

Klausur zur Vorlesung Spektroskopie und Strukturaufklärung molekularer Verbindungen 2

Vorname: _____

Name: _____

Matrikelnummer: _____

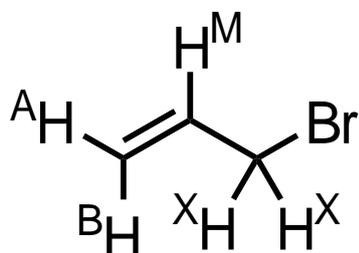
1,0	1,3	1,7	2,0	2,3	2,7	3,0	3,3	3,7	4,0	5,0
100–95	94–90	89–85	84–80	79–75	74–70	69–65	64–60	59–55	54–50	49–0

Ergebnis: Aufgabe 1: Punkte von 15 Punkten,
Aufgabe 2: Punkte von 15 Punkten,
Aufgabe 3: Punkte von 15 Punkten,
Aufgabe 4: Punkte von 15 Punkten,
Aufgabe 5: Punkte von 25 Punkten,
Aufgabe 6: Punkte von 15 Punkten;

Summe: Punkte. Note: _____

Aufgabe 1 (15 Punkte)

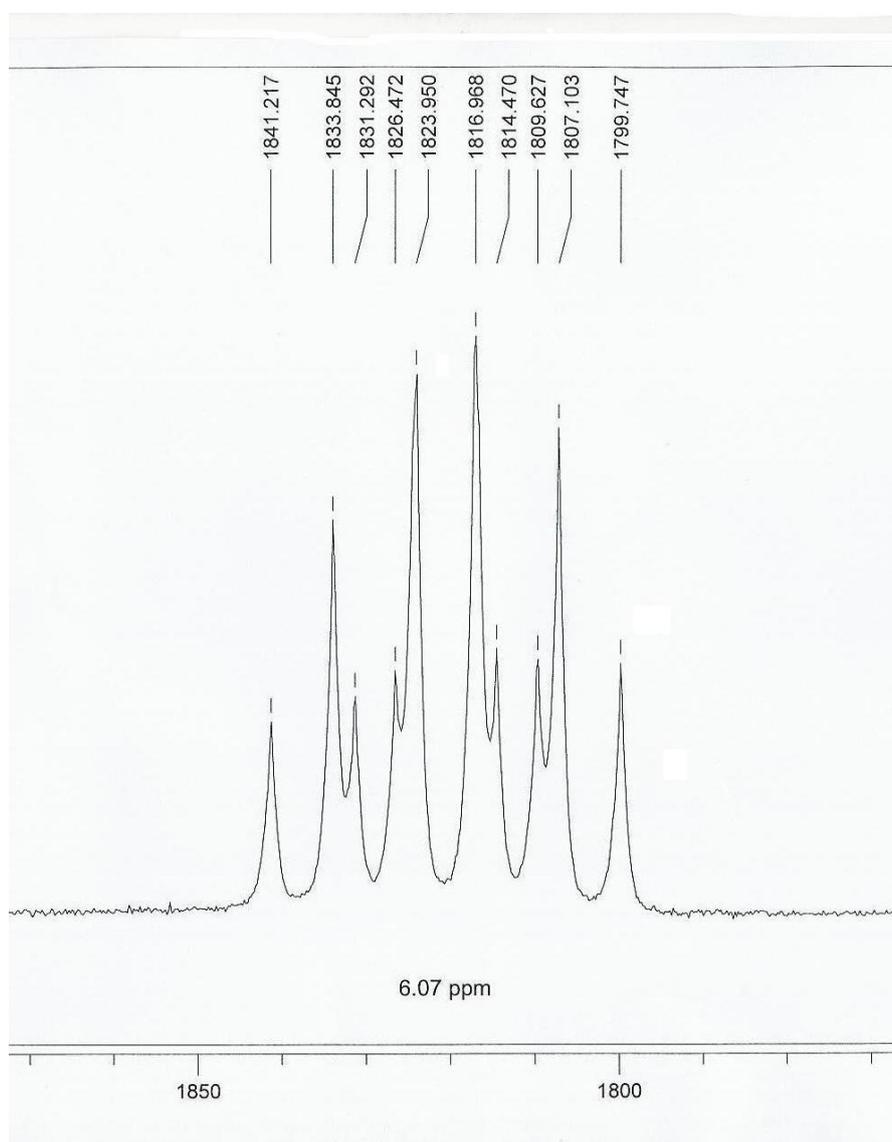
In der unten stehenden Abbildung sehen Sie einen Ausschnitt des $^1\text{H-NMR}$ -Spektrums von Allylbromid. Es handelt sich um das Signal des Protons 2-H, also H^{M} des ABMX_2 -Systems. Geben Sie nachstehend bitte die drei Kopplungskonstanten mit einer Hinterkommastelle Genauigkeit an.



$${}^3J_{\text{M,A(cis)}} =$$

$${}^3J_{\text{M,B(trans)}} =$$

$${}^3J_{\text{M,X}} =$$

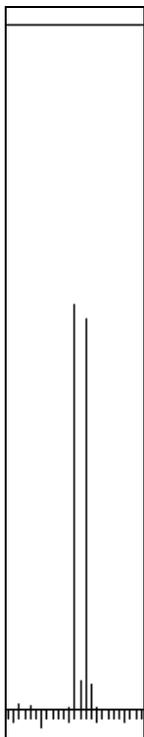


Aufgabe 2 (15 Punkte)

