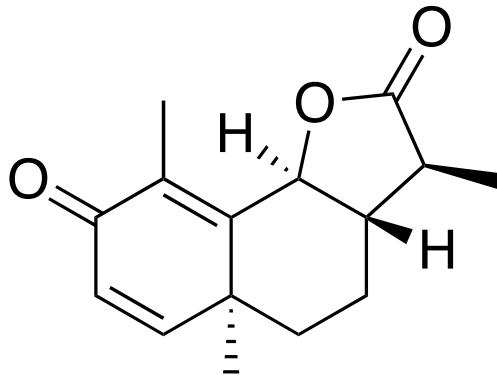


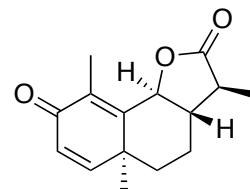
Prüfungsaufgabe 2 Spektrenaufgabe Rückwärtslösung

Im **separaten Handout C04** finden Sie die IR-, Massen-, ^1H -NMR-, COSY- und ^{13}C -NMR-Spektren des Moleküls **C04**.



C04

Bearbeiten Sie die folgenden Fragen.



Zum IR-Spektrum (4 Punkte):

(I) Ordnen Sie die Schwingungen (**fett** markierte Bindung) der folgenden funktionellen Gruppen den Banden im IR Spektrum zu.

Schwingung	Banden
O-C=O st.	
C=C st.	
C-H st.	

(II) Begründen Sie, warum die C=O st. Schwingung eine grössere Intensität als die C-H st. Schwingung aufweist.

Zum Massenspektrum (2 Punkte):

(I) Erklären Sie die Signale bei m/z 231 und 173 im Massenspektrum.

Zum $^1\text{H-NMR}$ -Spektrum (16 Punkte):

(I) a) Bestimmen Sie die Integrale und Multiplizitäten der in der untenstehenden Tabelle aufgeführten Signale.

Verwenden Sie dabei die folgenden Abkürzungen:

s für Singulett

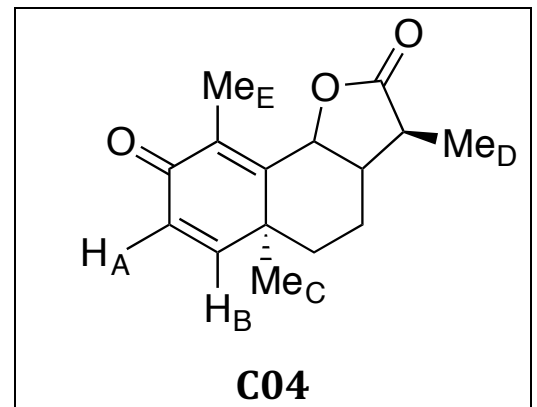
d für Dublett

t für Triplett

q für Quartett

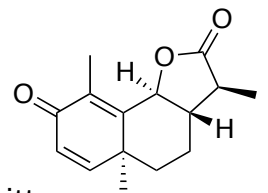
m für Multipllett und höher Ordnung

Präfix **br** für breite Signale

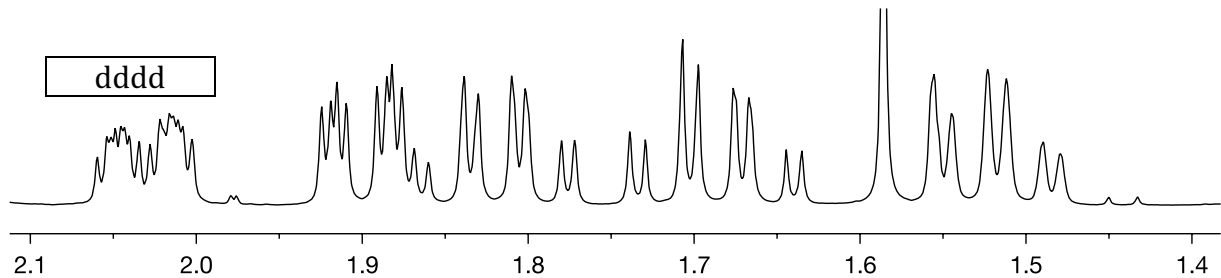


b) Ordnen Sie die Signale den H-Atomen in der oben rechts abgebildeten Struktur zu. Benützen Sie die angegebenen Indices.

