

Prüfungsaufgabe 1 Spektrenaufgabe Vorwärtslösung

Im **separaten Handout** finden Sie die IR-, Massen-, ^{13}C -NMR und ^1H -NMR-Spektren der Verbindung **C05**.

Bearbeiten Sie die folgenden Fragen.

Ziel: Ermittlung der Konstitution von **C05**.

Zum IR Spektrum (4 Punkte):

(I) Ordnen Sie die Bande bei 2994 cm^{-1} der entsprechenden Molekülschwingung zu.

(II) Wie ist der Zusammenhang zwischen der Wellenzahl und der Frequenz der entsprechenden Schwingung?

(III) Von welchen Faktoren hängt die Position einer Bande im IR-Spektrum ab? Erklären Sie den Fall eines hypothetischen zwei atomigen Moleküls.

Zum MS (4 Punkte):

(I) Erklären Sie das Isotopenmuster für **a)** den Basispeak und **b)** den Peak bei m/z 122.

(II) Welche Ionisationsmethode wurde verwendet? Erklären Sie die Methode.

Zum ^1H -NMR-Spektrum (2 Punkte):

(I) Welchen Ursprung haben die drei Peaks im ^1H -NMR-Spektrum?

Zum ^{13}C -NMR-Spektrum (1 Punkte):

(I) Bestimmen Sie die Art des Kohlenstoffs mit Hilfe der ^{13}C -NMR-Spektren.

Chemische Verschiebung	C, CH, CH ₂ , CH ₃
30 ppm	
81 ppm	

Zum Gesamten (15 Punkte):

(I) Wie lautet die Summenformel des gesuchten Moleküls **C05**?


(II) Berechnen Sie die Anzahl der Doppelbindungsäquivalente mit Hilfe der Summenformel. (Geben Sie die Rechnung an.)

(III) Welche Strukturelemente sind im gesuchten Molekül **C05** vorhanden? Berücksichtigen Sie alle bisher gesammelten Informationen.

(IV) Zeichnen Sie die Konstitution des Moleküls **C05**.




(V) Welches Fragment ist für das Signal bei 52 m/z im Massenspektrum verantwortlich? Geben Sie die Summenformel an und schlagen Sie eine Struktur für das Fragment vor.

