

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 10 Punkten,

Aufgabe 2: Punkte von 30 Punkten,

Aufgabe 3: Punkte von 20 Punkten,

Aufgabe 4: Punkte von 20 Punkten,

Aufgabe 5: Punkte von 20 Punkten;

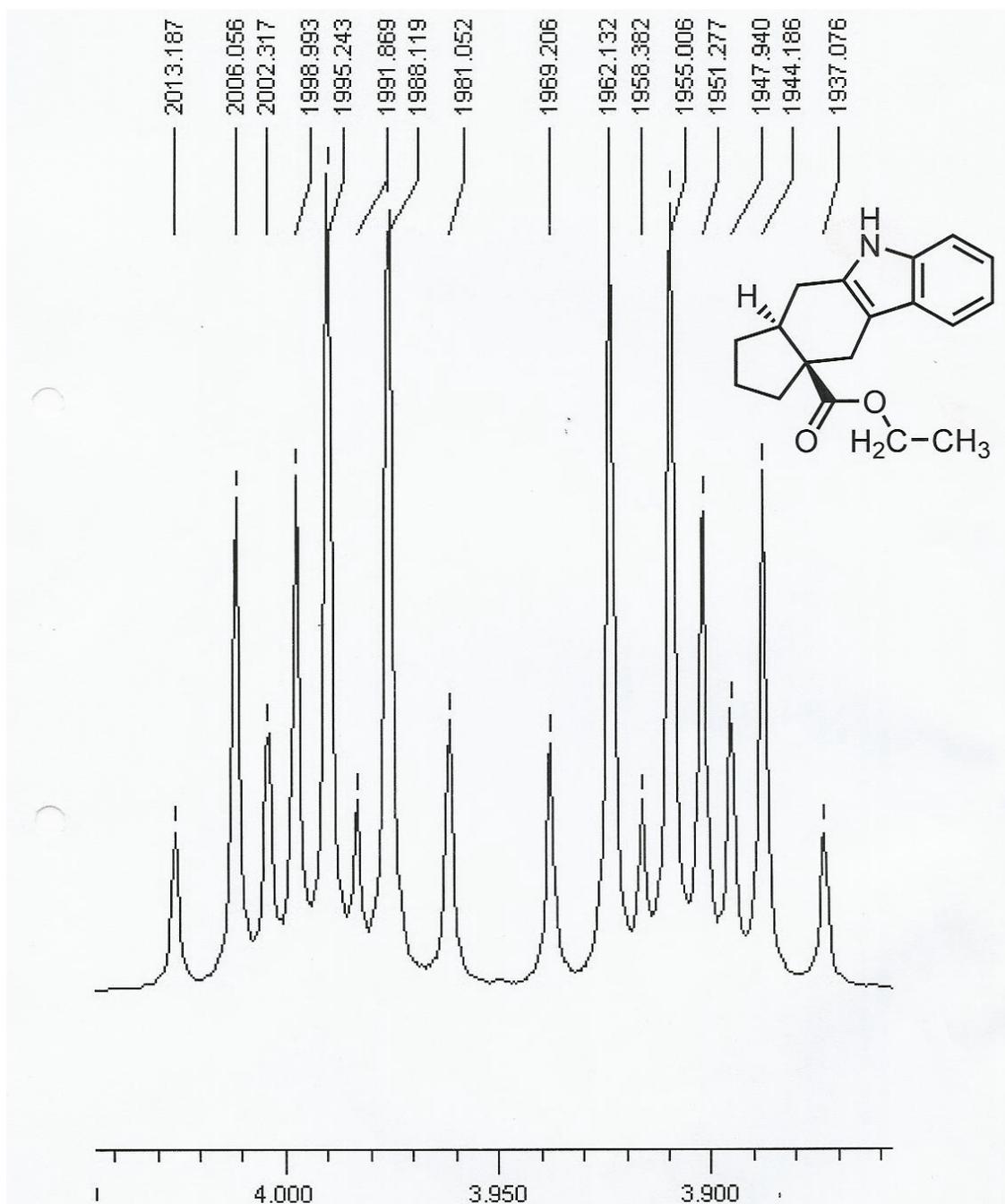
Summe: Punkte. Note: _____

Aufgabe 1 (10 Punkte)

In der unten stehenden Abbildung sehen Sie einen Ausschnitt des $^1\text{H-NMR}$ -Spektrums des gezeigten Indolderivates. Es handelt sich um die Signale der Methylenprotonen der Estergruppe, die den AM-Teil eines AMX_3 -Systems bilden. Geben Sie bitte nachstehend die zwei gefragten Kopplungskonstanten auf ganze Hertz gerundet (ohne Hinterkommastelle) an.

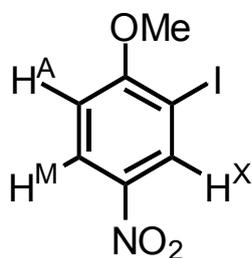
$${}^2J_{\text{AM}} =$$

$${}^3J_{\text{AX}} = {}^3J_{\text{MX}} =$$



Aufgabe 2 (30 Punkte)

Berechnen Sie mithilfe des Inkrementsystems die chemischen Verschiebungen der aromatischen Protonen H^A , H^M und H^X von 2-Iod-4-nitroanisol mit zwei Hinterkommastellen Genauigkeit.

