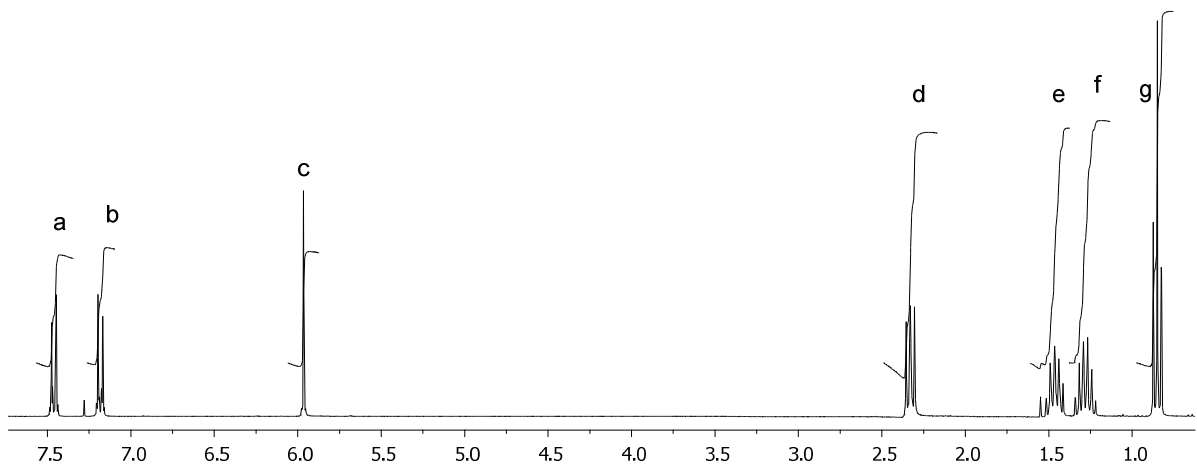
U 12

$C_{18}H_{24}NCl$



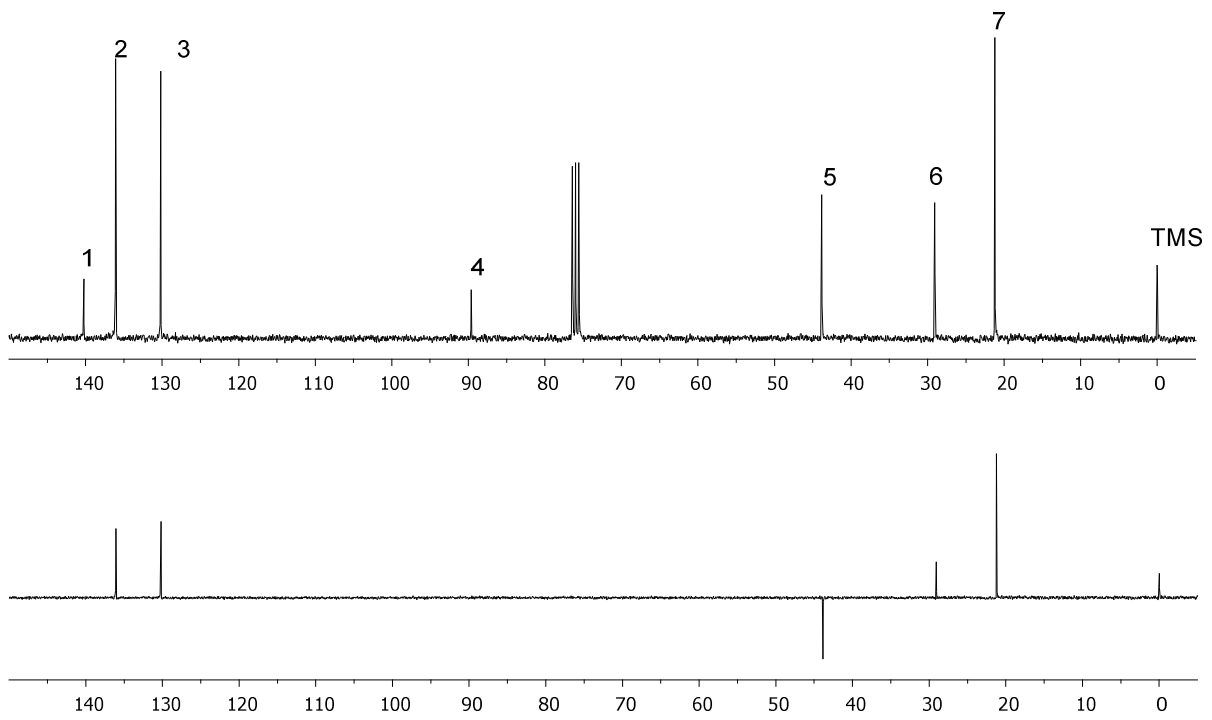
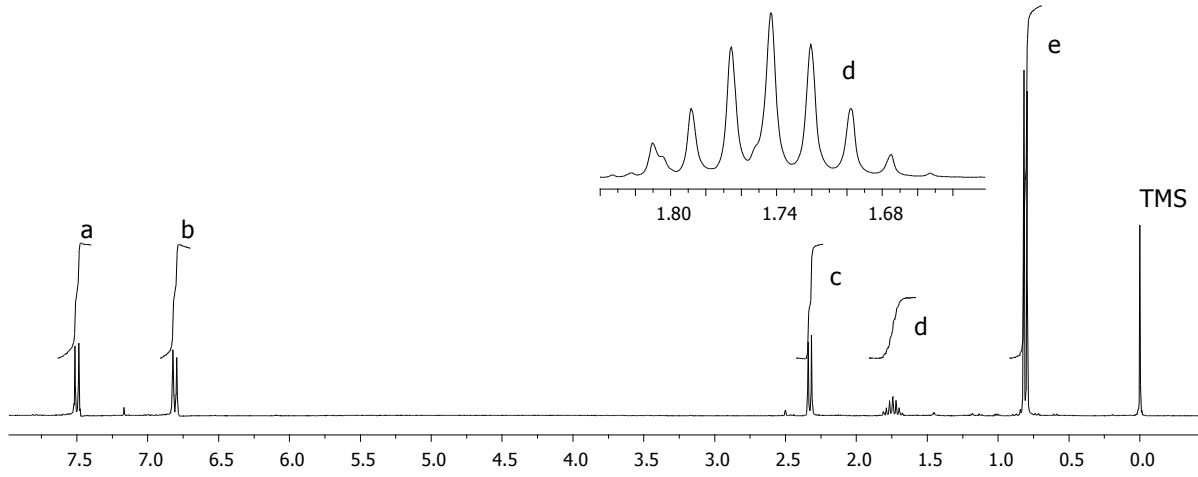
1. Struktur – bestimmen Sie die 3 Reste
2. Zeichnen Sie den Splittingschlüssel für die aliphatischen Protonen. Bezeichnen Sie die Aufspaltungen mit den jeweiligen Kopplungskonstanten. (z. B.  $J_{AB}$ ,  $J_{AC}$  usw. )
3. Auf welchem NMR-Gerät wurden diese Spektren aufgenommen?
4. Wie würde das Spektrum unten auf dieser Seite aussehen, wenn es auf einem 600 MHz-Gerät gemessen worden wäre?





U13:  $C_{10}H_{13}J$

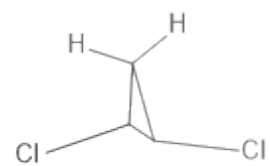
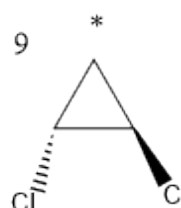
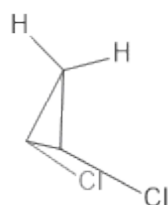
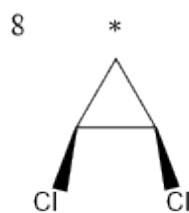
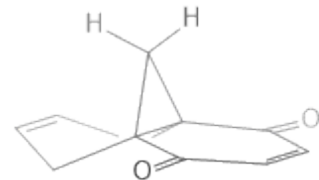
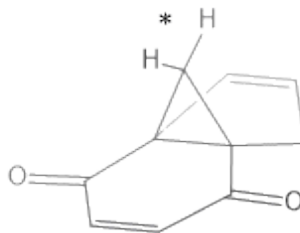
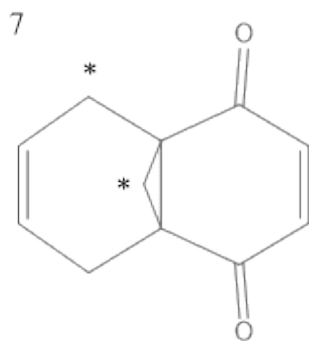
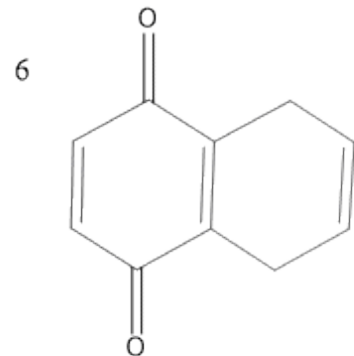
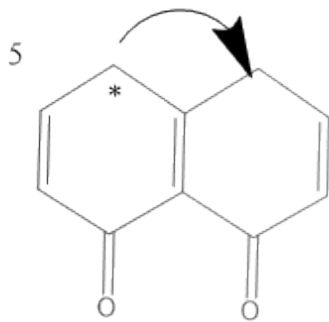
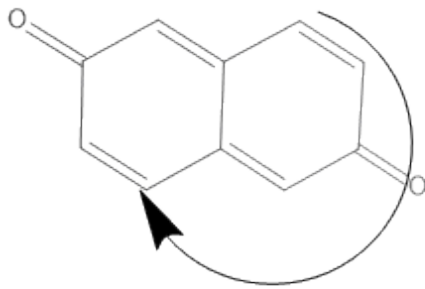
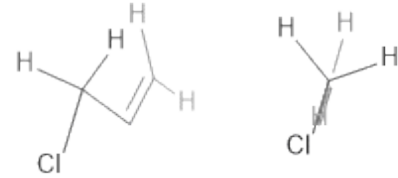
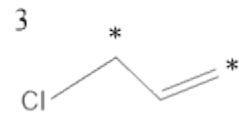
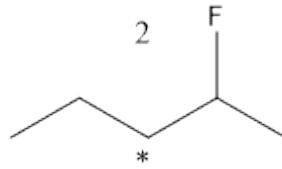
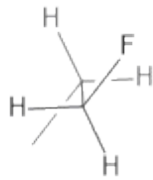
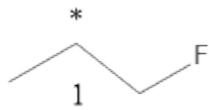
Struktur?

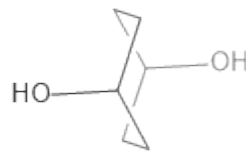
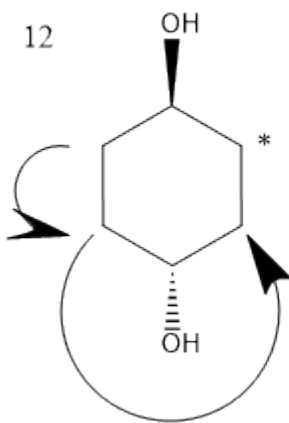
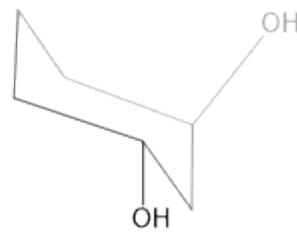
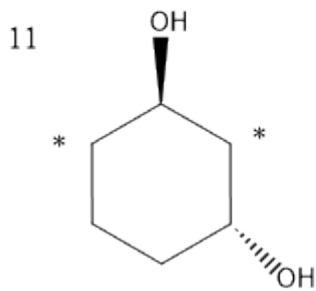
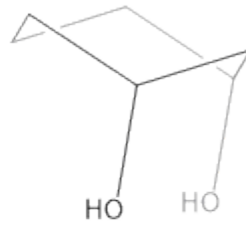
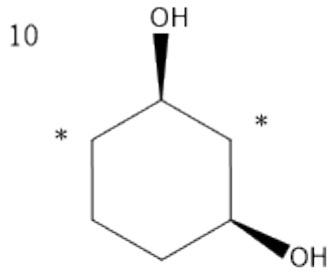


U14

homotop -  
enantiotop -  
diastereotop -

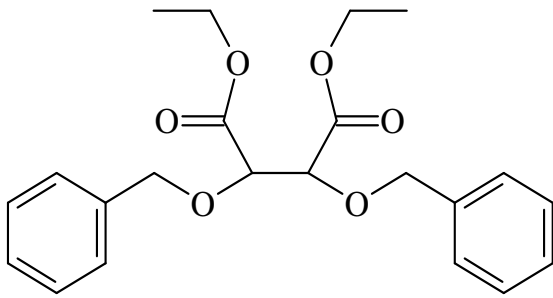
Rotation  
Spiegelebene  
nichts, chirales Zentrum



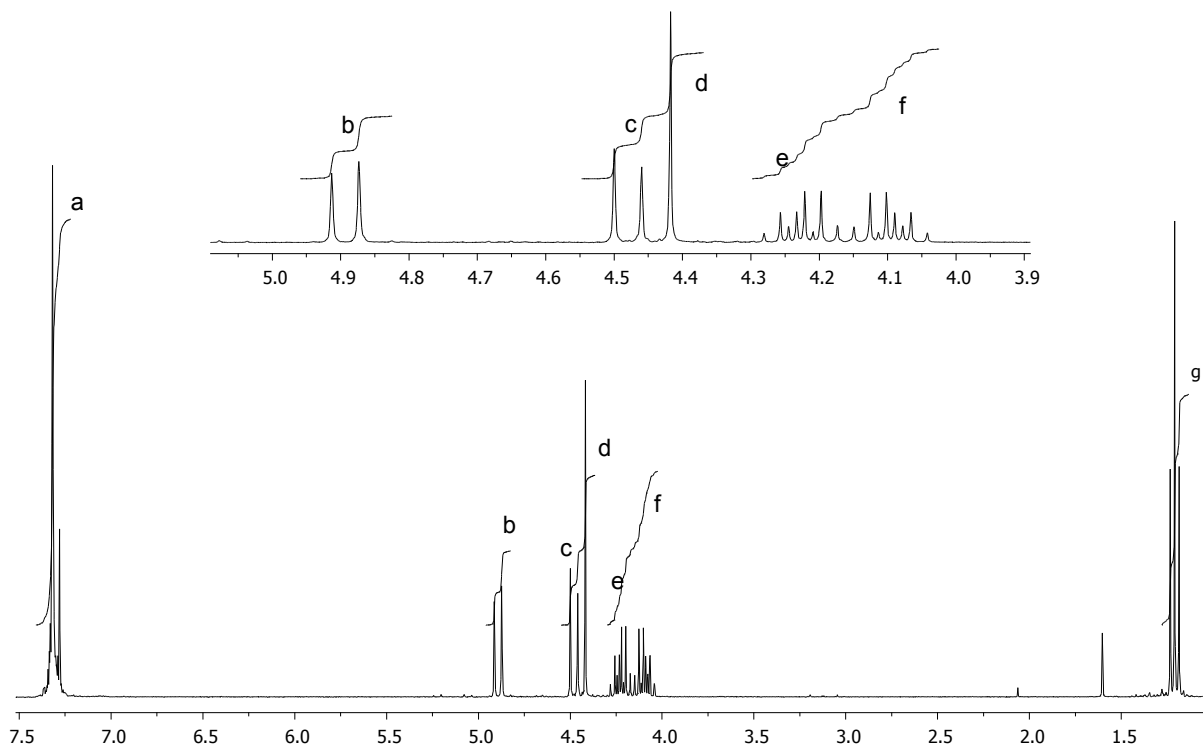


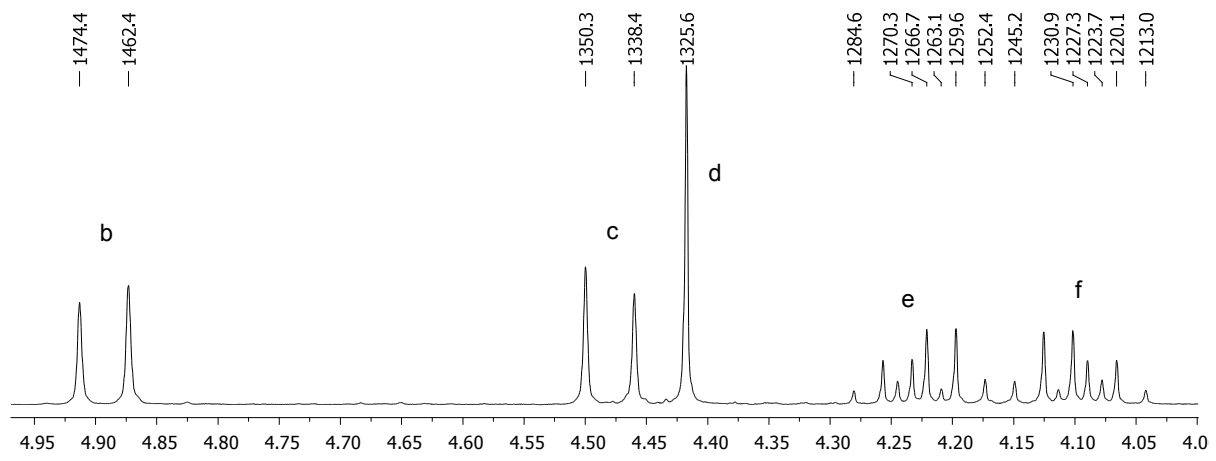
1. Bestimmen Sie, ob die 2 Protonen der markierten Methylen-Gruppen (\*) homotop, enantiotop oder diastereotop sind.
2. Bestimmen Sie, ob die markierten Gruppen (Pfeile) homotop, enantiotop oder diastereotop sind.
3. Wieviele Signale erwarten Sie im  $^1\text{H}$ -Spektrum?
4. Bestimmen Sie das Spinsystem.
5. Geben Sie je ein Beispiele für ein AB, AB<sub>2</sub>, ABC, ABCDE und AA'BB'-System an.

# U 15



1. Ordnen Sie alle Protonen-Signale zu.
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die Protonen zwischen 4 und 5 ppm incl. allen Kopplungskonstanten in Hz (z.B.  $J_{ab} = 8$  Hz) (Seite 2)
3. Erklären Sie die Protonen-Signale zwischen 4.4 und 5 ppm genau. (Warum ist b und c ein Duplett? Warum ist d ein Singulett?)

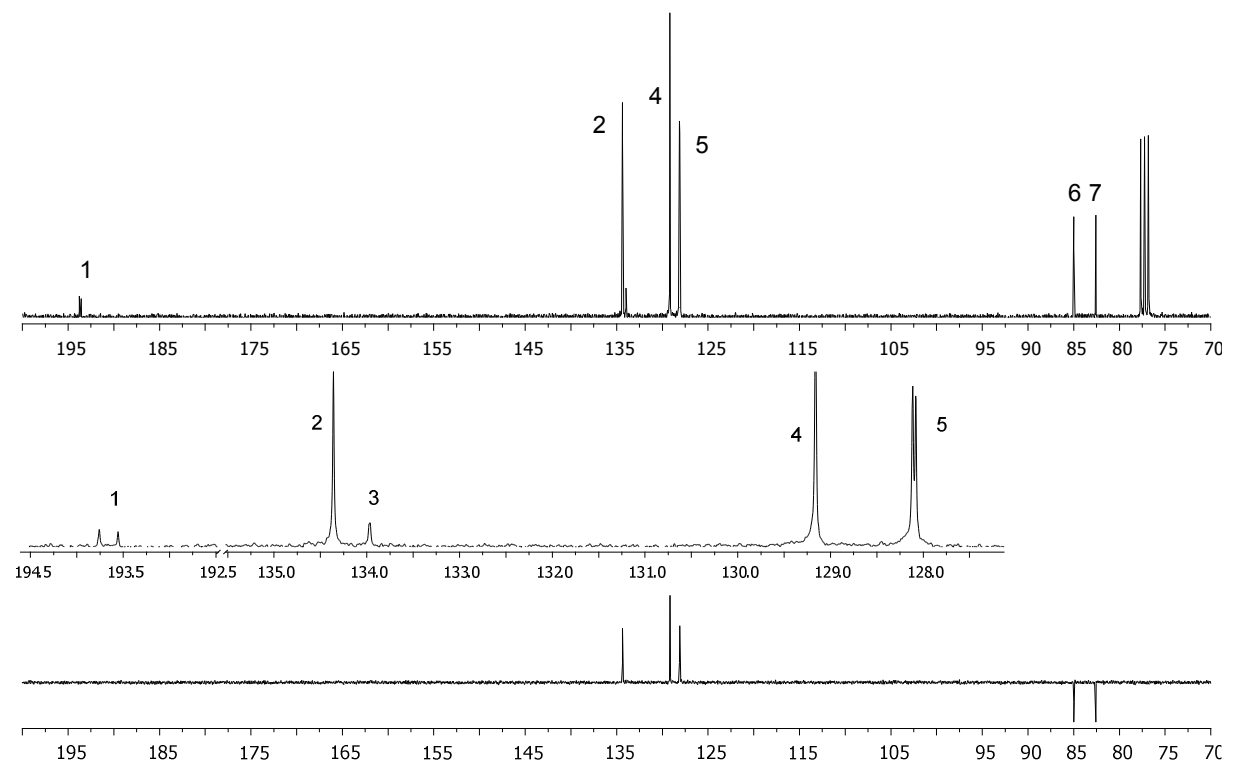
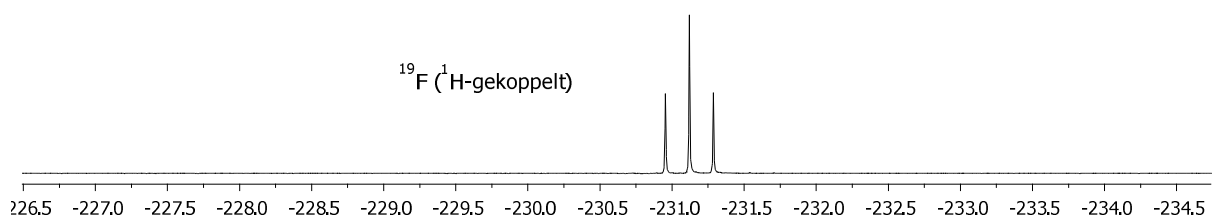
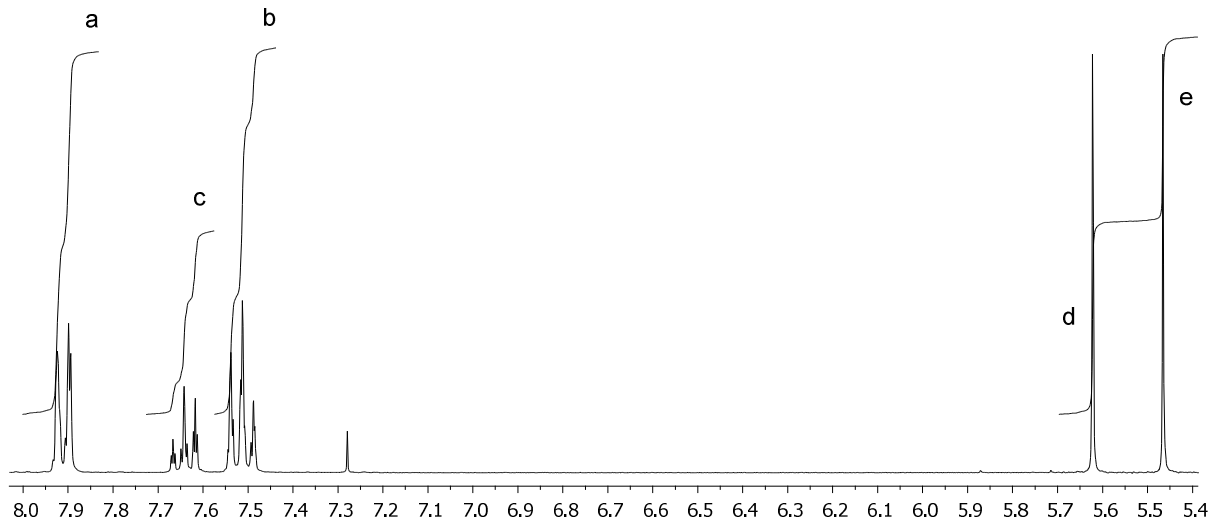




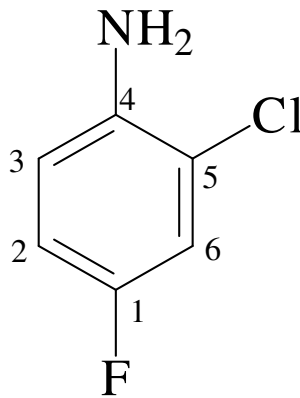
U16

$C_8H_7OF$ .

