

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 20 Punkten,
Aufgabe 4: Punkte von 20 Punkten,
Aufgabe 5: Punkte von 25 Punkten;

Summe: Punkte. Note: _____

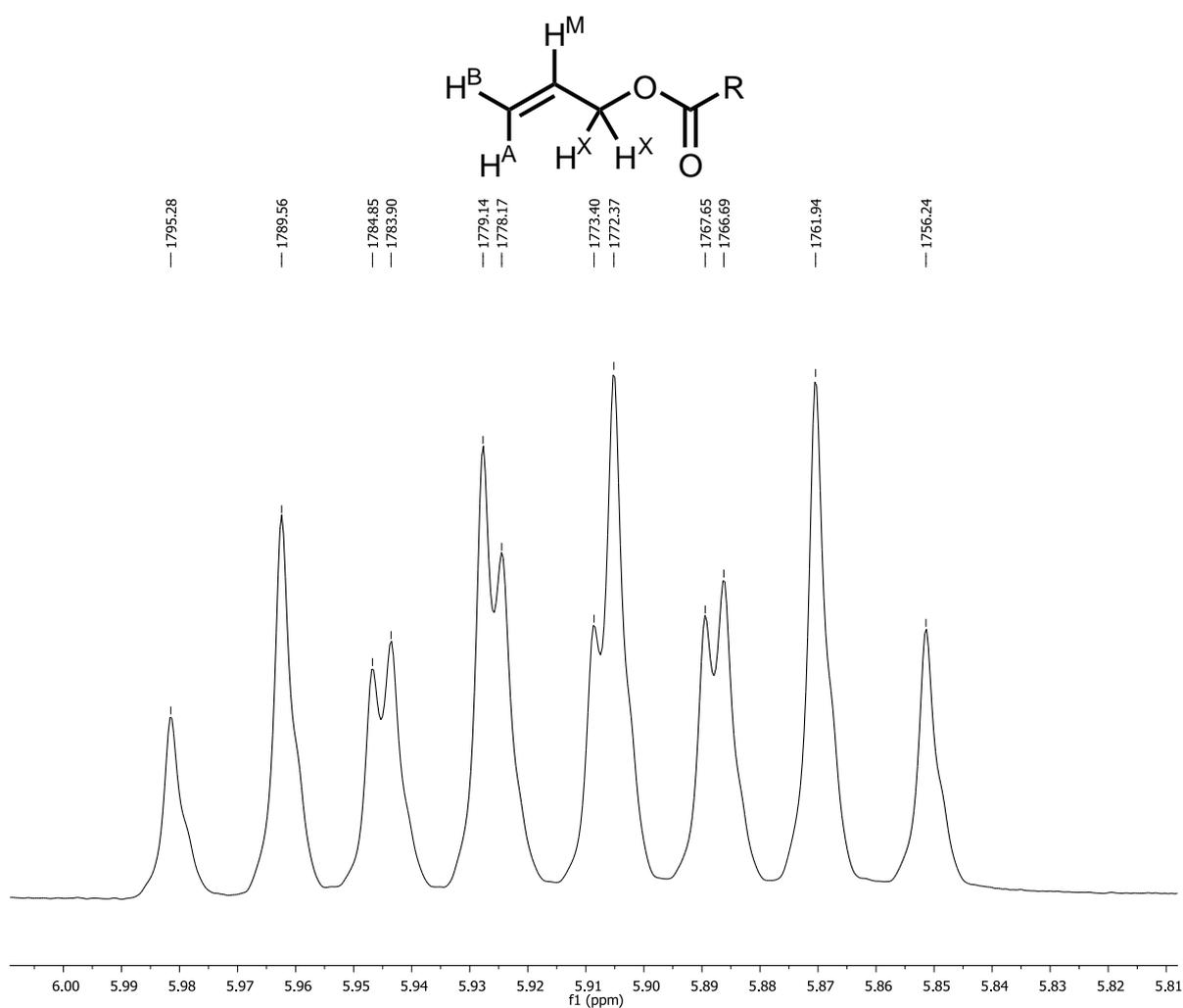
Aufgabe 1 (15 Punkte)

Unten ist ein Ausschnitt des $^1\text{H-NMR}$ -Spektrums eines Allylesters abgebildet. Es handelt sich um den M-Teil eines ABMX₂-Systems mit der Multiplizität "ddt". Bestimmen Sie bitte die folgenden Kopplungskonstanten (mit einer Genauigkeit von ± 0.1 Hz):

$${}^3J_{AM} = \quad \text{Hz (trans),}$$

$${}^3J_{BM} = \quad \text{Hz (cis),}$$

$${}^3J_{MX} = \quad \text{Hz.}$$



Bitte geben Sie bei den folgenden vier Aufgaben nur einen vollständigen Strukturvorschlag an. Der Lösungsweg interessiert nicht.

Aufgabe 2 (20 Punkte)

Auf den Seiten S1 bis S3 des Spektrenanhanges sehen Sie das ^1H -NMR-, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR-, DEPT135-NMR- und IR-Spektrum sowie das Massenspektrum einer unbekanntem Verbindung. Bestimmen Sie die Konstitution der Verbindung.

Aufgabe 3 (20 Punkte)

Auf den Seiten S4 bis S6 des Spektrenanhanges sehen Sie das IR-Spektrum, das Massenspektrum sowie das ^1H -, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ - und DEPT135-NMR-Spektrum einer unbekanntem Verbindung. Bestimmen Sie die Konstitution der Verbindung.

Aufgabe 4 (20 Punkte)

Auf den Seiten S7 bis S9 des Spektrenanhanges sehen Sie das IR-Spektrum, das Massenspektrum sowie das ^1H -, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ - und DEPT135-NMR-Spektrum einer unbekanntem Verbindung. Bestimmen Sie die Konstitution der Verbindung.

Aufgabe 5 (25 Punkte)

(1) Auf den Seiten S19 bis S13 des Spektrenanhanges sehen Sie das IR-Spektrum, das Massenspektrum sowie das ^1H -, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ - und DEPT135-NMR-Spektrum einer unbekanntenen Verbindung. Bestimmen Sie die Konstitution der Verbindung.

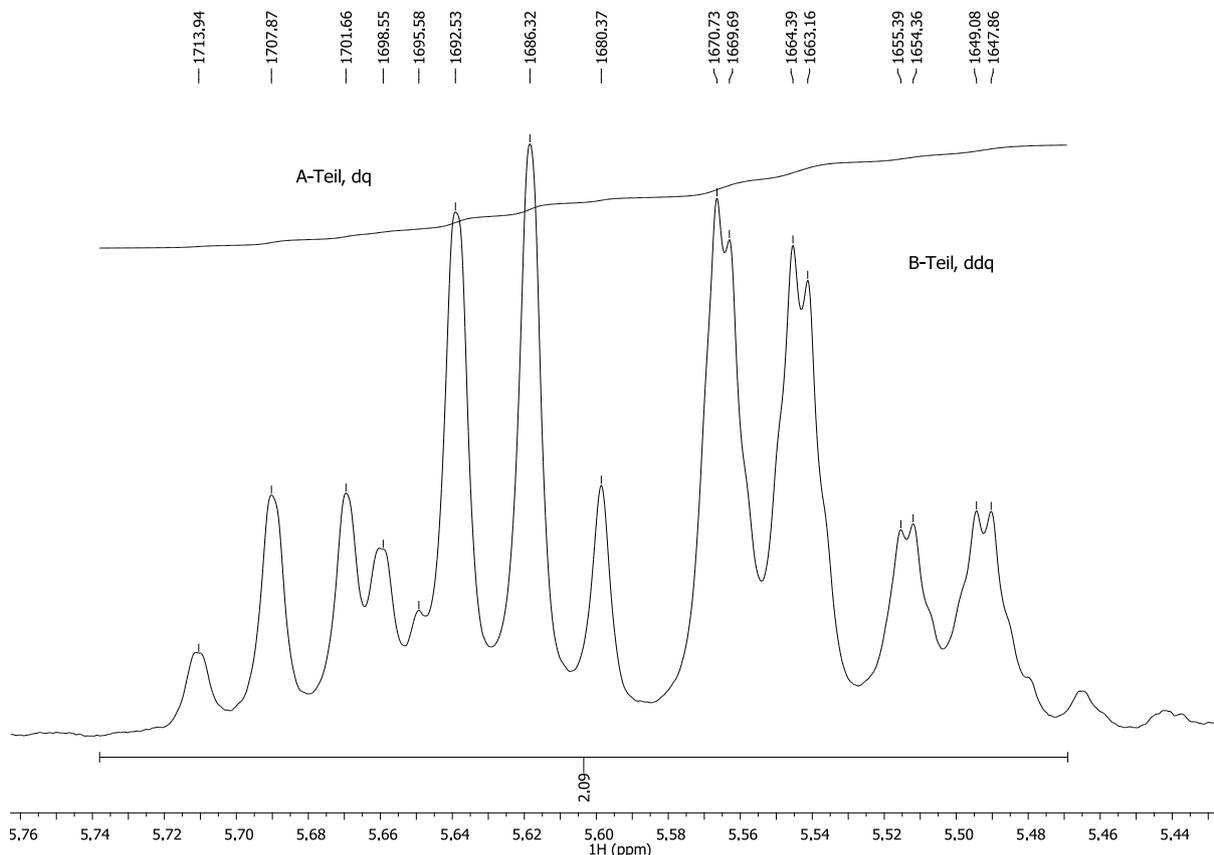
(2) Die olefinischen Protonen der Verbindung bilden den AB-Teil eines ABMX_3 -Systems zwischen 5.45 und 5.75 ppm. Der A-Teil koppelt neben der J_{AB} als Quartett mit $^3J_{\text{AX}} = 6.1 \text{ Hz}$ und der B-Teil neben der J_{AB} als dq mit $^3J_{\text{AM}} = 6.3 \text{ Hz}$ und $^4J_{\text{AX}} = 1.0 \text{ Hz}$, wobei letztere Kopplung nicht vollständig spektral aufgelöst ist, d.h. es sieht aus wie ein "ddd".

