

Klausur zur Vorlesung Spektroskopie und Strukturaufklärung molekularer Verbindungen 2

Vorname: _____

Name: _____

Matrikelnummer: _____

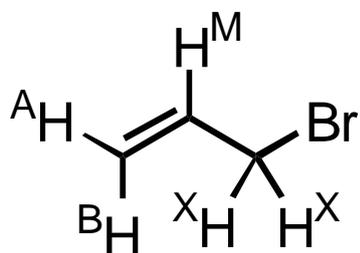
1,0	1,3	1,7	2,0	2,3	2,7	3,0	3,3	3,7	4,0	5,0
100-95	94-90	89-85	84-80	79-75	74-70	69-65	64-60	59-55	54-50	49-0

Ergebnis: Aufgabe 1: Punkte von 15 Punkten,
Aufgabe 2: Punkte von 20 Punkten,
Aufgabe 3: Punkte von 15 Punkten,
Aufgabe 4: Punkte von 25 Punkten,
Aufgabe 5: Punkte von 25 Punkten;

Summe: Punkte. Note: _____

Aufgabe 1 (15 Punkte)

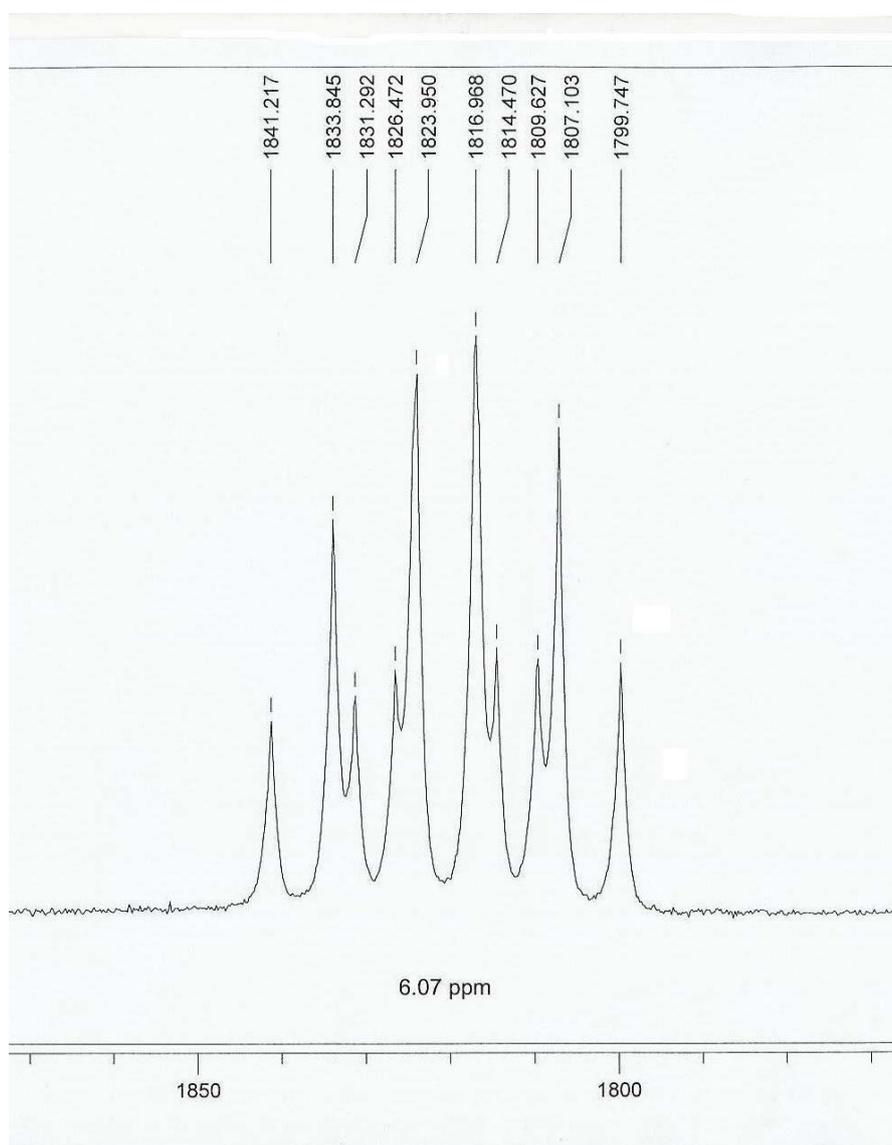
In der unten stehenden Abbildung sehen Sie einen Ausschnitt des ^1H -NMR-Spektrums von Allylbromid. Es handelt sich um das Signal des Protons 2-H, also H^{M} des ABMX_2 -Systems. Geben Sie nachstehend bitte die drei Kopplungskonstanten mit einer Hinterkommastelle Genauigkeit an.