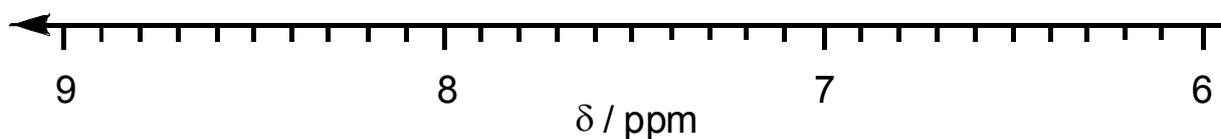


$$\delta(H^A) =$$

$$\delta(H^M) =$$

$$\delta(H^X) =$$

Zeichnen Sie unter der Annahme ${}^3J_{AM} = 8 \text{ Hz} (= 8 \text{ mm})$, ${}^4J_{MX} = 1 \text{ Hz} (= 1 \text{ mm})$ und ${}^5J_{AX} = 0 \text{ Hz}$ maßstabsgetreu mithilfe eines Lineals das ${}^1\text{H}$ -NMR-Spektrum des AMX-Systems (ohne Dacheffekte):



Aufgabe 3 (20 Punkte)

In der Anlage finden Sie die Spektren einer unbekanntes Verbindung.
Geben Sie hier **einen** Strukturvorschlag an.

Aufgabe 4 (20 Punkte)

In der Anlage finden Sie die Spektren einer unbekanntes Verbindung.
Geben Sie hier **einen** Strukturvorschlag an.

Aufgabe 5 (20 Punkte)

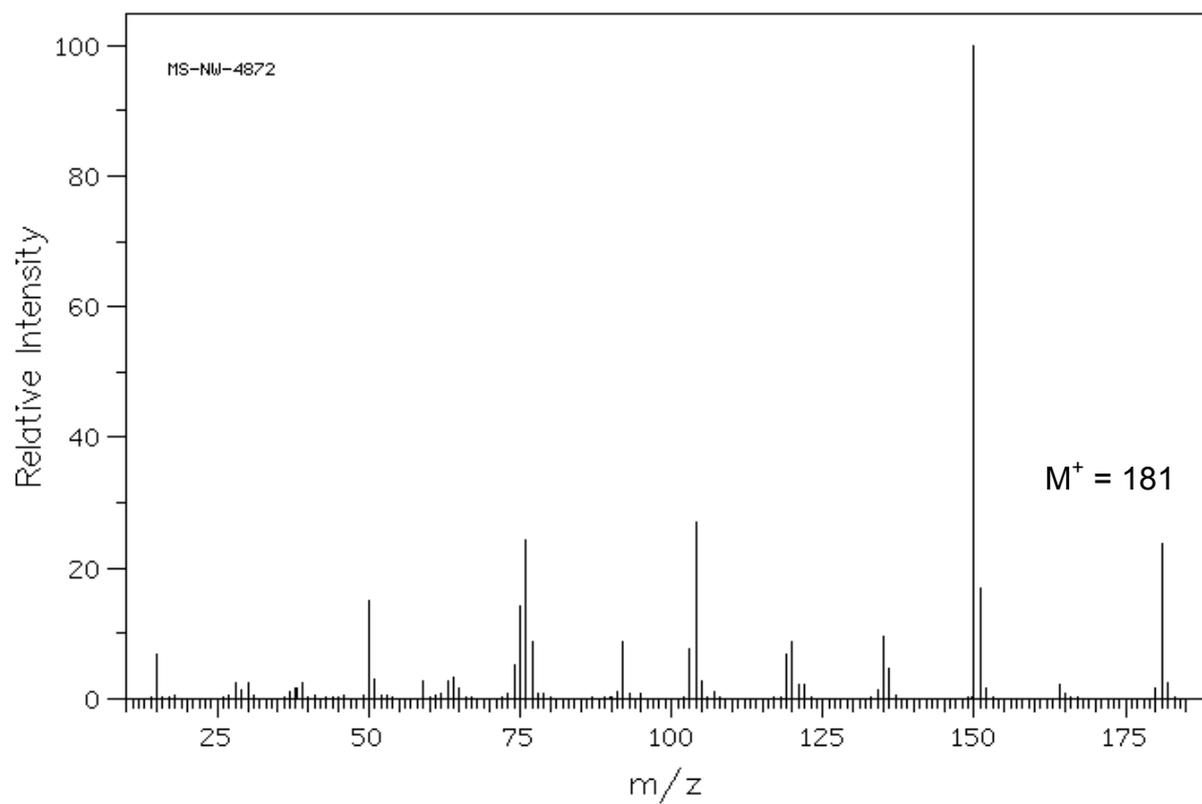
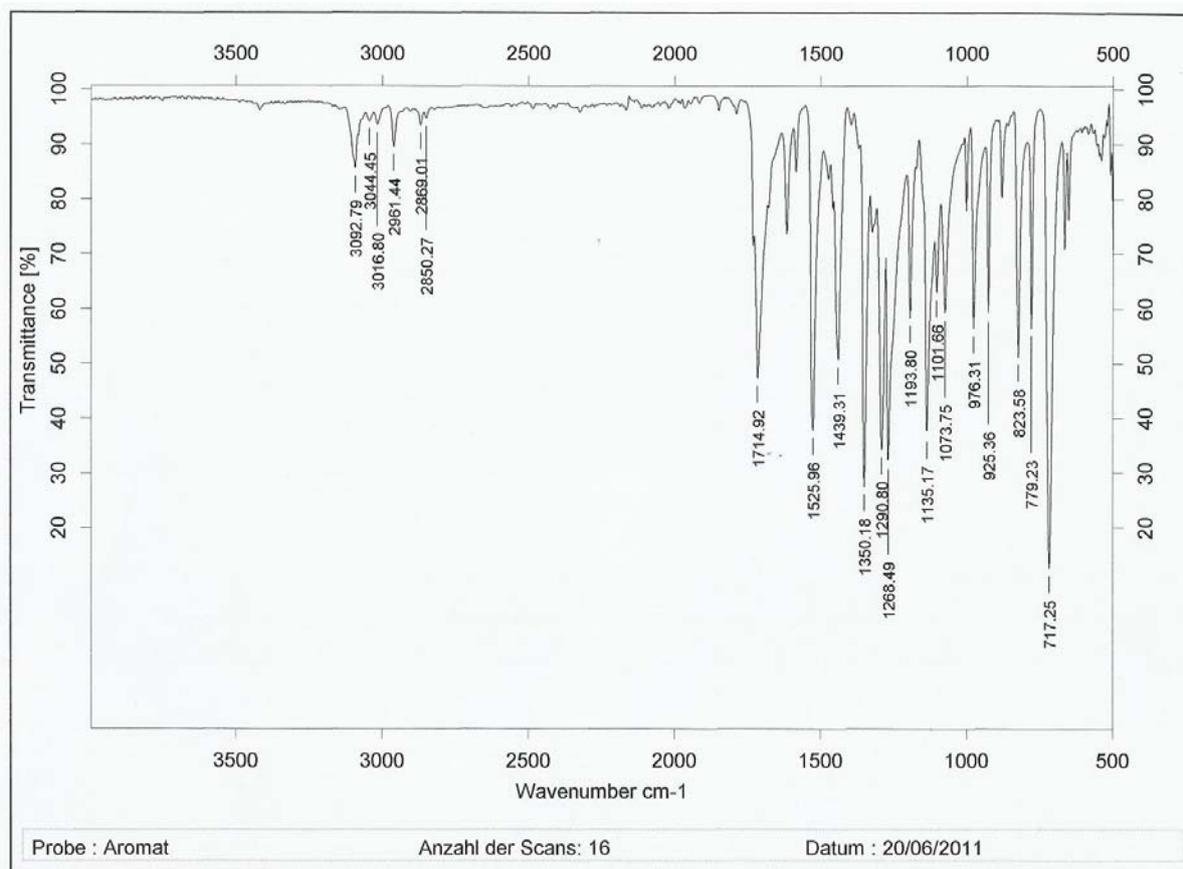
In der Anlage finden Sie die Spektren einer unbekanntes Verbindung.
Geben Sie hier **einen** Strukturvorschlag an.