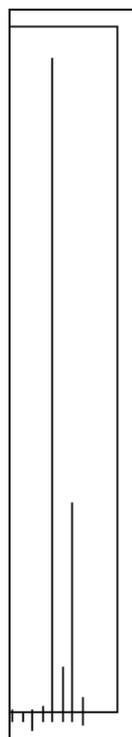
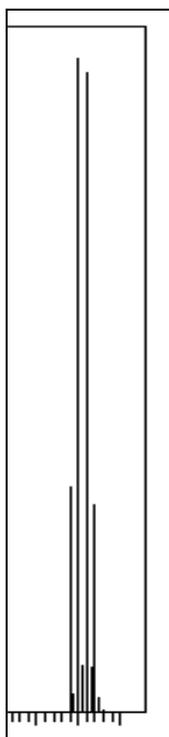
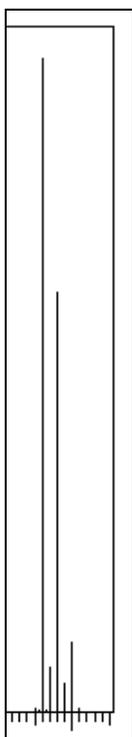
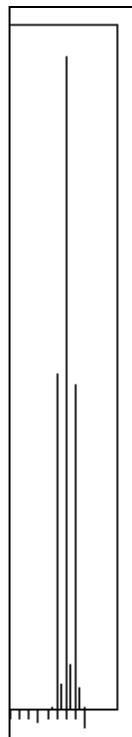
Skizzieren Sie bitte mit Lineal (Geodreieck) ein Triplett von Triplets mit ${}^3J_{ax,ax} = 8.0$ Hz und ${}^3J_{ax,eq} = 3.0$ Hz, wie es beispielsweise in Cyclohexanderivaten vorkommen kann. Wählen Sie dabei unbedingt den folgenden Maßstab: 8 Hz = 4 cm und 3 Hz = 1.5 cm. Geben Sie zusätzlich unterhalb jedes einzelnen der neun Peaks die relative Intensität an, wobei der kleinste Peak die Intensität 1 haben soll.

Aufgabe 3 (15 Punkte)

Unten sehen die die M^+ -Signale von Benzolderivaten, die jeweils bis zu drei Chlor oder Bromatome (oder beides) enthalten. Schreiben Sie bitte die Summenformeln so unter die Spektrenausschnitte, wie es bei dem ersten Bild beispielhaft gezeigt ist.



C_6H_5Br



Aufgabe 4 (15 Punkte)

Auf der Seite A1 (Anlage) ist das ^1H -NMR-Spektrum (500 MHz, D_2O) einer unbekanntenen Verbindung samt Vergrößerung abgebildet. Die Signale einiger saurer Protonen (also OH oder NH) sind nicht sichtbar. Auf der Seite A2 sehen Sie das IR-Spektrum der Verbindung. Das Massenspektrum zeigt ein M^+ -Signal bei m/z 119 (ohne Cl, Br, S oder Si-Satelliten). Das ^{13}C -NMR lautet wie folgt:

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR (125 MHz, D_2O): $\delta = 54.0$ (CH_3), 55.0 (CH), 59.6 (CH_2), 169.3 (4°-C) ppm.

Geben Sie hier **einen** Strukturvorschlag an (Konstitution).

Sicherheitshinweis:

Gefragt ist jeweils ein und nur ein Konstitutionsvorschlag. Auch bei falschen Lösungen werden Teillösungen bzw. Strukturfragmente mit Punkten belohnt. Bei mehr als einem Strukturvorschlag pro Aufgabe gibt es Null Punkte!

Nicht gefragt sind Strukturzuordnungen, Kopplungskonstanten, Argumente für den Lösungsweg. Dafür gibt es definitiv keine Punkte!

Aufgabe 5 (25 Punkte)

Auf der Seite A3 (Anlage) ist das ^1H -NMR-Spektrum (500 MHz, CDCl_3) einer unbekanntenen Verbindung samt Vergrößerung abgebildet. Auf der Seite A4 sehen Sie das $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR (125 MHz, CDCl_3) samt DEPT135. Und schließlich befinden sich auf der Seite A5 das IR- und EI-Massenspektrum der Verbindung.

Geben Sie hier **einen** Strukturvorschlag an (Konstitution).

Sicherheitshinweis:

Gefragt ist jeweils ein und nur ein Konstitutionsvorschlag. Auch bei falschen Lösungen werden Teillösungen bzw. Strukturfragmente mit Punkten belohnt. Bei mehr als einem Strukturvorschlag pro Aufgabe gibt es Null Punkte!

Nicht gefragt sind Strukturzuordnungen, Kopplungskonstanten, Argumente für den Lösungsweg. Dafür gibt es definitiv keine Punkte!

Aufgabe 6 (15 Punkte)

Auf der Seite A6 (Anlage) ist das ^1H -NMR-Spektrum (500 MHz, CDCl_3) einer unbekanntenen Verbindung samt Vergrößerung abgebildet. Auf der Seite A7 sehen Sie eine weitere Vergrößerung des ^1H -NMR-Spektrums sowie das IR-Spektrum der Verbindung. Das $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR (125 MHz, CDCl_3) samt DEPT135 befindet sich auf der Seite A8. Das Massenspektrum lautet wie folgt:

MS (EI, 70 eV): m/z (%) = 89 (1) [M^+], 60 (2), 45 (20), 30 (100).

