

Prüfungsaufgabe 1 Spektrenaufgabe Vorwärtslösung

Im **separaten Handout** finden Sie die IR-, Massen-, ^{13}C -NMR und ^1H -NMR-Spektren der Verbindung **C03**.

Bearbeiten Sie die folgenden Fragen.

Ziel: Ermittlung der Konstitution von **C03**.

Zum MS (3 Punkte):

Das gesuchte **Molekül** hat die Masse von **142 Da**. Das Molekülion ist im Massenspektrum **nicht** sichtbar.

(I) Erklären Sie die Entstehung des Basispeaks.

(II) Erklären Sie das Isotopenmuster bei m/z 107 und 127 im Massenspektrum.

Zum IR Spektrum (2 Punkte):

(I) Ordnen Sie die folgenden Banden den entsprechenden Molekülschwingungen zu.

Bandenposition	Schwingung
3000 cm^{-1}	
1778 cm^{-1}	

Zum ^1H -NMR-Spektrum (6 Punkte):

(I)

a) Bestimmen Sie die Multiplizitäten der beiden Signale bei 6.5-6.4 ppm und 1.9- 1.85 ppm im ^1H -NMR-Spektrum.

b) Was für eine Aussage über das enthaltene Fragment können Sie anhand der Kopplungsmuster im ^1H -NMR-Spektrum machen?

(II) Bestimmen Sie die Kopplungskonstante/n für das Multipllett bei 6.5-6.4 ppm. Entsprechen die Intensitäten der Sublinien Ihren Erwartungen. Begründen Sie.

Zum Gesamten(16 Punkte):

(I) Welche Strukturelemente sind im gesuchten Molekül **C03** vorhanden?
Berücksichtigen Sie alle bisher gesammelten Informationen.

(II) Was ist die Summenformel des gesuchten Moleküls **C03**?

(III) Zeichnen Sie die Konstitution des Moleküls **C03**.

(IV) Geben Sie eine mögliche Erklärung, weshalb das Molekölion im MS nicht sichtbar ist. Wenn Sie die Struktur nicht herausfinden konnten, antworten Sie allgemein!

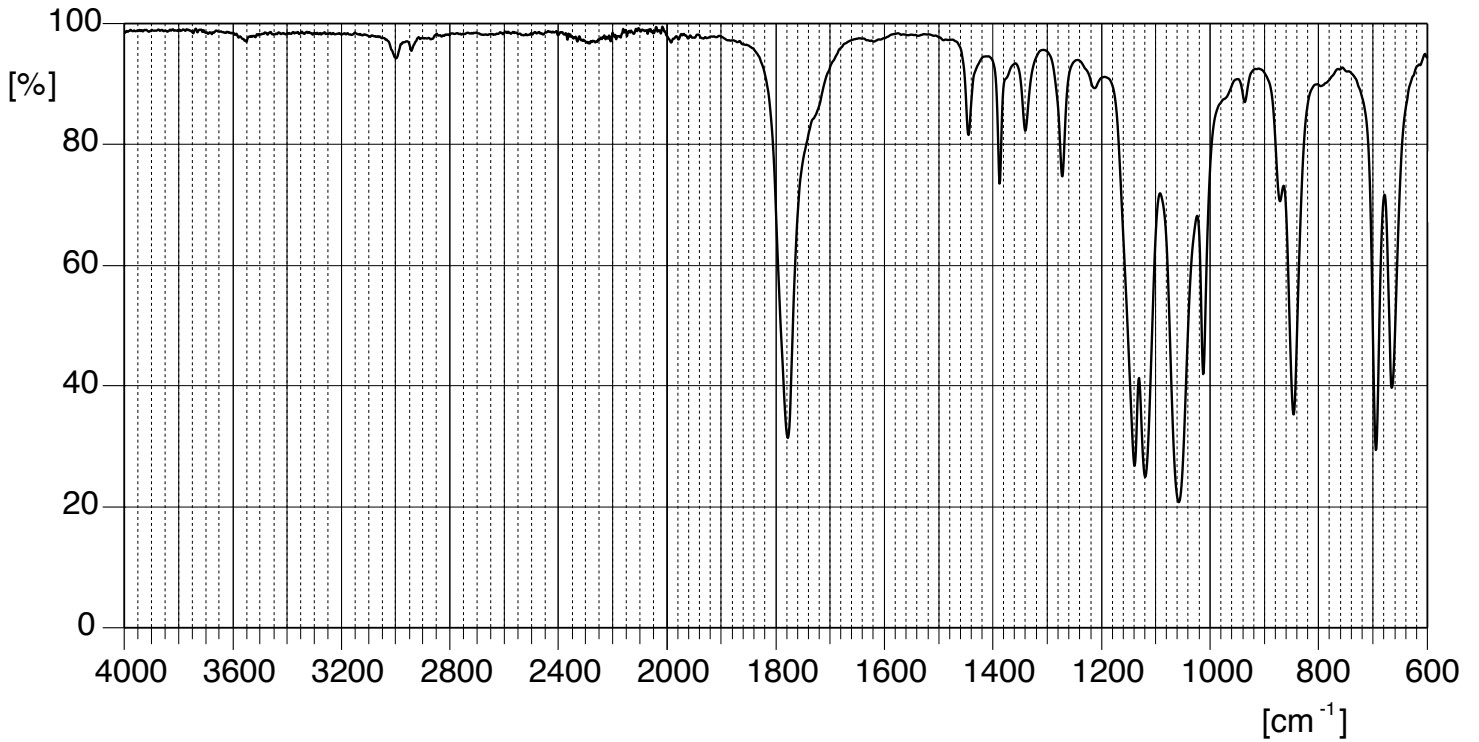
(V) Zeichnen Sie die Strukturformeln der Fragmente für die Signale bei m/z 63, 107 und 127.