Entnehmen Sie dem Spektrum die Kopplungskonstante $^3J_{\text{AB}}$ ($\pm 0.1 \text{ Hz}$) und geben Sie an, ob die Konfiguration des Alkens *cis* (Z) oder *trans* (E):

$$^3J_{\text{AB}} = \quad \text{Hz},$$

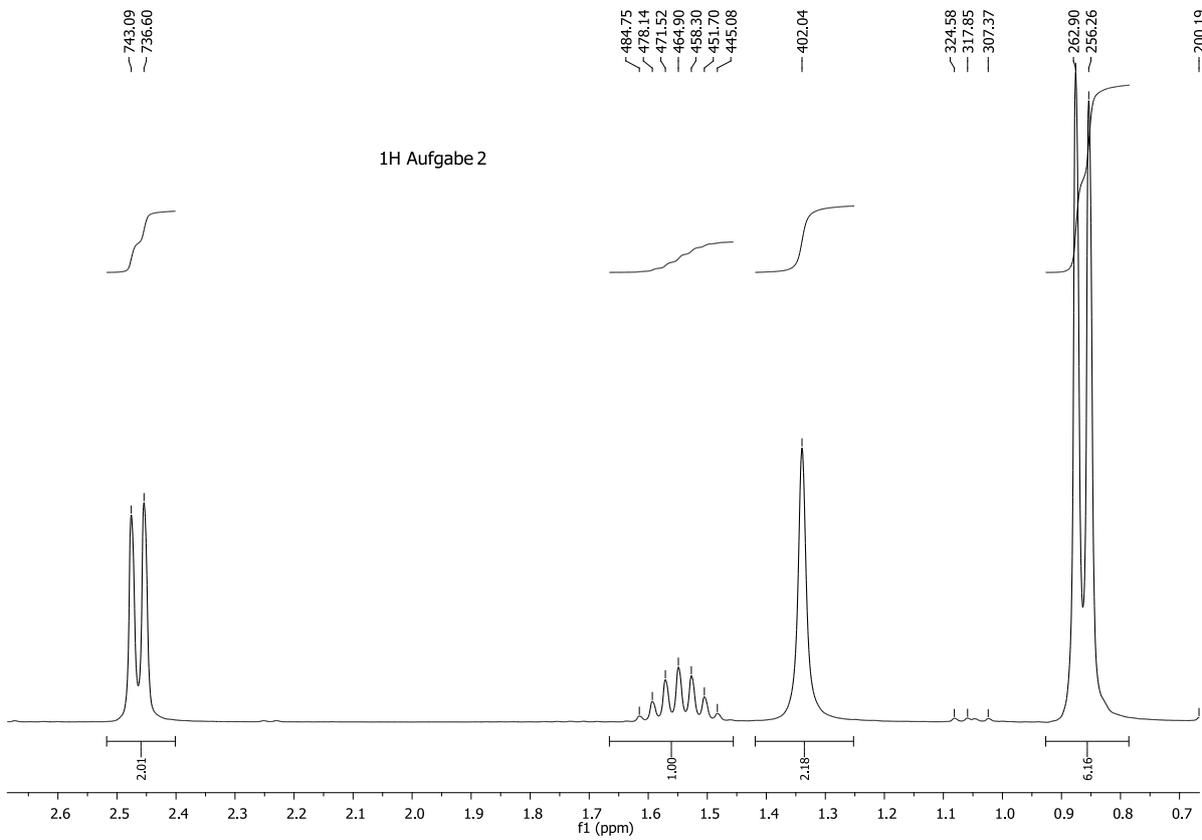
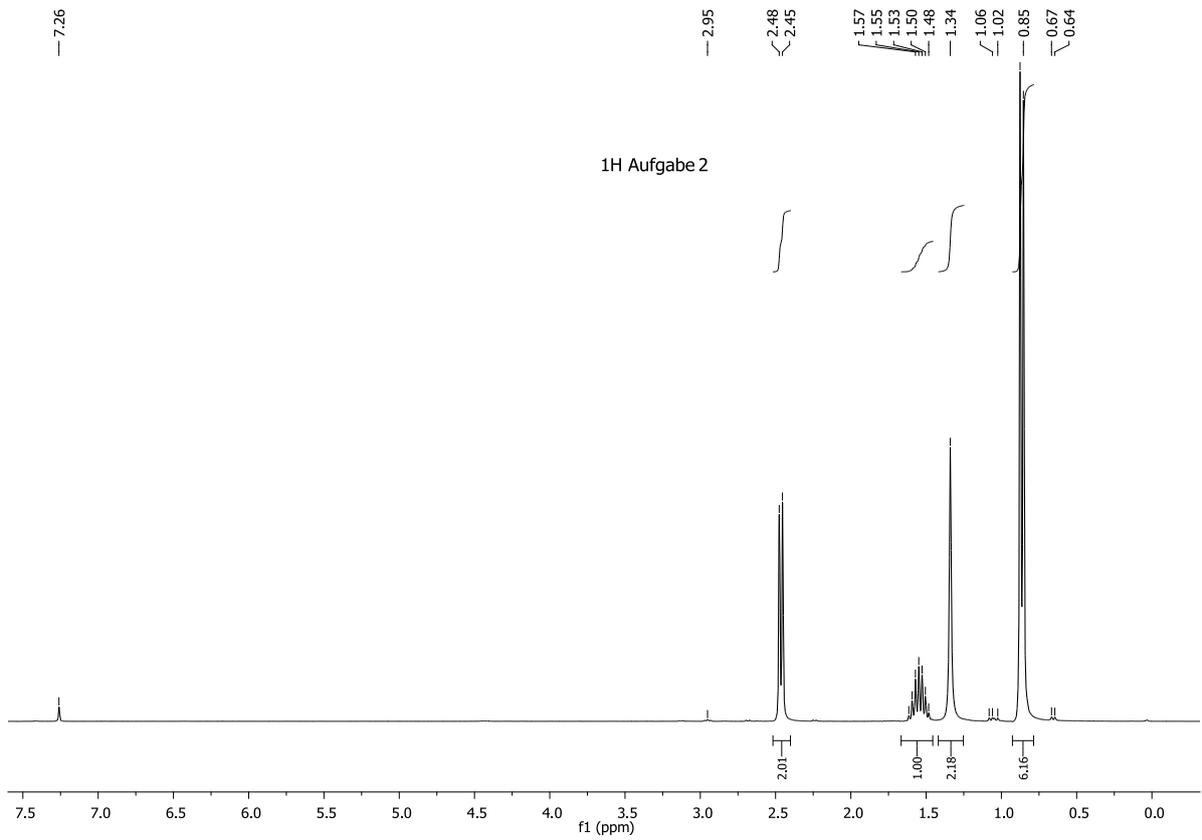
cis oder

trans (zutreffendes bitte ankreuzen).

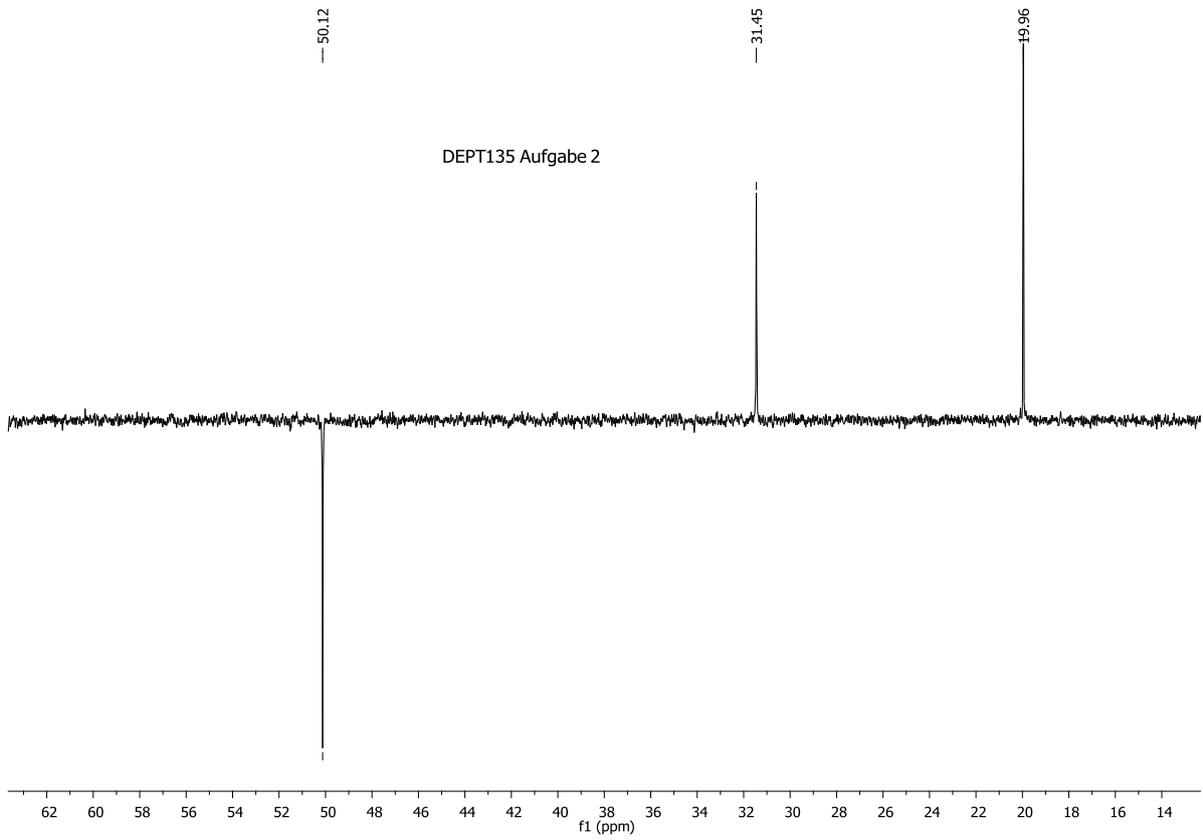
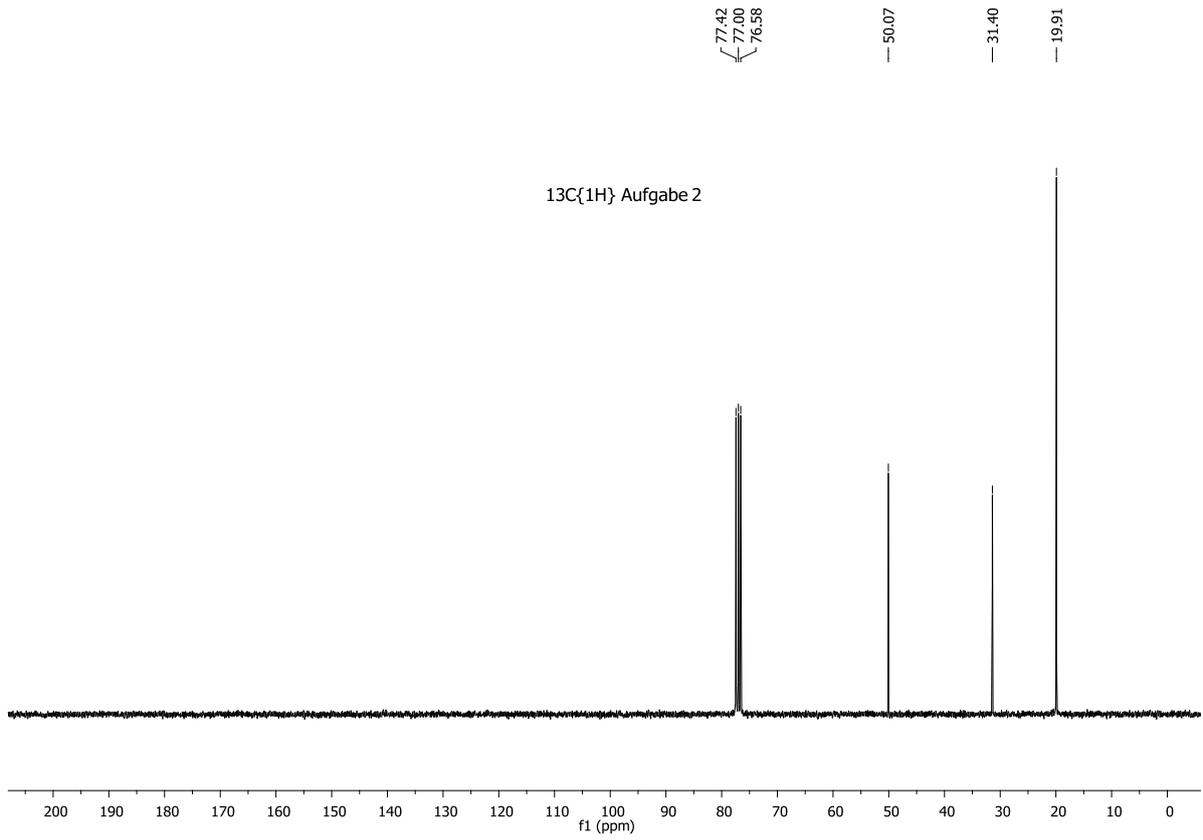