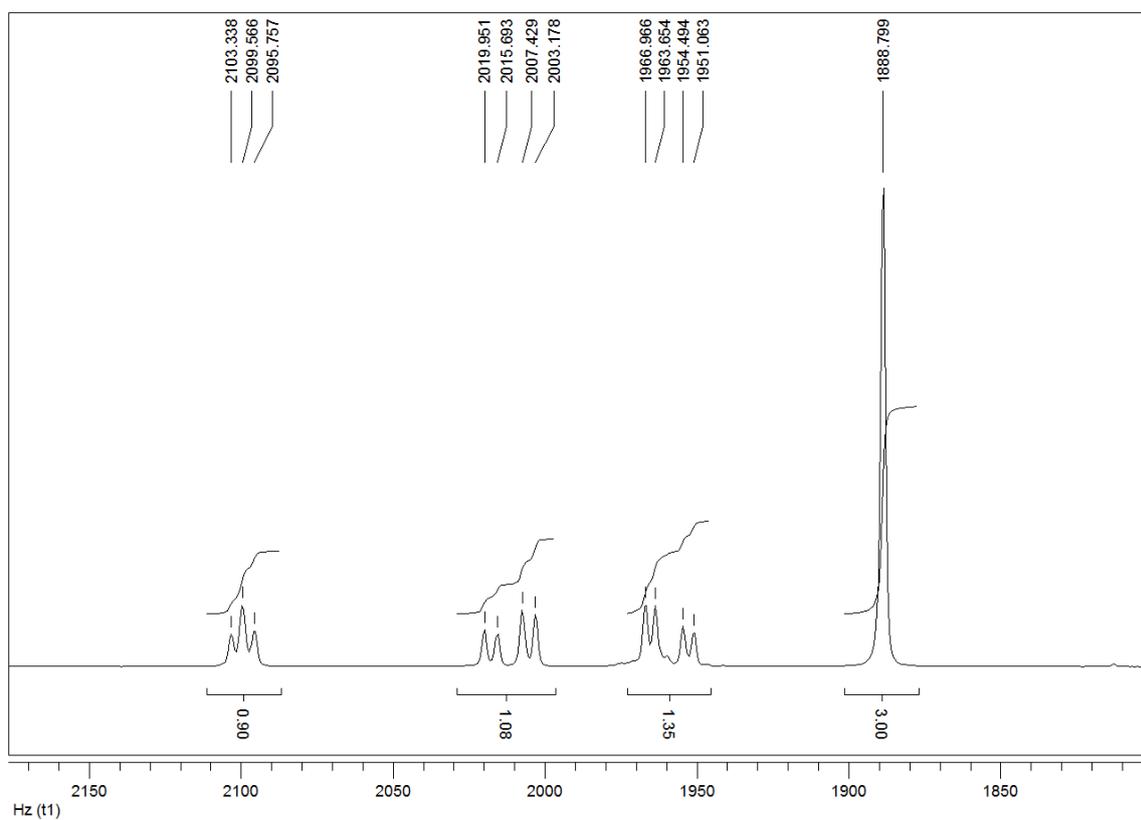
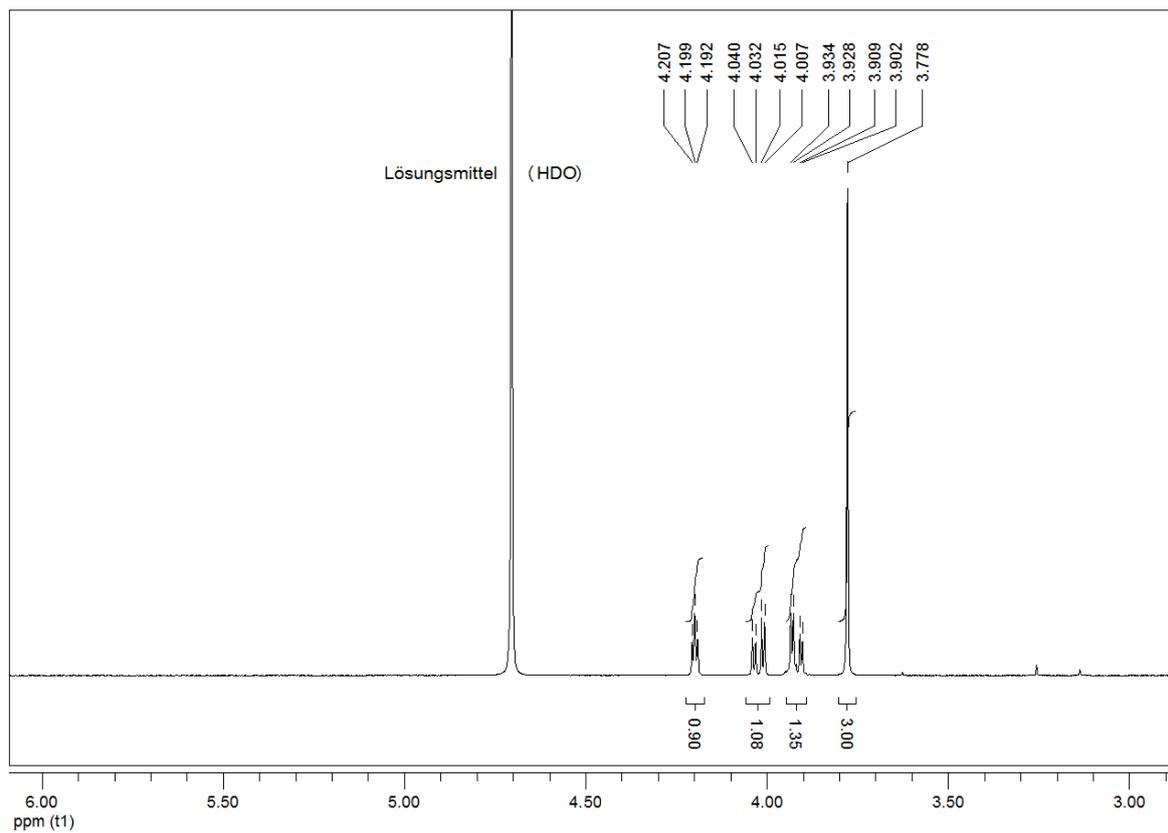
Geben Sie hier **einen** Strukturvorschlag an (Konstitution).

Sicherheitshinweis:

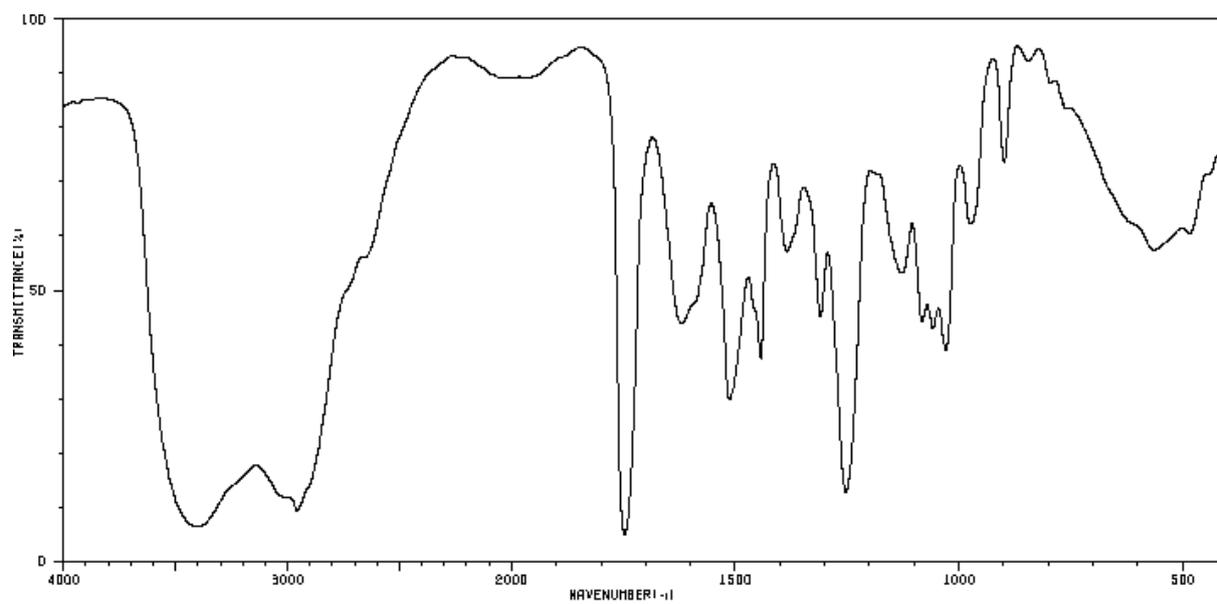
Gefragt ist jeweils ein und nur ein Konstitutionsvorschlag. Auch bei falschen Lösungen werden Teillösungen bzw. Strukturfragmente mit Punkten belohnt. Bei mehr als einem Strukturvorschlag pro Aufgabe gibt es Null Punkte!