Chemische Verschiebung	Integral	Multiplizität	Index
6.68 – 6.64 ppm			
6.27 – 6.23 ppm			
2.15 – 2.12 ppm			
1.34 – 1.31 ppm			
1.30 – 1.26 ppm			

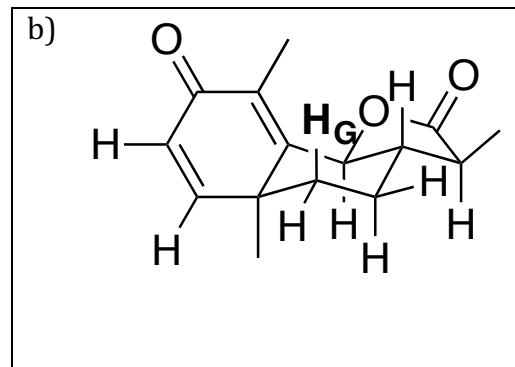


(II) Wie viele Signale von Wasserstoffatomen sehen Sie im folgenden Ausschnitt des ^1H -NMR-Spektrums? Trennen Sie das Spektrum durch Striche in Multiplette auf und beschreiben Sie die Multiplizität der Signale analog zum links angegebenen Beispiel.



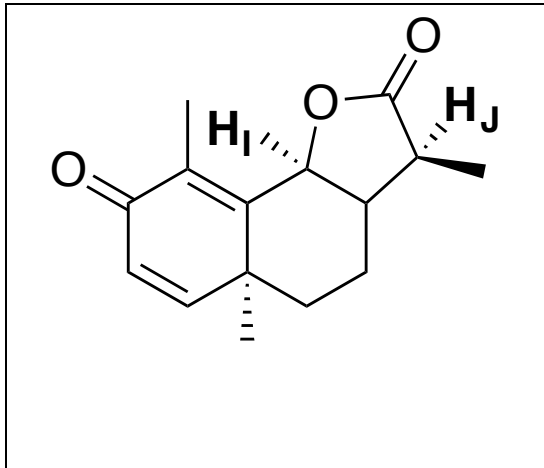
(III) In einem konformationell fixierten Cyclohexan gibt es drei verschiedene Arten von vicinalen H-H- Kopplungen. Welche sind das? Teilen Sie sie nach ihrer Grösse grob in zwei Gruppen auf. In welche dieser Gruppen gehören die im obigem Spektrum ebenfalls sichtbaren geminalen Kopplungen?

(IV) a) Wie viele Kopplungspartner hat H_G (siehe Struktur unten rechts)? **b)** Markieren Sie die Kopplungspartner in der angegebenen Struktur. **c)** Ordnen Sie H_G dem entsprechenden Multipllett im ^1H -NMR-Spektrum zu.



Zum COSY-Spektrum (3 Punkte):

(I) Ordnen Sie die zwei eingezeichneten Wasserstoffatome mit Hilfe des COSY-Spektrums den Signalen im ^1H -NMR-Spektrum zu. Begründen Sie ihre Zuordnung.