Spektrenanhang

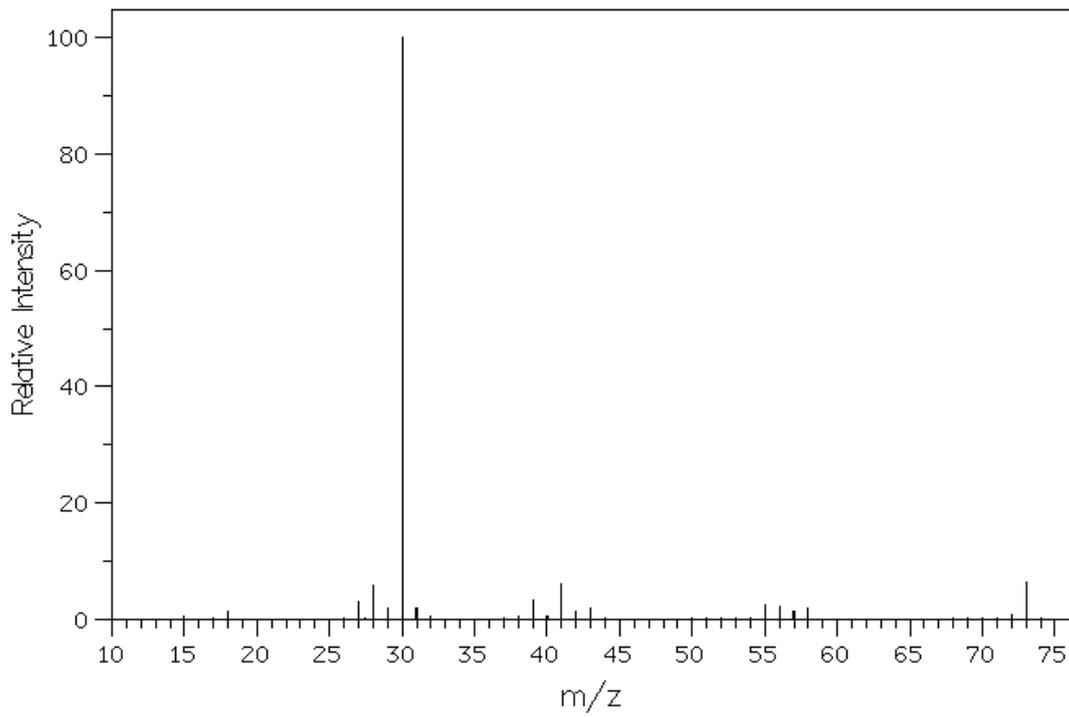
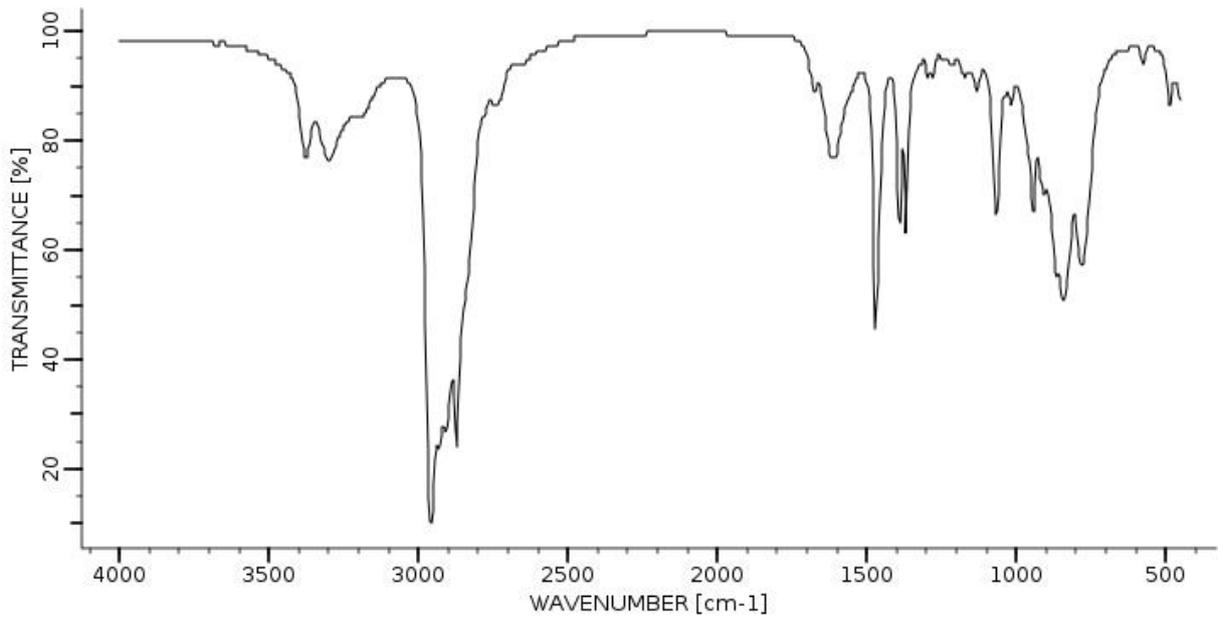
Spektren für Aufgabe 2



Spektrenanhang

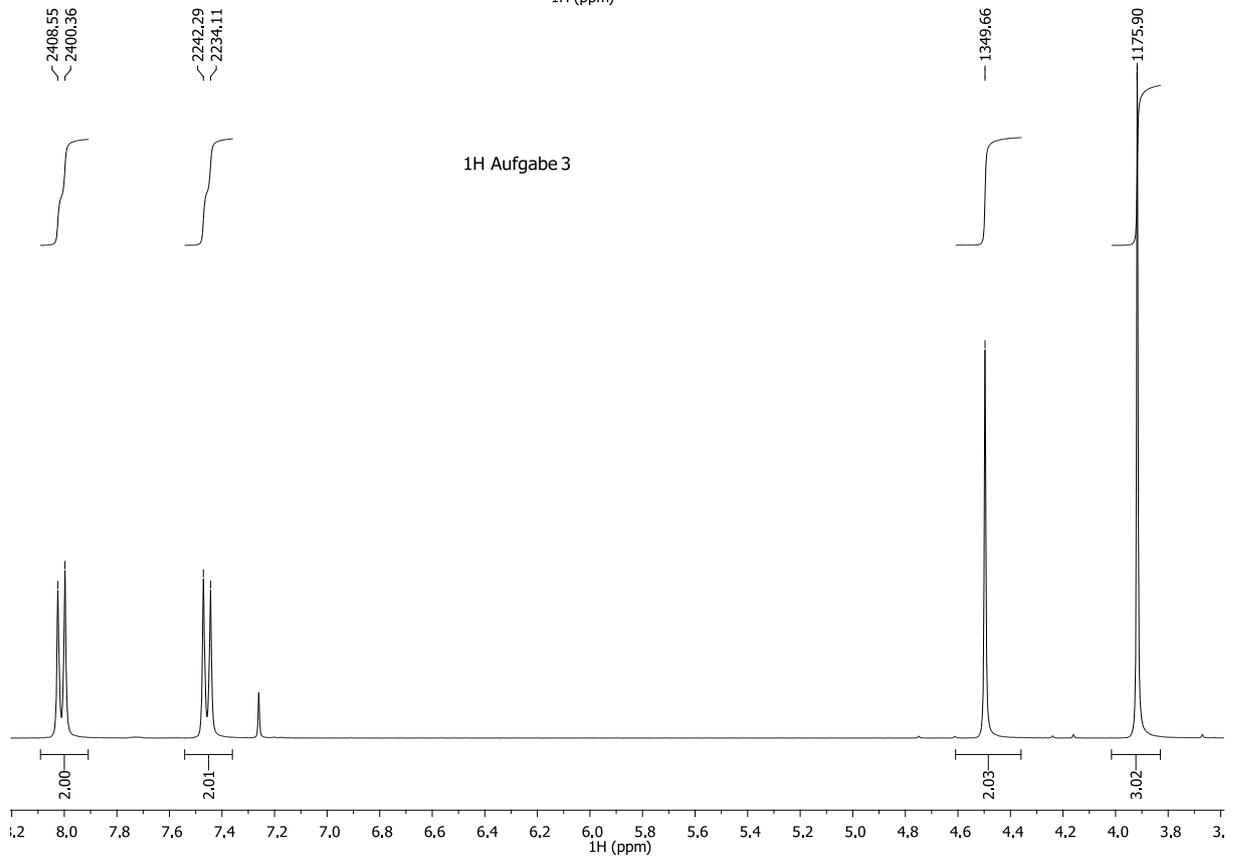
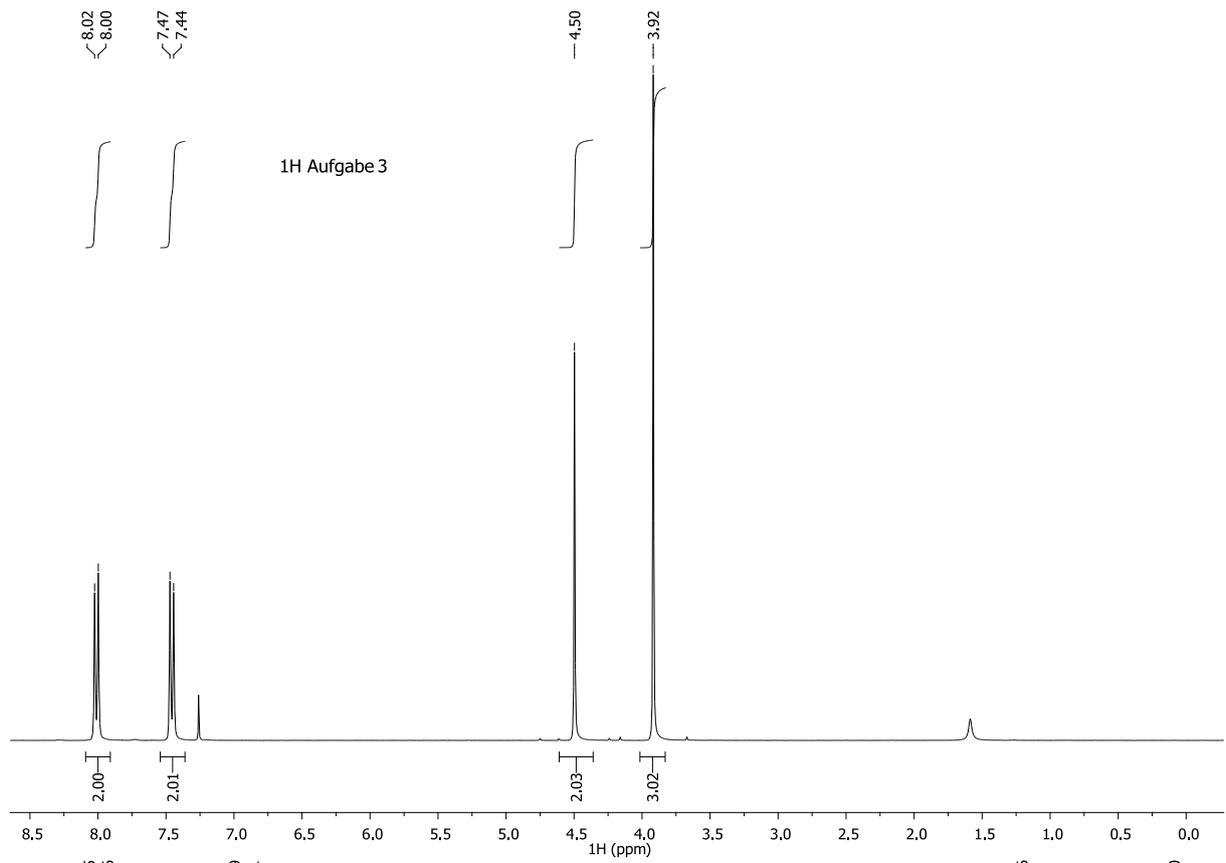