Nicht gefragt sind Strukturzuordnungen, Kopplungskonstanten, Argumente für den Lösungsweg. Dafür gibt es definitiv keine Punkte!

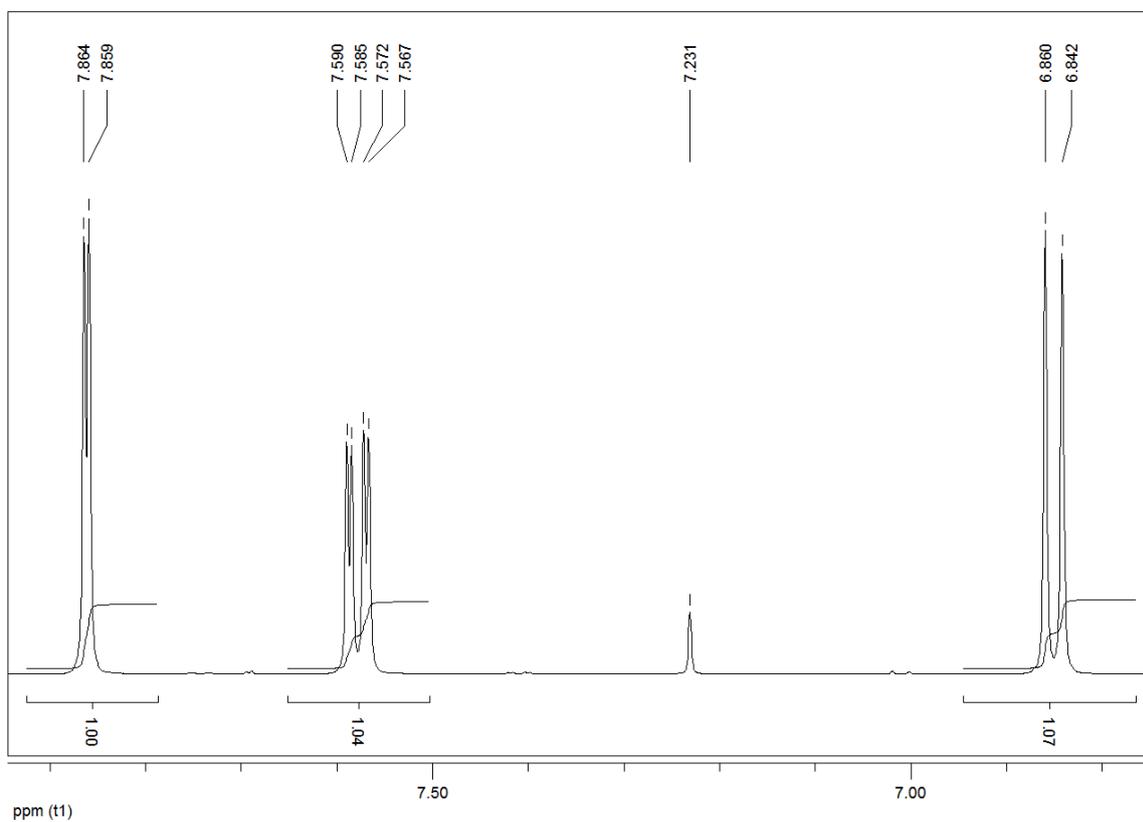
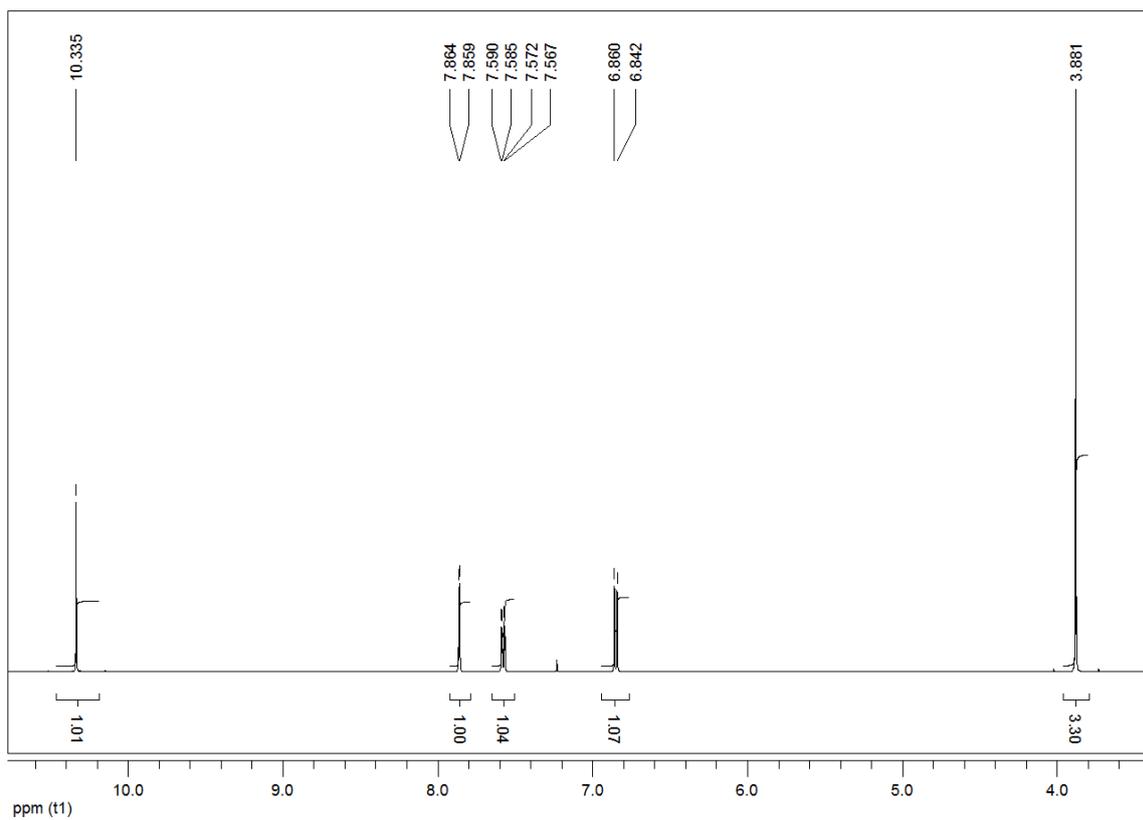
Zu Aufgabe 4