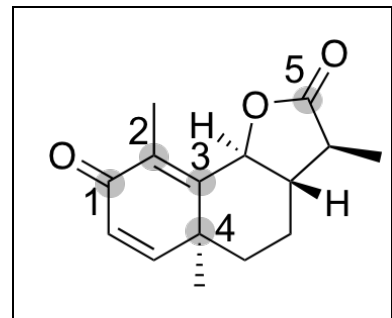


H_I : ppm

H_J : ppm

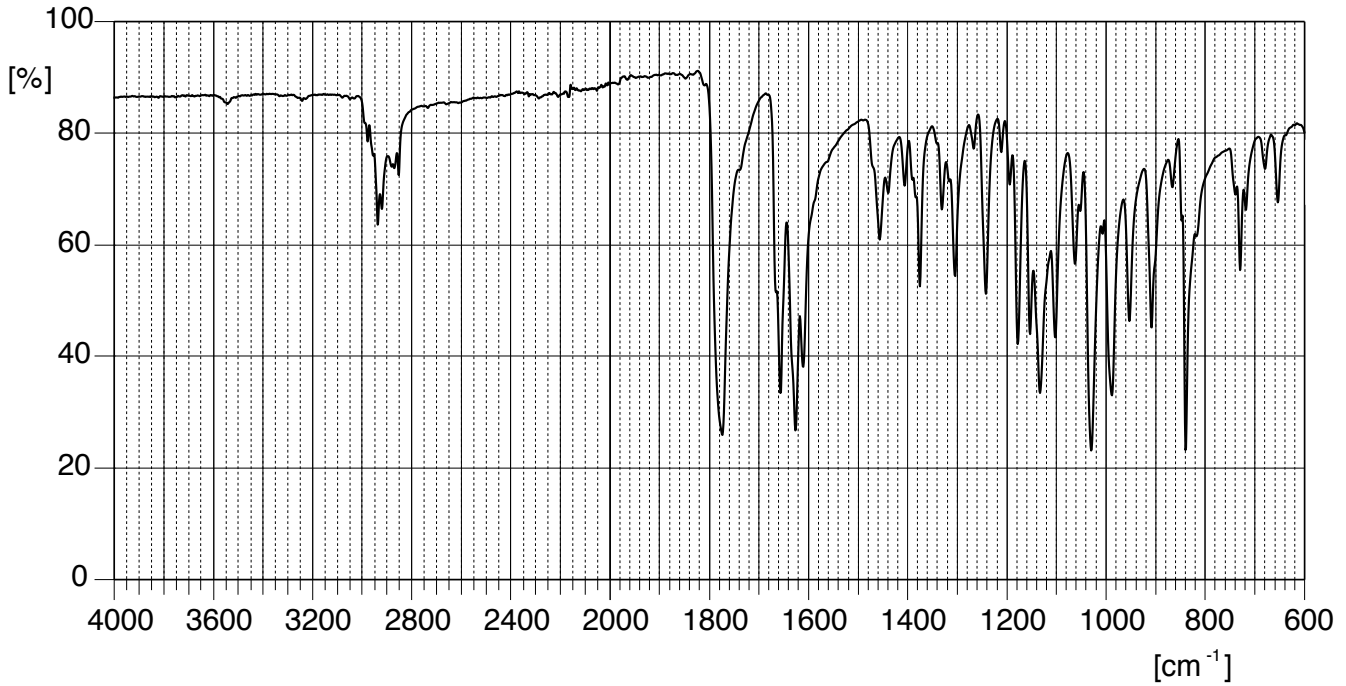
Zum ^{13}C -NMR-Spektrum (4 Punkte):

(I) Ordnen Sie die Signale der 5 quartären Kohlenstoffatome im ^{13}C -NMR-Spektrum zu. Verwenden Sie die Indices in der Abbildung rechts.