Spektrenanhang

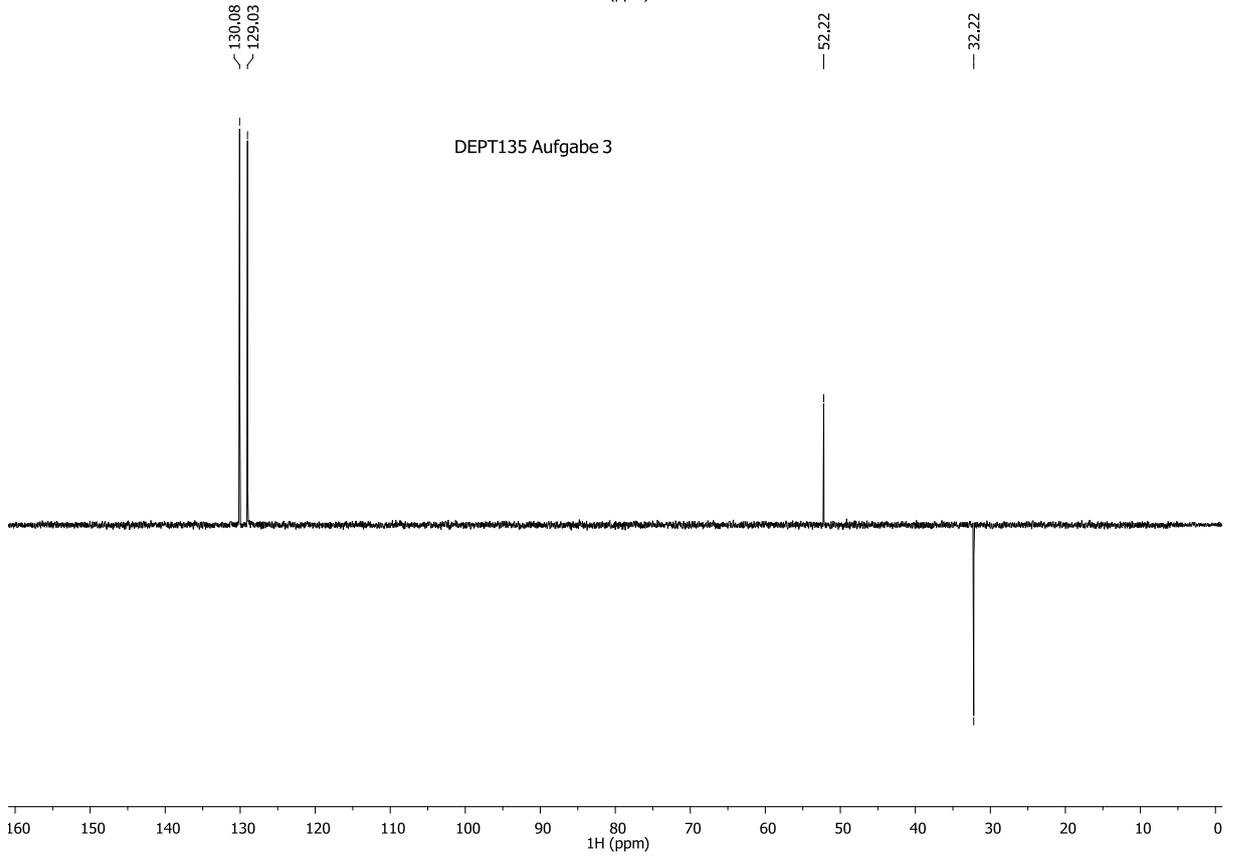
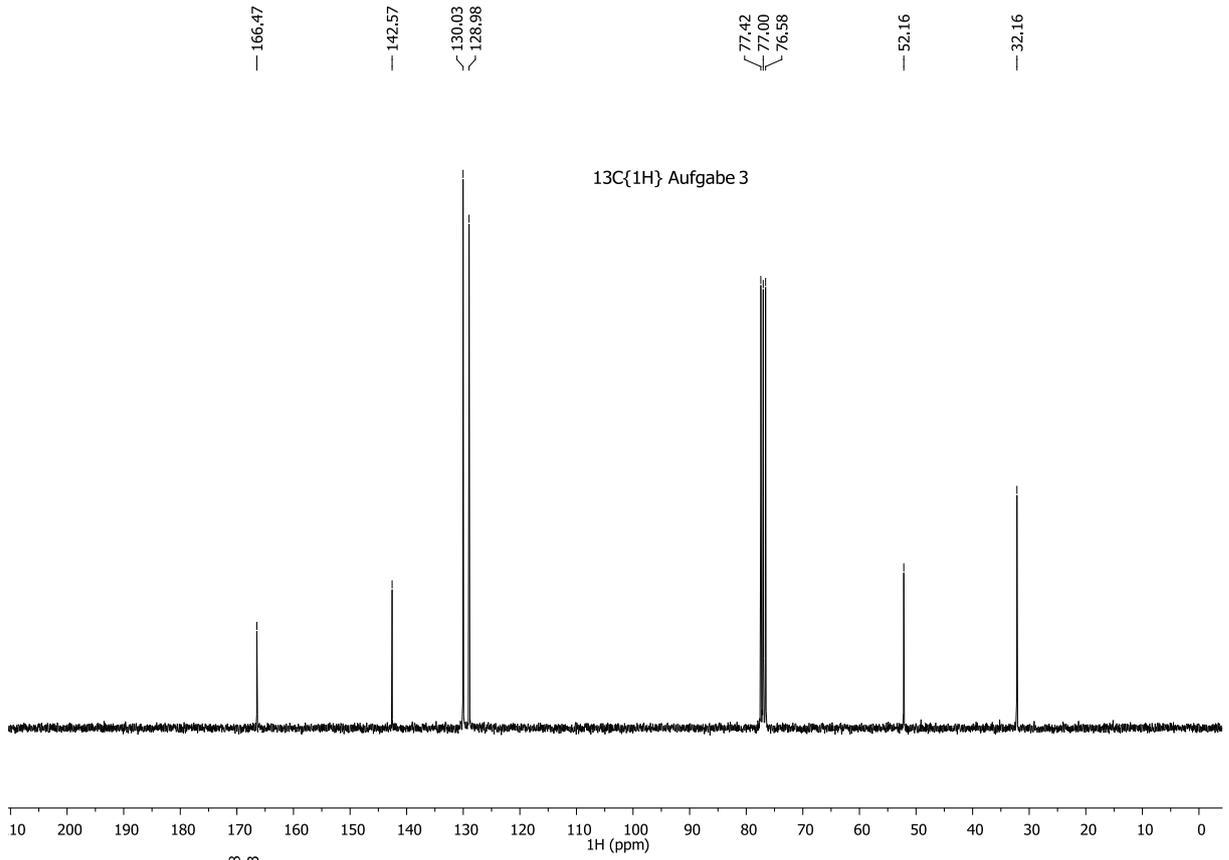