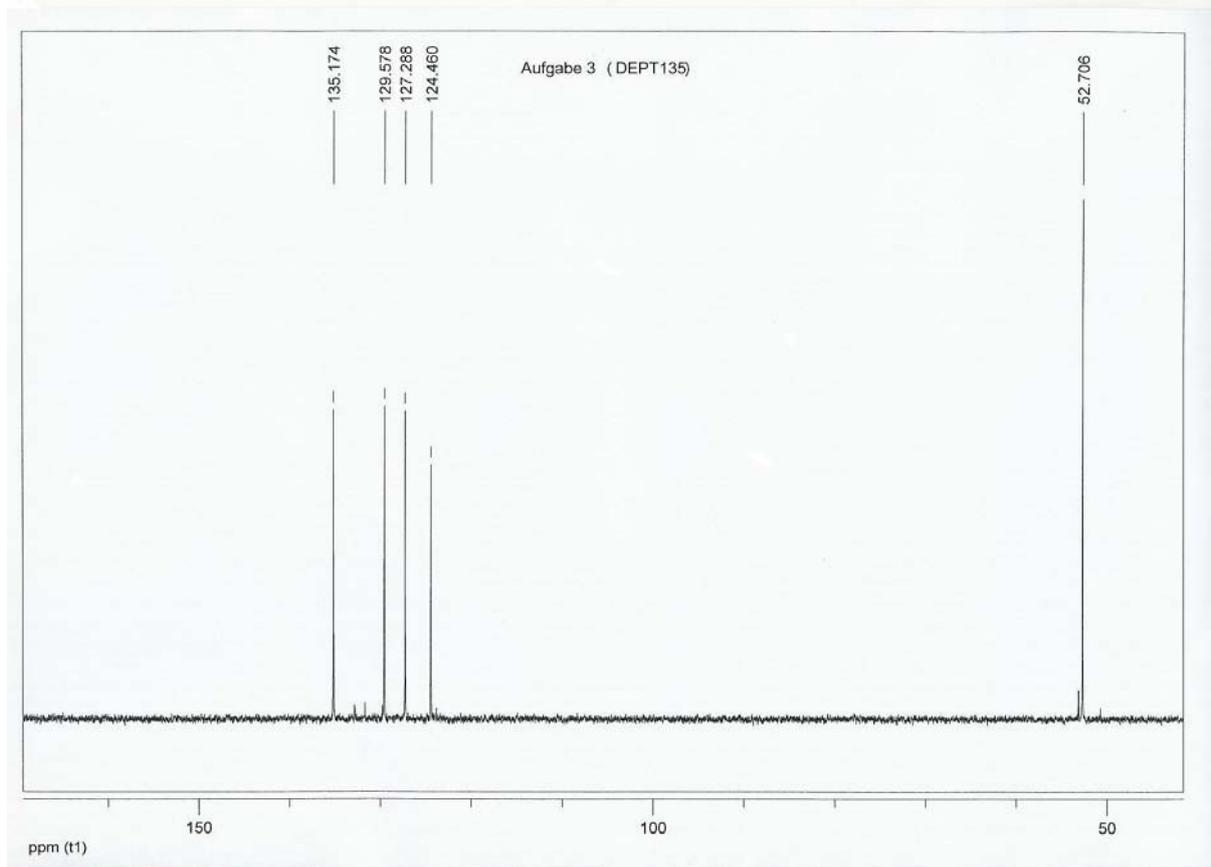
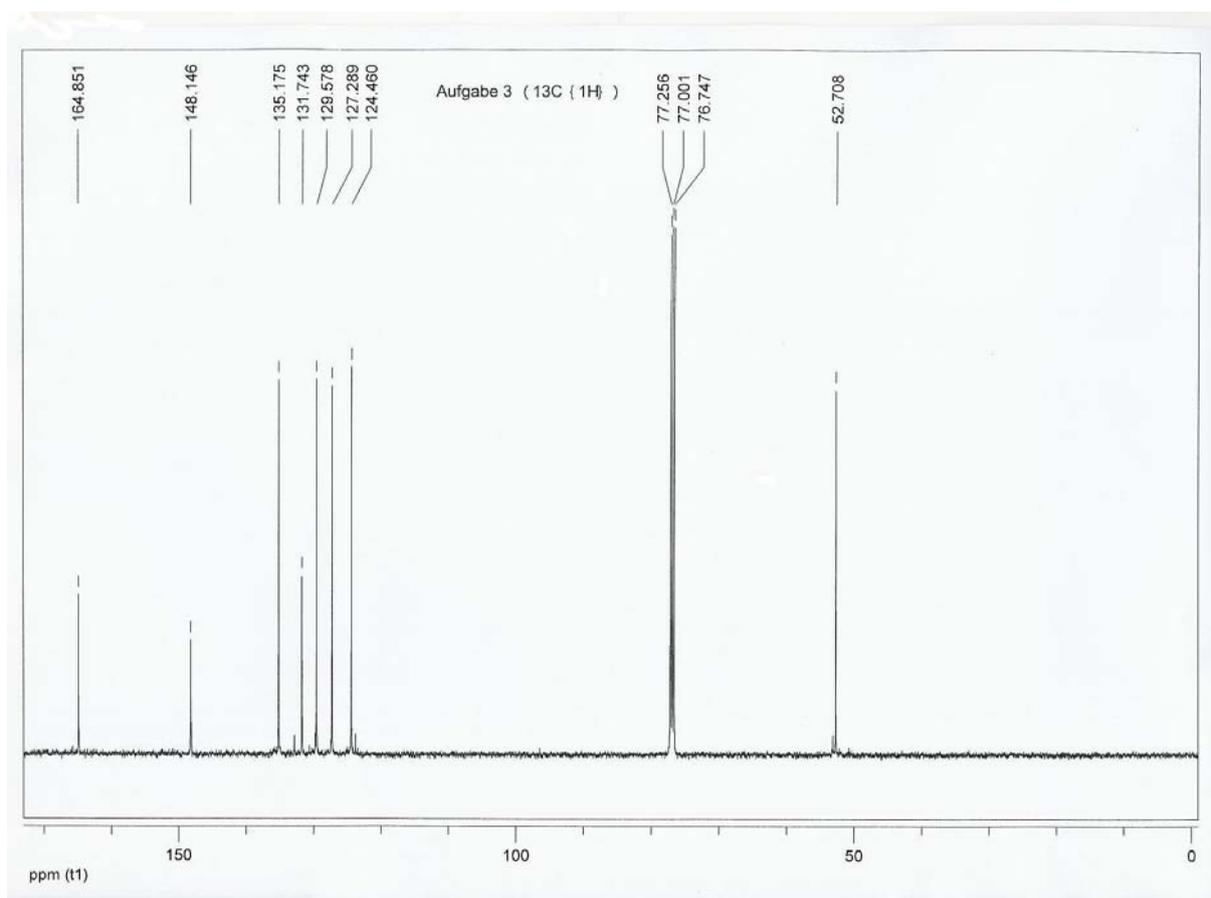
Sicherheitshinweis:

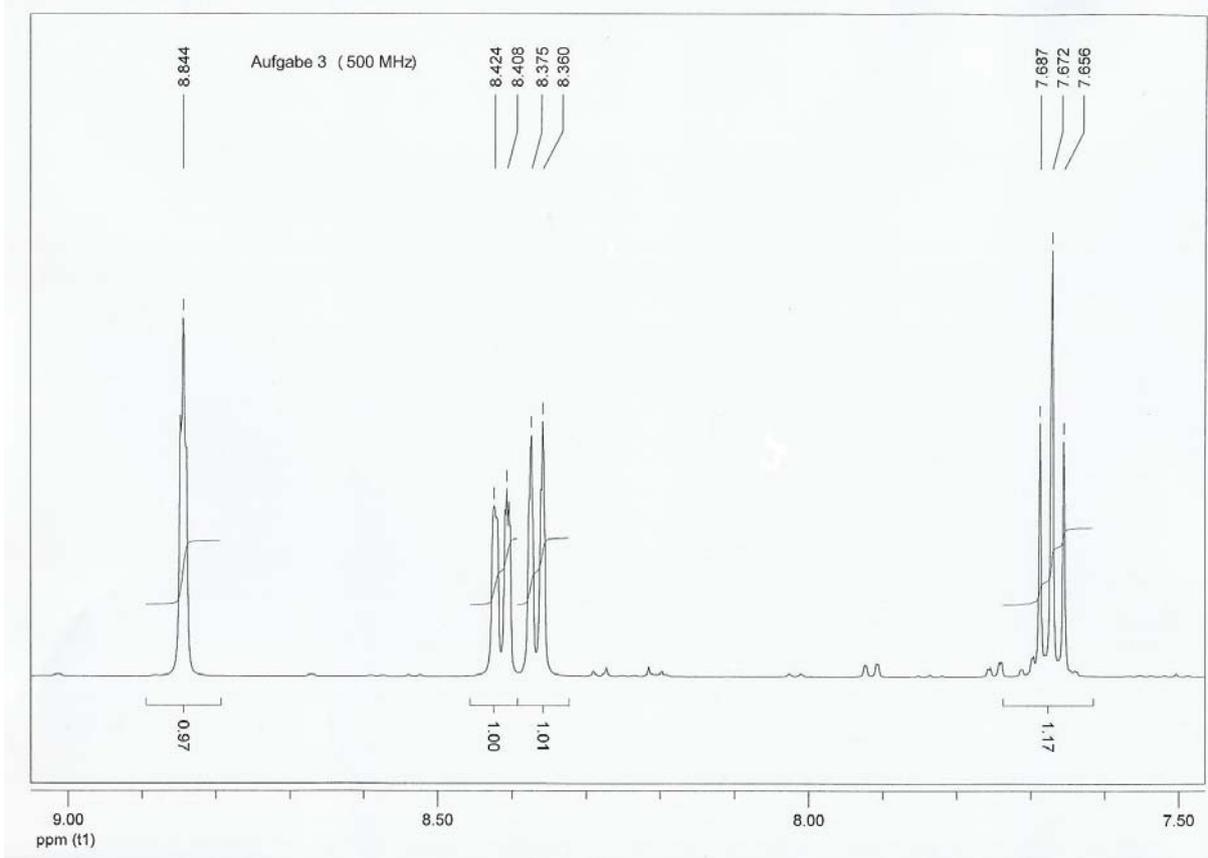
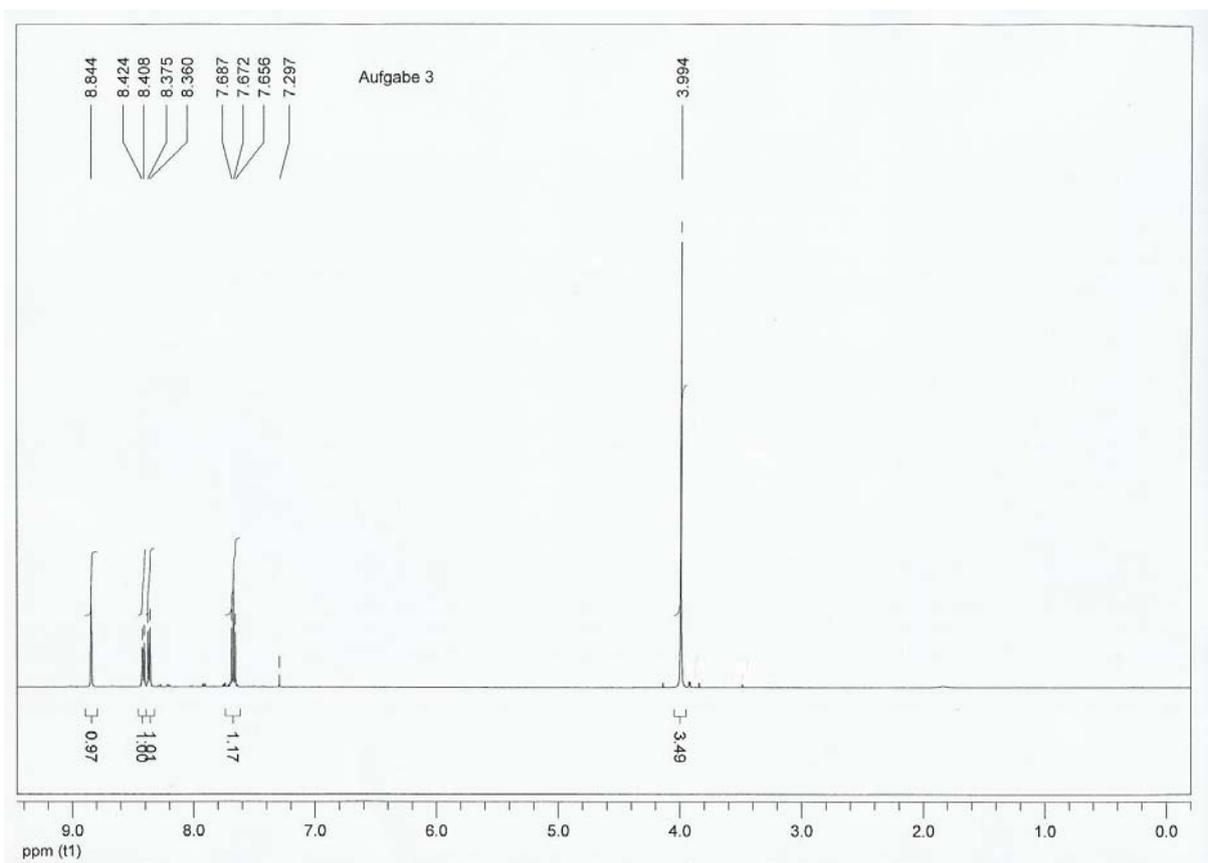
Gefragt ist jeweils ein und nur ein Konstitutionsvorschlag. Auch bei falschen Lösungen werden Teillösungen bzw. Strukturfragmente mit Punkten belohnt. Bei mehr als einem Strukturvorschlag pro Aufgabe gibt es Null Punkte!