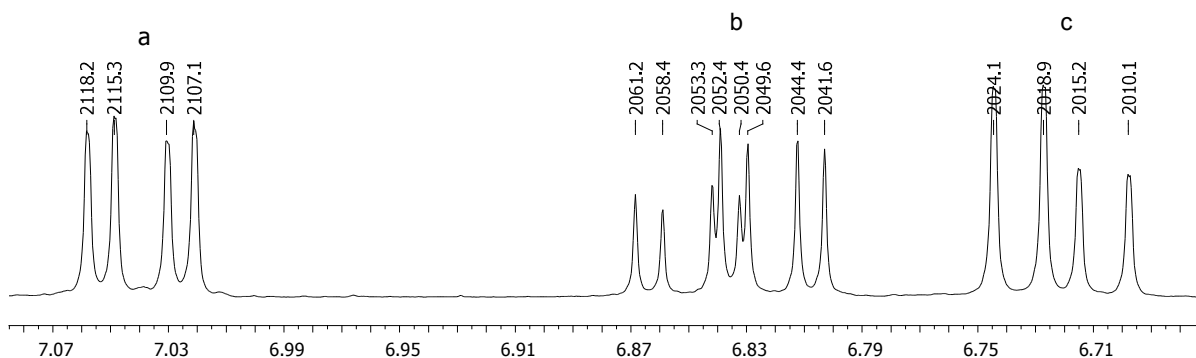
1. Struktur?
2. Erklären Sie die Signale bei ca. 82 und 86 ppm. (2 P)



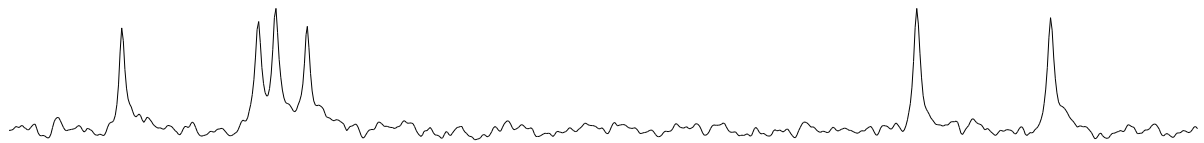
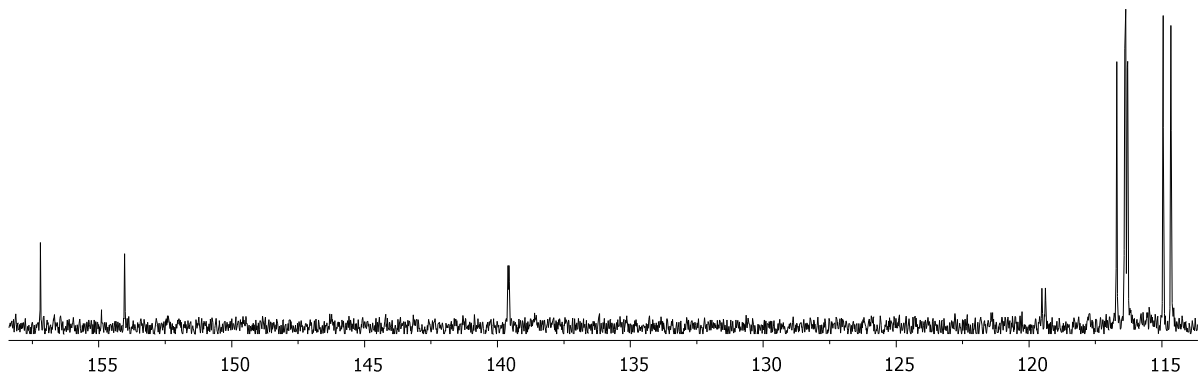
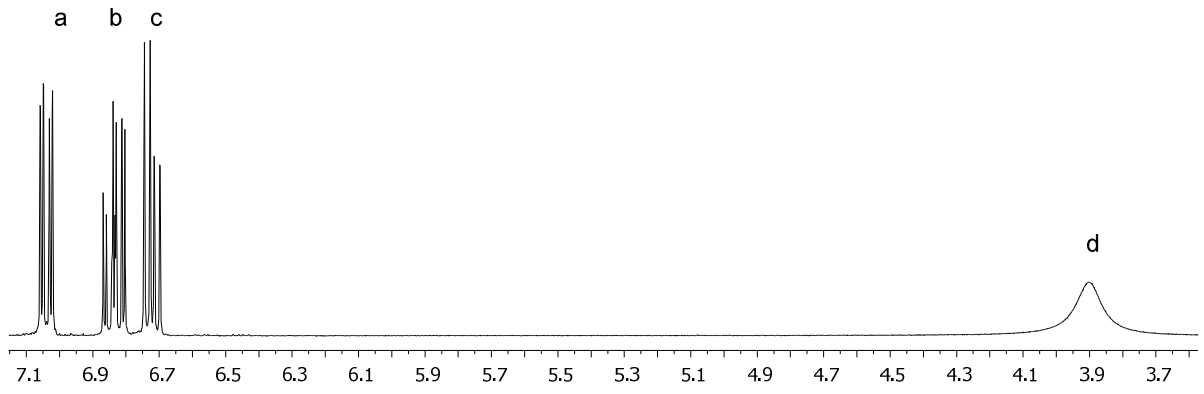
# U17



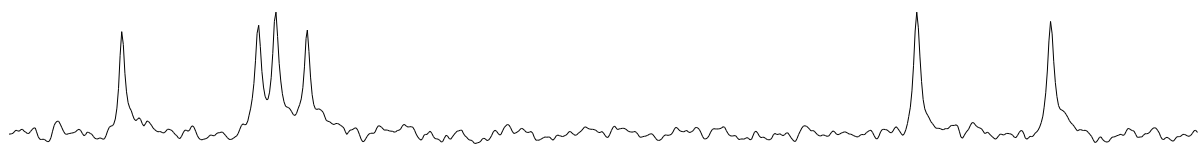
1. Ordnen Sie die Protonen zu. (Für die genaue Zuordnung der  $^{13}\text{C}$ -Signale lernen Sie später das HSQC-Spektrum kennen)
2. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die Protonen (1 Hz = 1mm). Bestimmen Sie alle Kopplungskonstanten.



3. Zeichnen Sie das F-Spektrum (Ohne und mit Protonen-Entkopplung,  $\delta = -130$  ppm)  
 → 2 Spektren zeichnen. Geben Sie auch hier die Kopplungskonstanten an.
4. Zeichnen Sie das Protonen-Spektrum, wenn bei dessen Aufnahme  $^{19}\text{F}$  entkoppelt wäre.
5. Warum sind im  $^{13}\text{C}$ -Spektrum so viele Signale zu sehen, obwohl nur 6 Cs im Molekül sind? Können Sie einige Signale zuordnen?



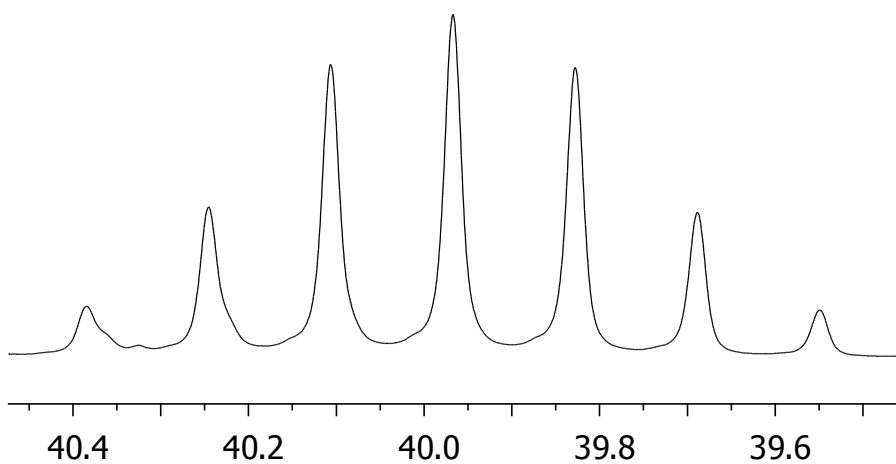
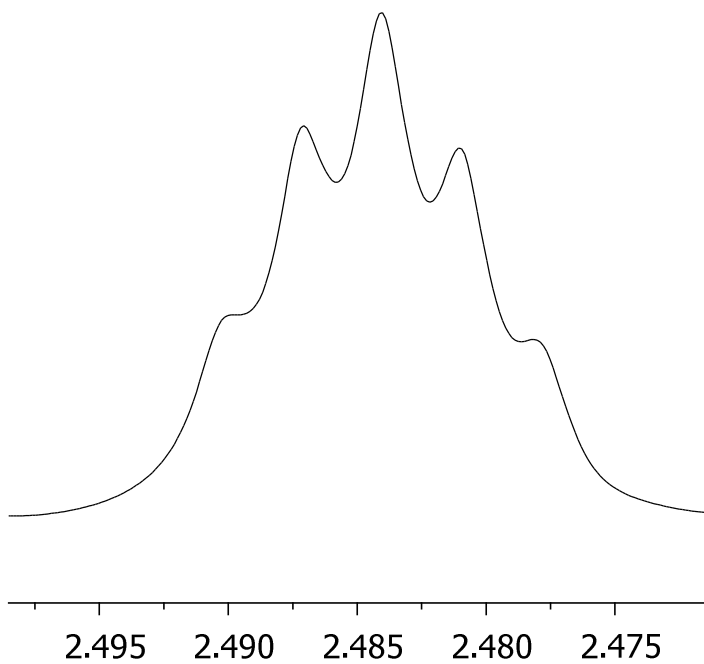
<sup>13</sup>C-Vergrößerung



Dept

## U18

1. Erklären Sie das Kopplungsmuster von d6-DMSO (99 %)
2. Wie würden die Spektren ausschauen, wenn Sie d6-DMSO (100 % deuteriert) hätten?
3. Wie würden die Spektren ausschauen, wenn Sie d5-DMSO hätten? ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  (1H-entk.),  $^{13}\text{C}$  (1H-gek.))



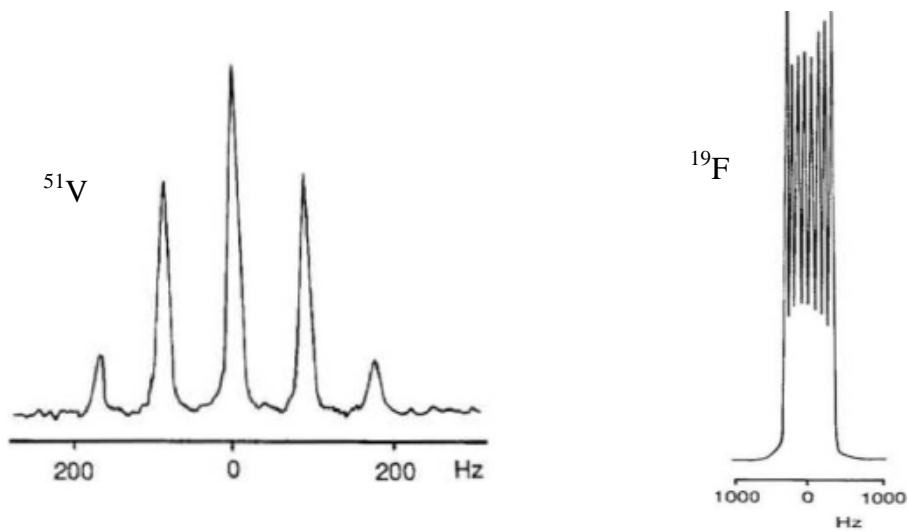
## U19

Erklären Sie die Aufspaltung des  $^{51}\text{V}$ - und des  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektrums des Anions  $\text{VOF}_4^-$ .

$^{51}\text{V}$ :  $I=7/2$ , Nat. Häufigkeit: 99.76 %

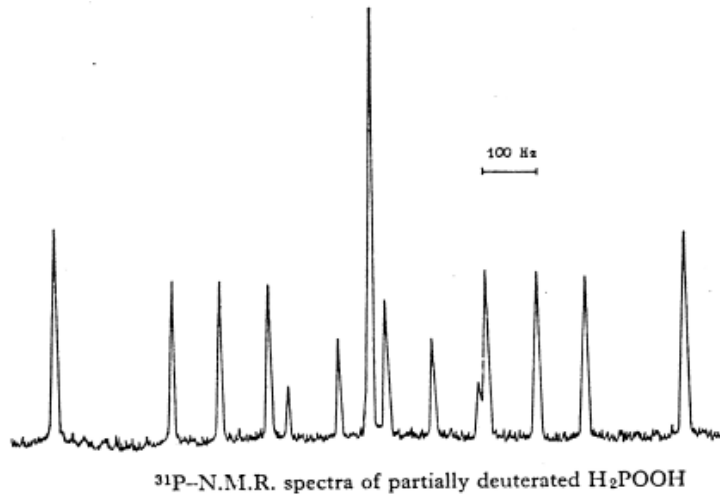
$^{19}\text{F}$ :  $I=1/2$ , Nat. Häufigkeit: 100 %

Was sagen Ihnen diese beiden Spektren über die Struktur des Anions aus?



## U20

Erklären Sie in folgendem  $^{31}\text{P}$ -Spektrum die Aufspaltung von partiell deuterierter hypophosphoriger Säure  $\text{H}_2\text{PO}(\text{OH})$



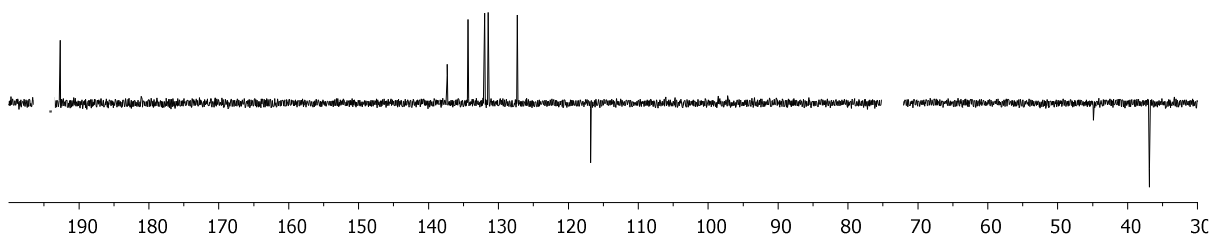
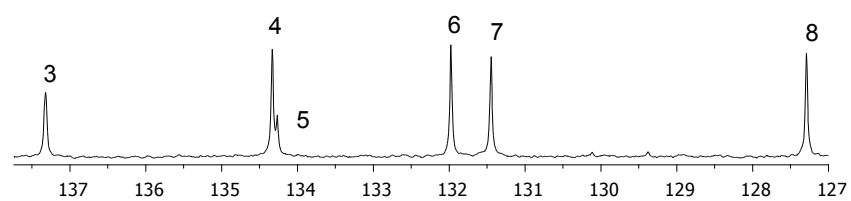
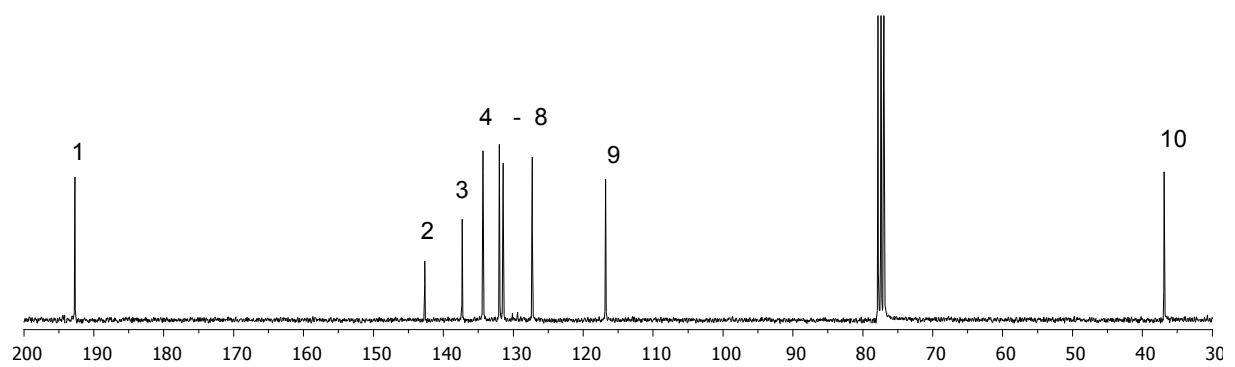
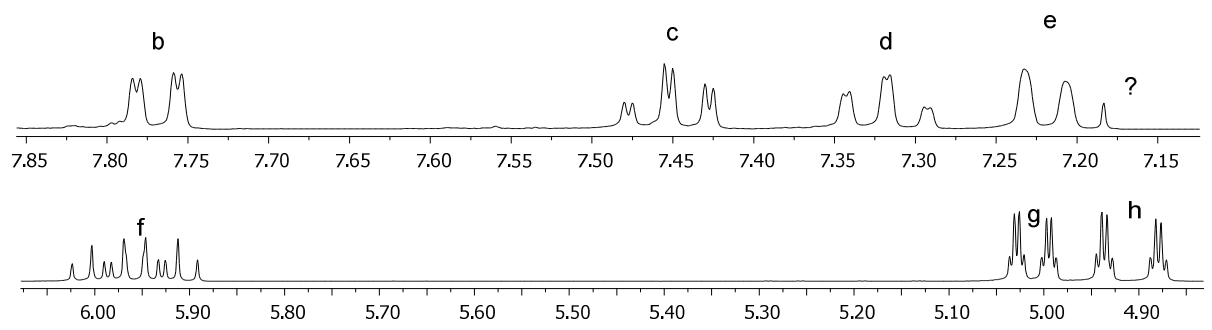
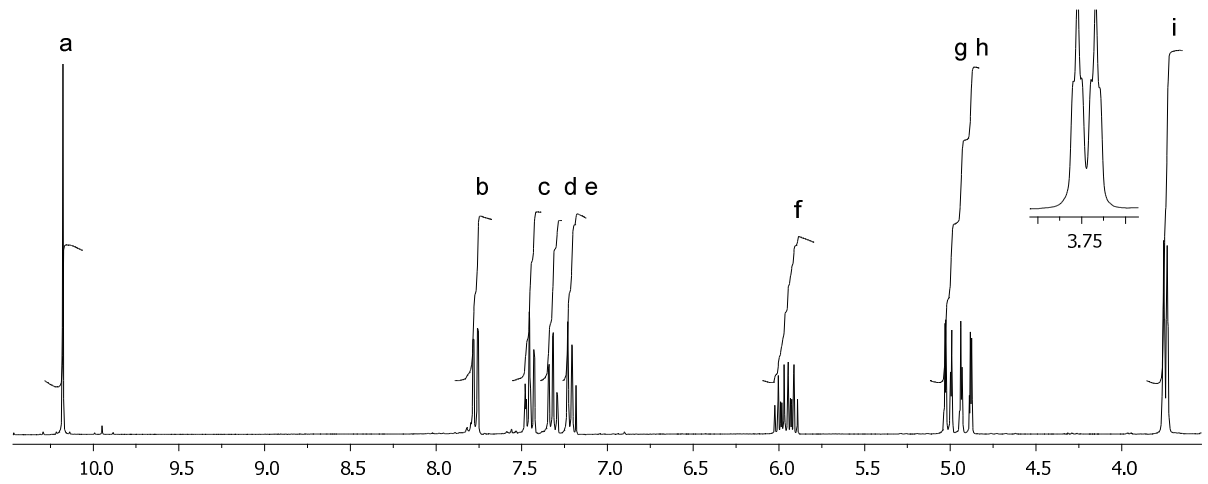
$\text{H}_2\text{PO}(\text{OH})$