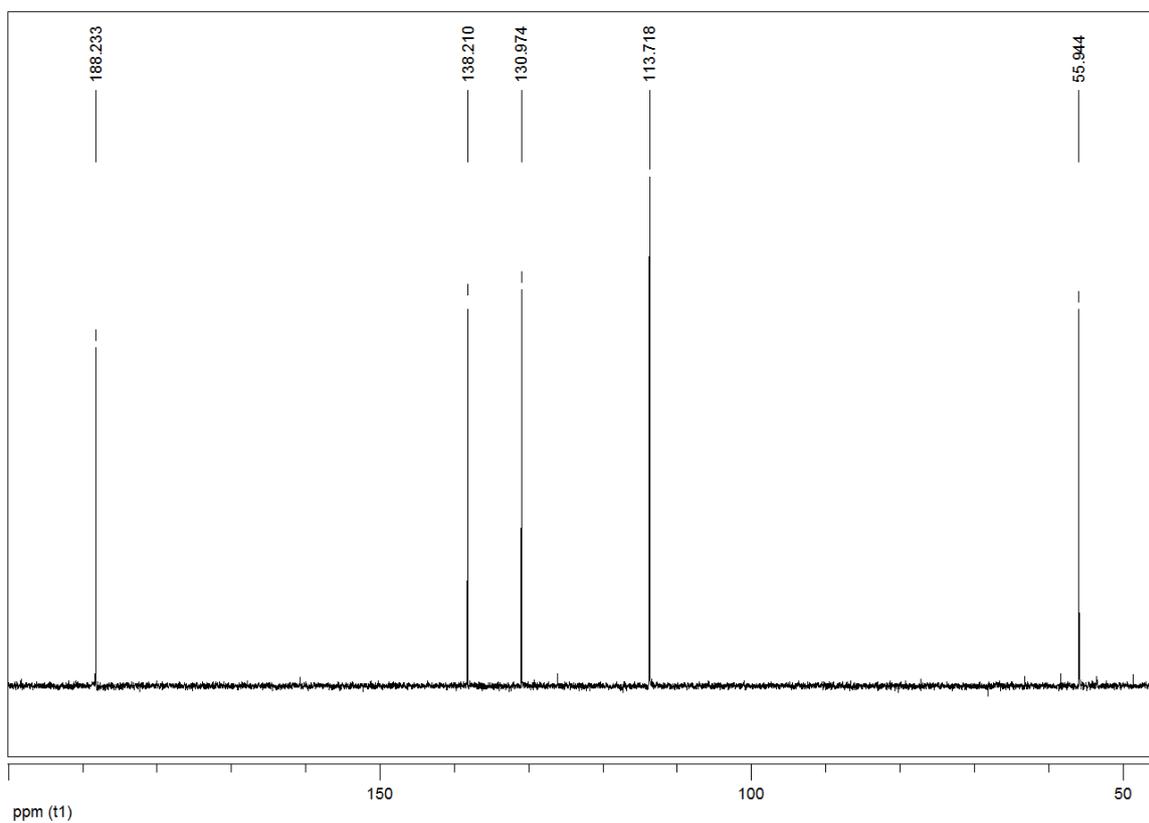
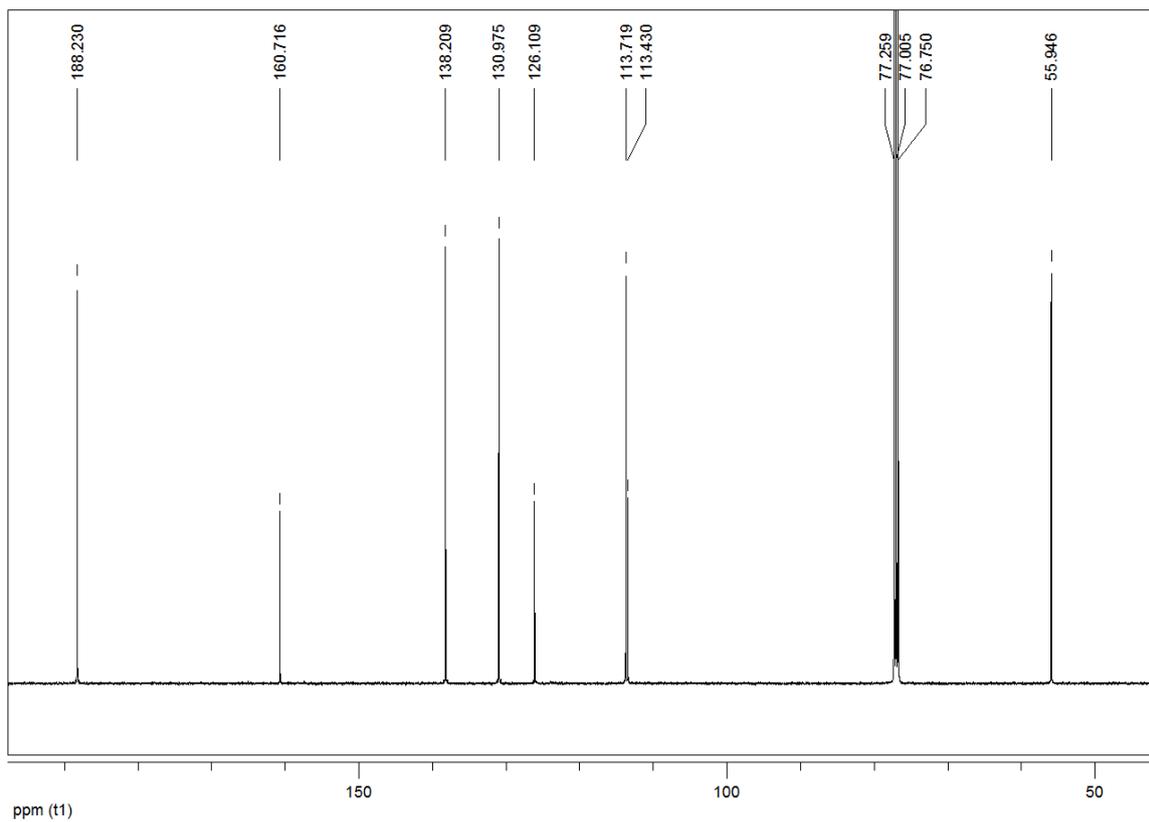
Zu Aufgabe 4