Spektrenanhang

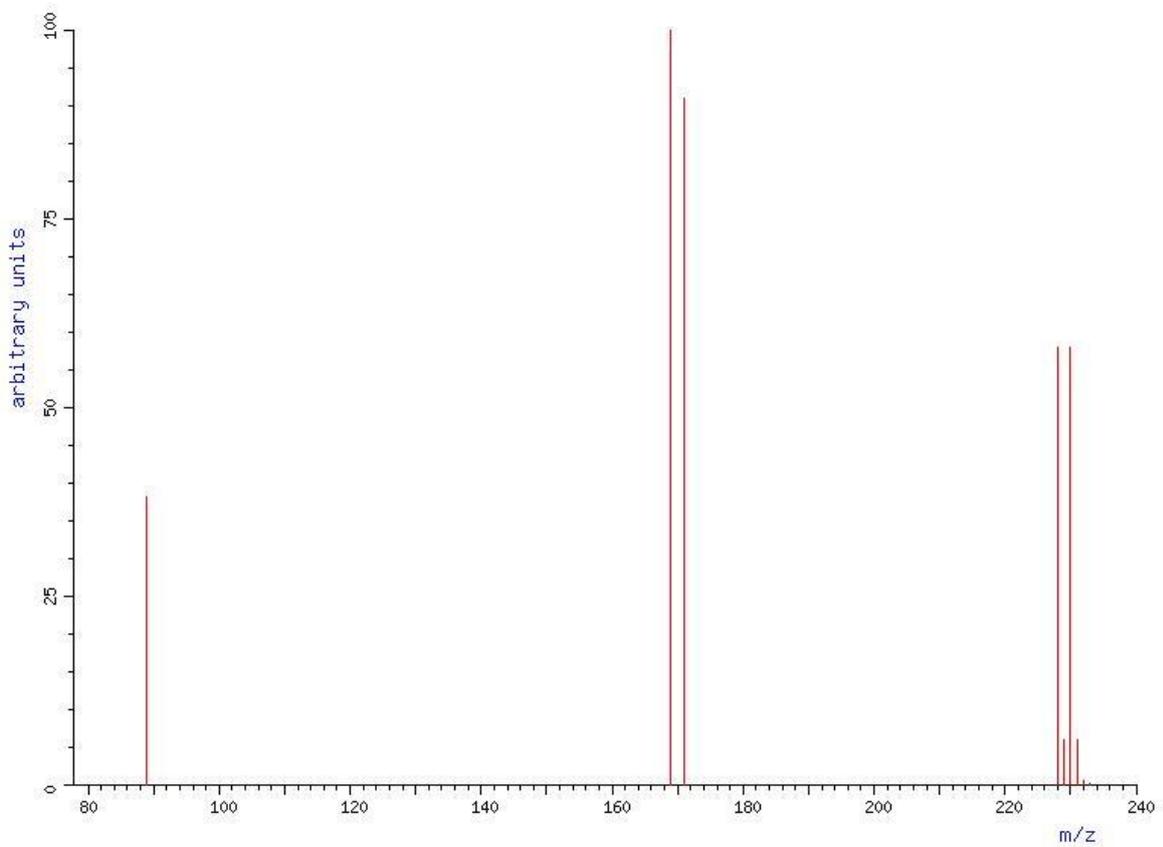
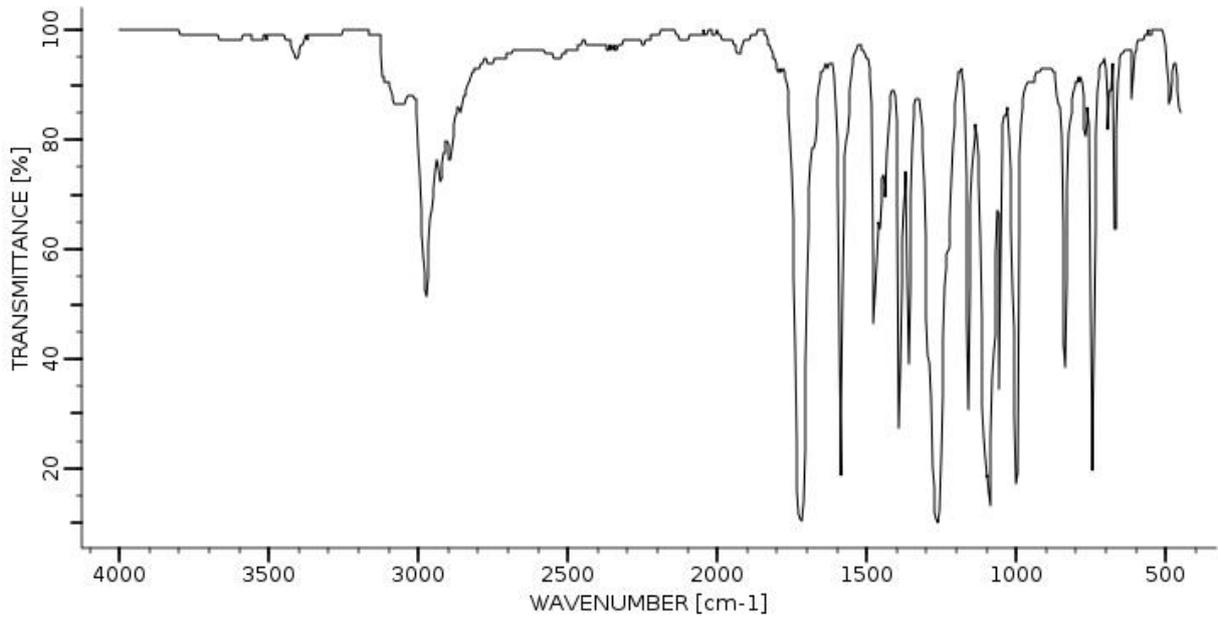
Spektren für Aufgabe 3



Spektrenanhang

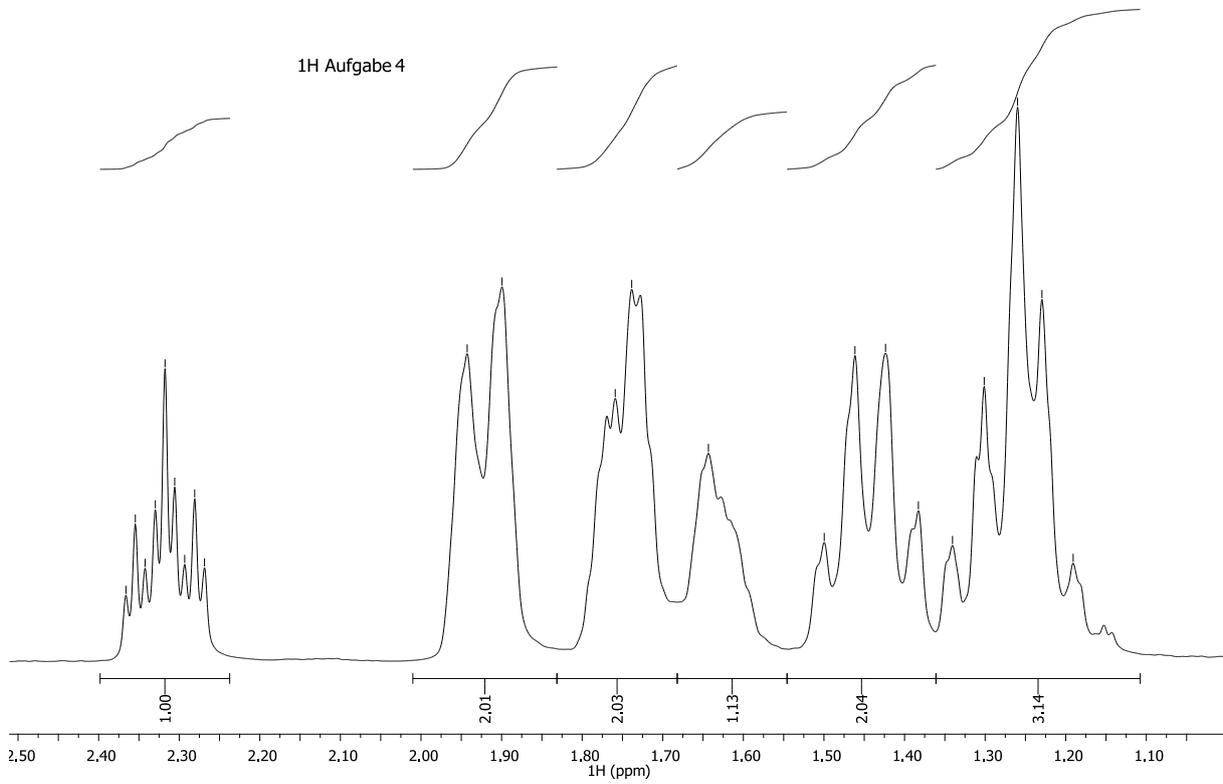
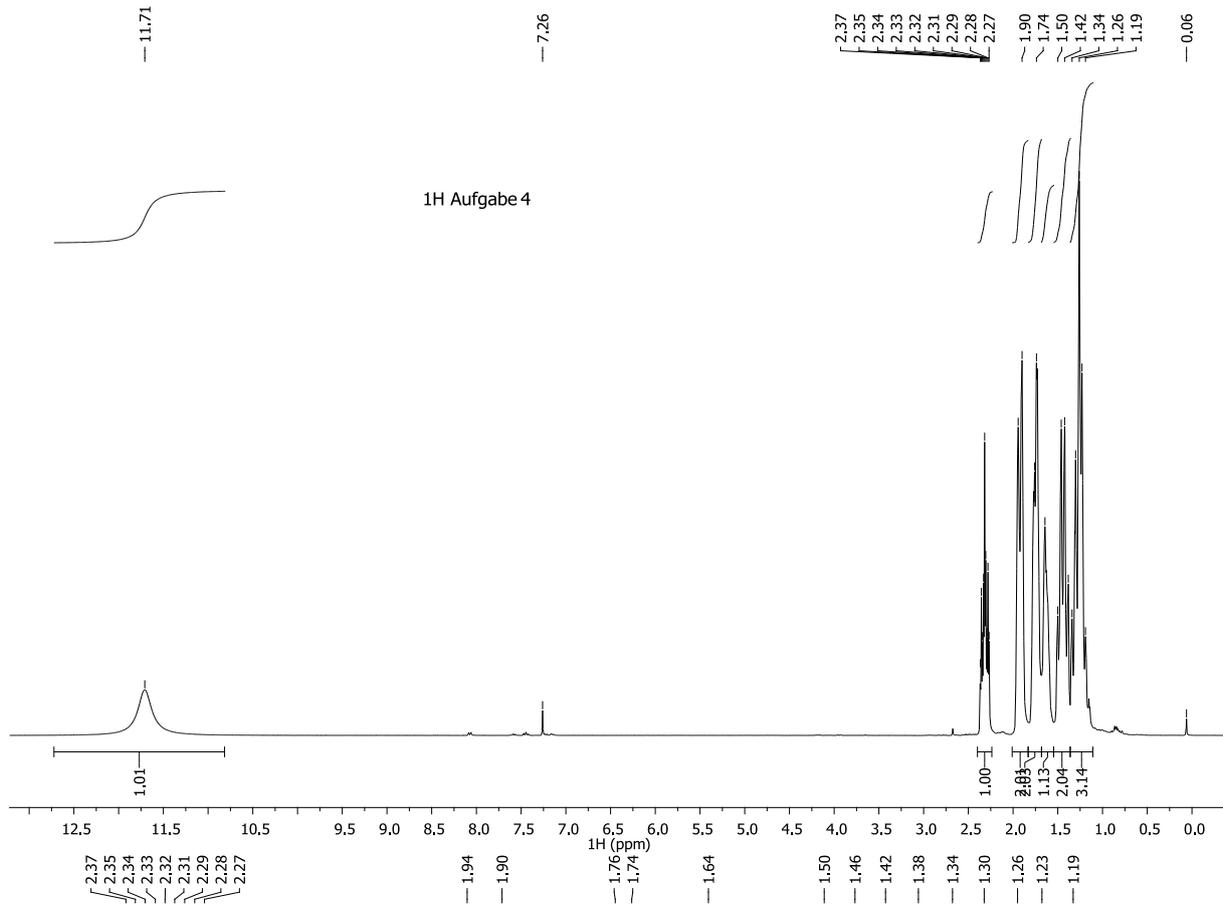