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

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

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

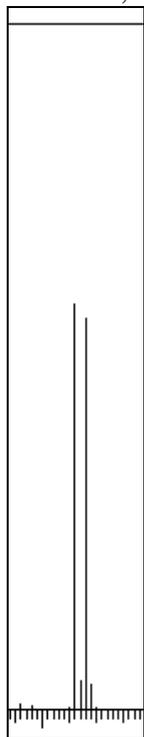


Aufgabe 2 (20 Punkte)

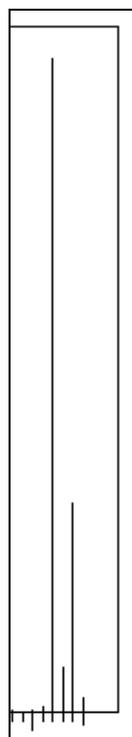
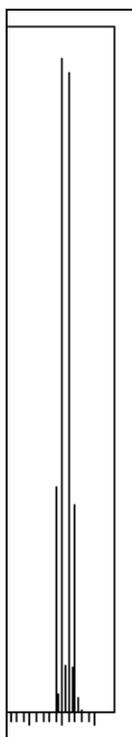
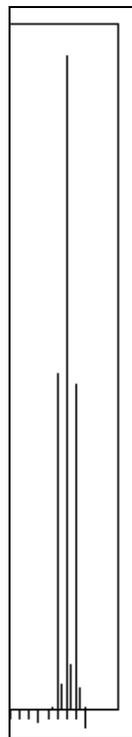
Skizzieren Sie bitte mit Lineal (Geodreieck) ein Triplet von Triplets mit ${}^3J_{ax,ax} = 8.0$ Hz und ${}^3J_{ax,eq} = 3.0$ Hz, wie es beispielsweise in Cyclohexanderivaten vorkommen kann. Wählen Sie dabei unbedingt den folgenden Maßstab: 8 Hz = 4 cm und 3 Hz = 1.5 cm. Geben Sie zusätzlich unterhalb 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.