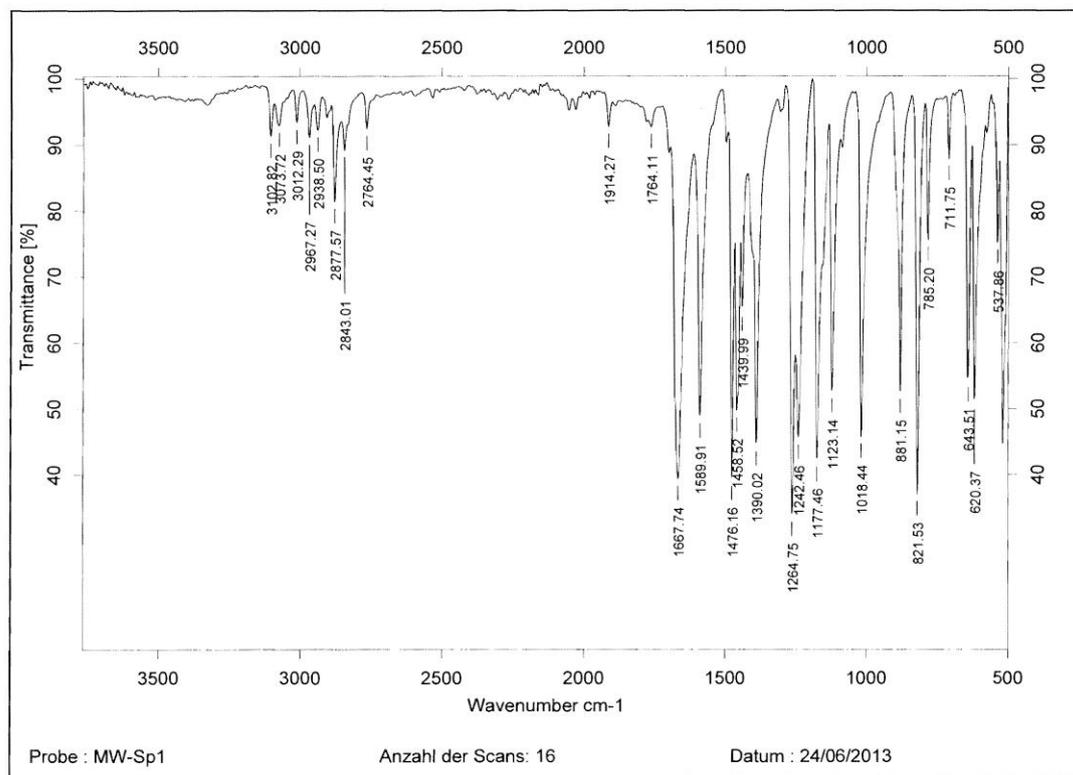
Zu Aufgabe 5



Zu Aufgabe 5



Zu Aufgabe 5

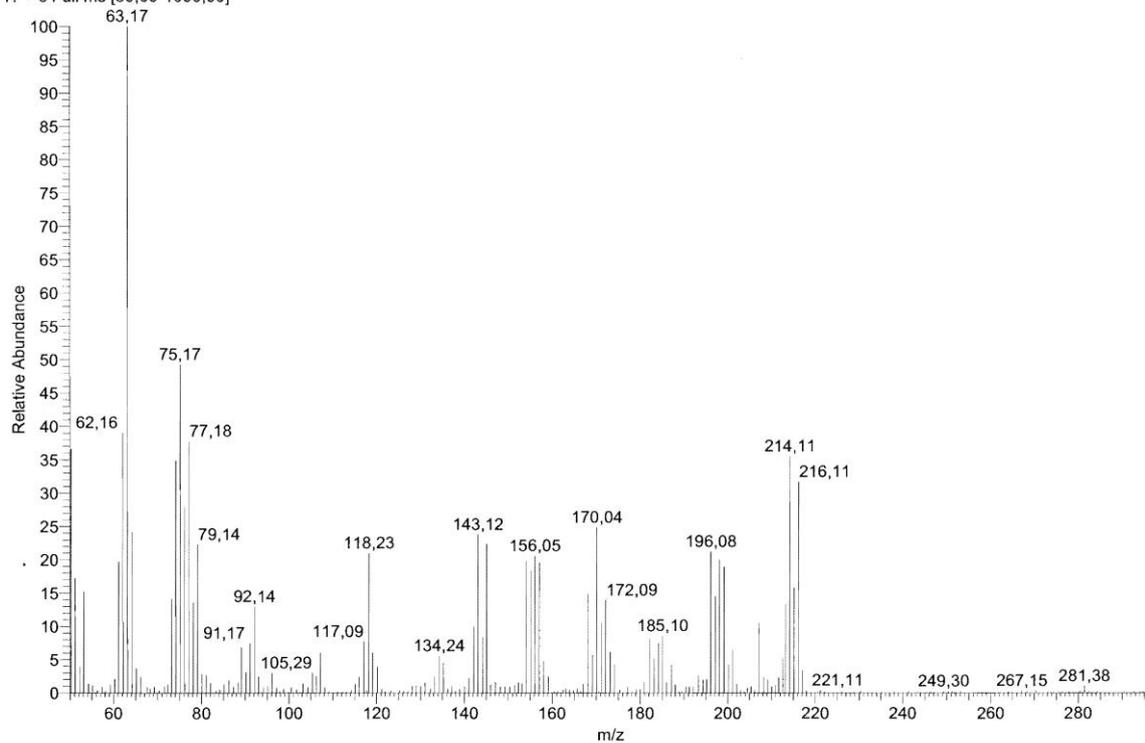