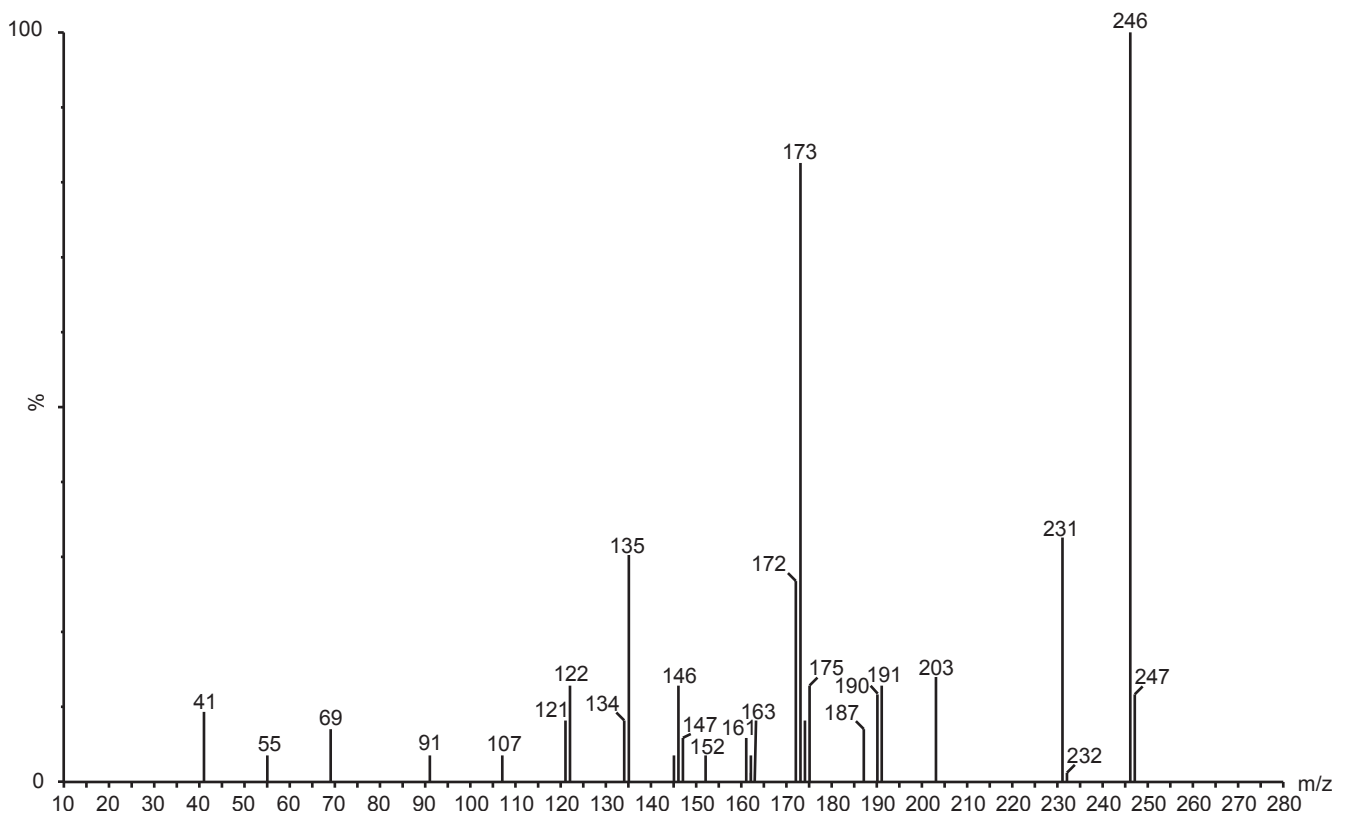


Chemische Verschiebung	Index

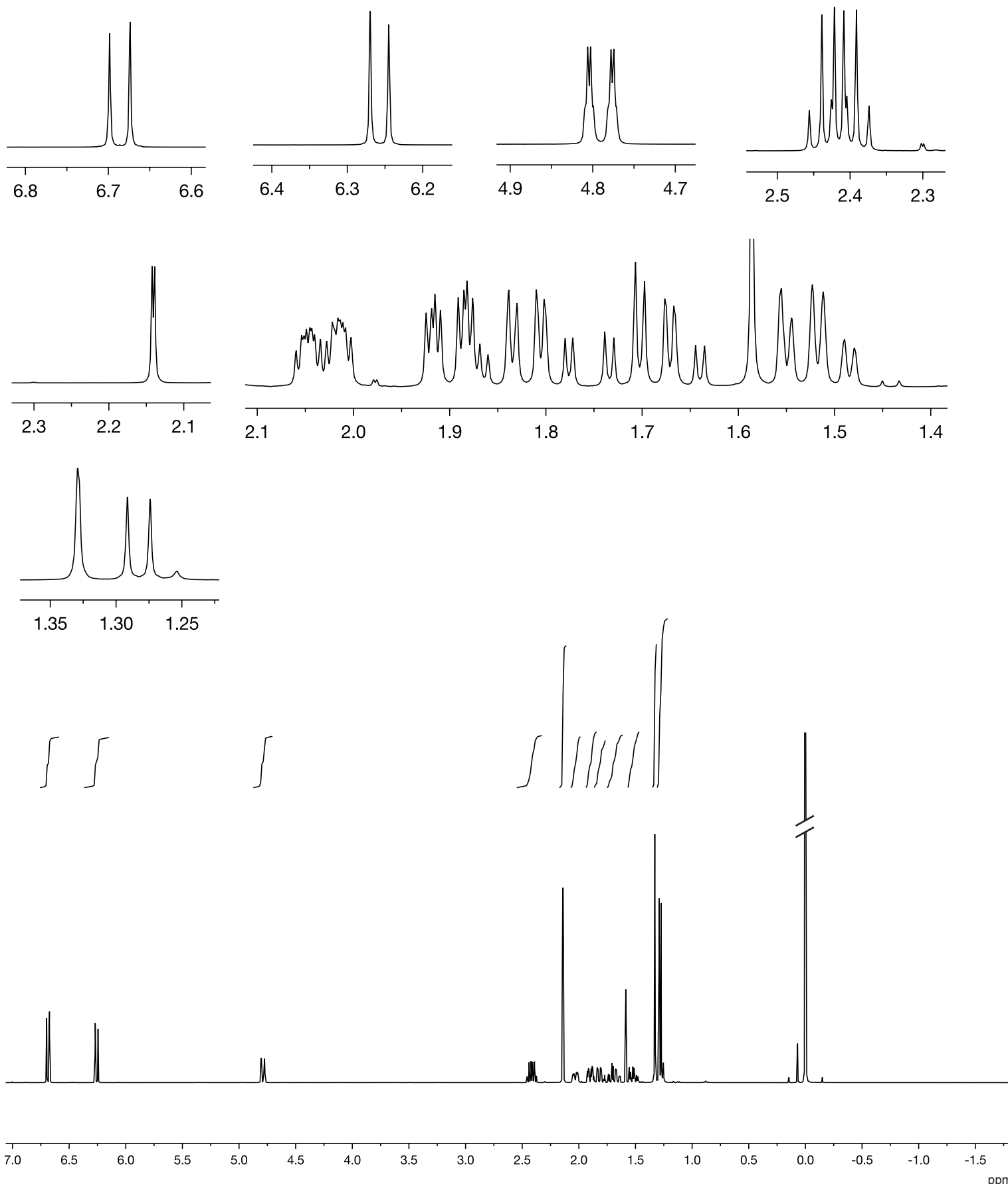