(VI) Erklären Sie die chemische Verschiebung von 6.5-6.4 ppm im ^1H -NMR Spektrum.

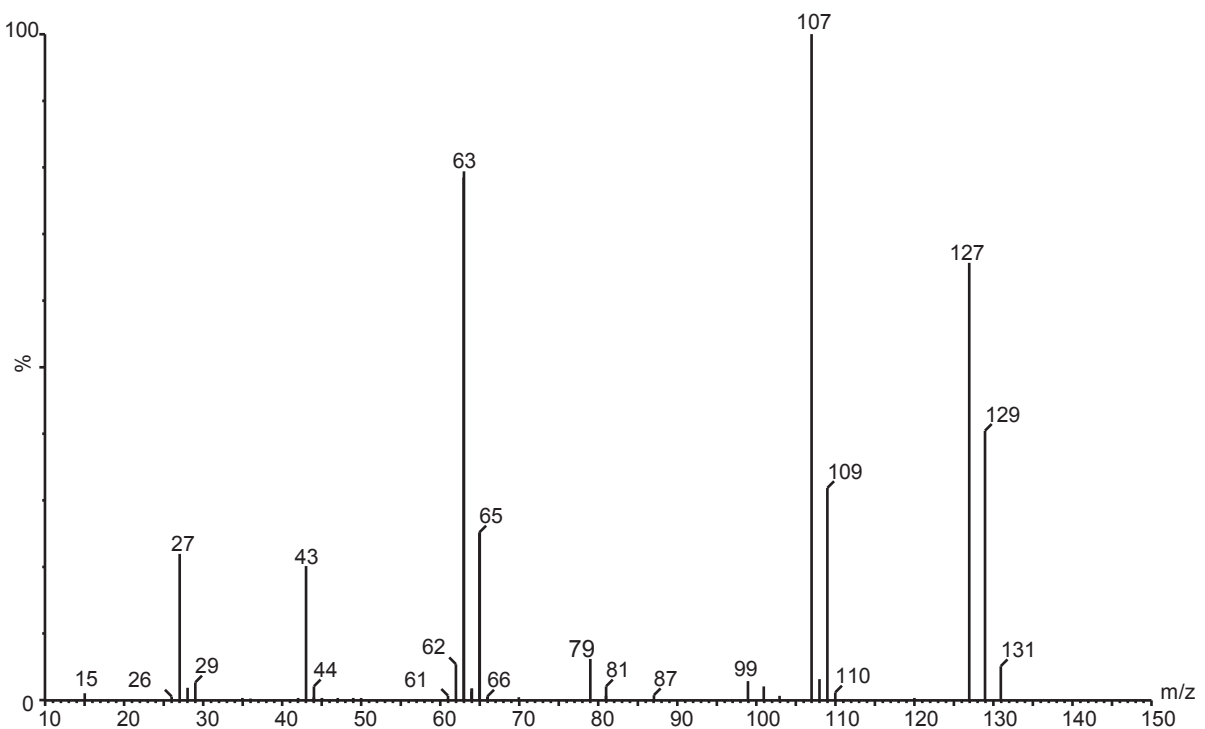
(VII) Erklären Sie, weshalb die Signale der quartären Kohlenstoffatome im ^{13}C -NMR-Spektrum eine kleinere Intensität aufweisen als CH-Signale.