$\text{HDPO}(\text{OH})$

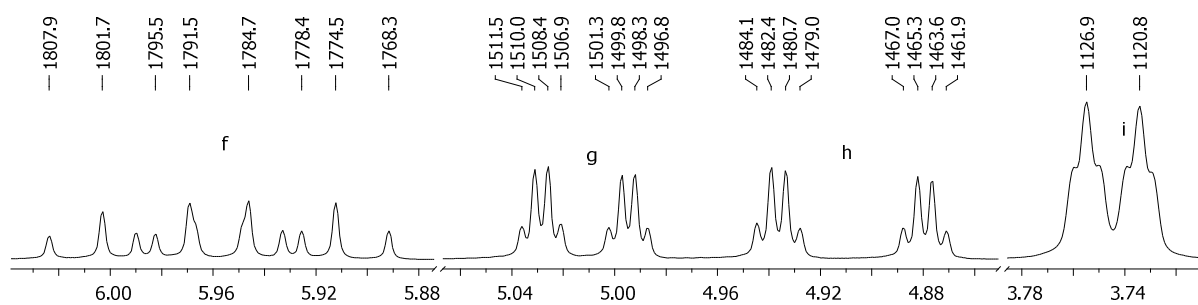
$\text{D}_2\text{PO}(\text{OH})$

# U21 $C_{10}H_{10}O$

- Strukturen ?
- Splittingschlüssel mit Kopplungskonstanten



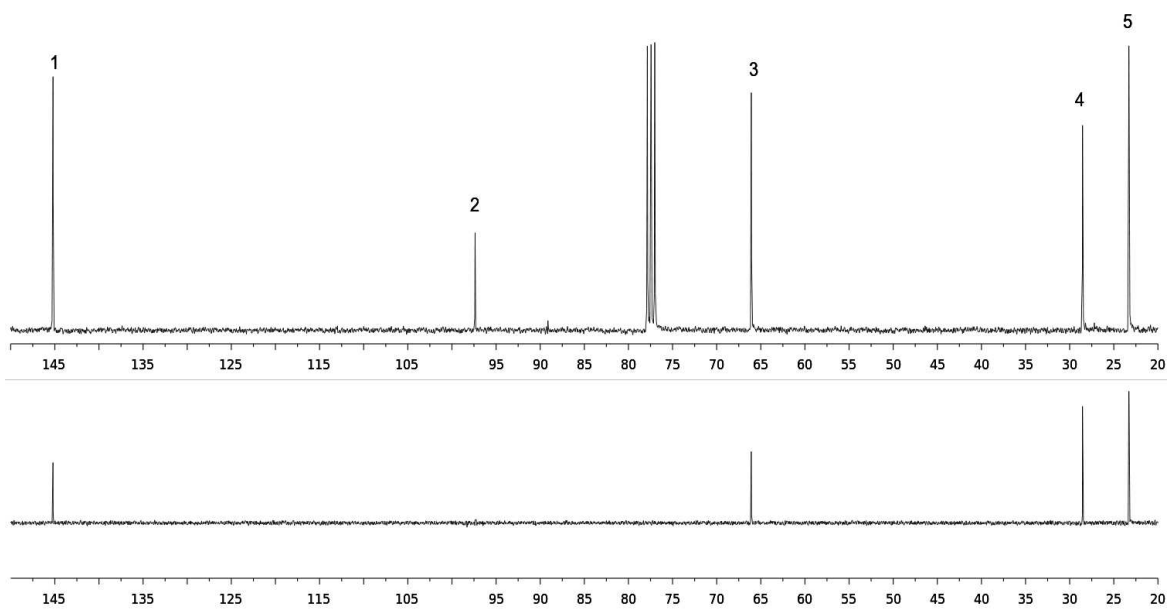
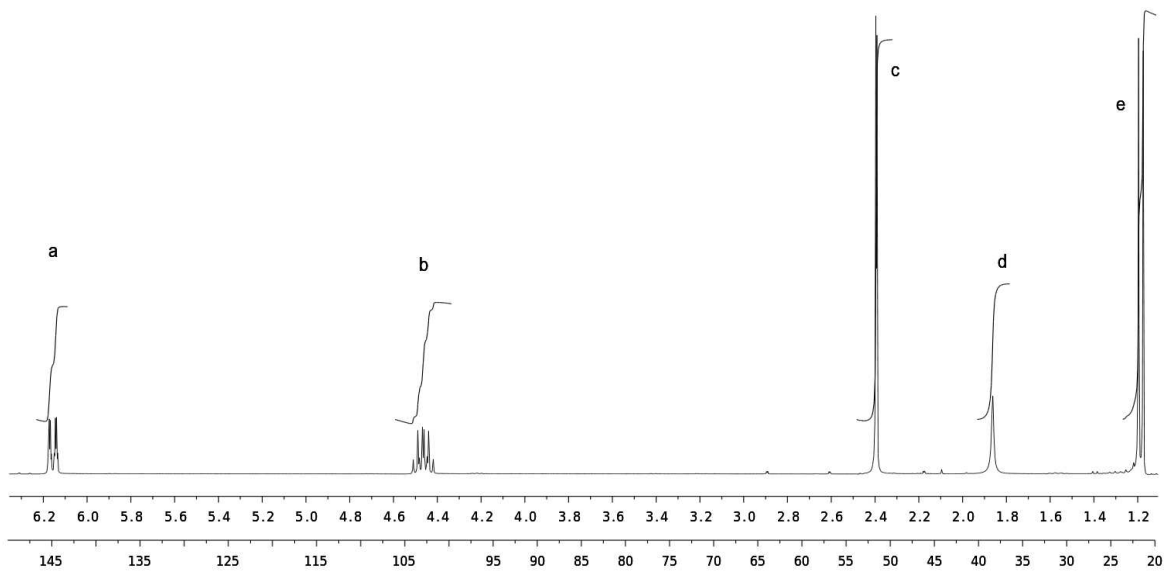
Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel incl. allen Kopplungskonstanten.  
Der Rechner zeigt nicht alle Kopplungskonstanten an. → Selber zufügen!

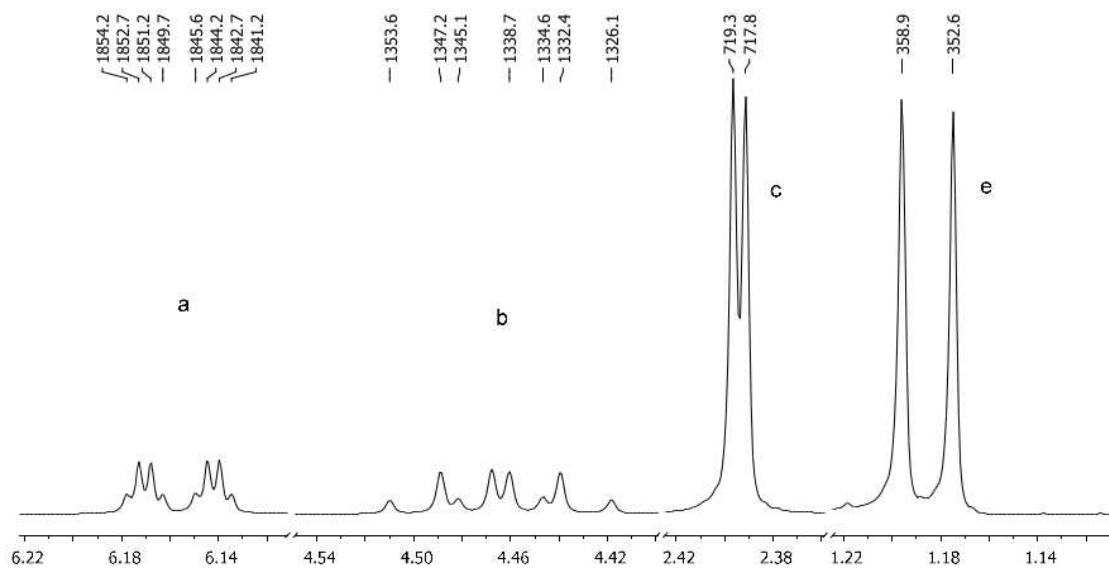


U22

SF: C<sub>5</sub>H<sub>9</sub>OI

1. Struktur ?
2. Erklären Sie das Kopplungsmuster der Signale bei 4.45 ppm und 6.15 ppm.  
Bestimmen Sie die Kopplungskonstanten. (Seite 2)

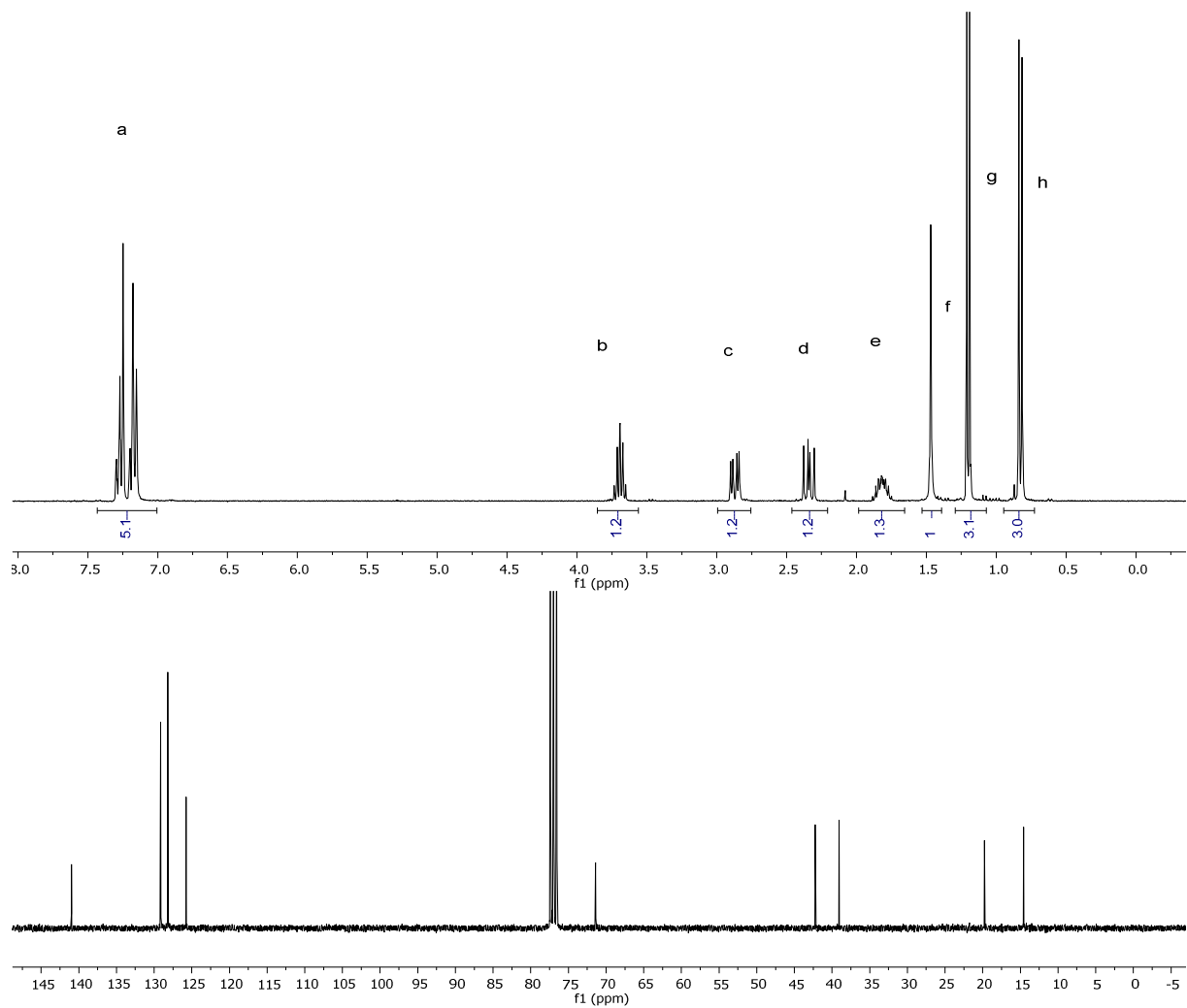


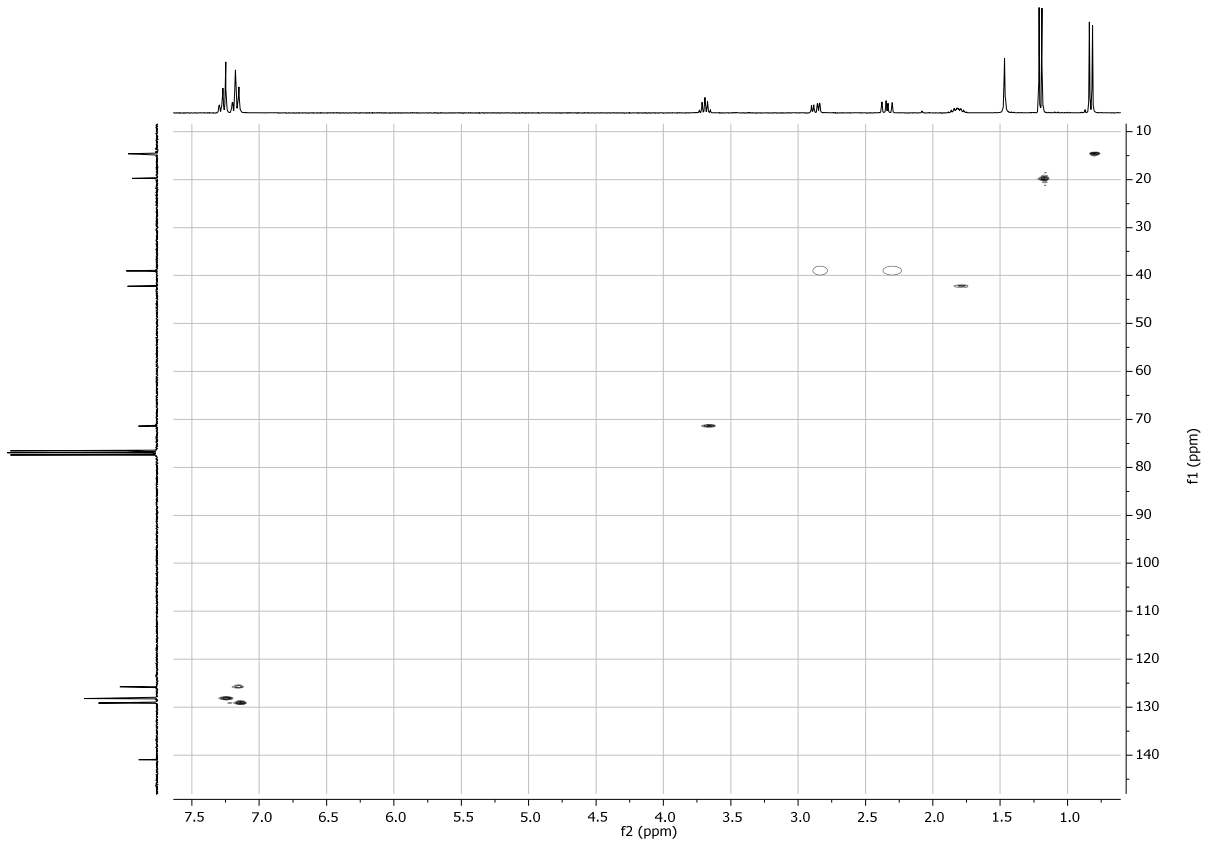
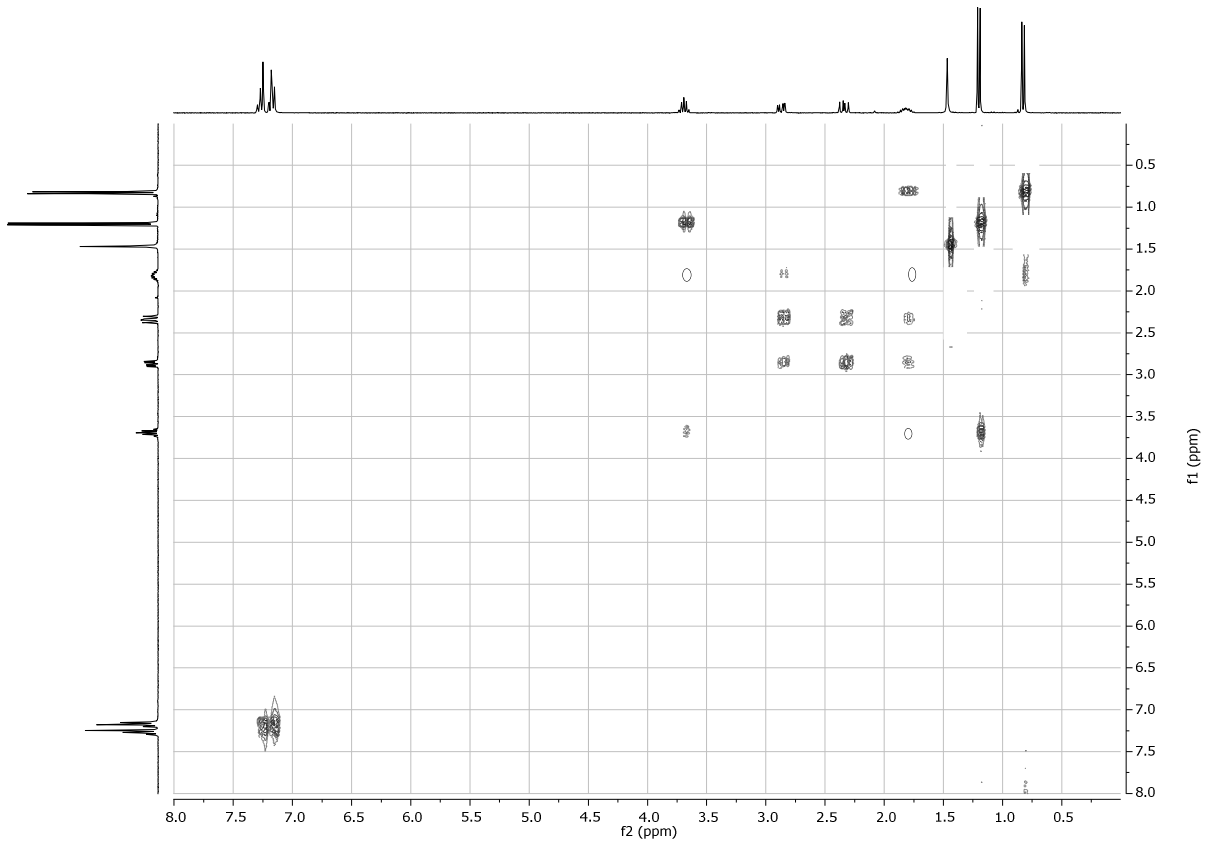


## U23

Auf folgenden Seiten sind die NMR-Spektren einer Verbindung mit folgender Summenformel abgebildet:  $C_{11}H_{16}O$  .

1. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (5 P)
2. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen (1 P)
3. Zeichnen Sie für den Aliphaten-Teil einen Splittingschlüssel. (6 P)

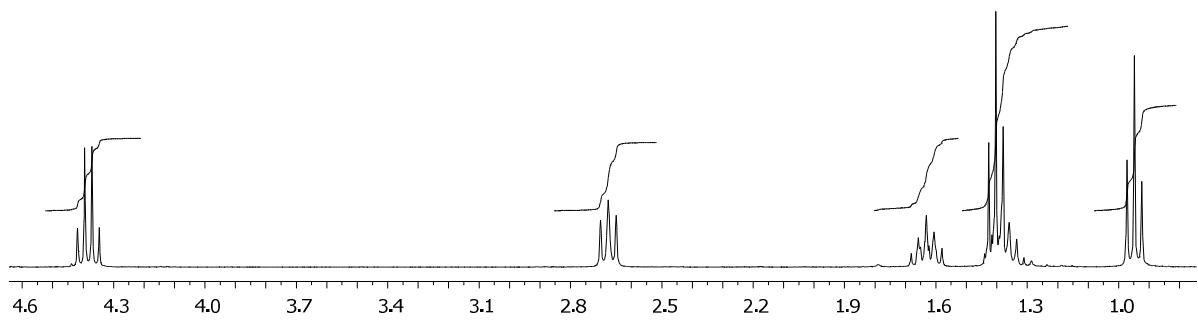
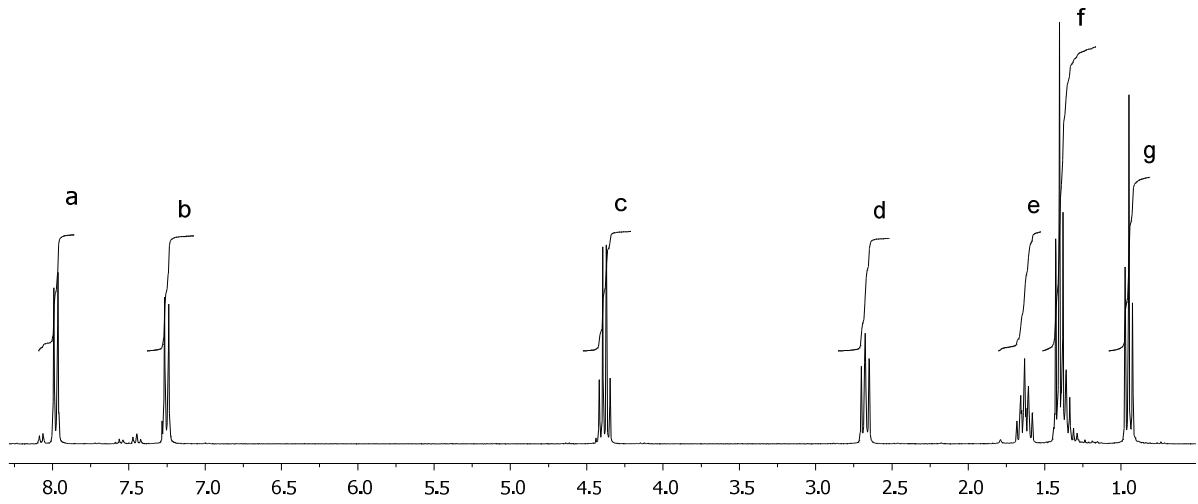




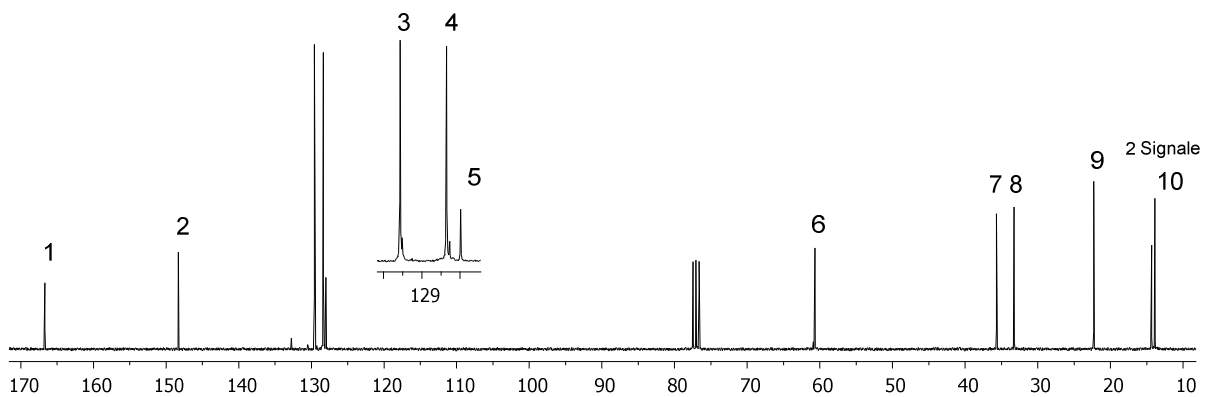
U24

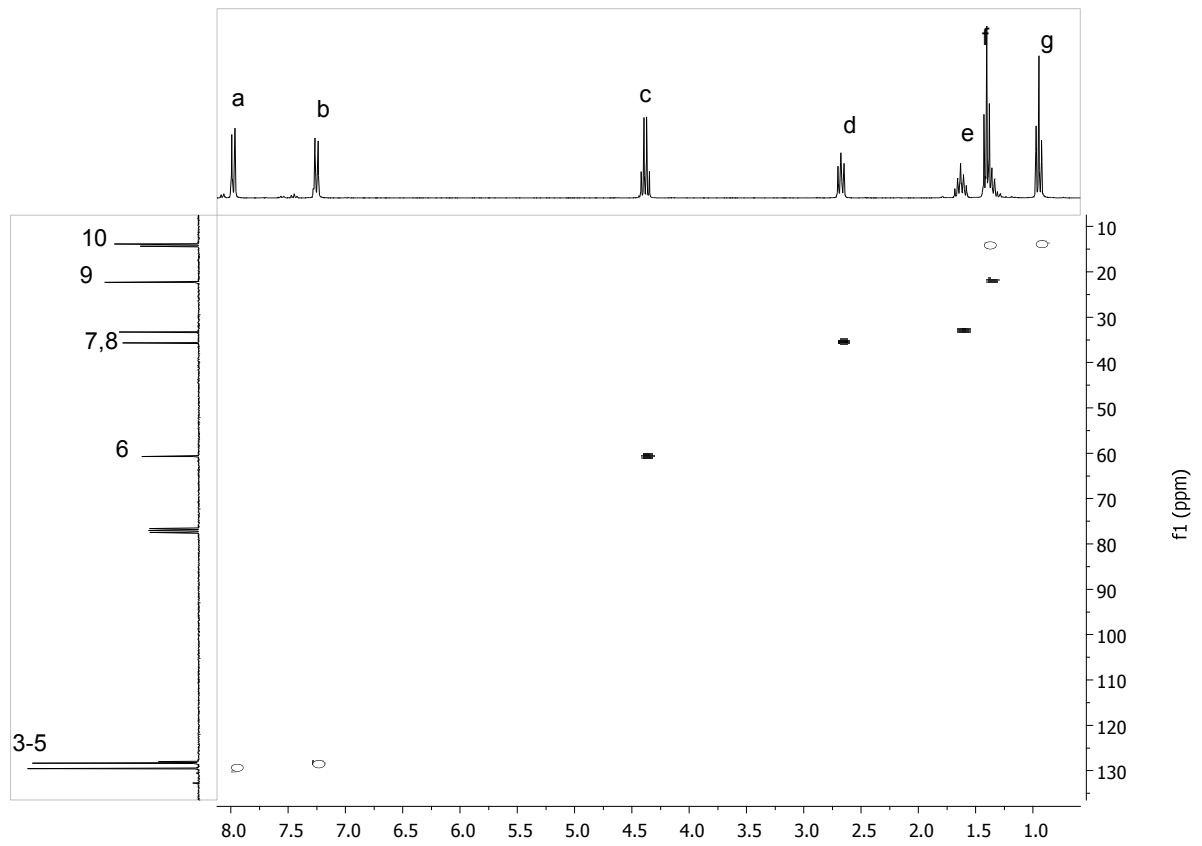
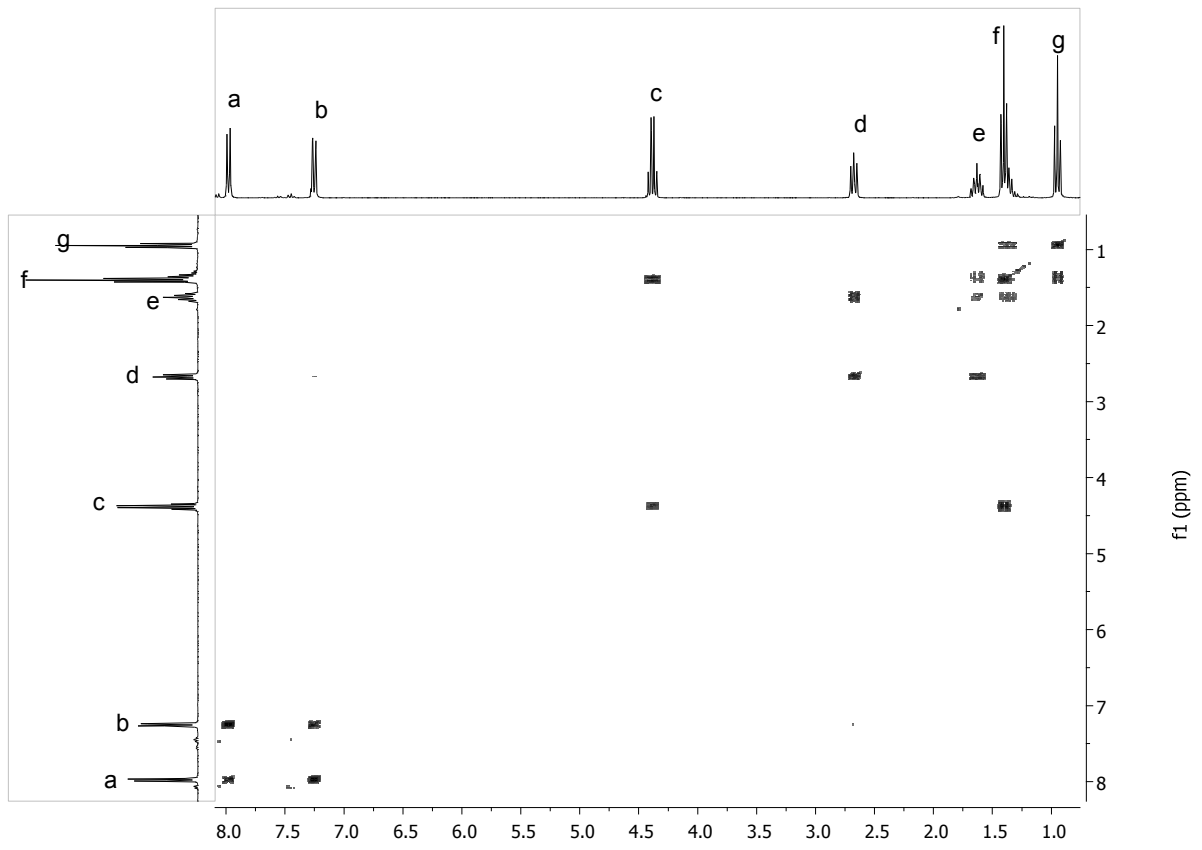
SF:  $C_{13}H_{18}O_2$

1. Bestimmen Sie die Struktur
2. Erklären Sie das Signal f.



Vergrößerung





HSQC: phasensensitiv

○ → CH oder CH<sub>3</sub>  
 ● → CH<sub>2</sub>

U25

$C_9H_{13}NO$

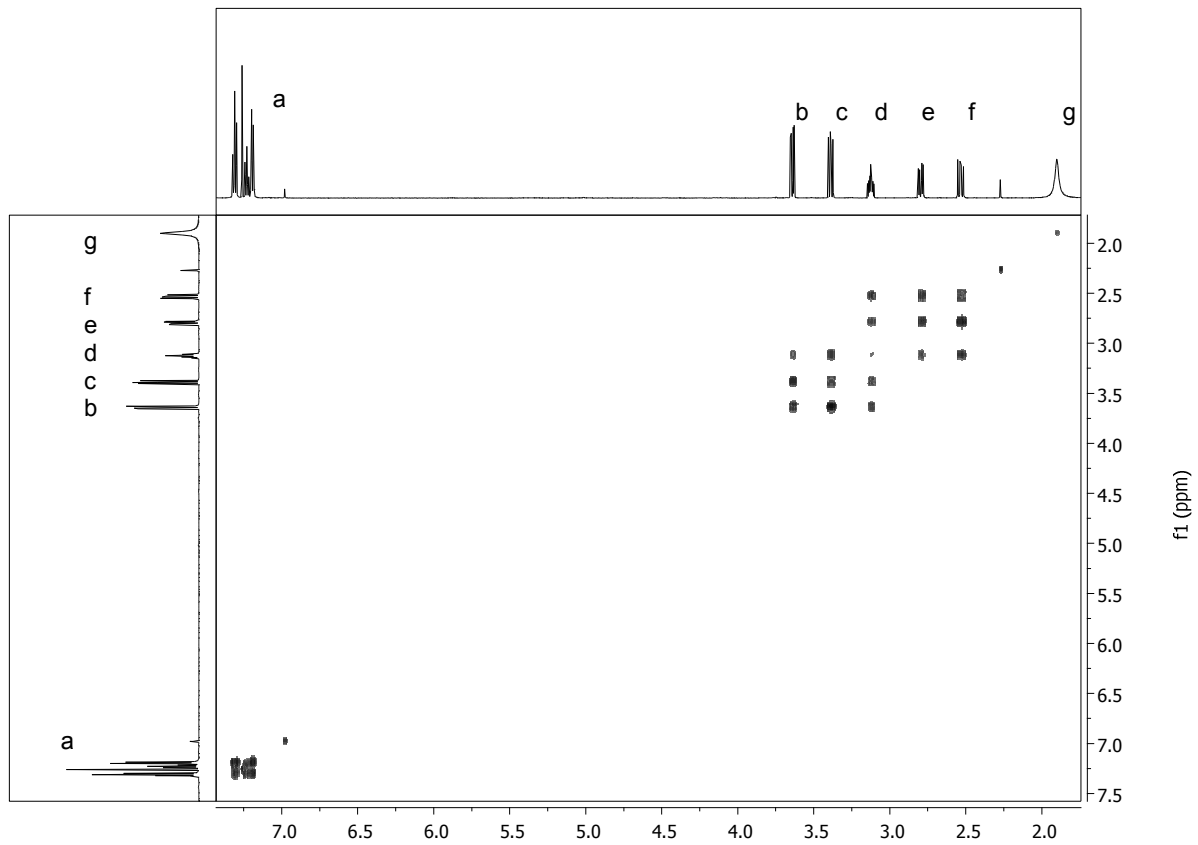
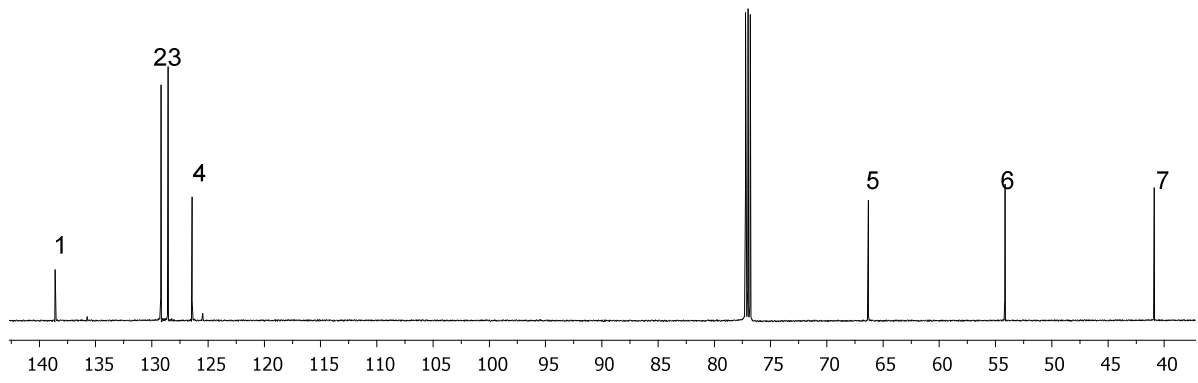
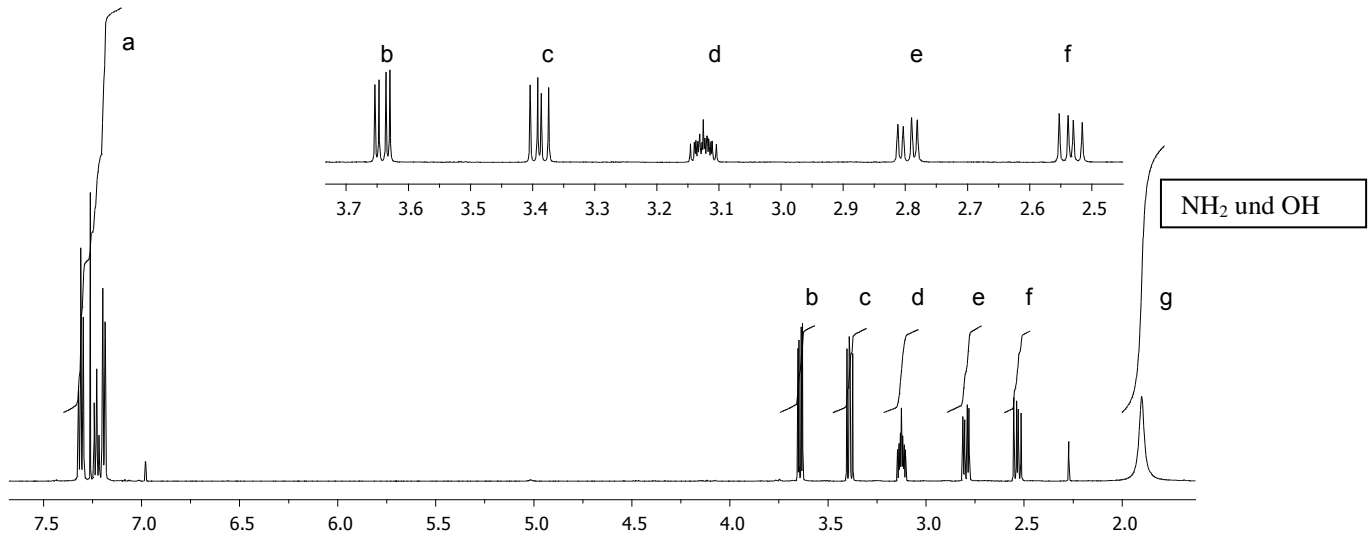
Hinweis: O ist elektronegativer als N !!

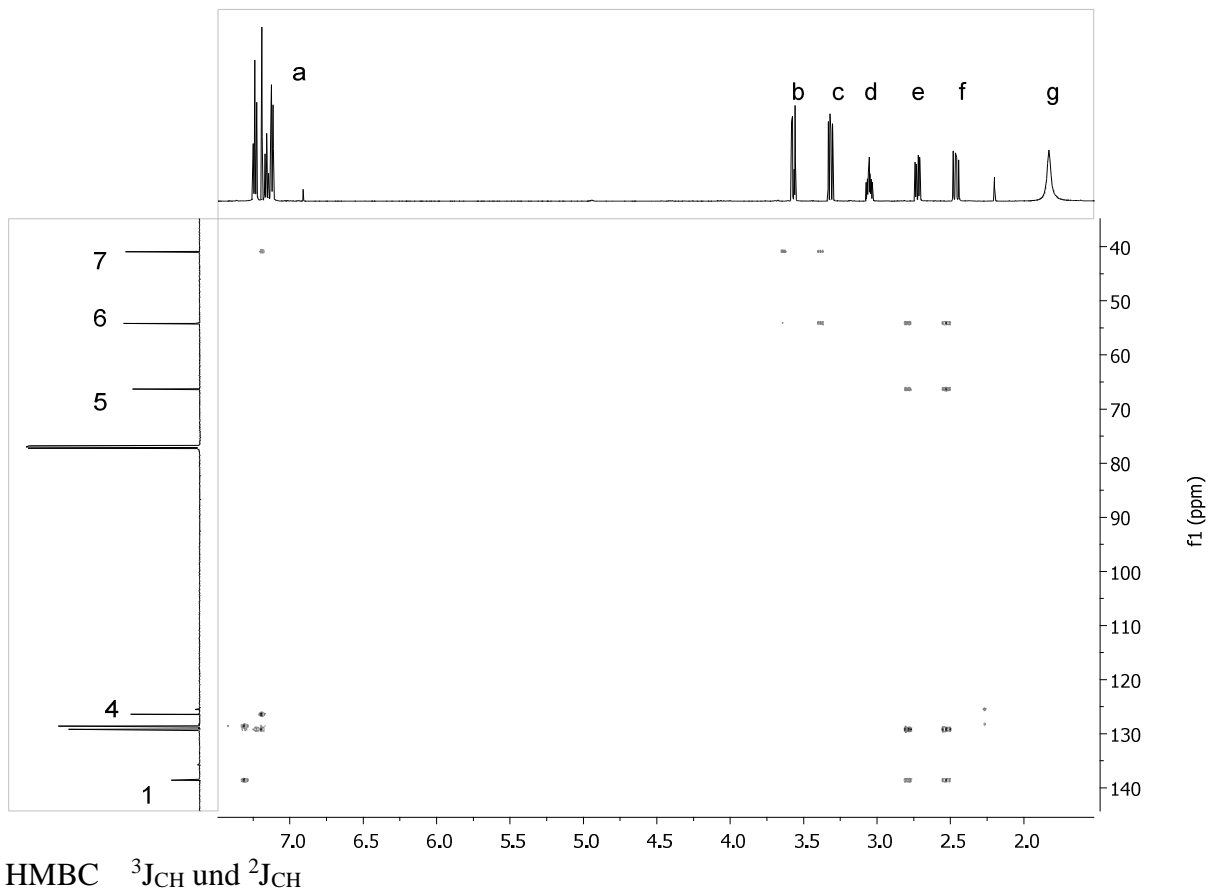
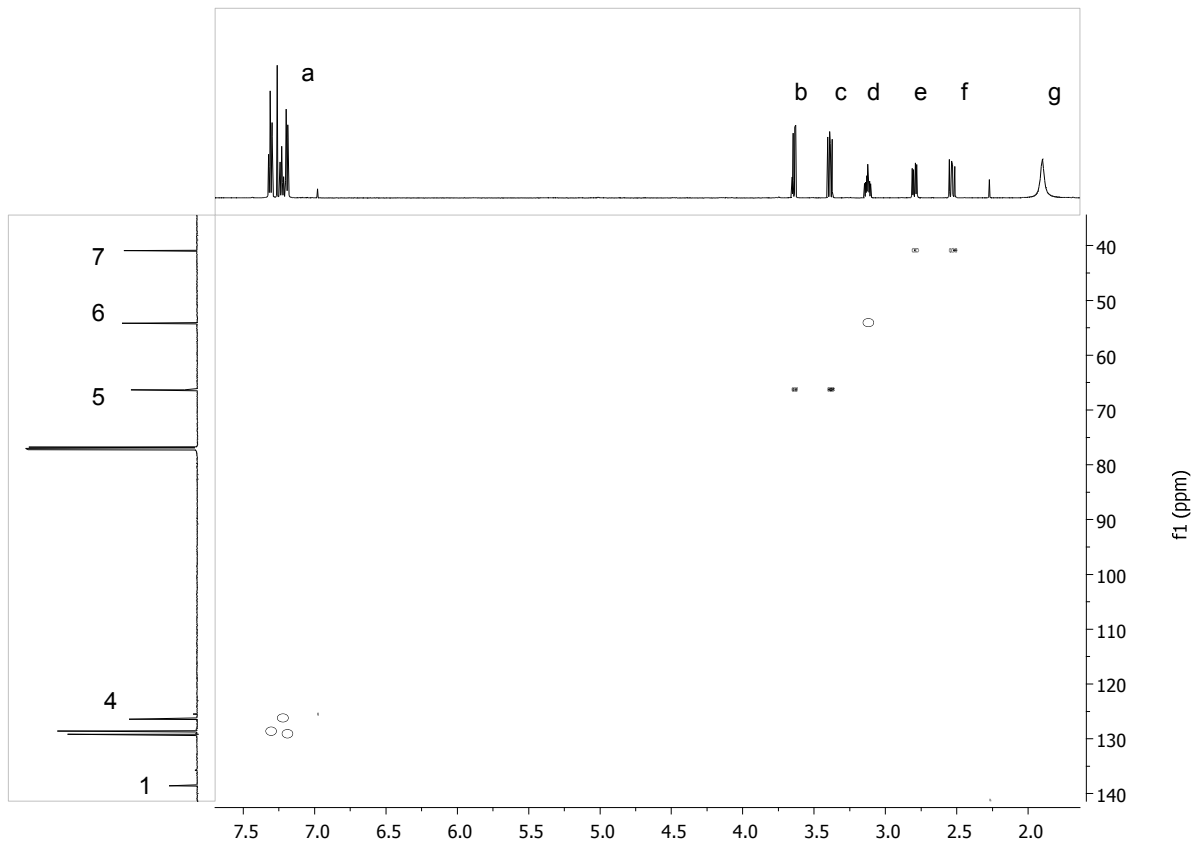
1. Bestimmen Sie die Struktur