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

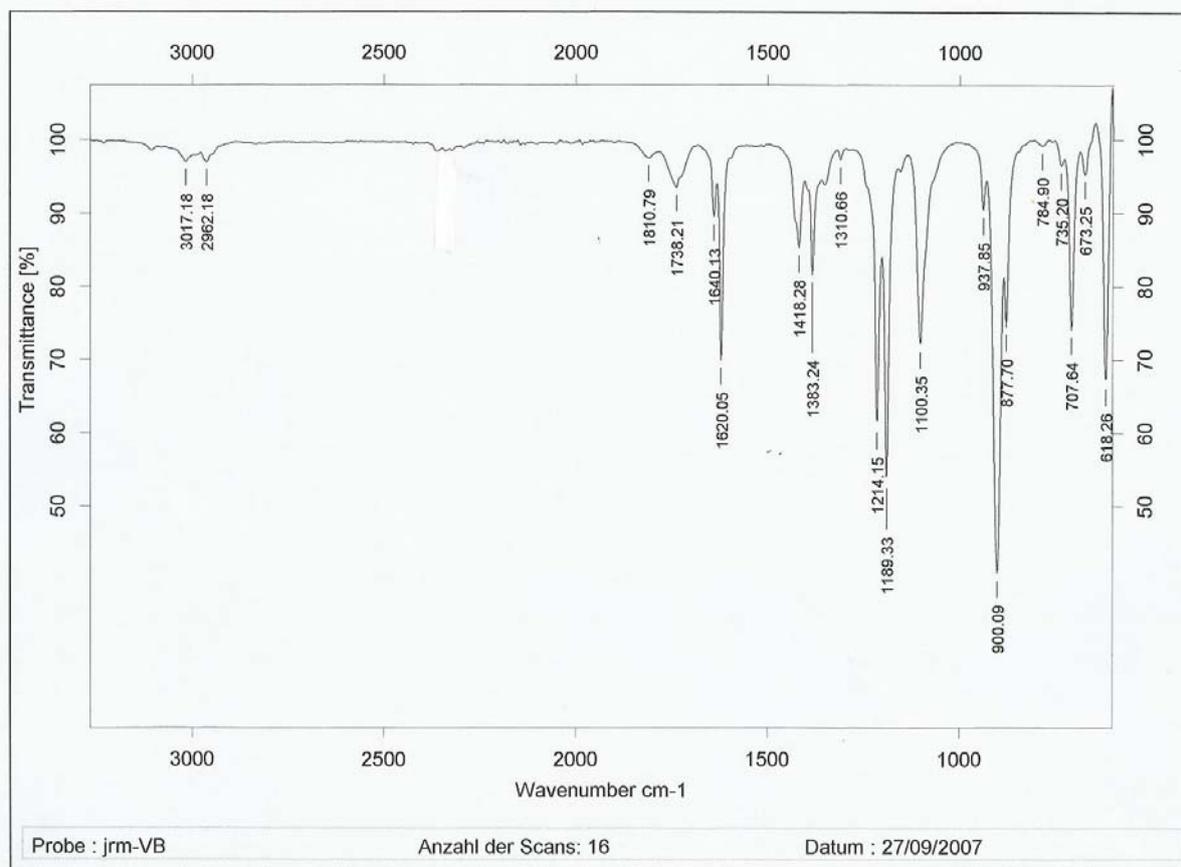
Anlage zu Aufgabe 3