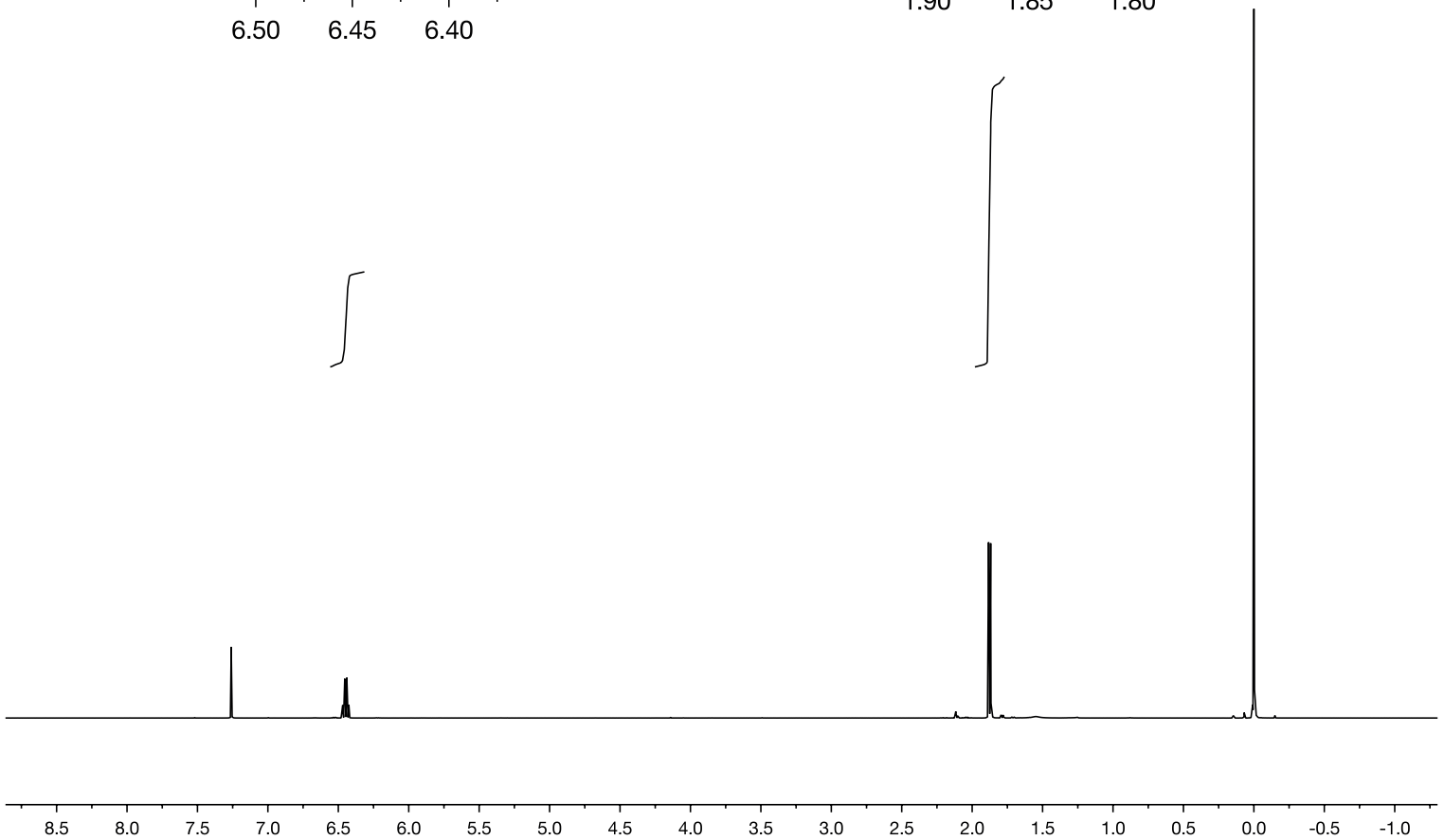
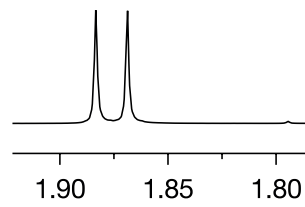
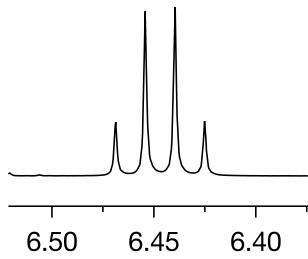