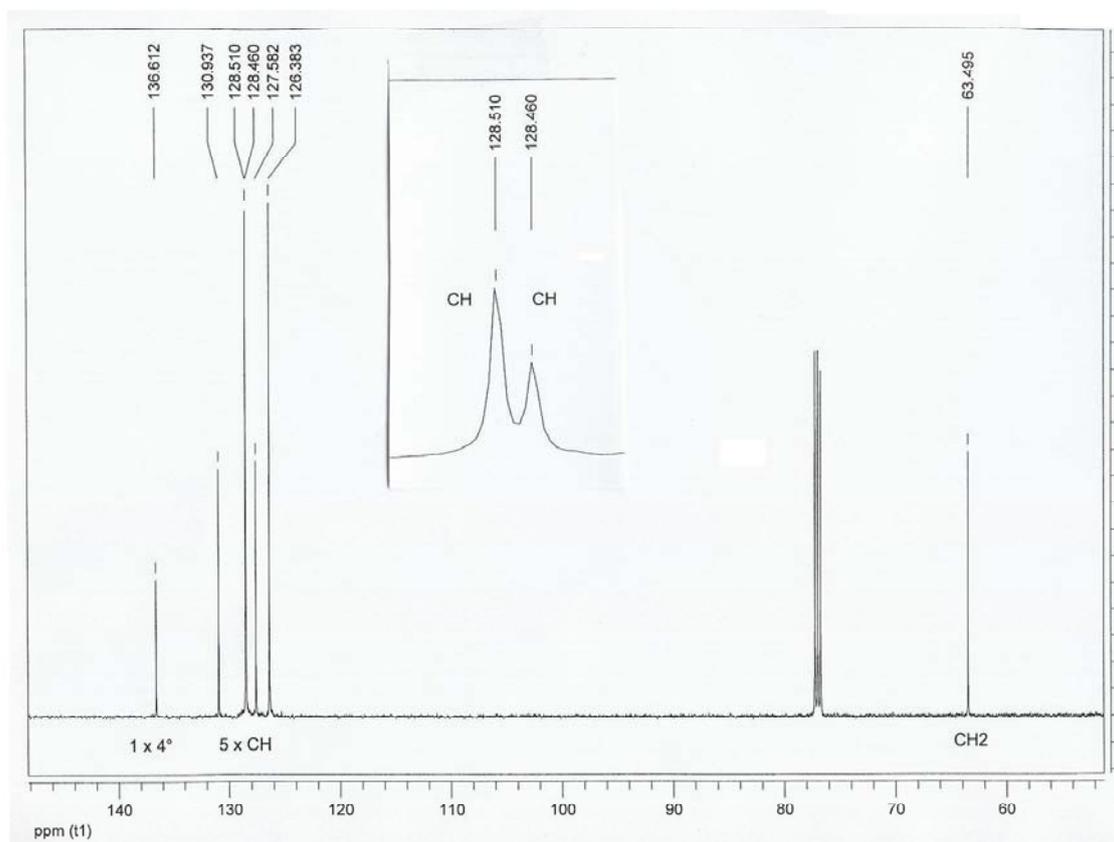
C_6H_5Br



Aufgabe 4 (25 Punkte)

Unten sehen Sie das $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR-Spektrum einer unbekanntten Verbindung mit Informationen zu den Phasen aus den DEPT-Spektren. Auf der nächsten Seite ist das ^1H -NMR-Spektrum (300 MHz) mit Aufspreizung abgebildet. Im IR-Spektrum (ohne Abbildung) ist ein saures Proton, aber keine Carbonylbande und keine Dreifachbindung zu sehen. Das Massenspektrum (ohne Abbildung) zeigt ein M^+ -Signal bei $m/z = 134$ (ohne Halogen- oder Schwefelmuster).