IR: Perkin Elmer Modell Spectrum 100



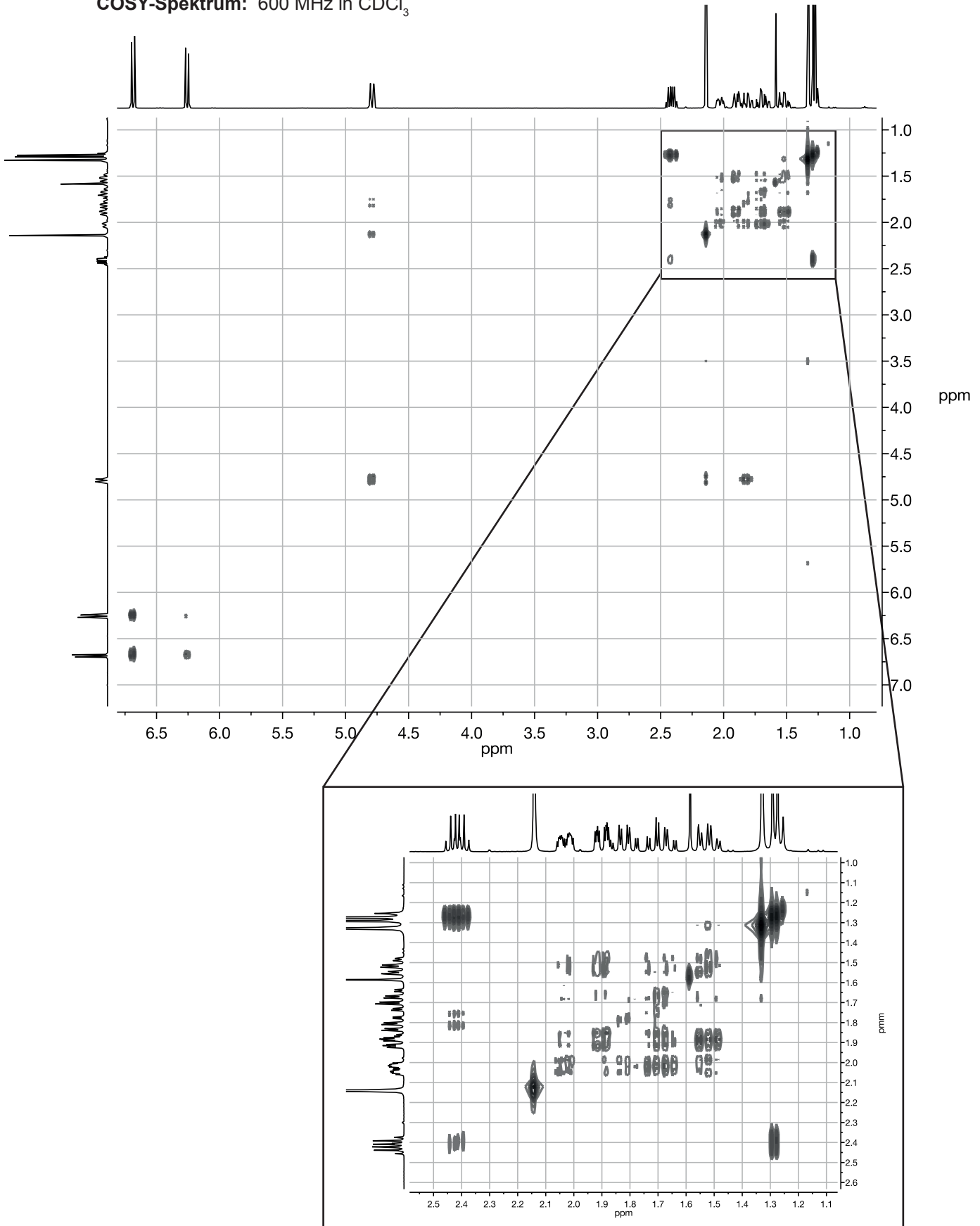
MS: EI, 75eV