IR: Perkin Elmer Modell Spectrum 100

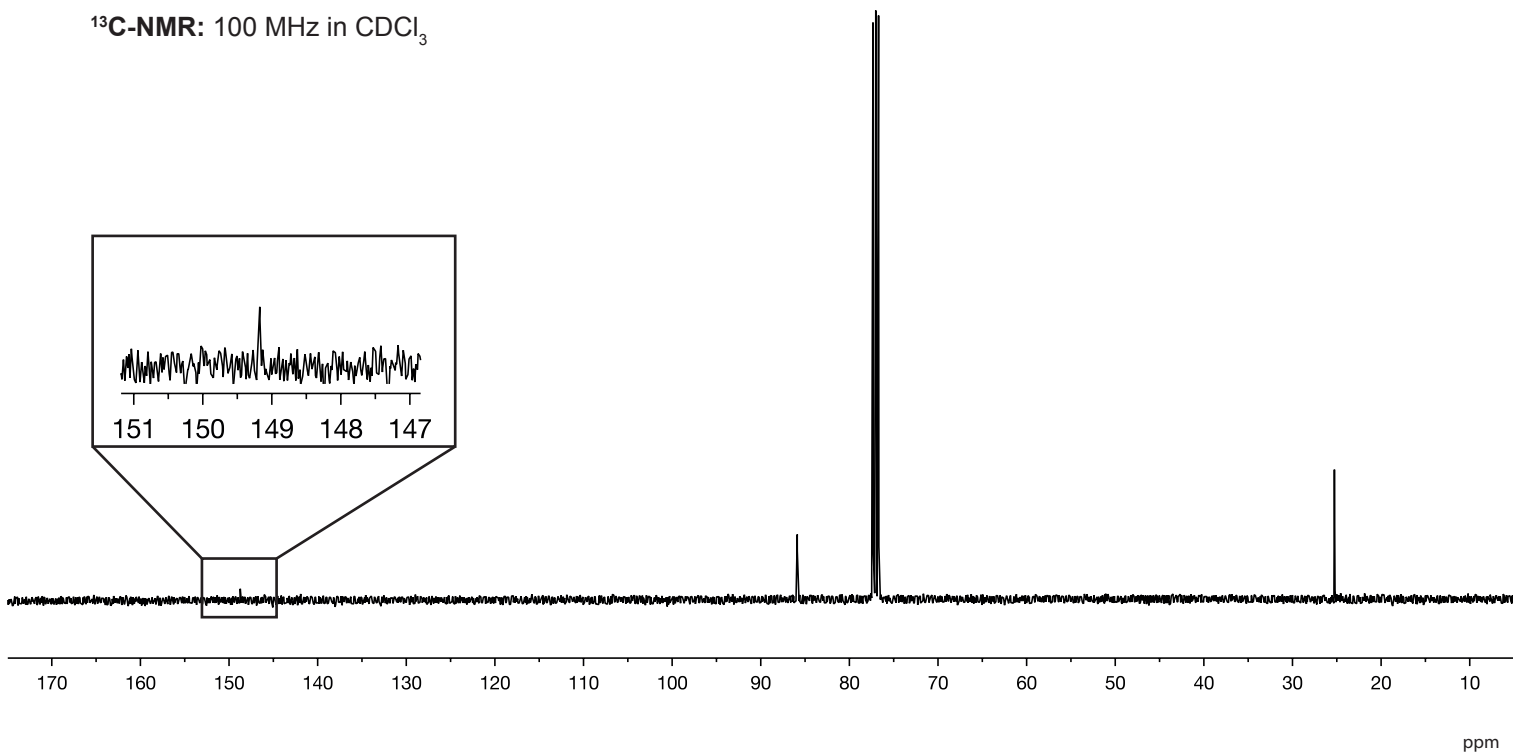


MS: EI, 75eV



¹H-NMR: 400 MHz in CDCl₃

$^{13}\text{C-NMR}$: 100 MHz in CDCl_3



DEPT 135 (125 MHz in CDCl_3)



DEPT 90 (125 MHz in CDCl_3)