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

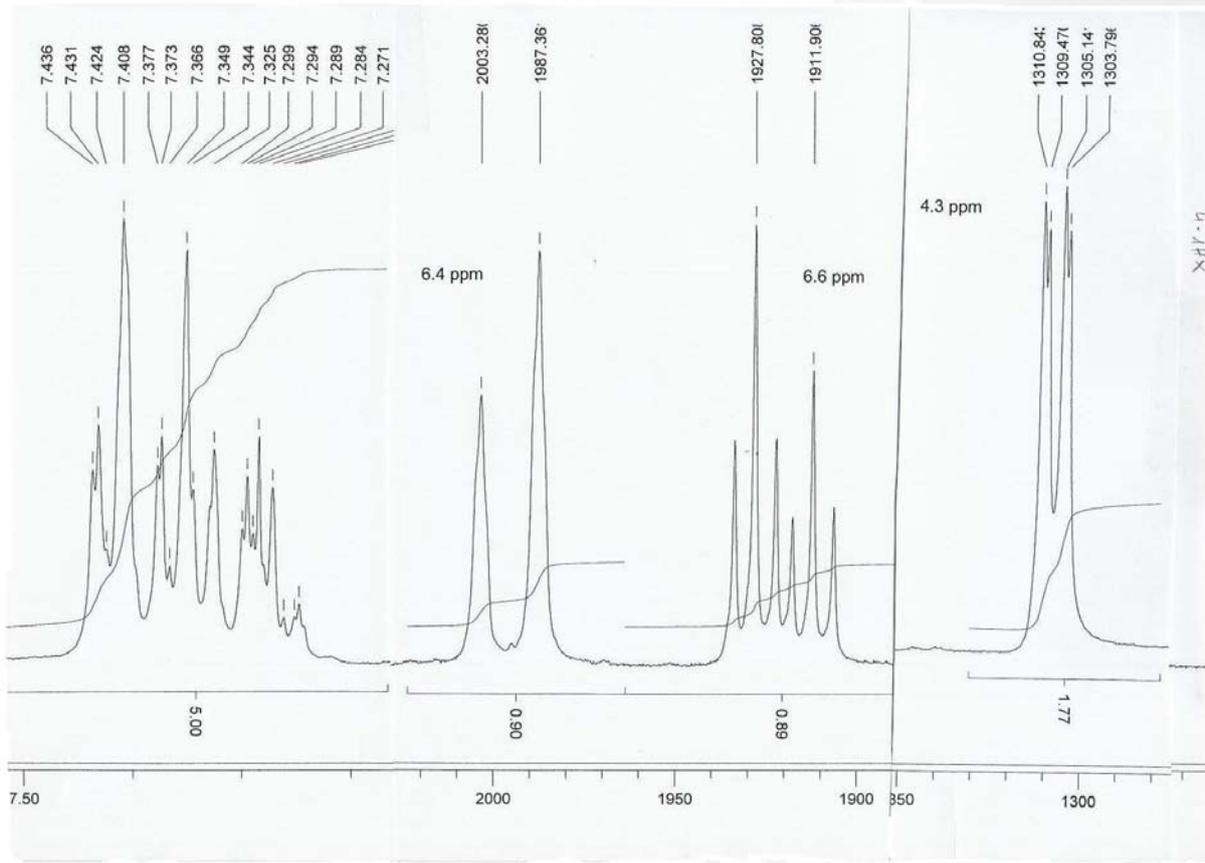
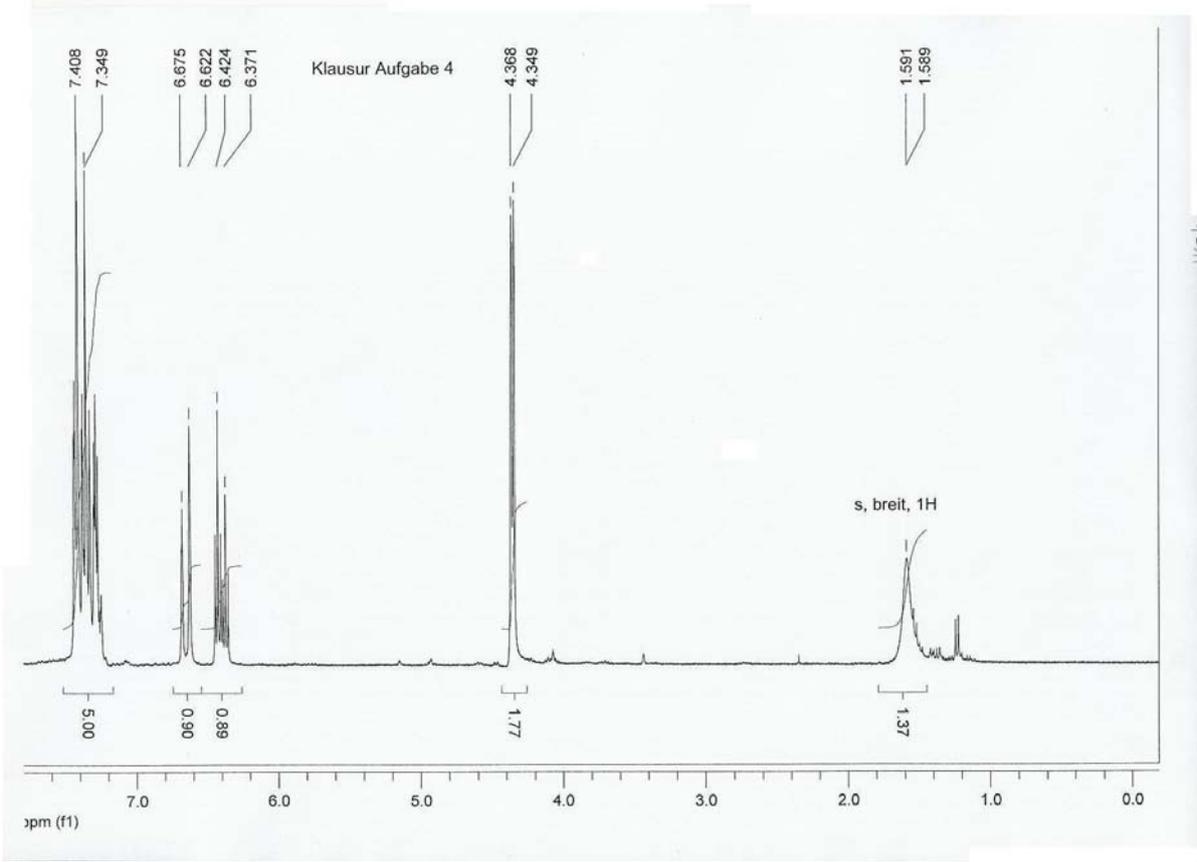


Im DEPT135 sind fünf CH-Signale zu sehen, zwei liegen sehr dicht zusammen (siehe Spreizung)

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 folgenden Seite sehen Sie das $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR-Spektrum einer unbekanntem Verbindung mit Informationen zu den Phasen aus den DEPT-Spektren. Ferner ist das ^1H -NMR-Spektrum (300 MHz) mit Aufspreizung abgebildet. Im IR-Spektrum (ohne Abbildung) ist ein Signal saurer Protonen, aber keine Carbonylbande und keine Dreifachbindung zu sehen. Das Massenspektrum (ohne Abbildung) zeigt ein M^+ -Signal bei $m/z = 177$ (ohne Halogen- oder Schwefelmuster).

Geben Sie hier **einen** Konstitutionsvorschlag an.

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!