Spektrenanhang

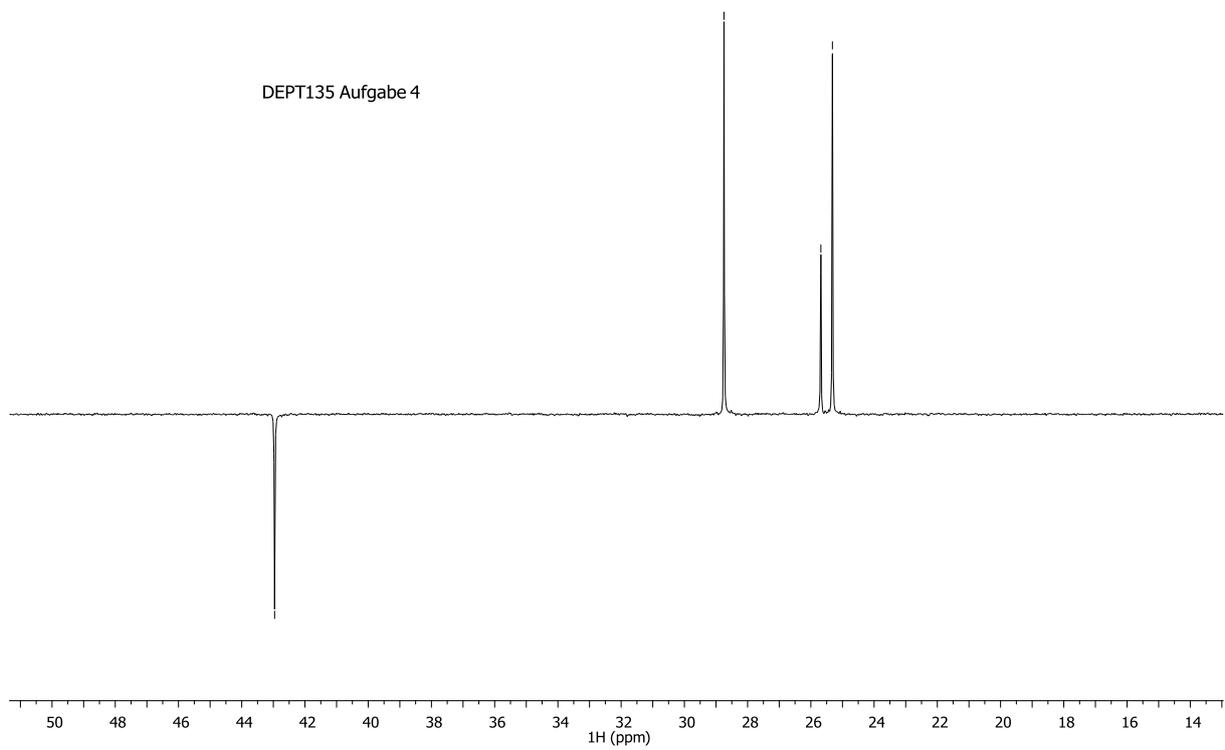
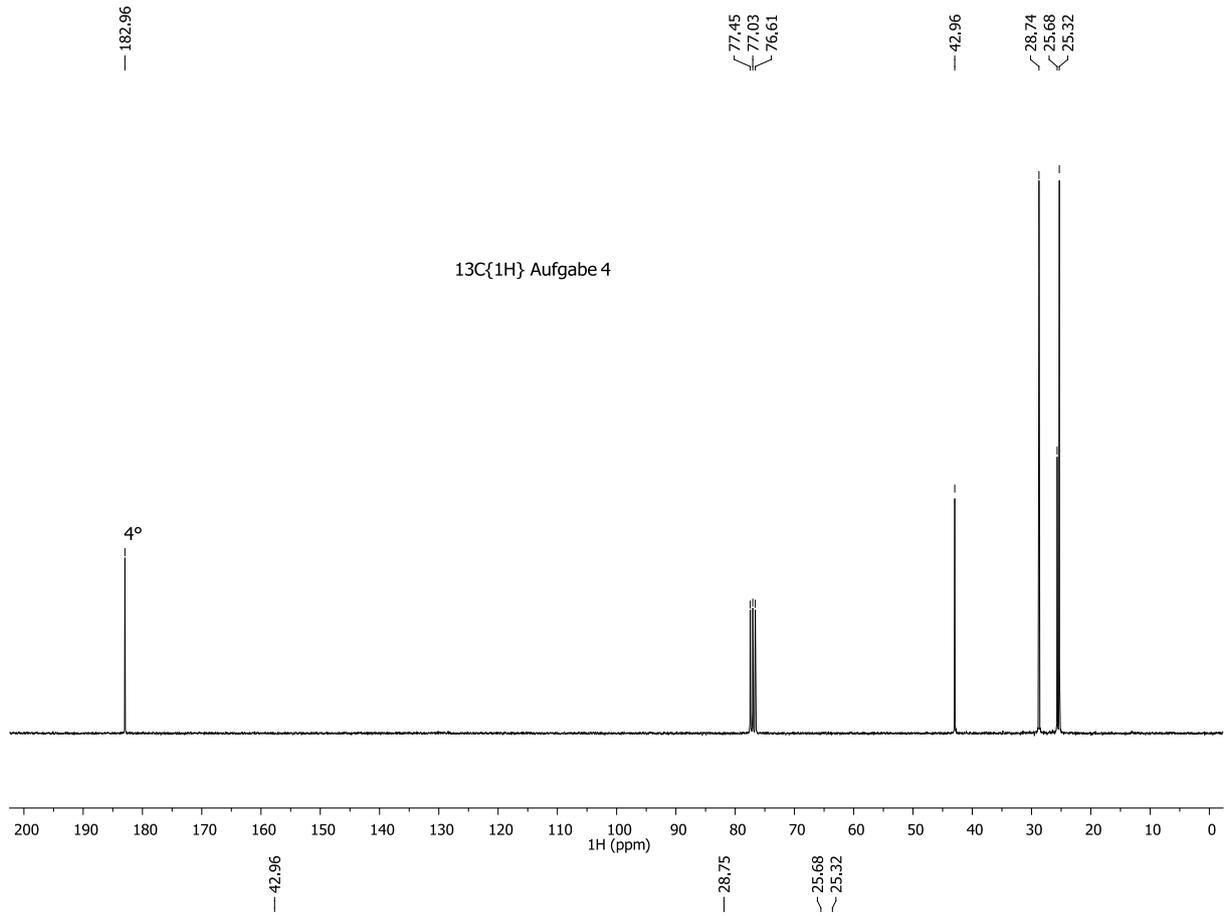


Spektrenanhang

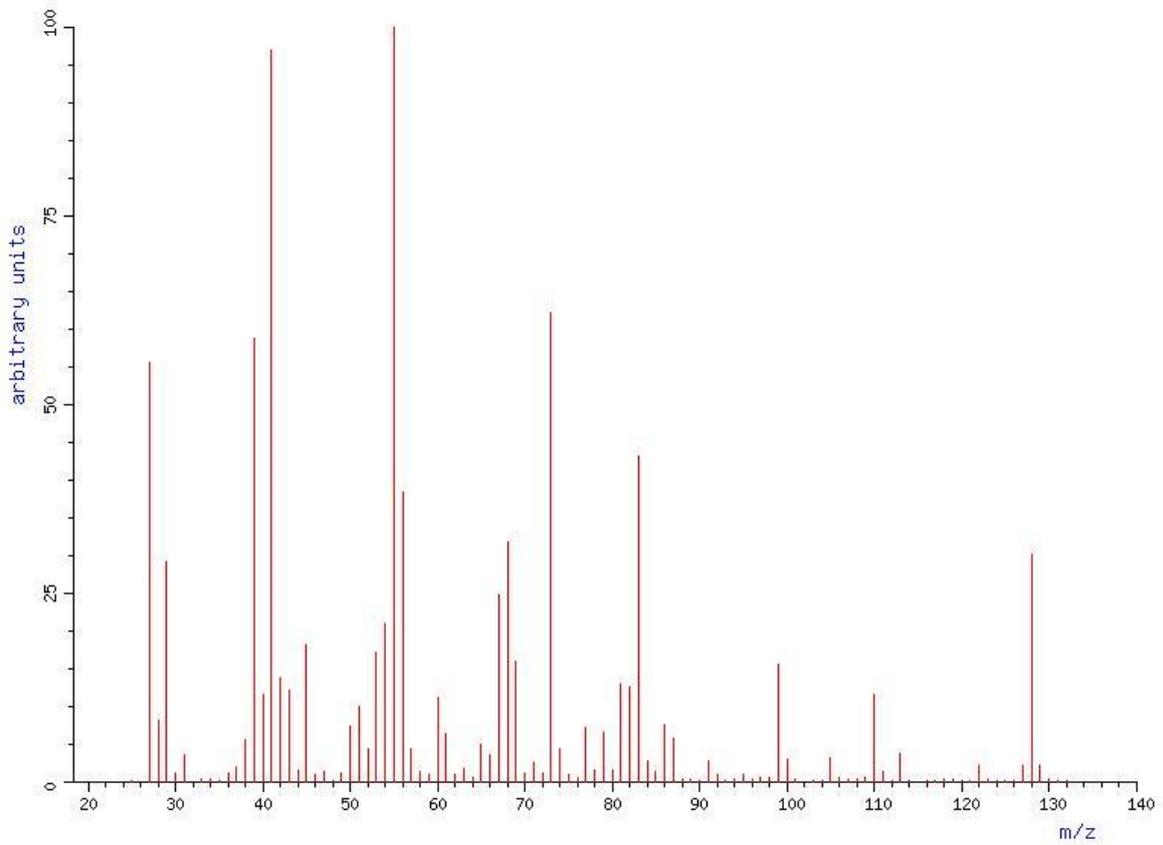
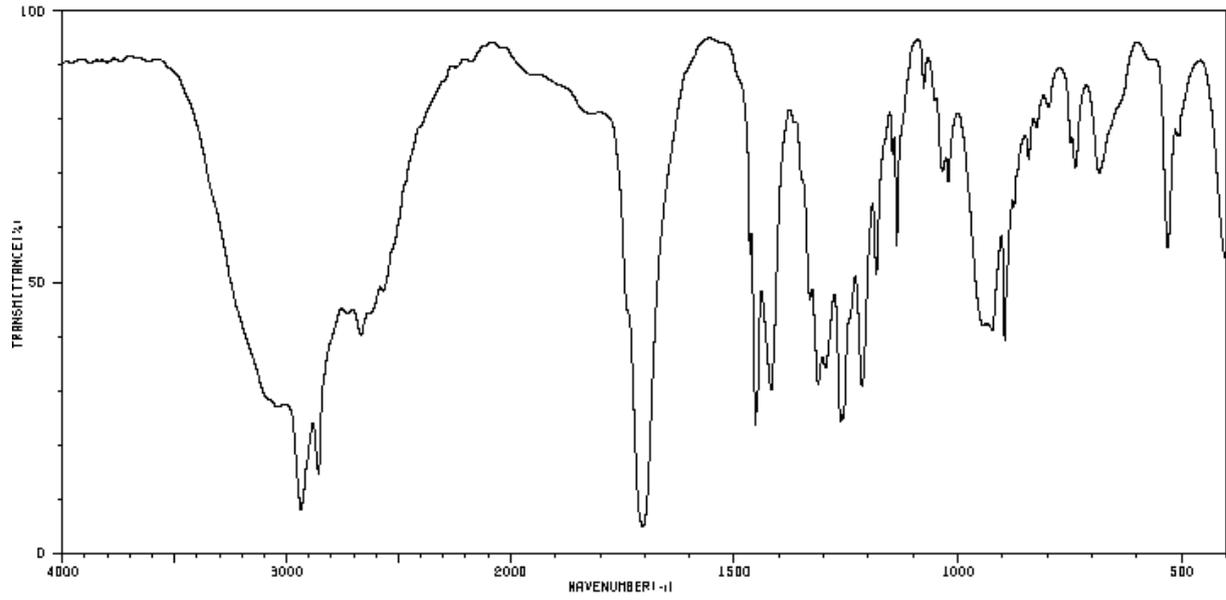
Spektren für Aufgabe 4