1. Bestimmen Sie das Spinsystem der Protonen.

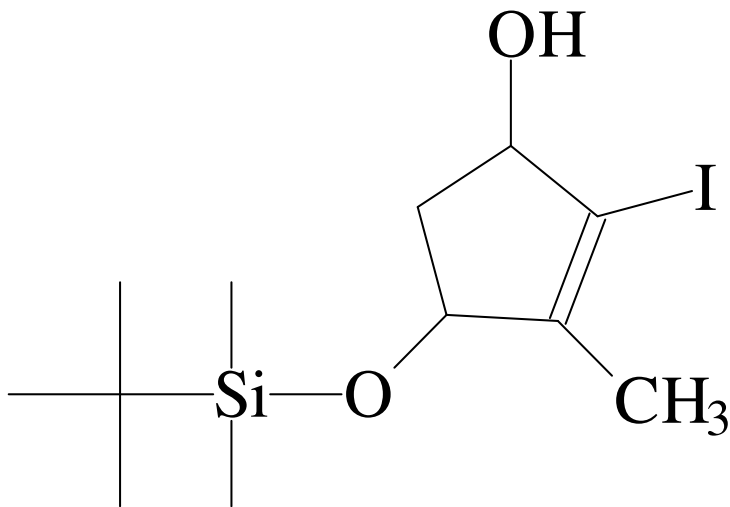
2. Im HSQC sehen Sie, dass an einem C-Atom 2 verschiedene H-Atome sitzen können.

- a) Welche Eigenschaft haben diese Protonen? Kurze Erklärung.
- b) Wie nennt man diese Protonen auf Grund dieser Eigenschaft?
- c) Welche Auswirkung hat diese Eigenschaft auf das Spinsystem?

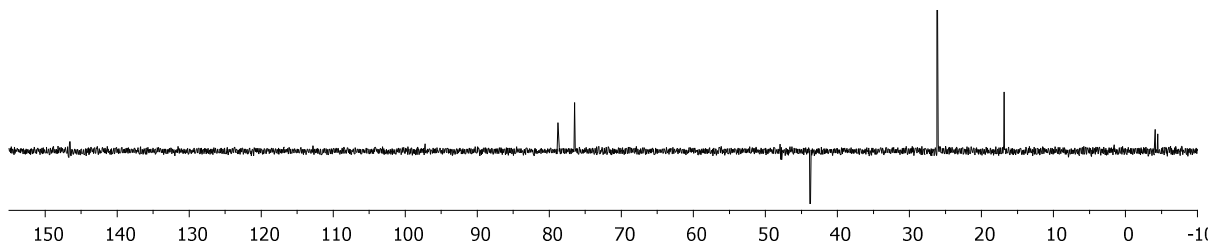
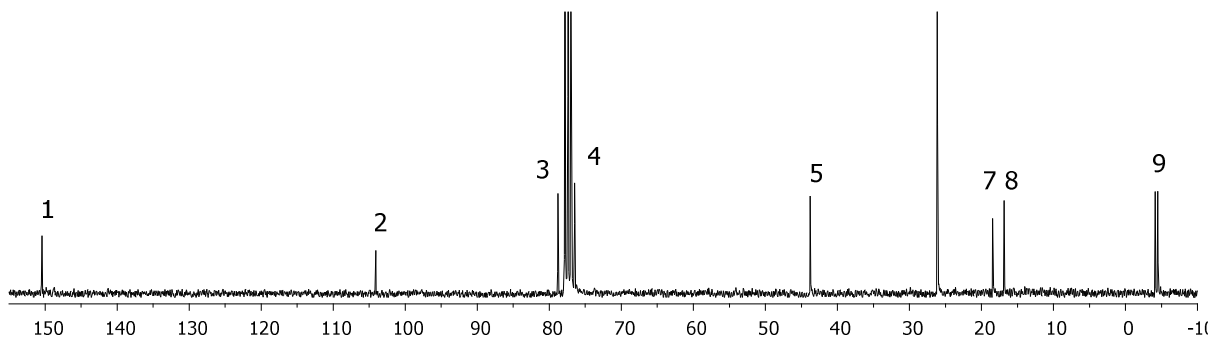
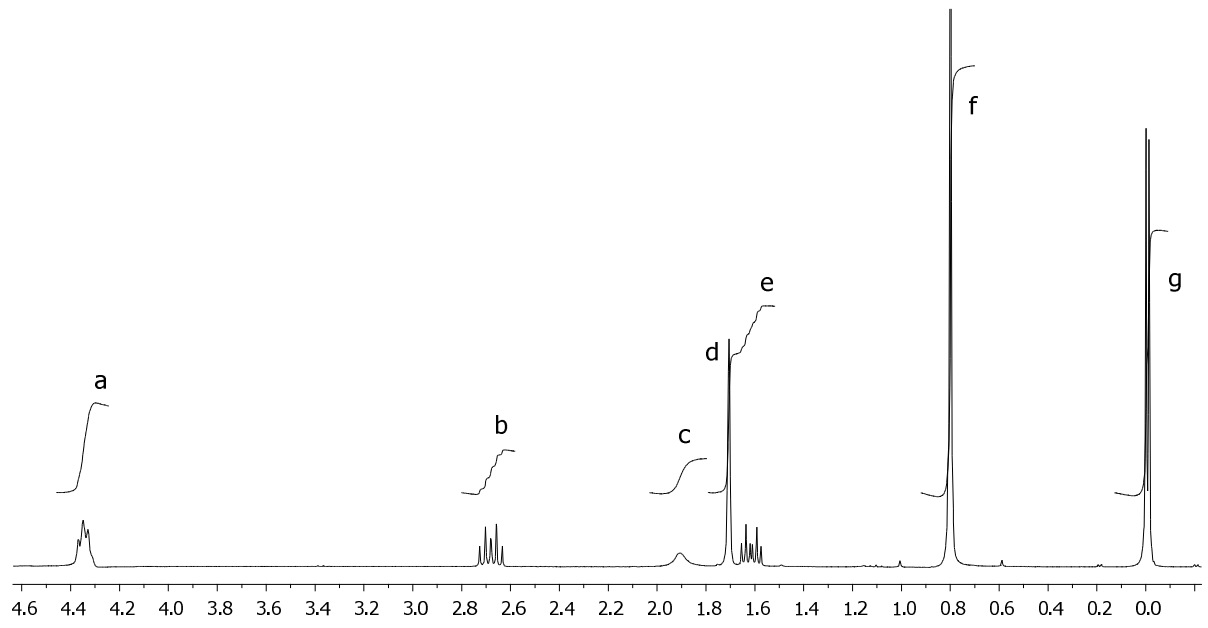


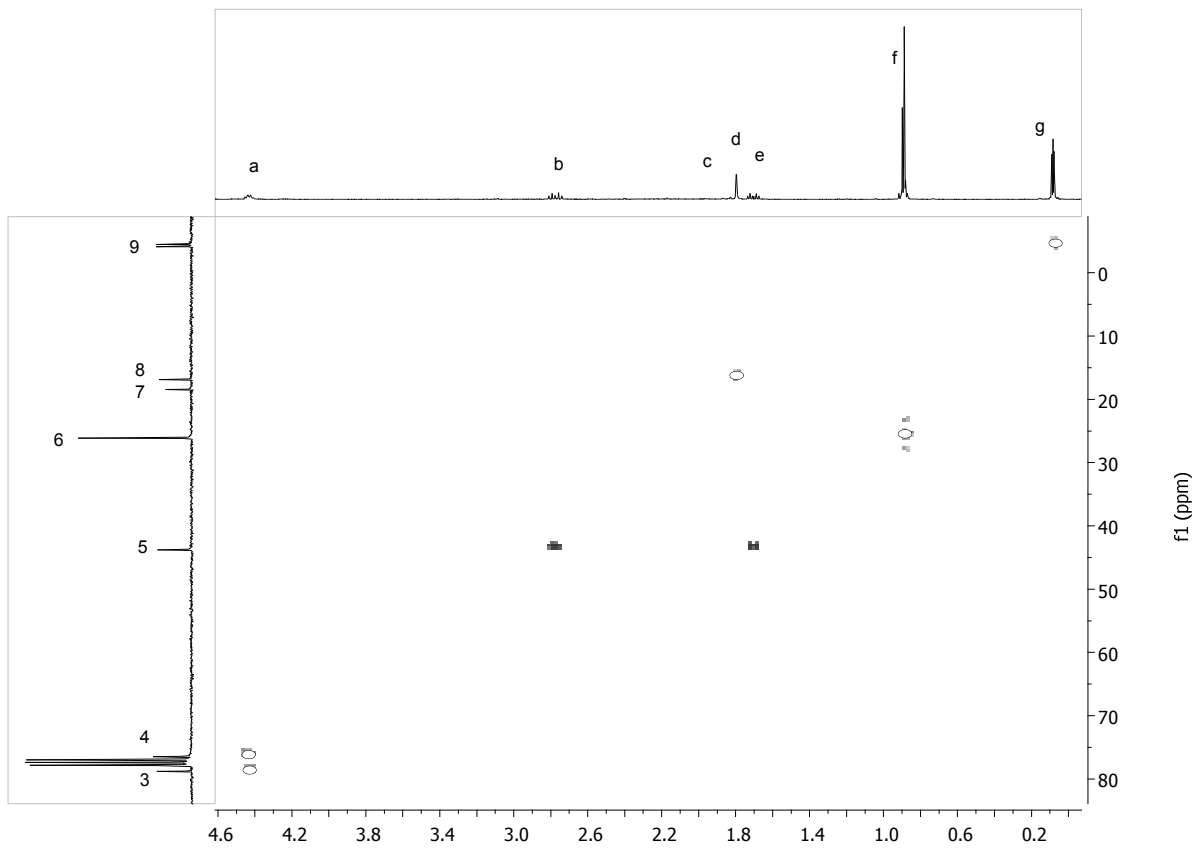
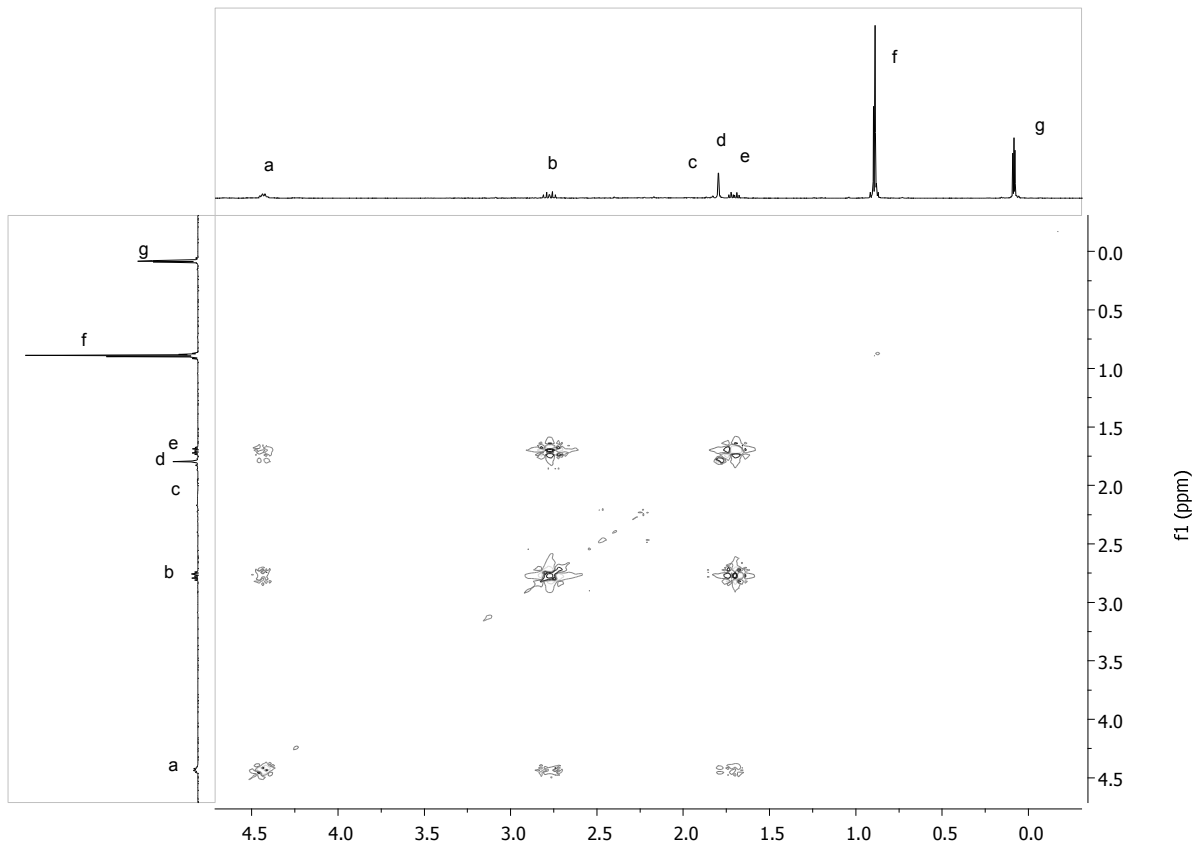


U26

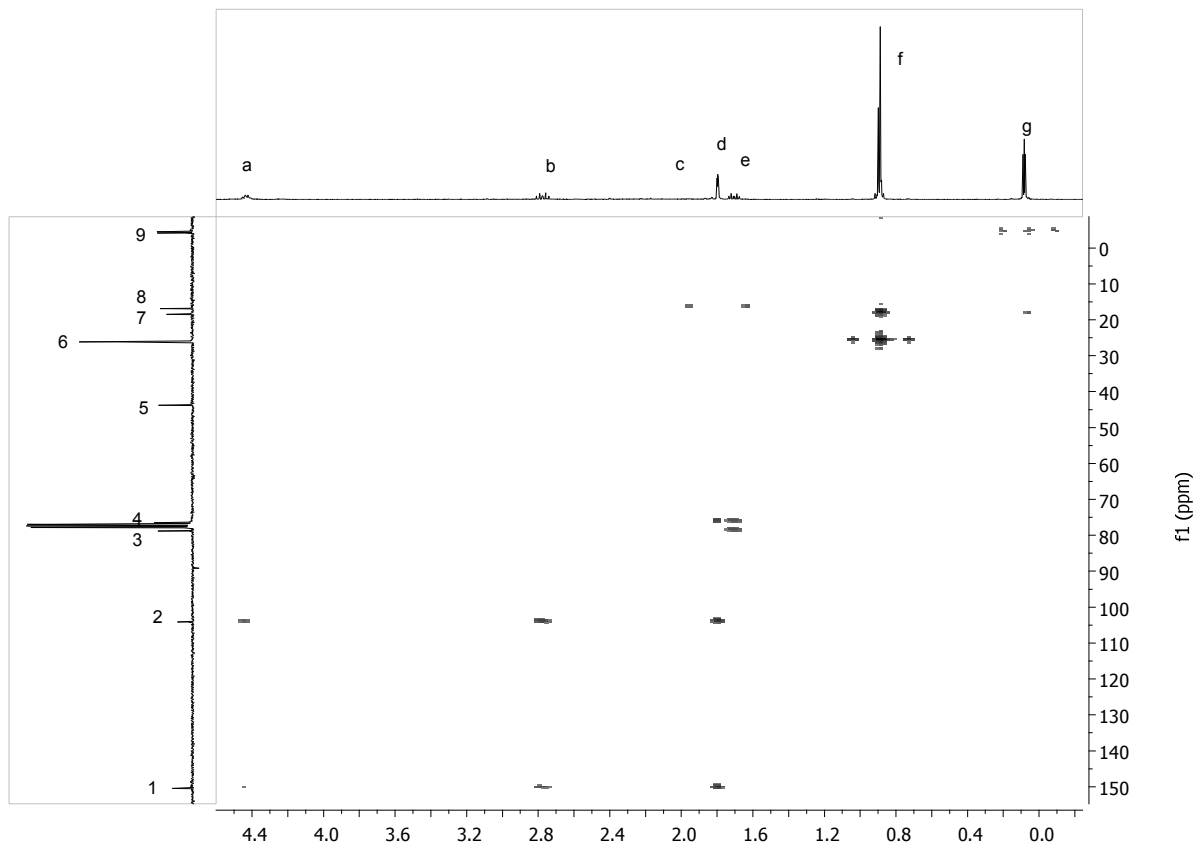


1. Ordnen Sie alle Signale soweit möglich zu.
2. Warum ist das <sup>13</sup>C-Signal bei ca. -5 ppm ein Dublett? (Zwei Signale)
3. Zeichnen Sie einen Splittingschlüssel für die 4 Protonen am Ring (nicht für OH)
4. Geben Sie das Spinsystem an. Beachten Sie Punkt 2!