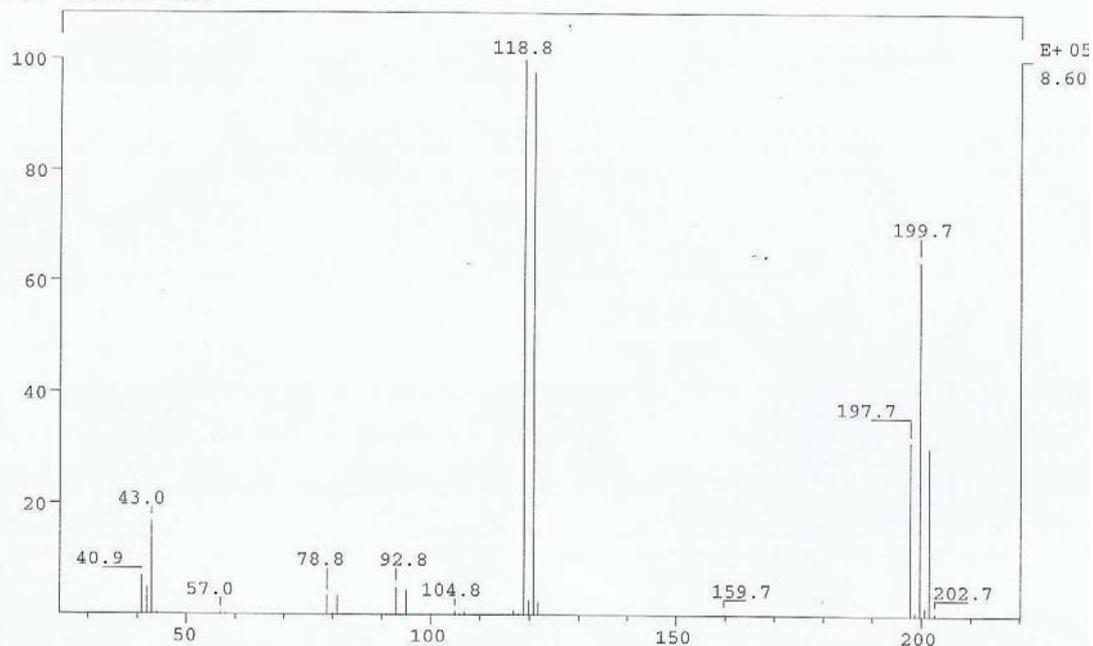




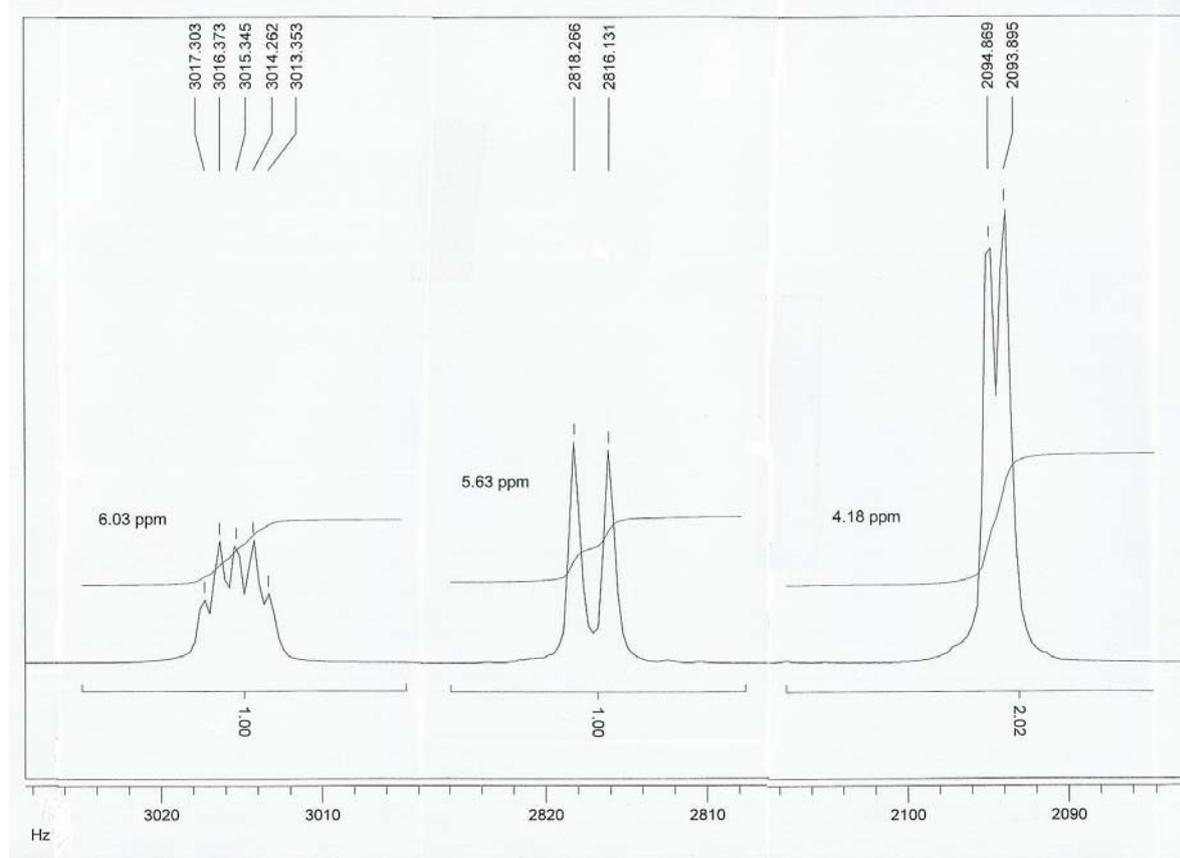
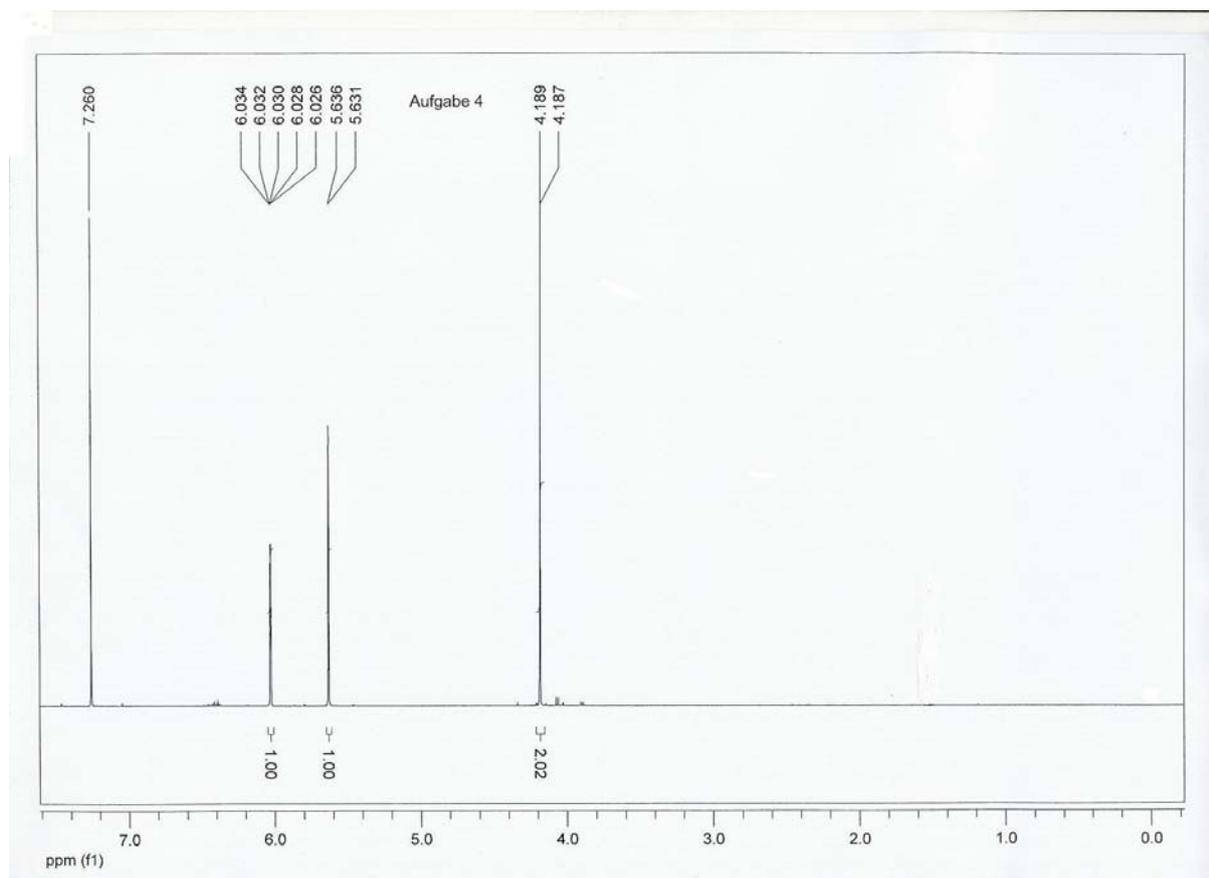
Anlage zu Aufgabe 4