Spektrenanhang

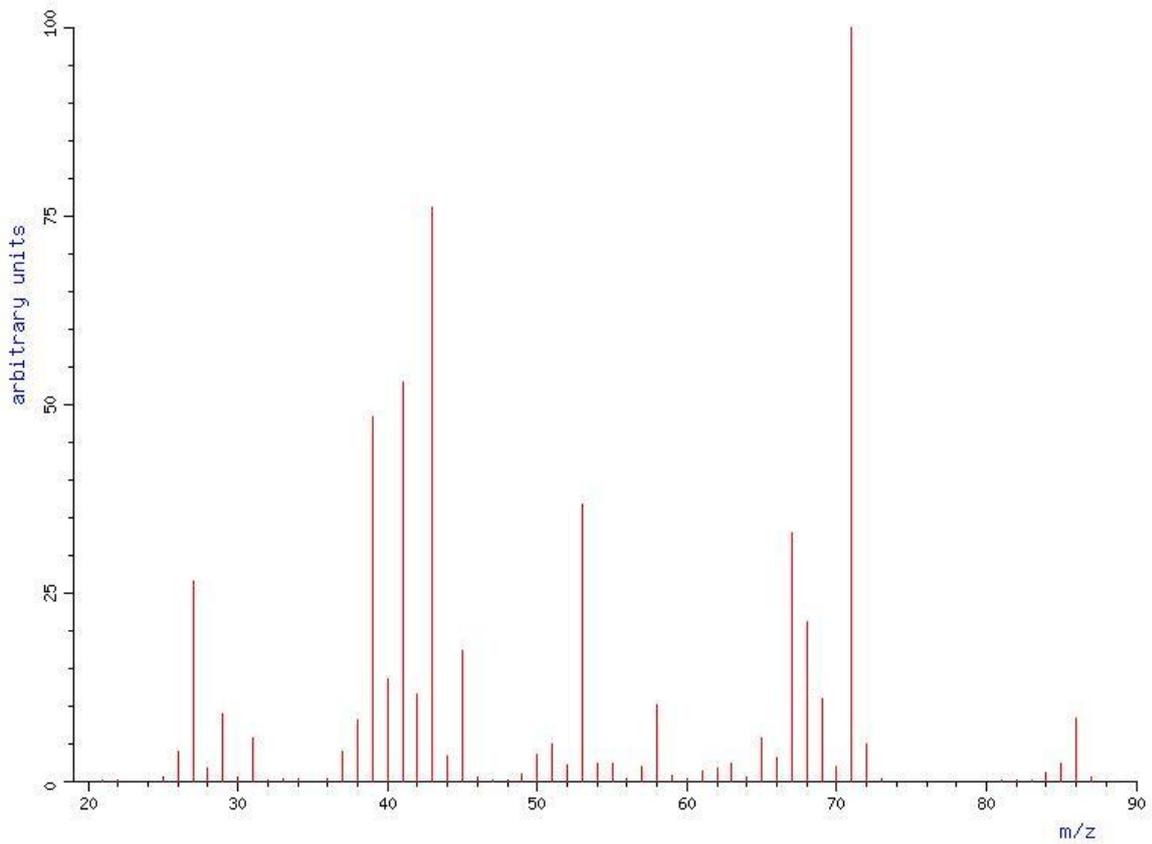
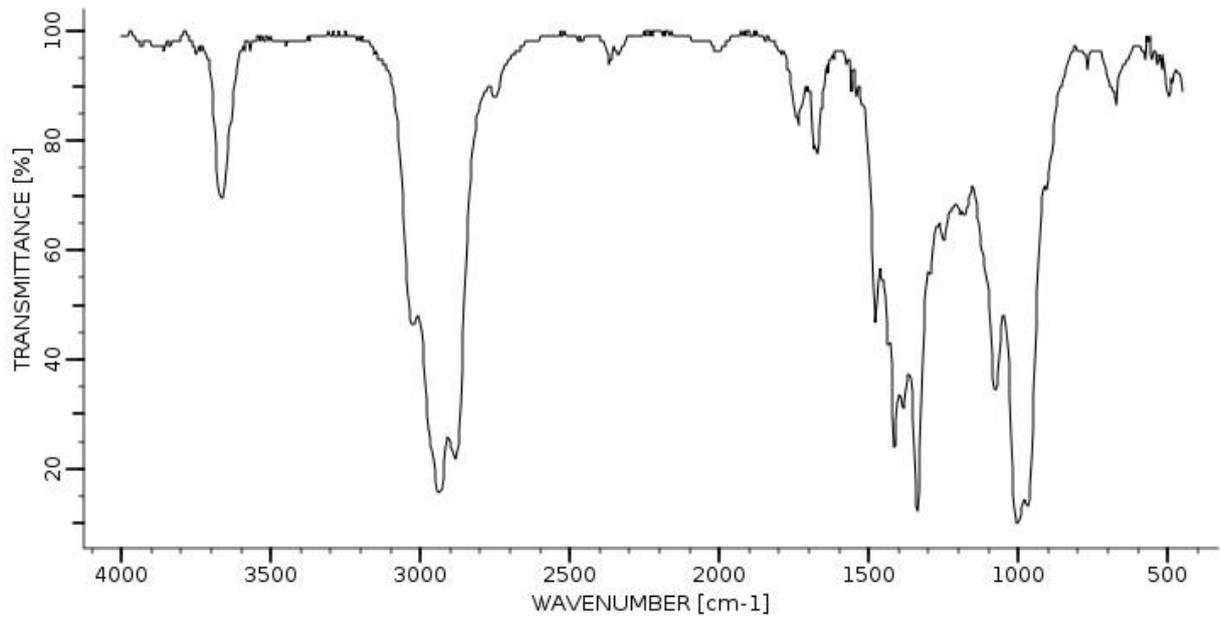