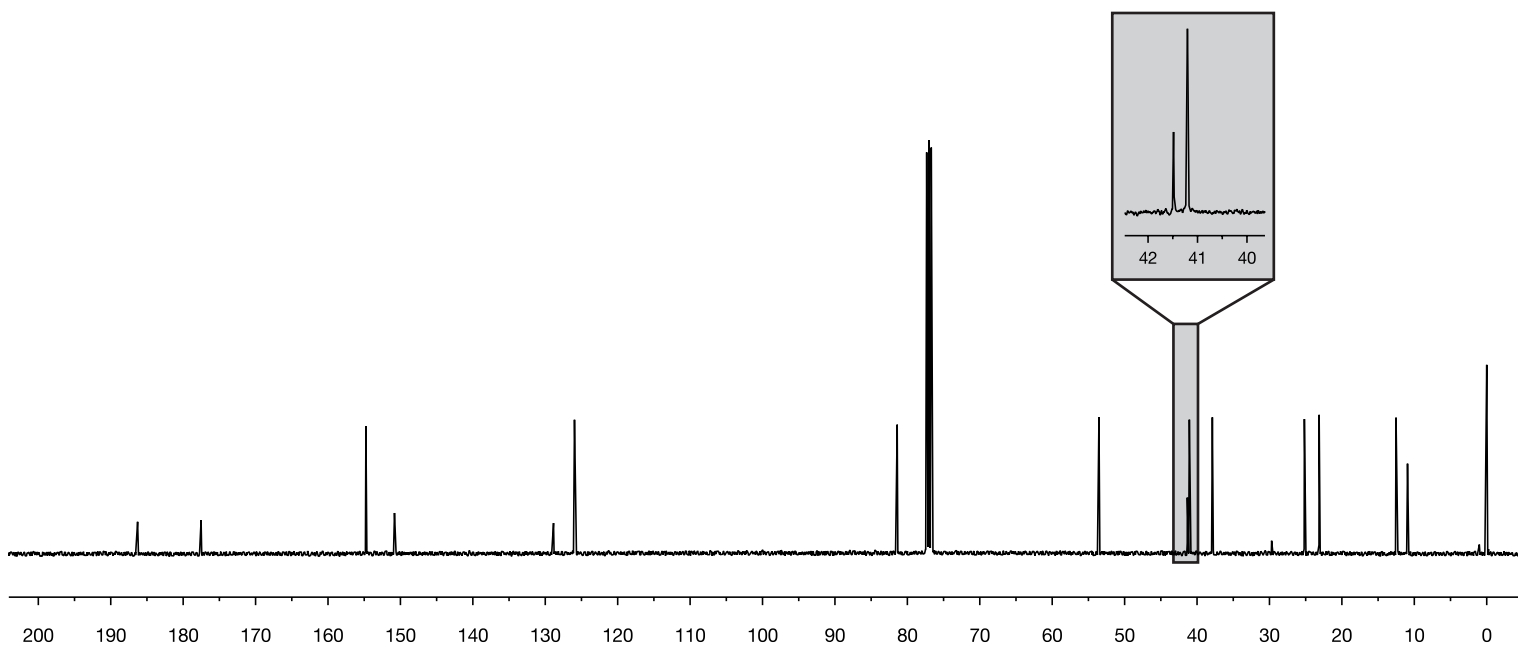
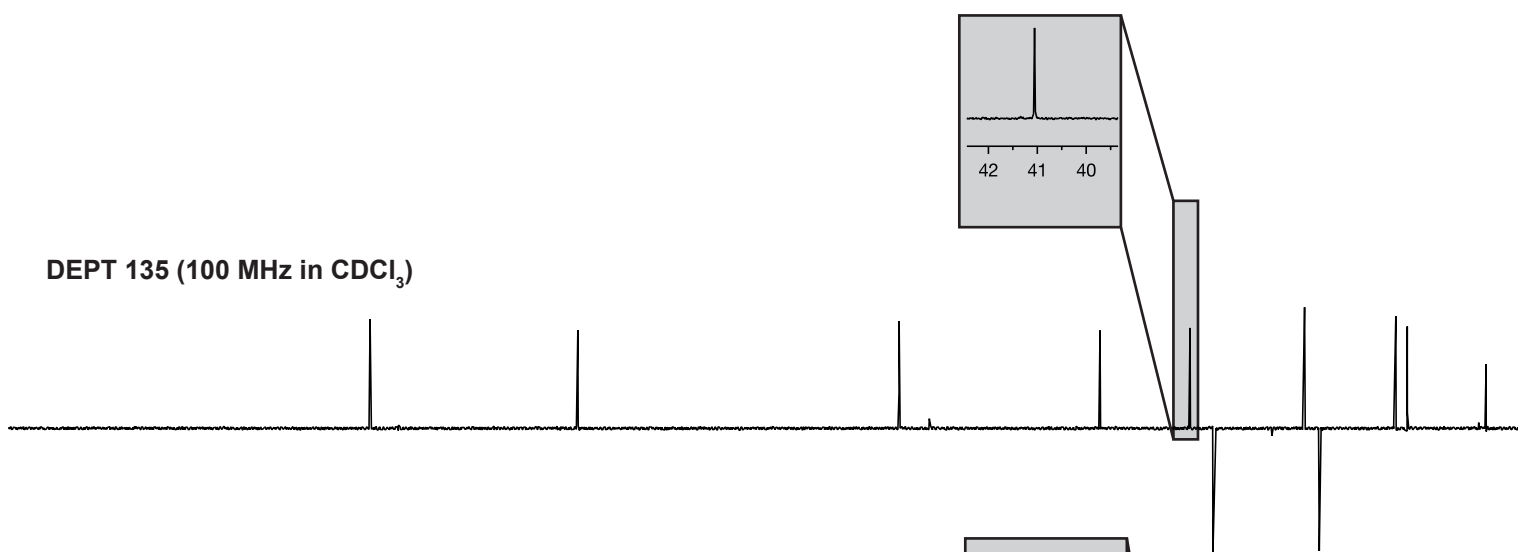


¹H-NMR: 400 MHz in CDCl₃



COSY-Spektrum: 600 MHz in CDCl₃



^{13}C -NMR: 100 MHz in CDCl_3 **DEPT 135 (100 MHz in CDCl_3)****DEPT 90 (100 MHz in CDCl_3)**