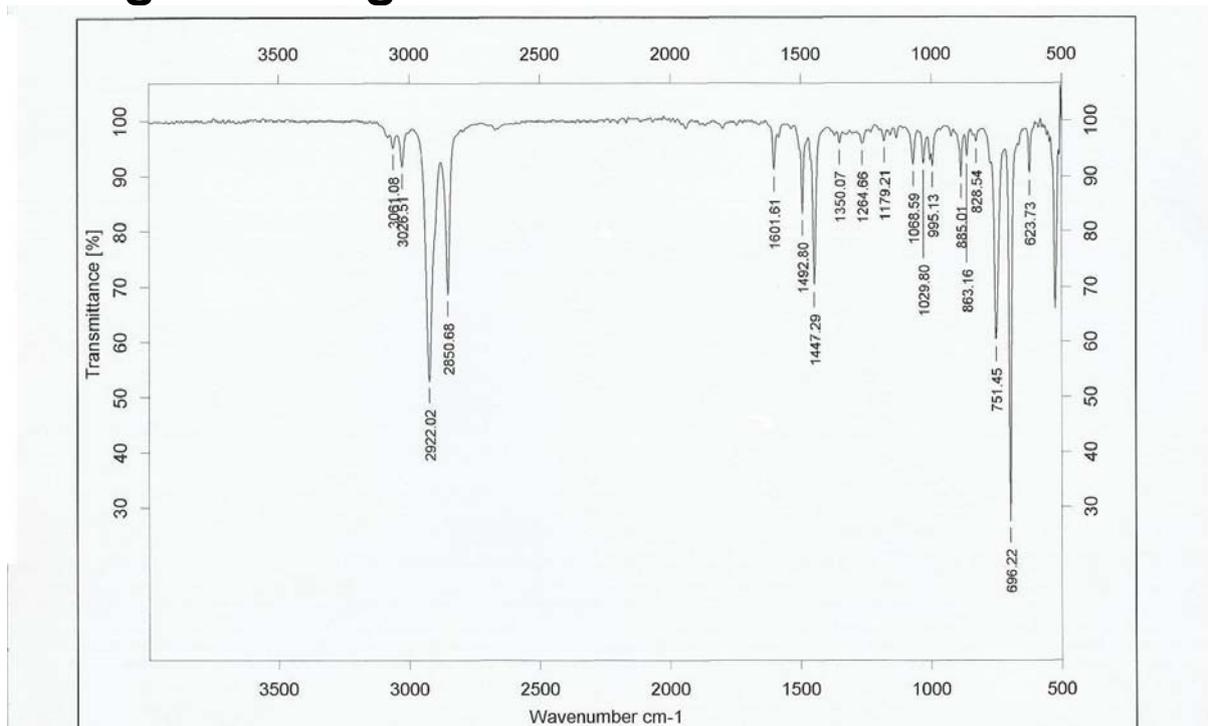
SPEC: 1mallu04 10-May-07 Elapse: 04:41.1 156
 Samp: JRM-VB Start : 10:50:14 435
 Comm: EI GC-MS DB5
 Mode: EI +VE +LMR BSCAN (EXP) UP LR
 Oper: Fabbretti Client: Mallu Inlet :
 Base: 118.8 Inten : 859827 Masses: 40 > 650
 Norm: 118.8 RIC : 3259480 #peaks: 32
 Peak: 1000.00 mmu



$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR (CDCl_3 , 125 MHz): $\delta = 36.77$ (1 x CH_2), 121.13 (1 x CH_2), 127.56 (1 x 4°-C) ppm.



Anlage zu Aufgabe 5



a84gc35 #1253-1282 RT: 13.40-13.64 AV: 30 NL: 1.29E5
T: + c Full ms [50.00-1000.00]