Spektrenanhang

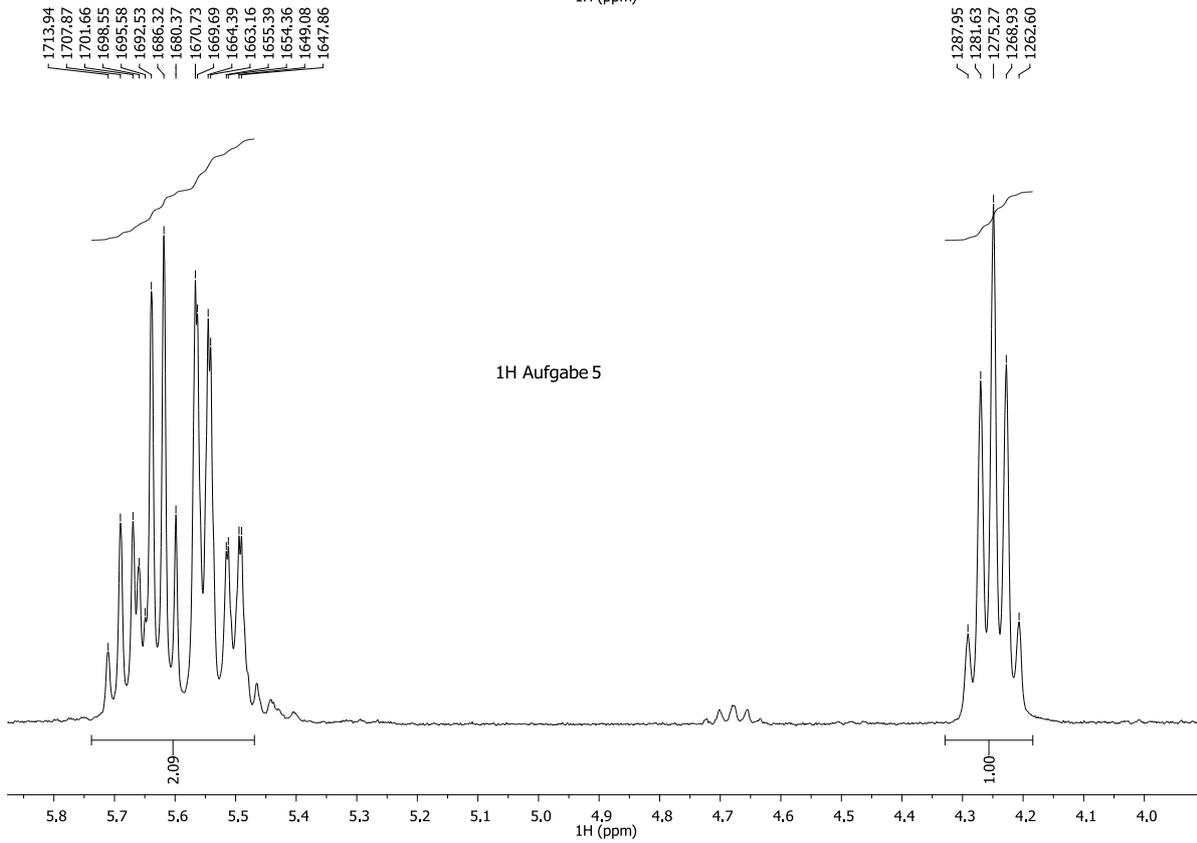
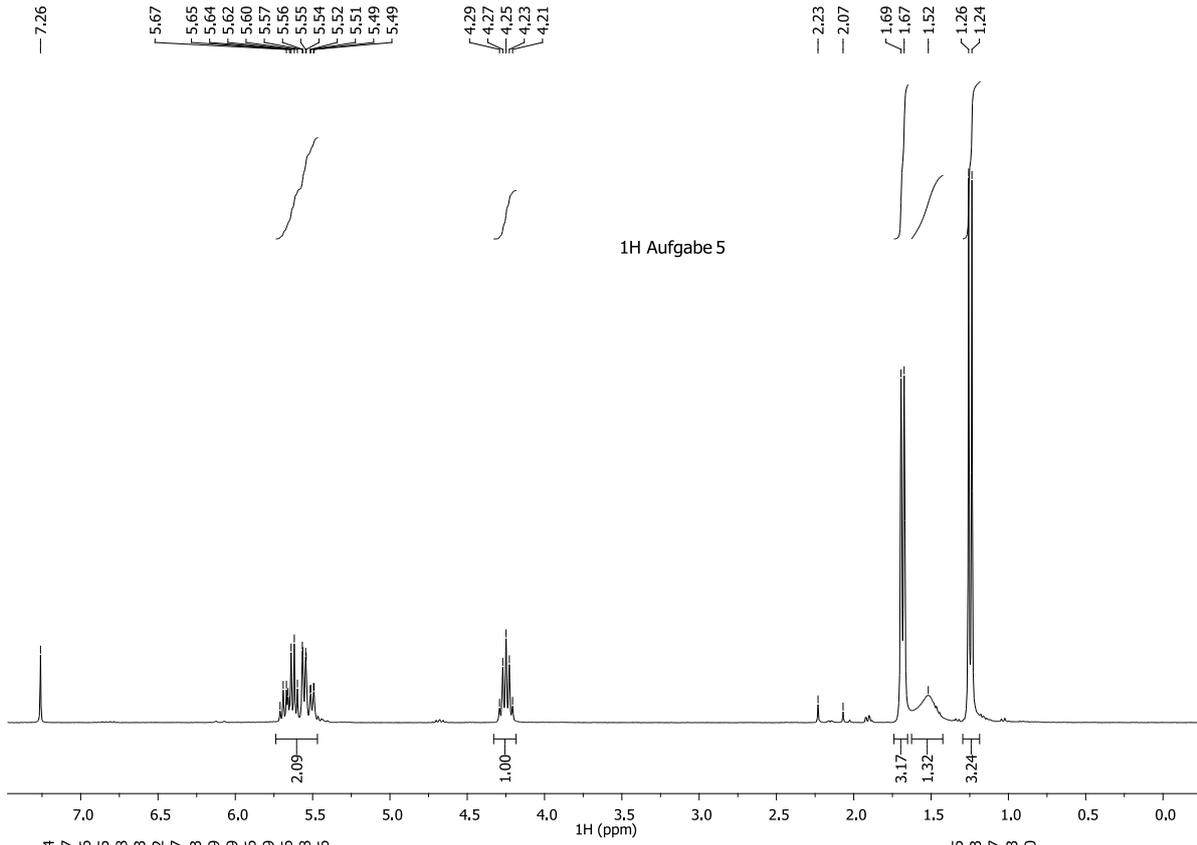


Spektrenanhang

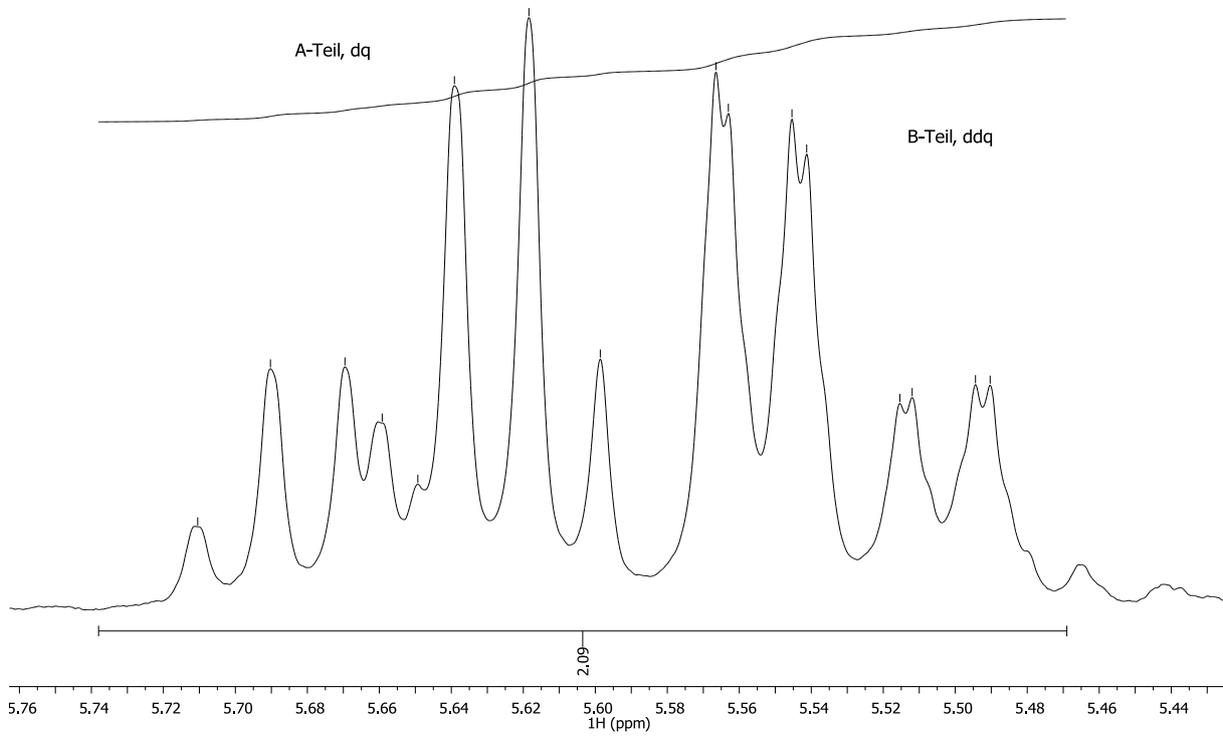
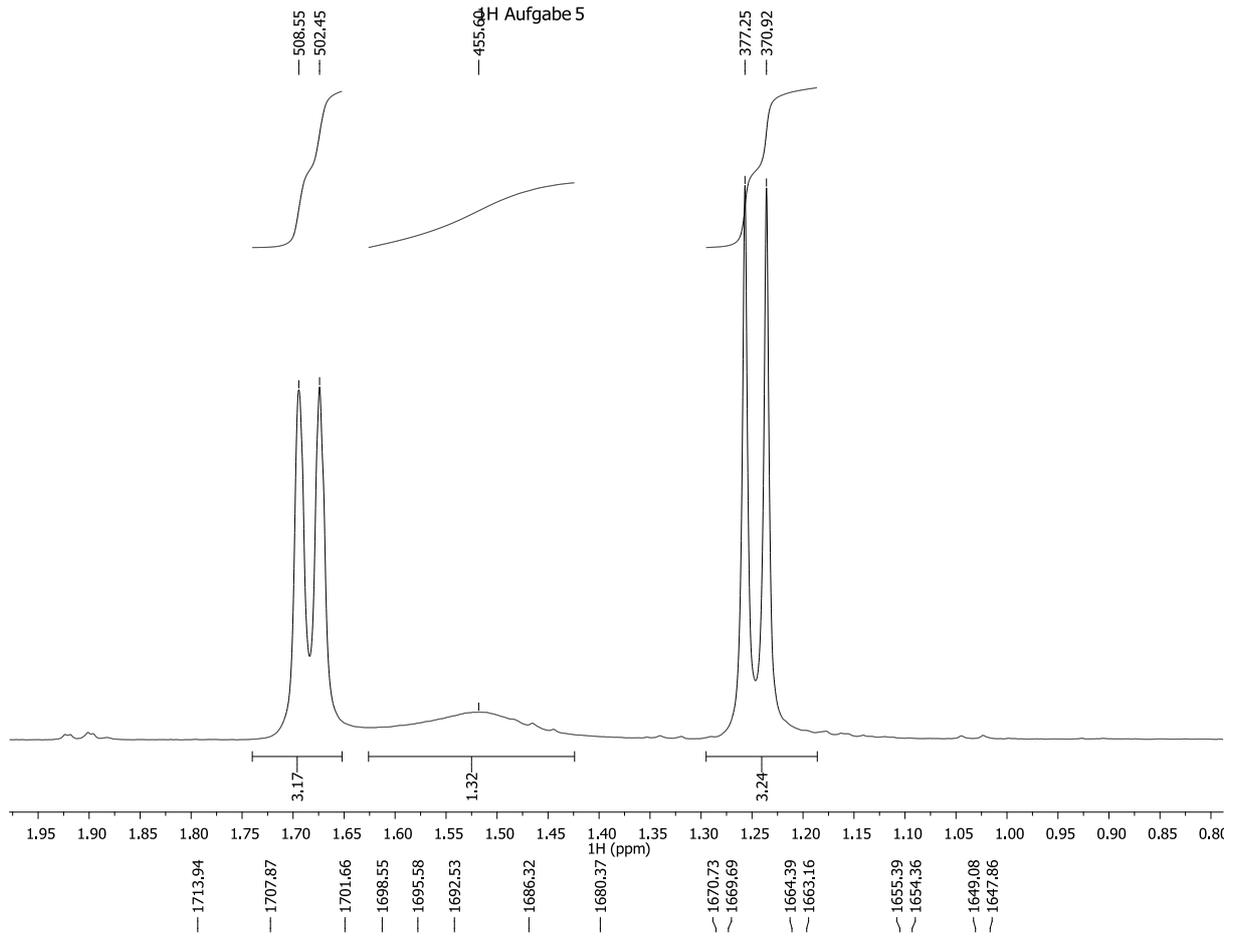
Spektren für Aufgabe 5



Spektrenanhang



Spektrenanhang



Spektrenanhang