H:\b26gc20

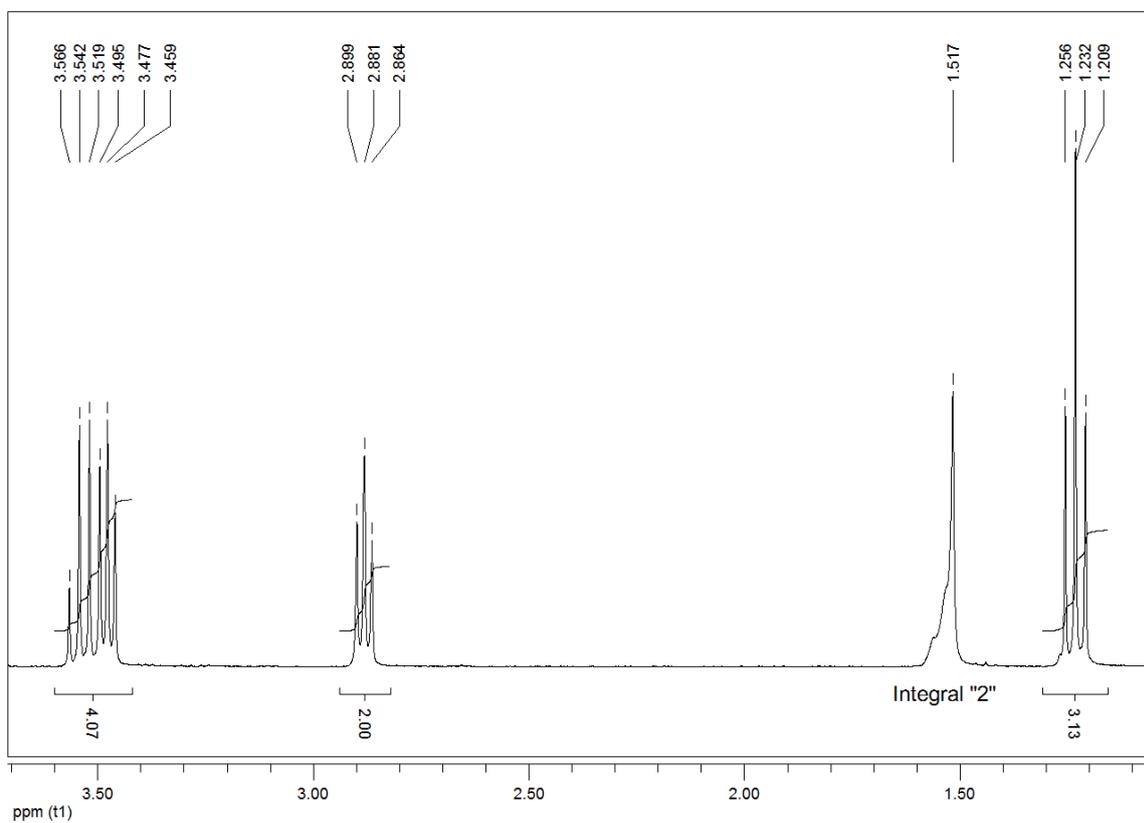
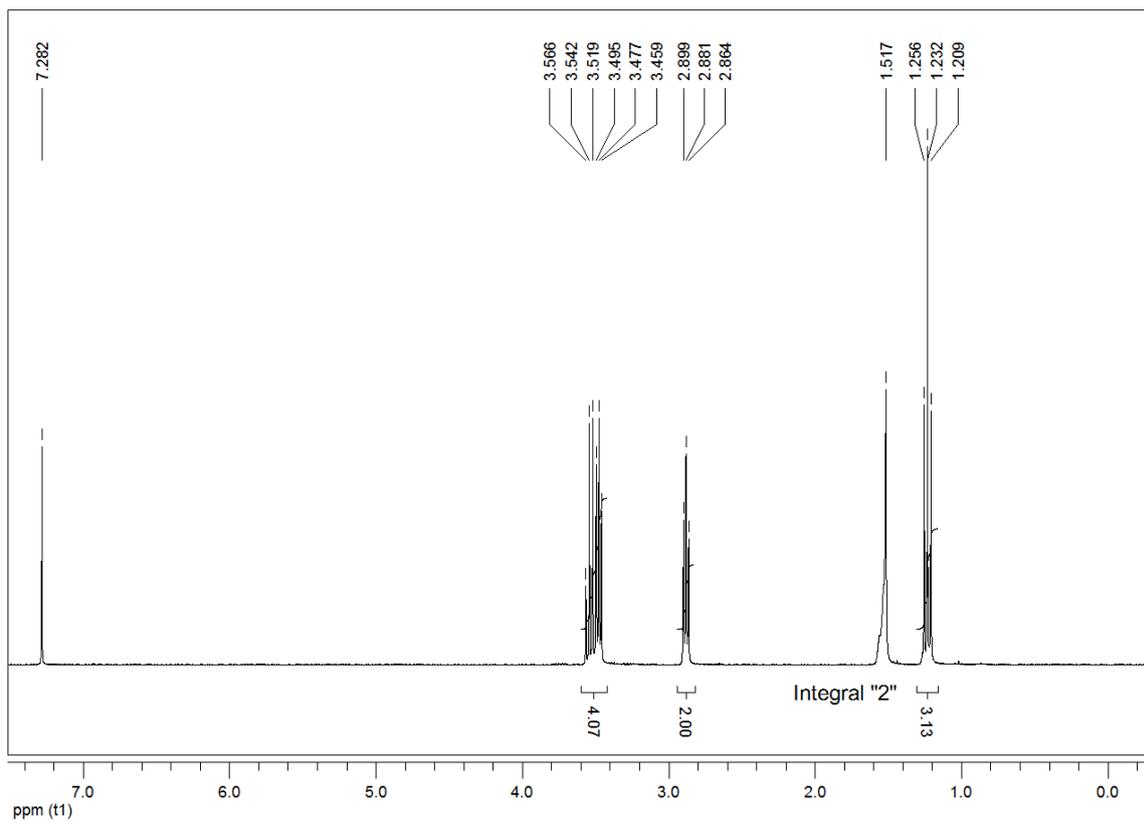
24.06.2013 17:39:26