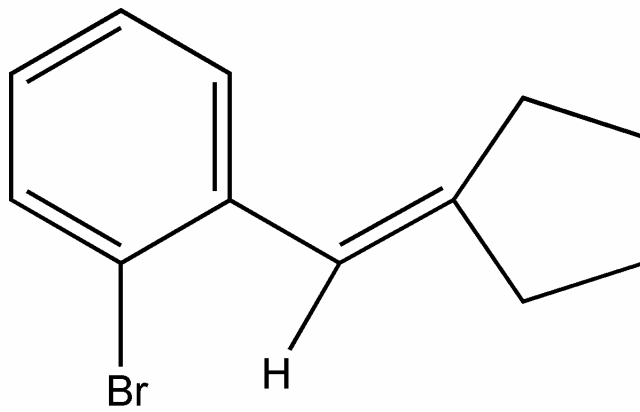




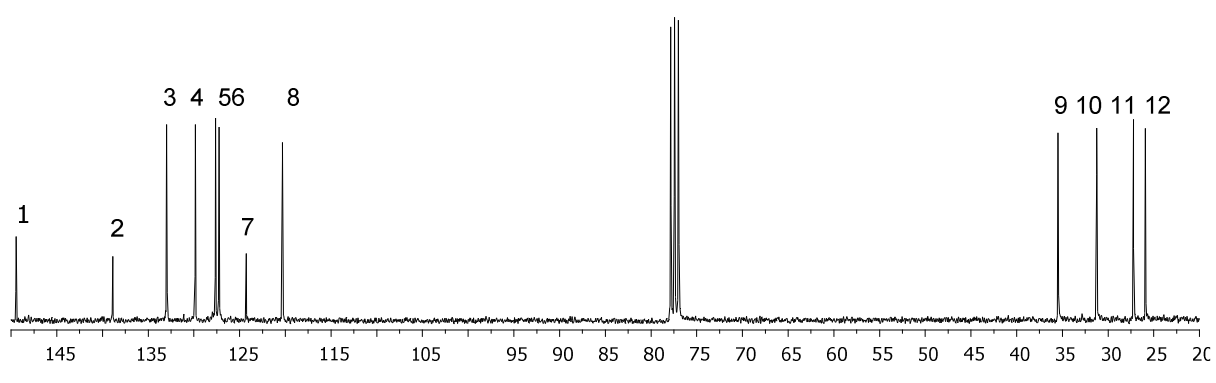
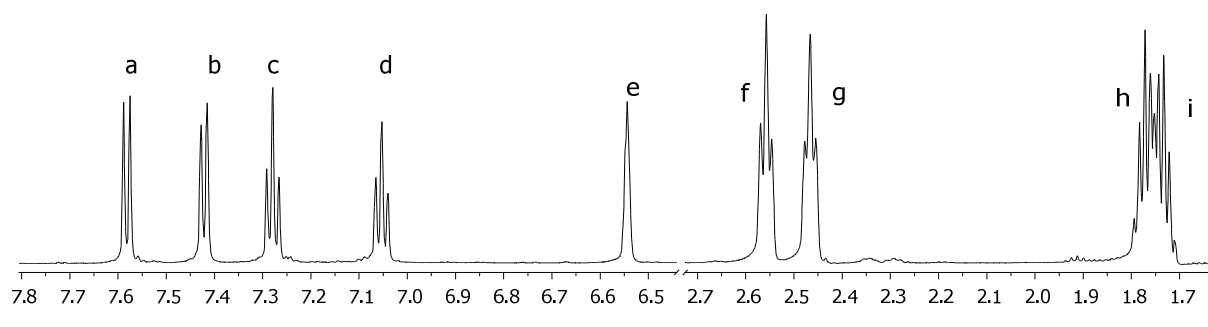
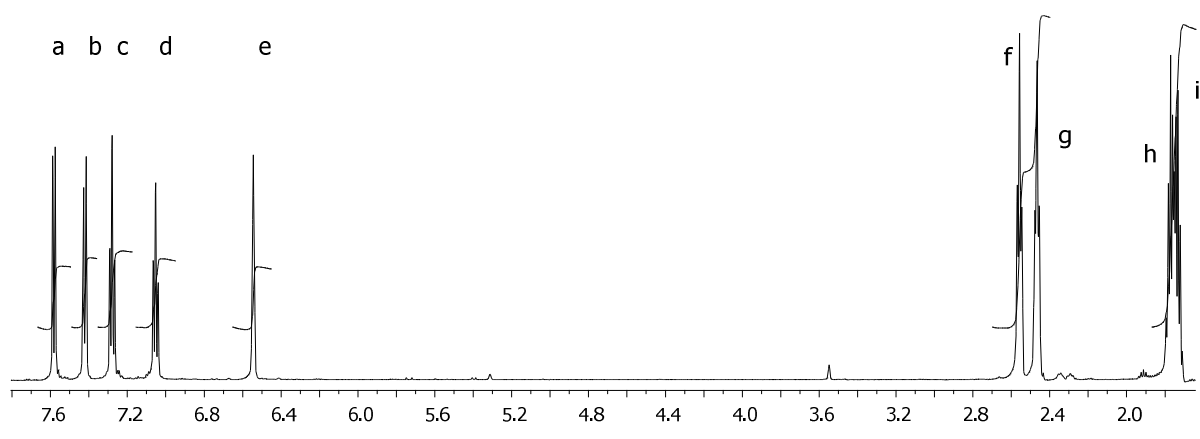
HMBC: vorwiegend  $^3J_{CH}$ -Kopplungen. (d. h. zwischen C und H liegen 3 Bindungen)  
gelegentlich  $^2J_{CH}$ -Kopplungen

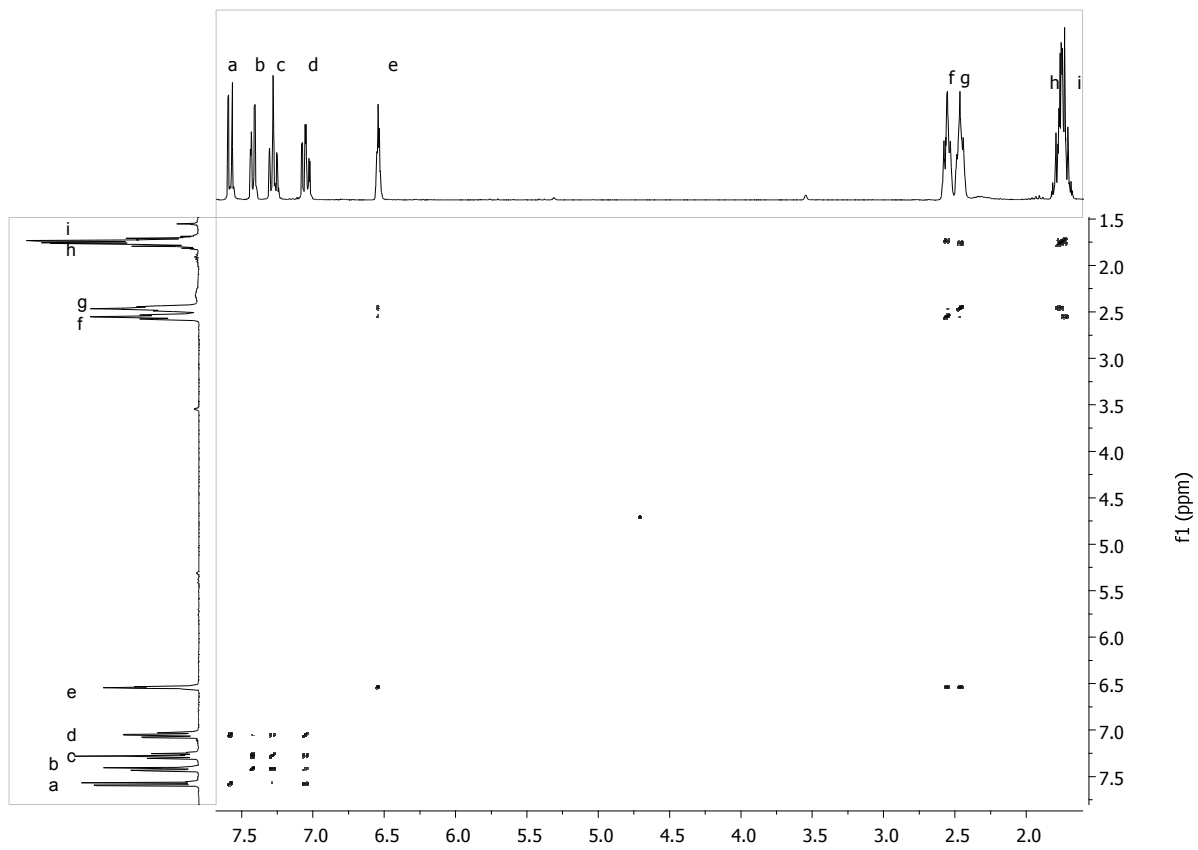


U27

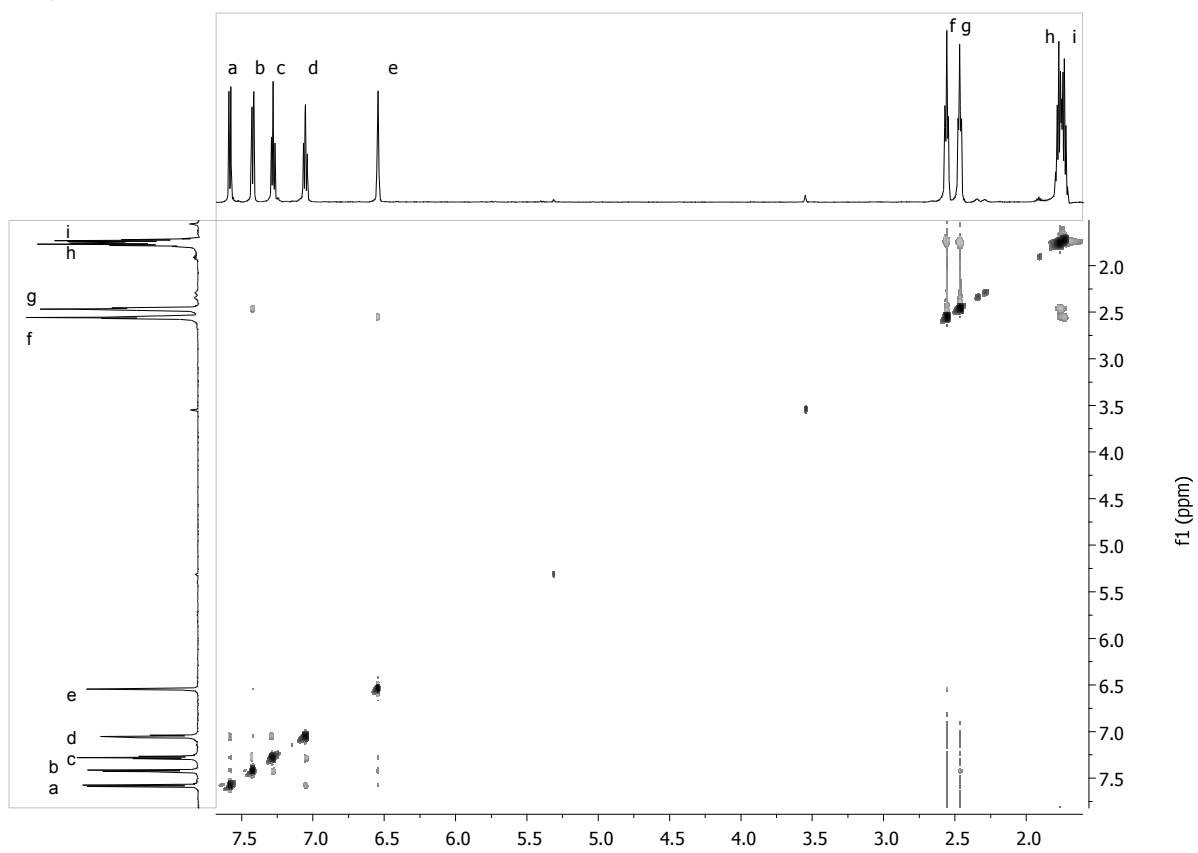


1. Ordnen Sie die Signale aus dem  $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$  -Spektrum obiger Strukturformel zu.

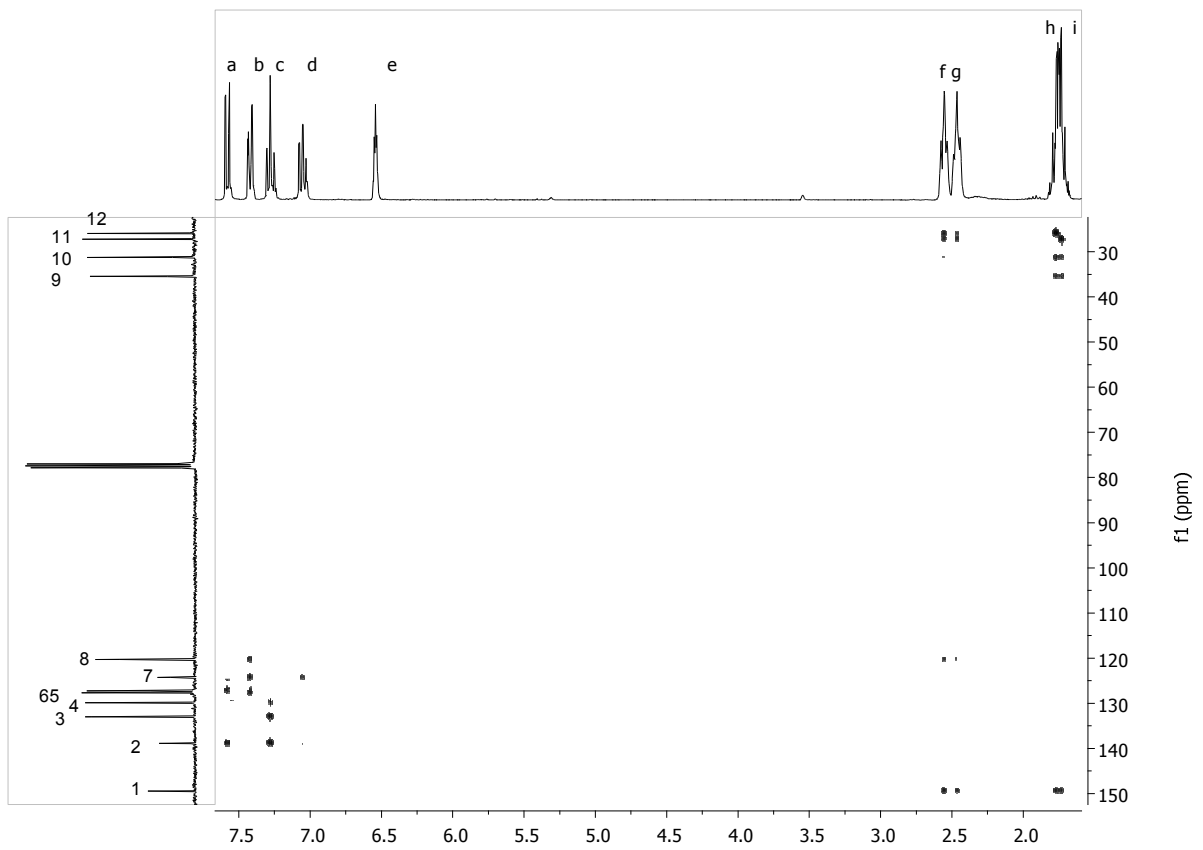
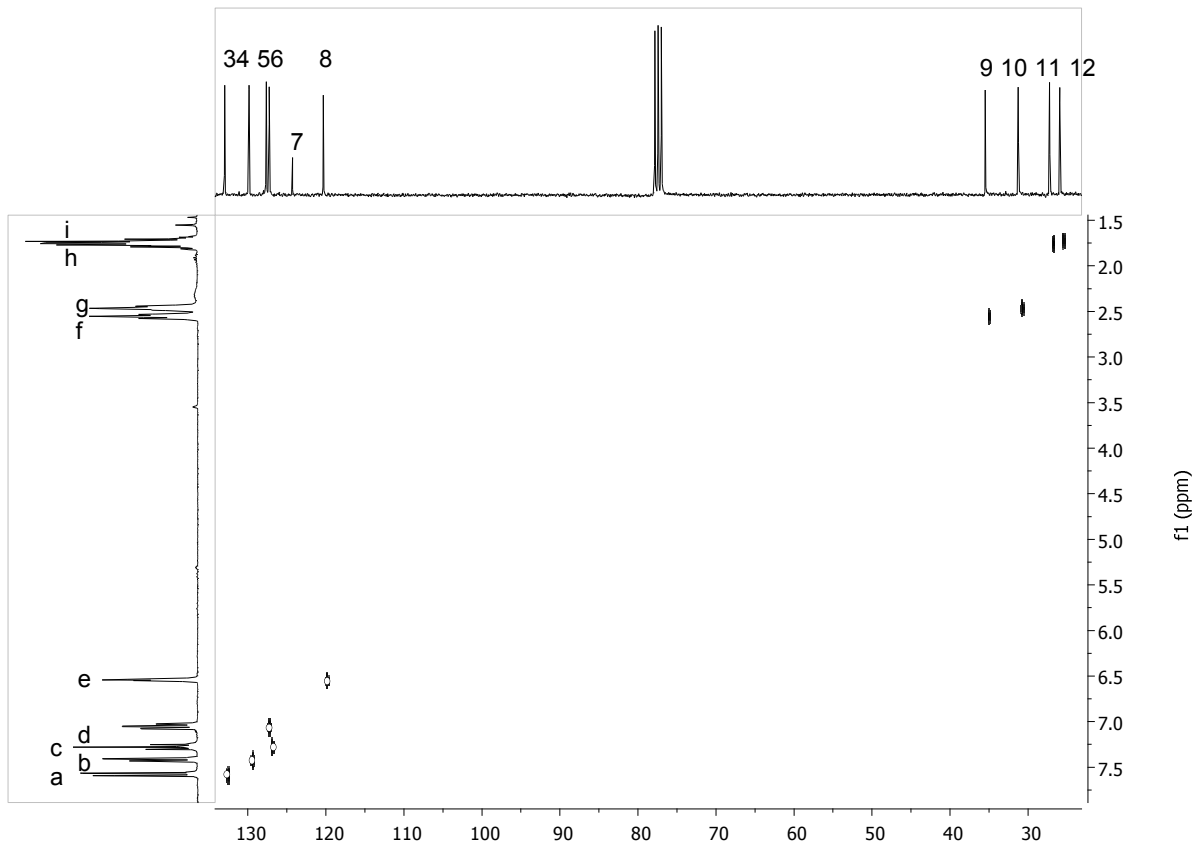




cosy



noesy





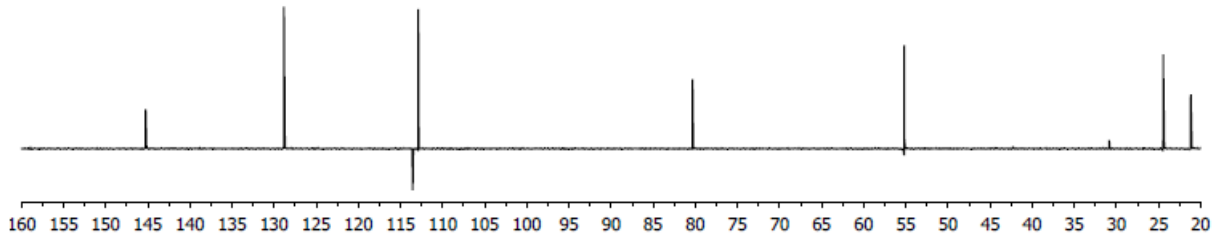
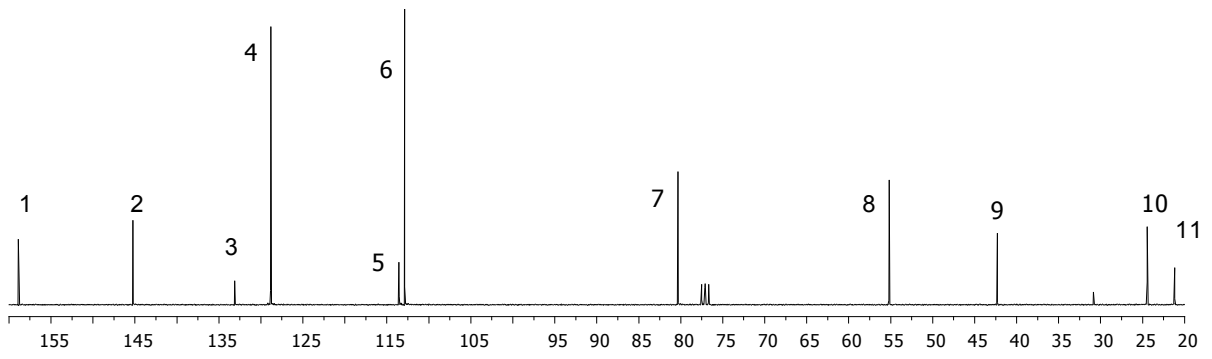
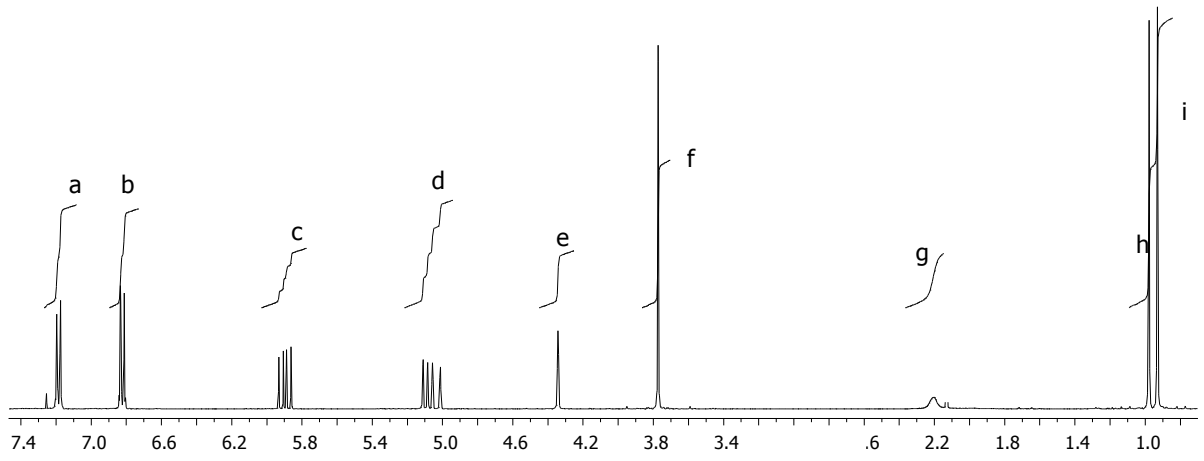
U 28