MWSP1

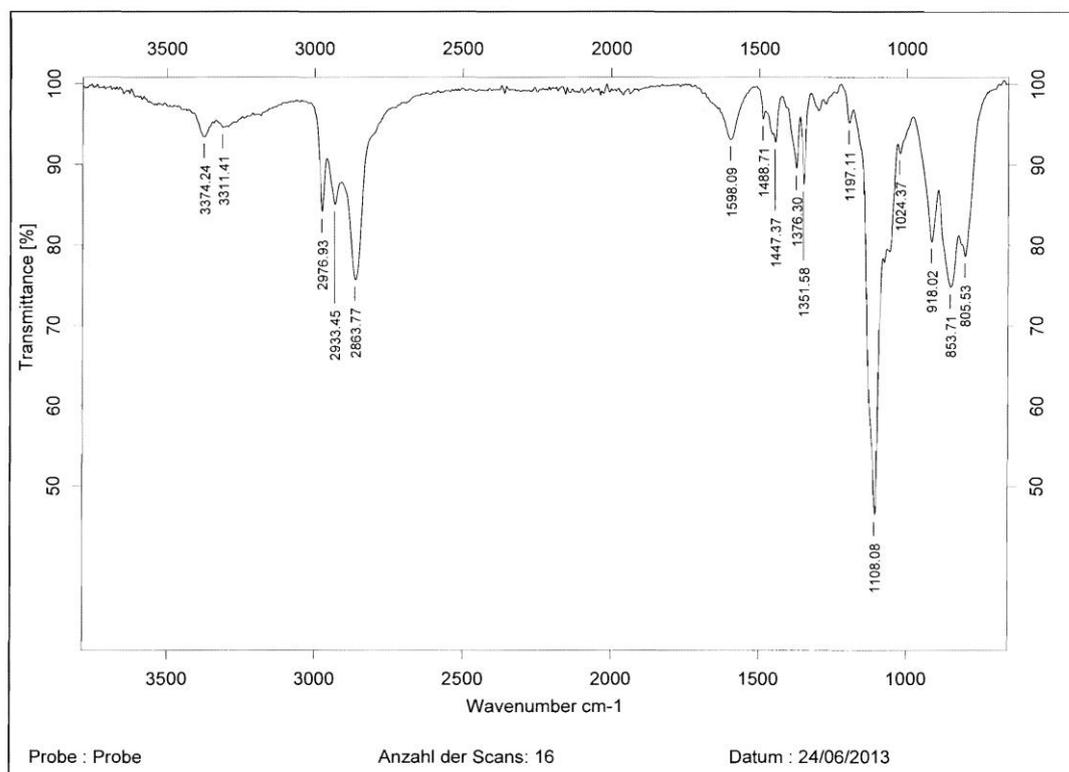
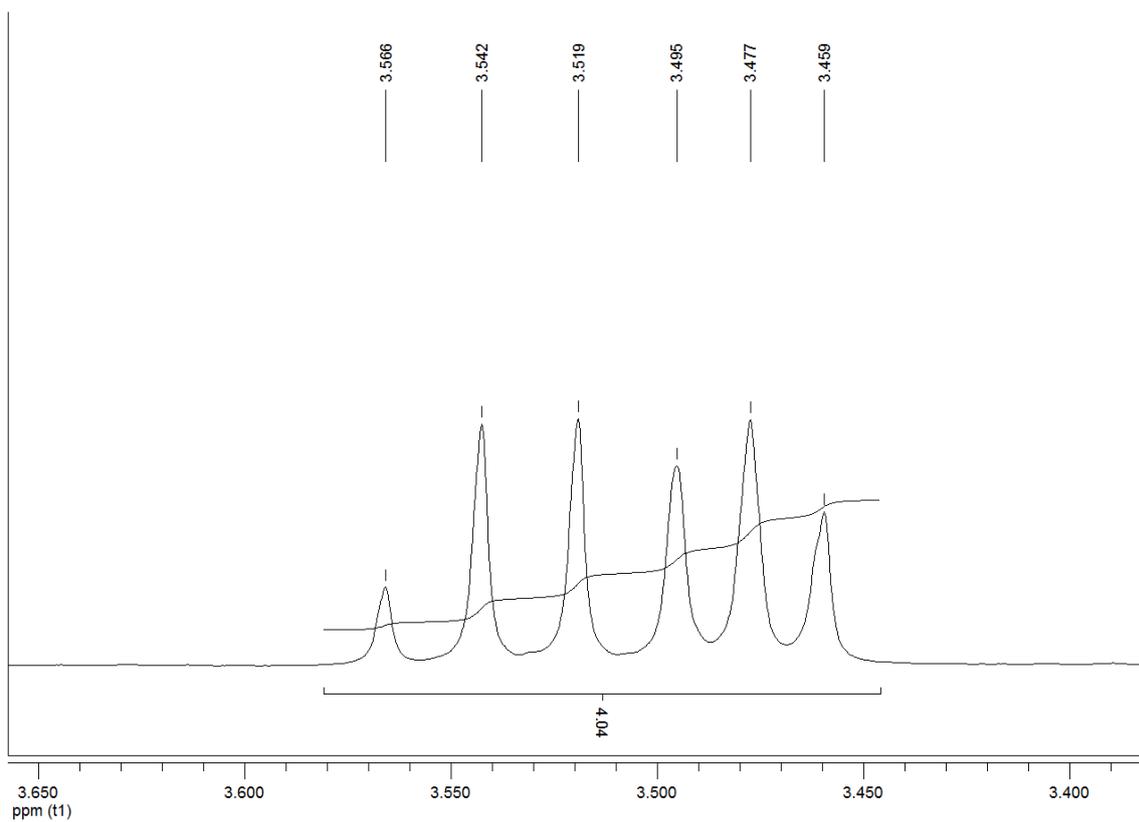
b26gc20 #1633-1672 RT: 16,51-16,83 AV: 40 NL: 2,88E4
 T: + c Full ms [50,00-1000,00]



Zu Aufgabe 6



Zu Aufgabe 6



Zu Aufgabe 6