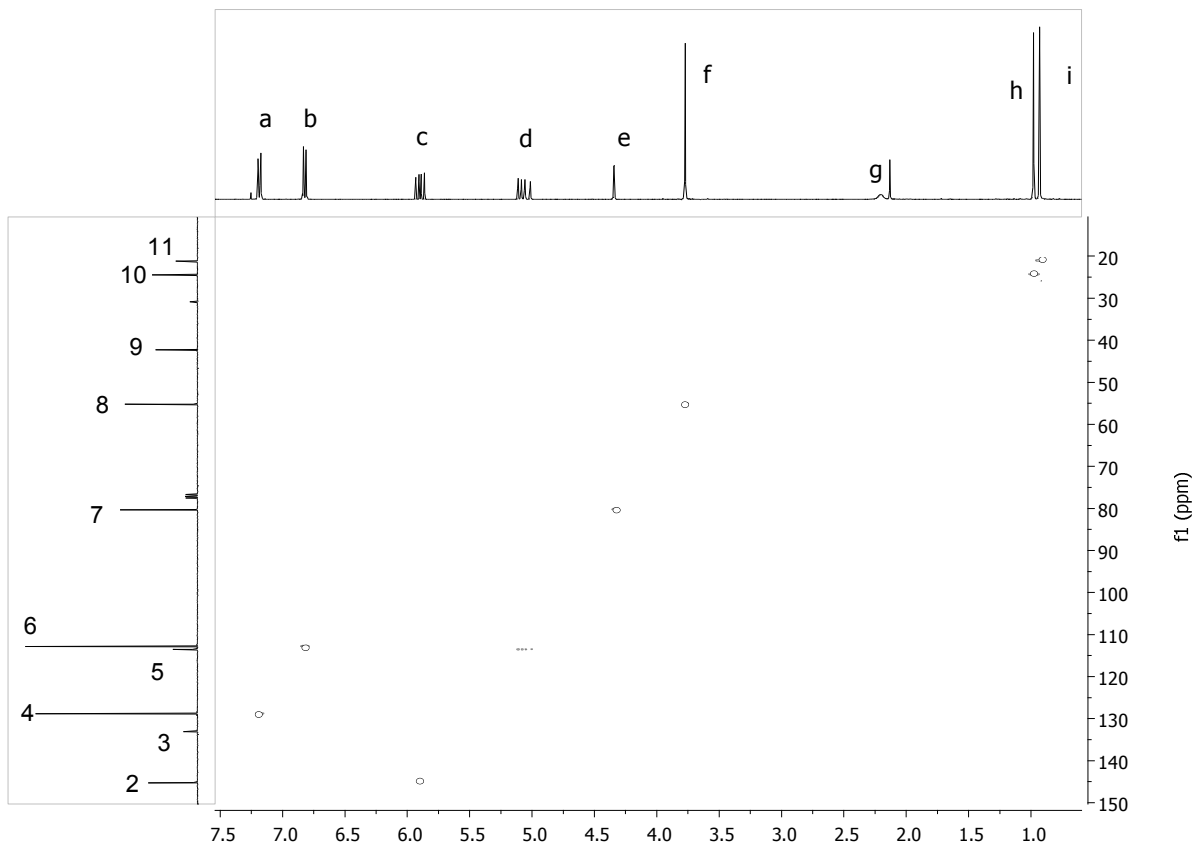
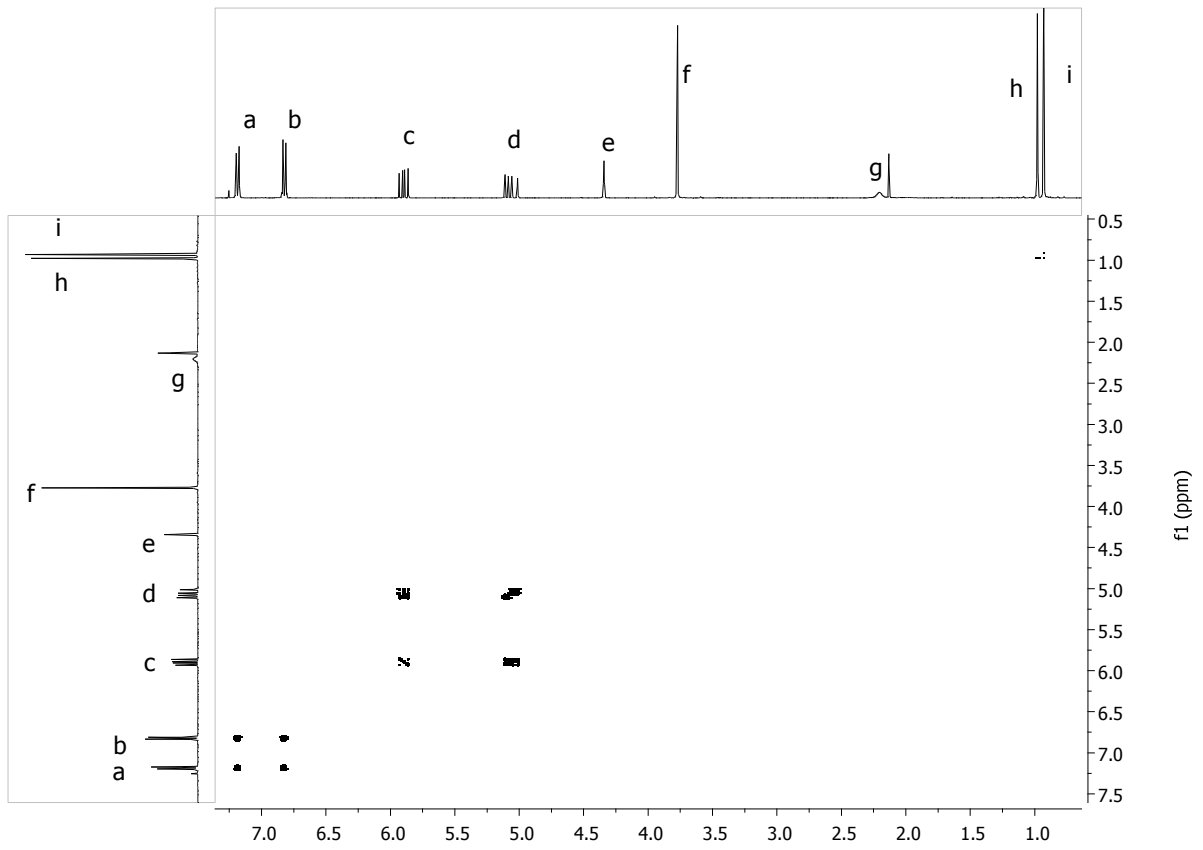


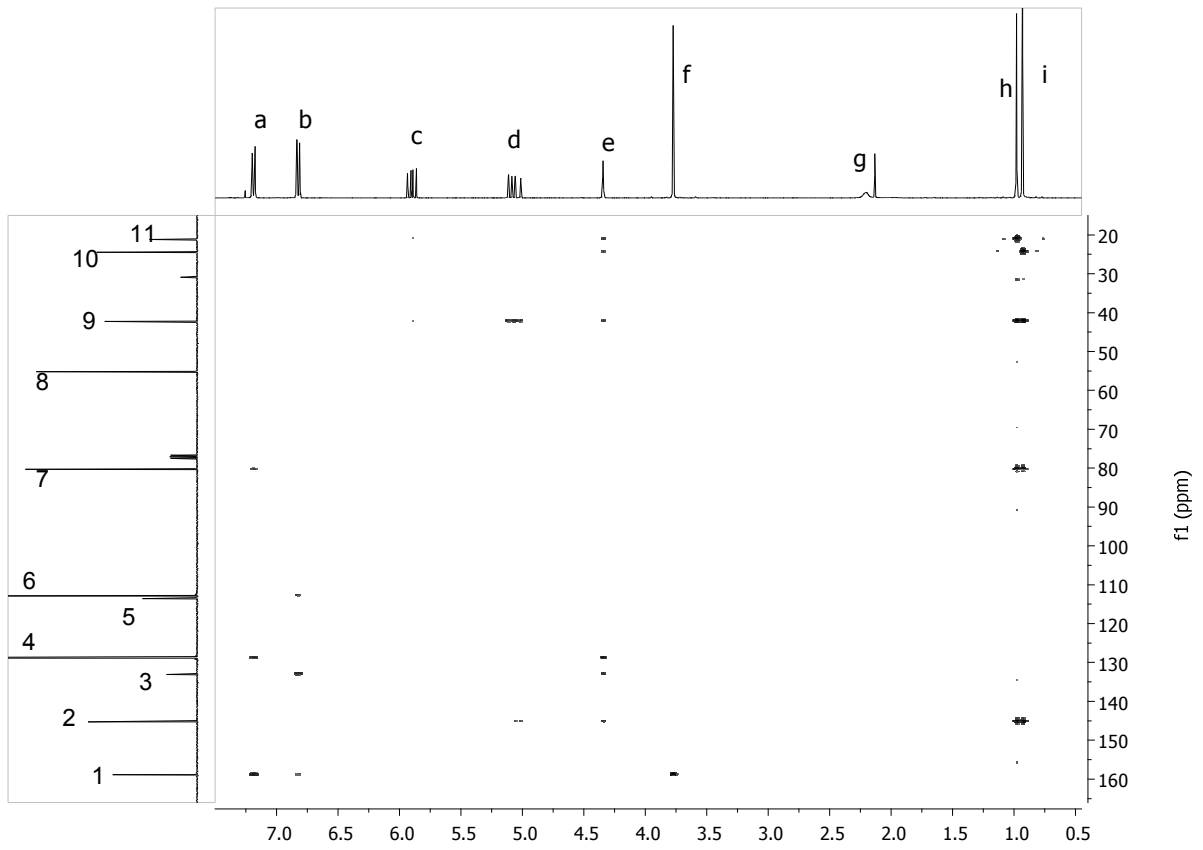
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren? (3 P)
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, um Frage 3 beantworten zu können.
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an. (2 P)
4. Ordnen Sie alle Signale zu ( $^1\text{H}$  und  $^{13}\text{C}$ ). (4 P)
5. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbare Kopplung der C-Atome 1, 2, 3, 4, 5 und 6 in Ihr gefundenes Molekül ein. Verwenden Sie Farbstifte (nicht rot!). Füllen Sie nachfolgende Tabelle aus. (4 P)

C-Atom	H-Atom	Kopplung
1	f	$^3J_{\text{CH}}$

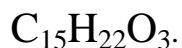
usw.







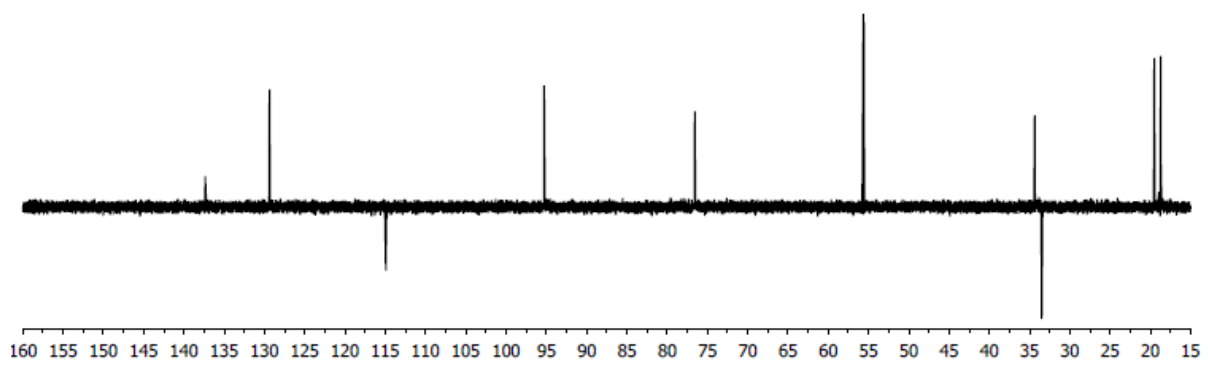
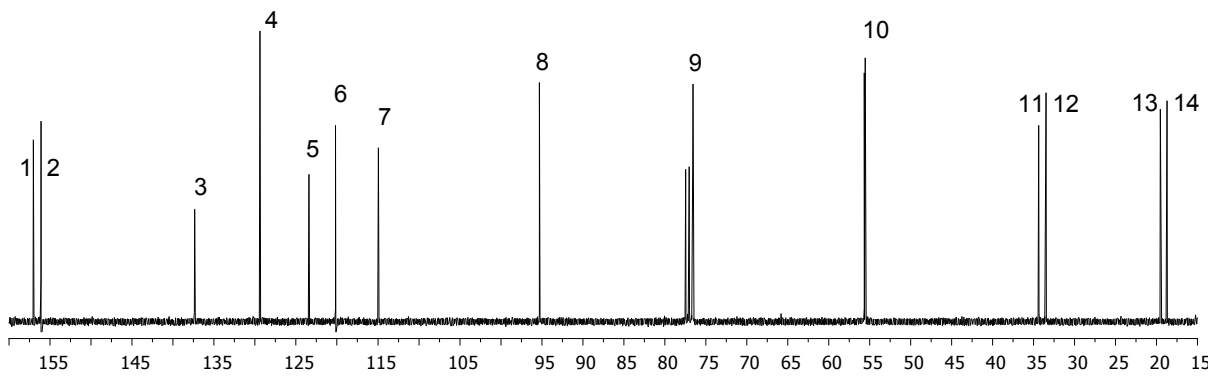
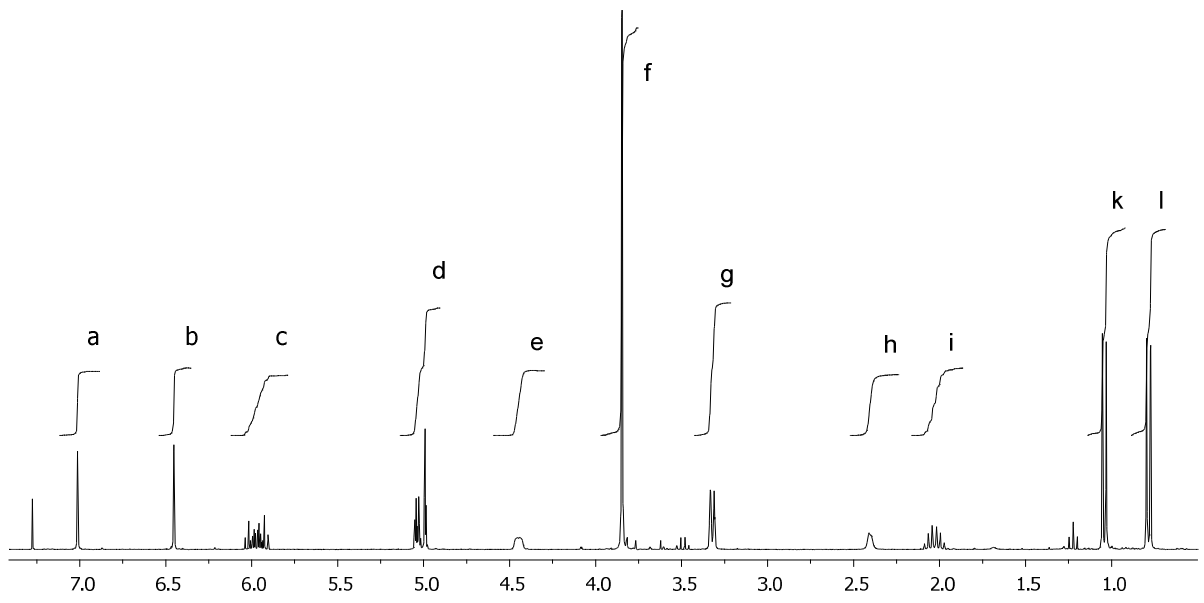
U 29

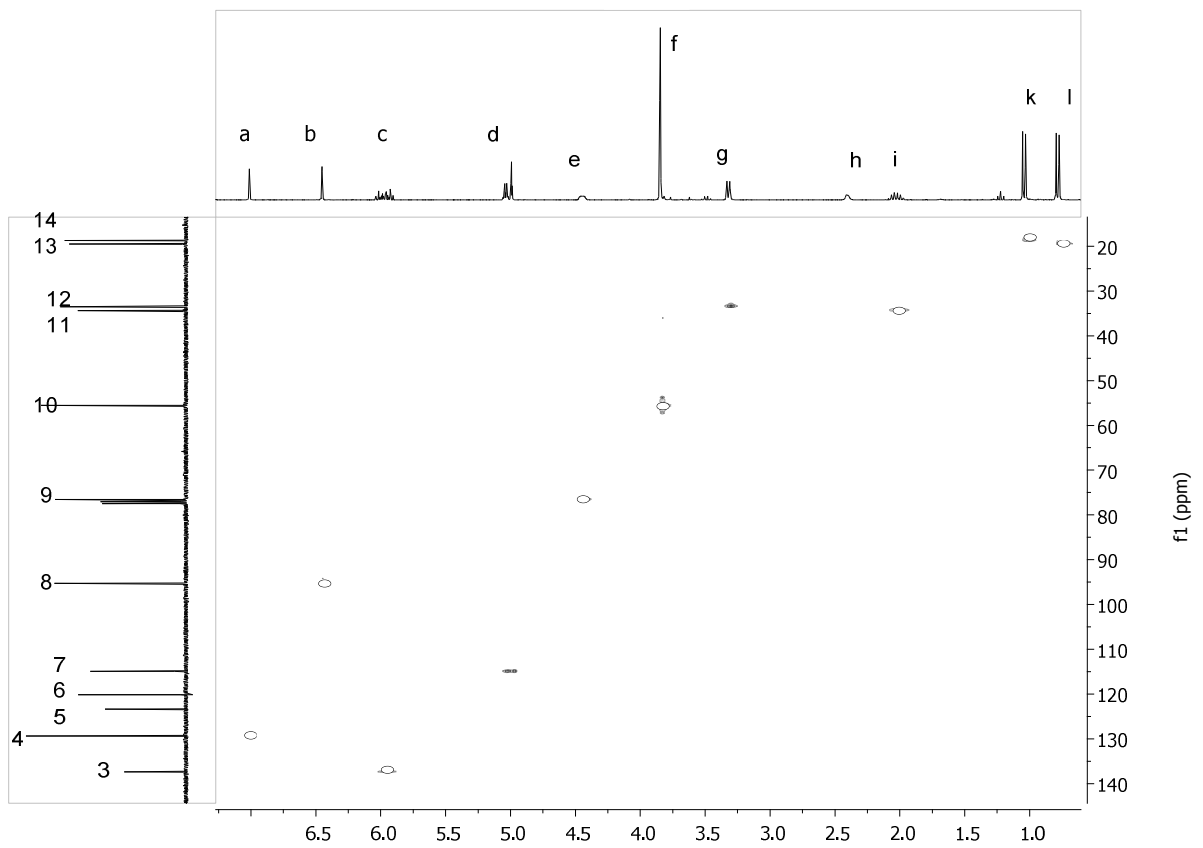
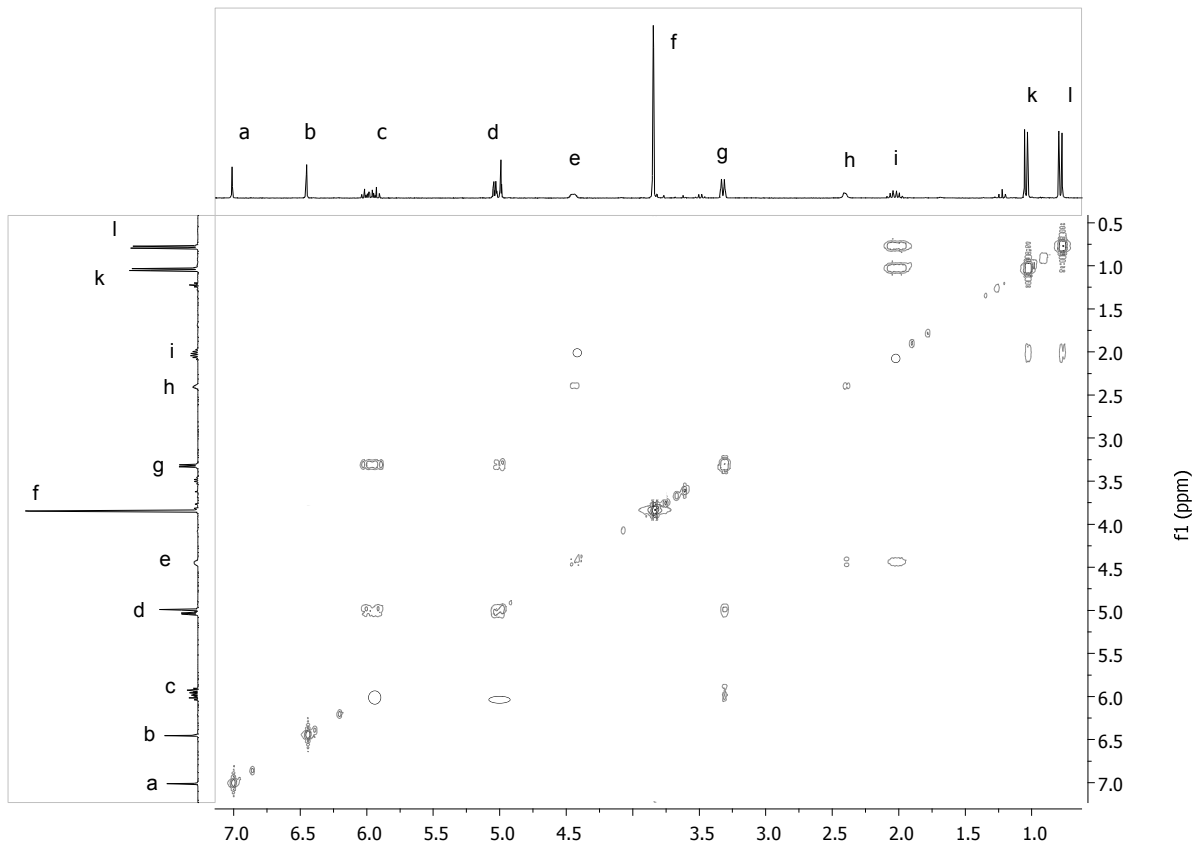


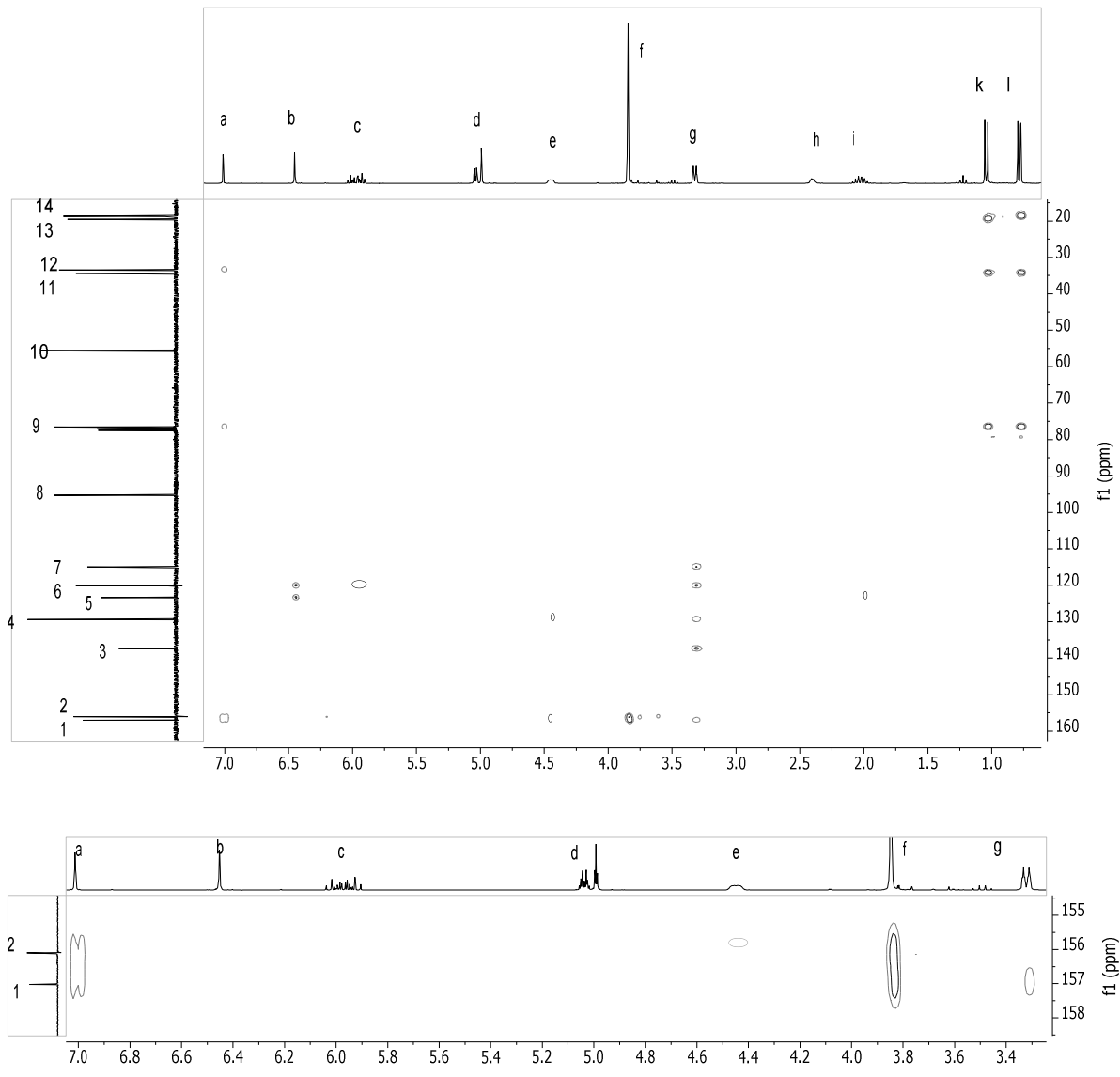
1. Welche Fragmente finden Sie auf Grund der Spektren?  
Hilfestellungen:  
Schauen Sie im COSY, welche Protonen miteinander koppeln.  
Schauen Sie im HSQC, welche Protonen zu welchen Cs gehören.  
Welche C-Atome gehören zum Aromaten. Warum ist eines dieser C-  
Atome so stark Hochfeld-verschoben? (siehe Inkremententabelle)
2. Ordnen Sie die Signale so gut wie möglich zu, um Frage 3 beantworten zu können.
3. Geben Sie eine sinnvolle Struktur an.
4. Ordnen Sie alle Signale zu.
5. Zeichnen Sie die im HMBC sichtbare Kopplung der C-Atome 1, 2, 5 und 6 in Ihr  
gefundenen Molekül ein. Verwenden Sie Farbstifte. Füllen Sie nachstehende Tabelle  
aus.

<b>13C</b>	<b>1H</b>	<b>J(C,H)</b>
<b>1</b>		<b>3 J</b>

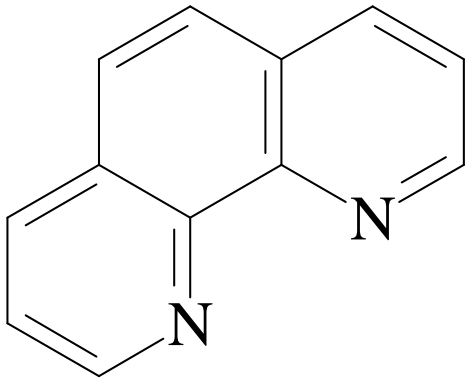
usw.



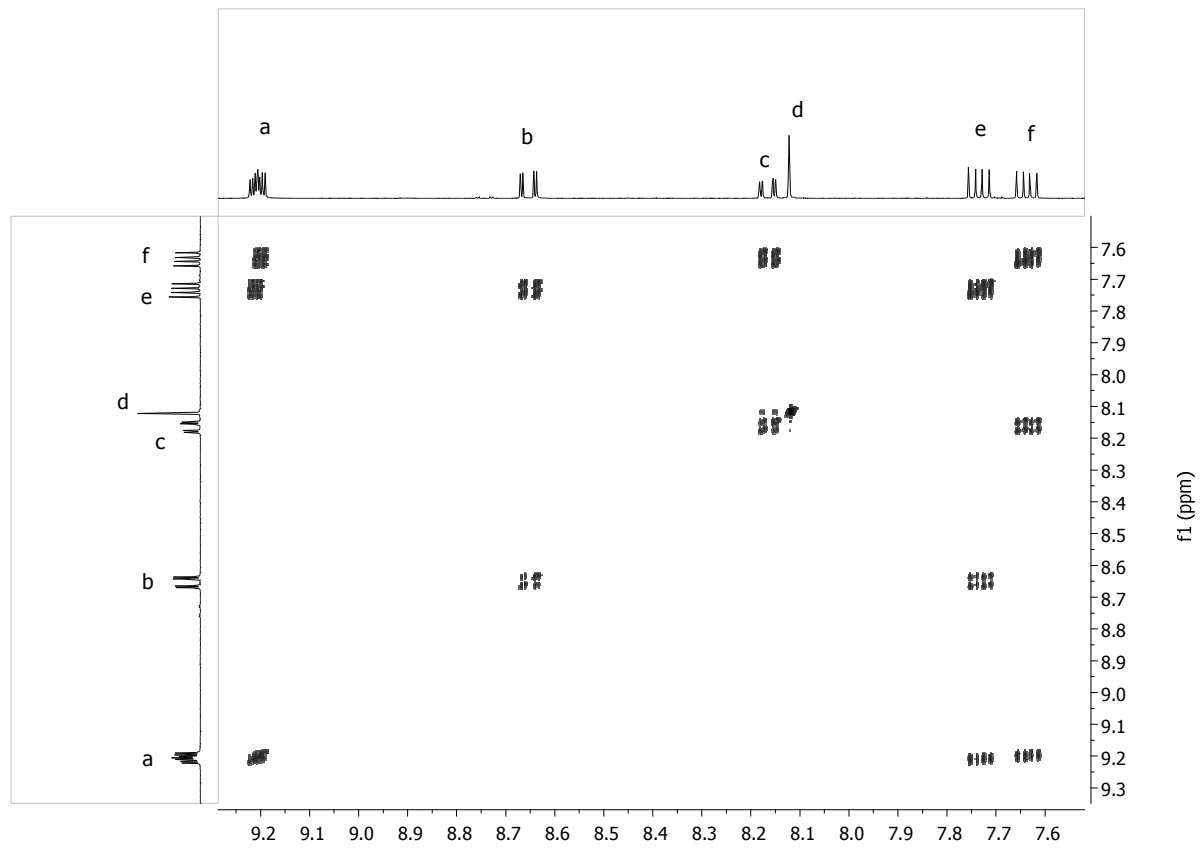
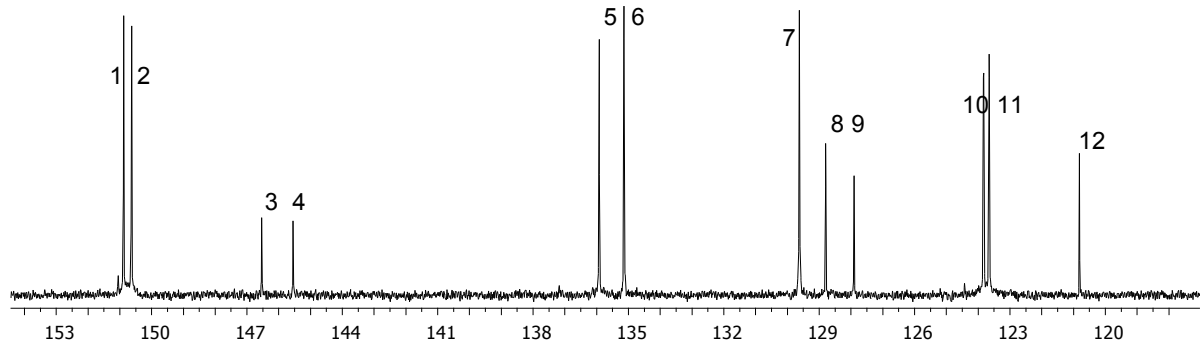
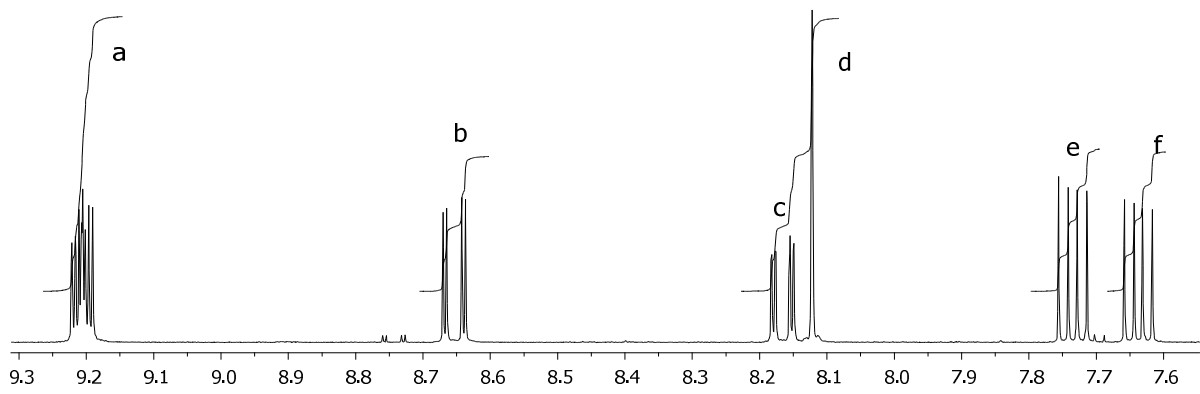


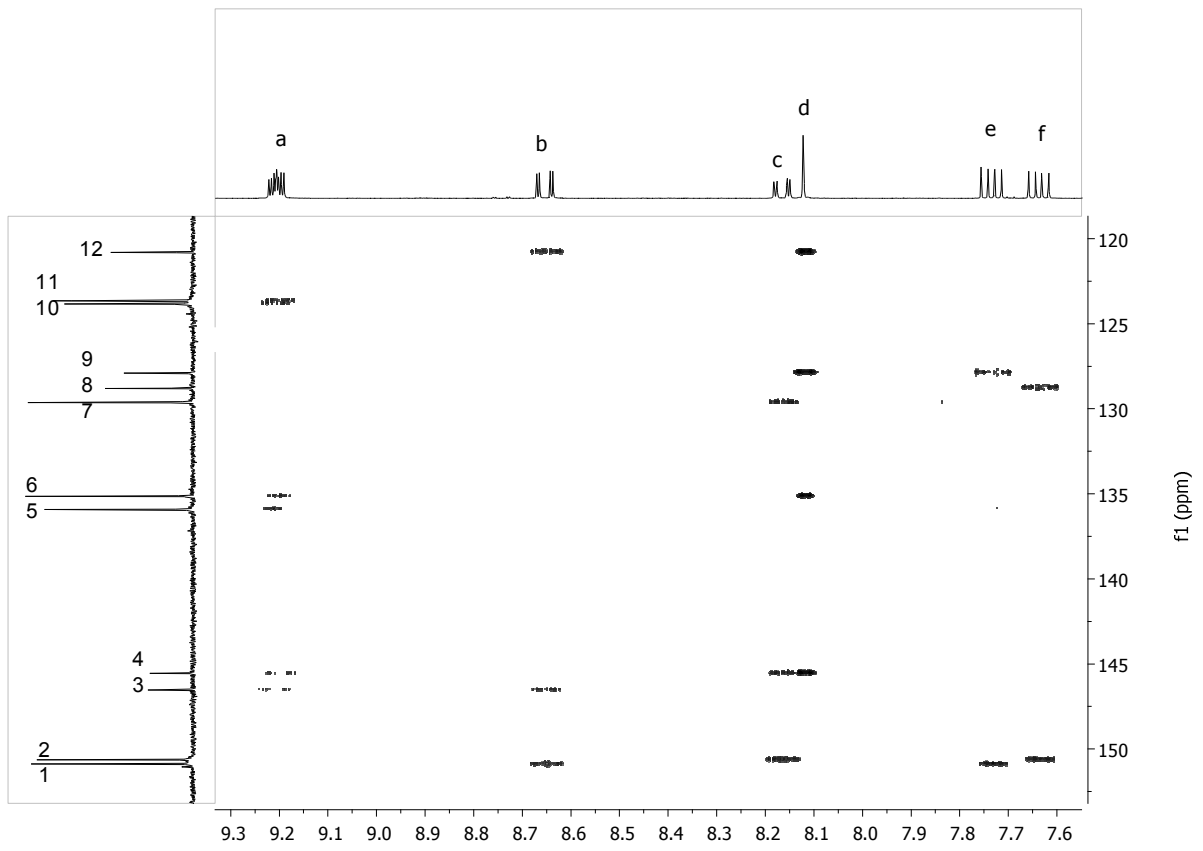
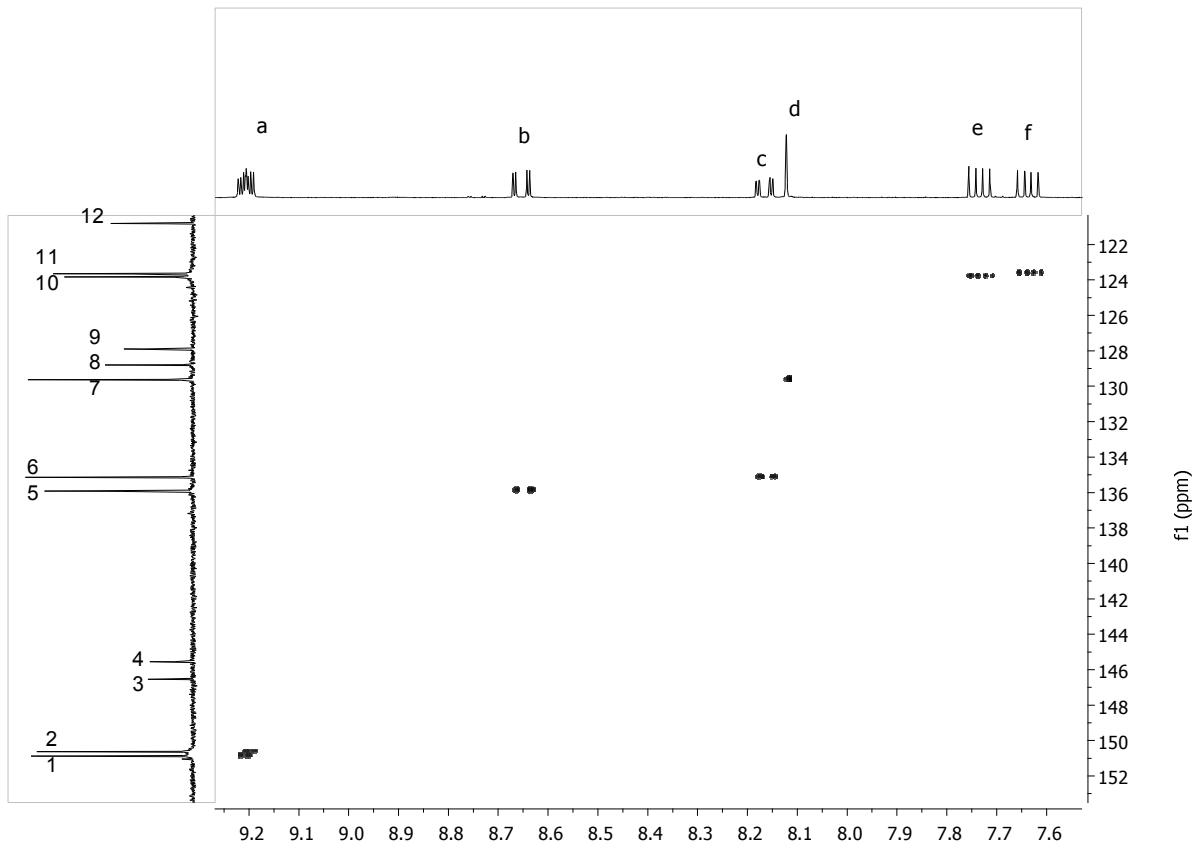


U30

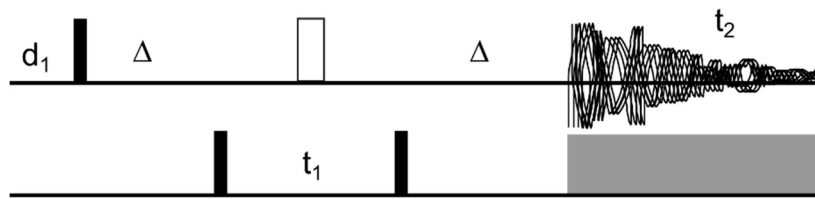


1. Bestimmen Sie, an welcher Stelle Br sitzt. (mit Begründung)
2. Ordnen Sie alle Signale zu.
3. Begründen Sie Ihre Zuordnung, indem Sie für C-Atom 3, 4, 7, 8, 9 und 12 die im HMBC sichtbaren Kopplungen einzeichnen. Verwenden Sie Farbstifte.





U31: Theorie (SS19)



1. Welches Experiment konnte mit dieser Impulsfolge gemessen werden?

a. Wie nennt man diese Impulsfolge? (1P)

b. Was für ein Experiment ist es? Erklären Sie was passiert während dieser Impulsfolge? (2P)

2. Impulsfolgeanalyse

a. Was sind die Bausteine (Pulsen und Wartezeiten) in dieser Impulsfolge? Wie lange sind sie normalerweise? (2P)

b. Welcher Teil ist die Präparation, Evolution, Mischung und Detektion? (2P)

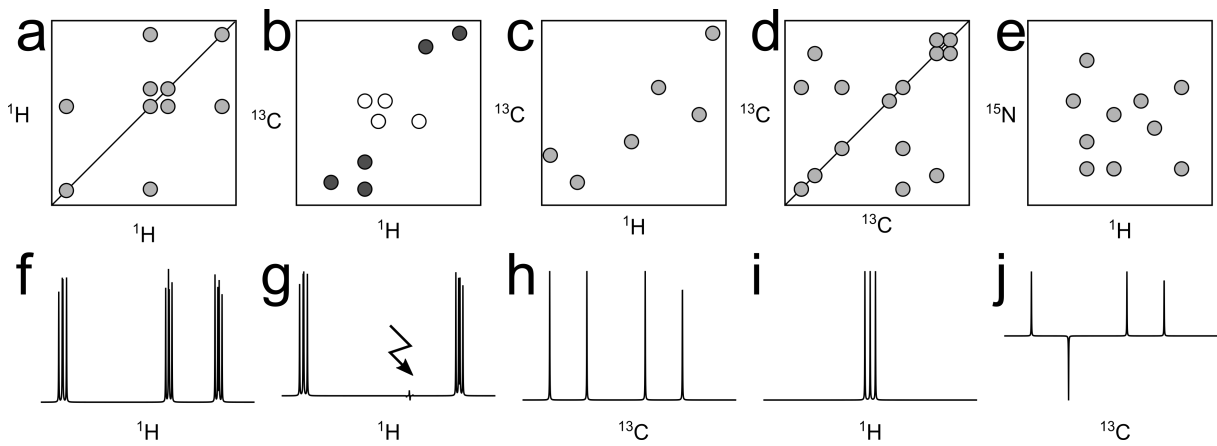
c. Warum brauchen wir die Wartezeit am Anfang der Sequenz? Wie lange sollen wir warten, wenn unser System ein  $T_1$  von 600 ms und ein  $T_2$  von 200 ms hat? (1P)

d. Wie lang ist die  $\Delta$ -Wartezeit nach dem ersten Impuls? Was bestimmt seine Länge? (1P)

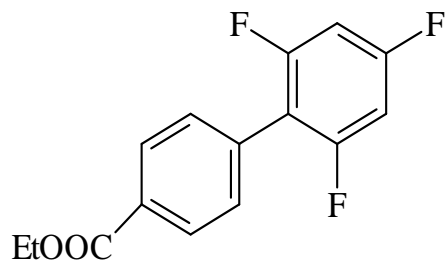
e. Was bedeuten  $t_1$  und  $t_2$ ? (1P)

f. Welcher Kanal könnte mit welchem Kern assoziiert sein? (1P)

3. Welches dieser Spektren könnte mit der obigen Pulssequenz aufgenommen worden sein? Bitte erläutern Sie, warum Sie auf diese Antwort gekommen sind. (3P)

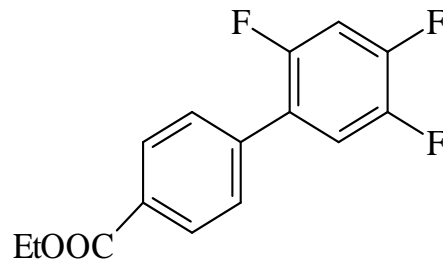


# U32



Struktur 1

oder



Struktur 2

1. Um welche Substanz handelt es sich? Geben Sie mind. 3 Gründe an, warum sich sich für Struktur 1 oder 2 entschieden haben.