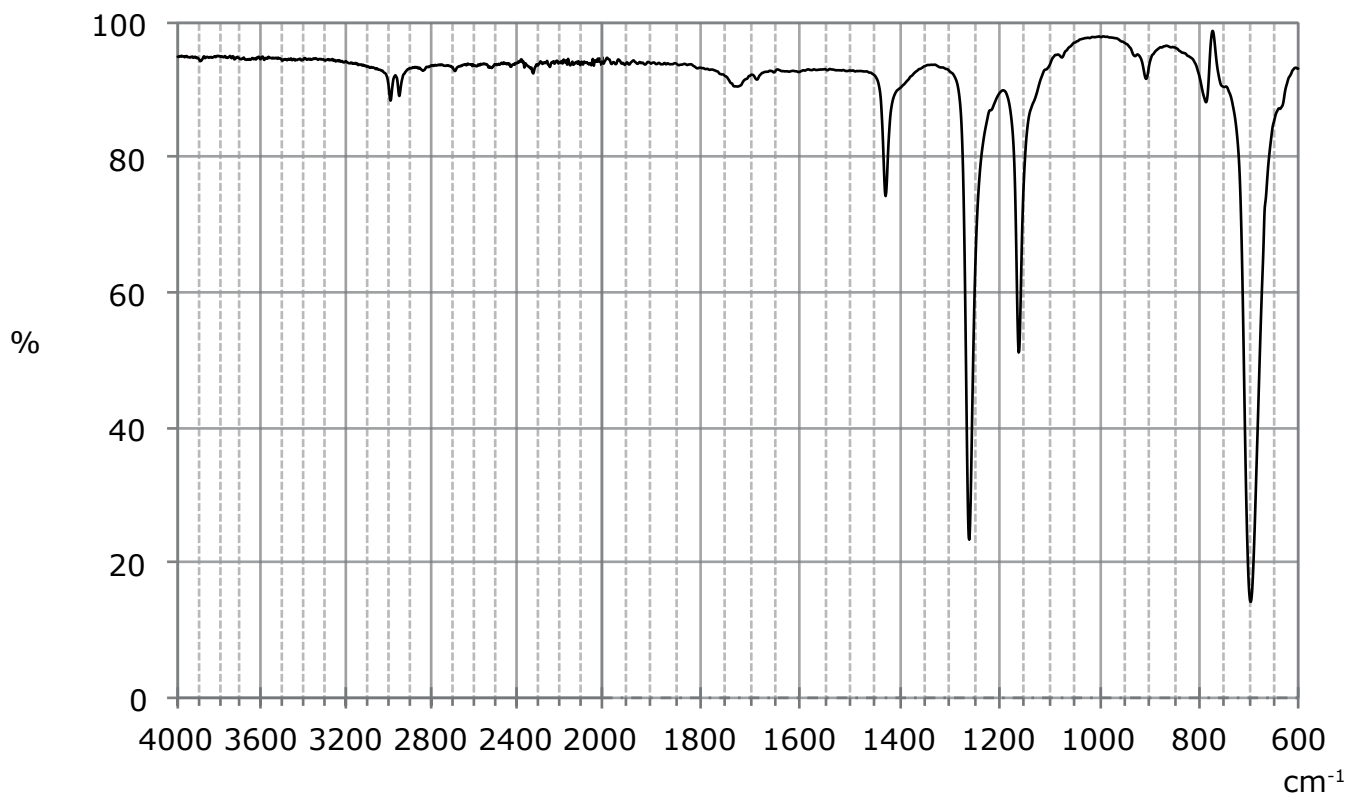
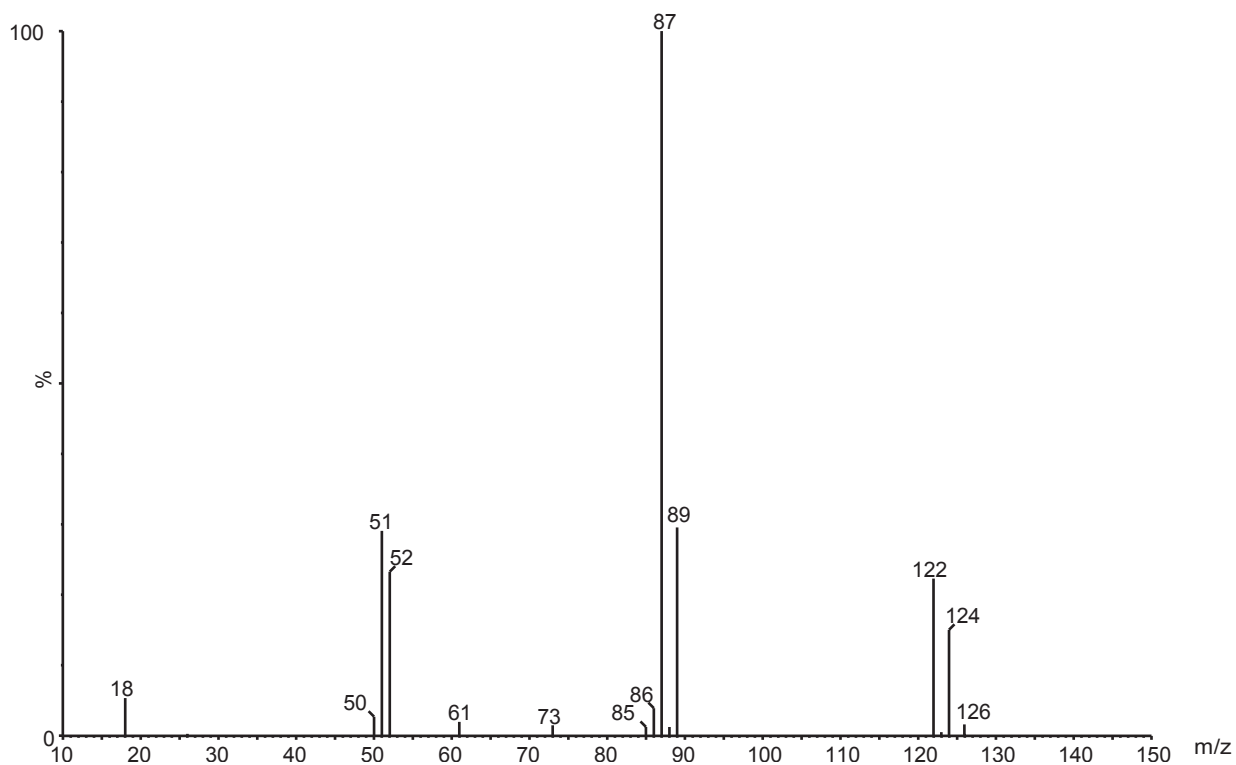


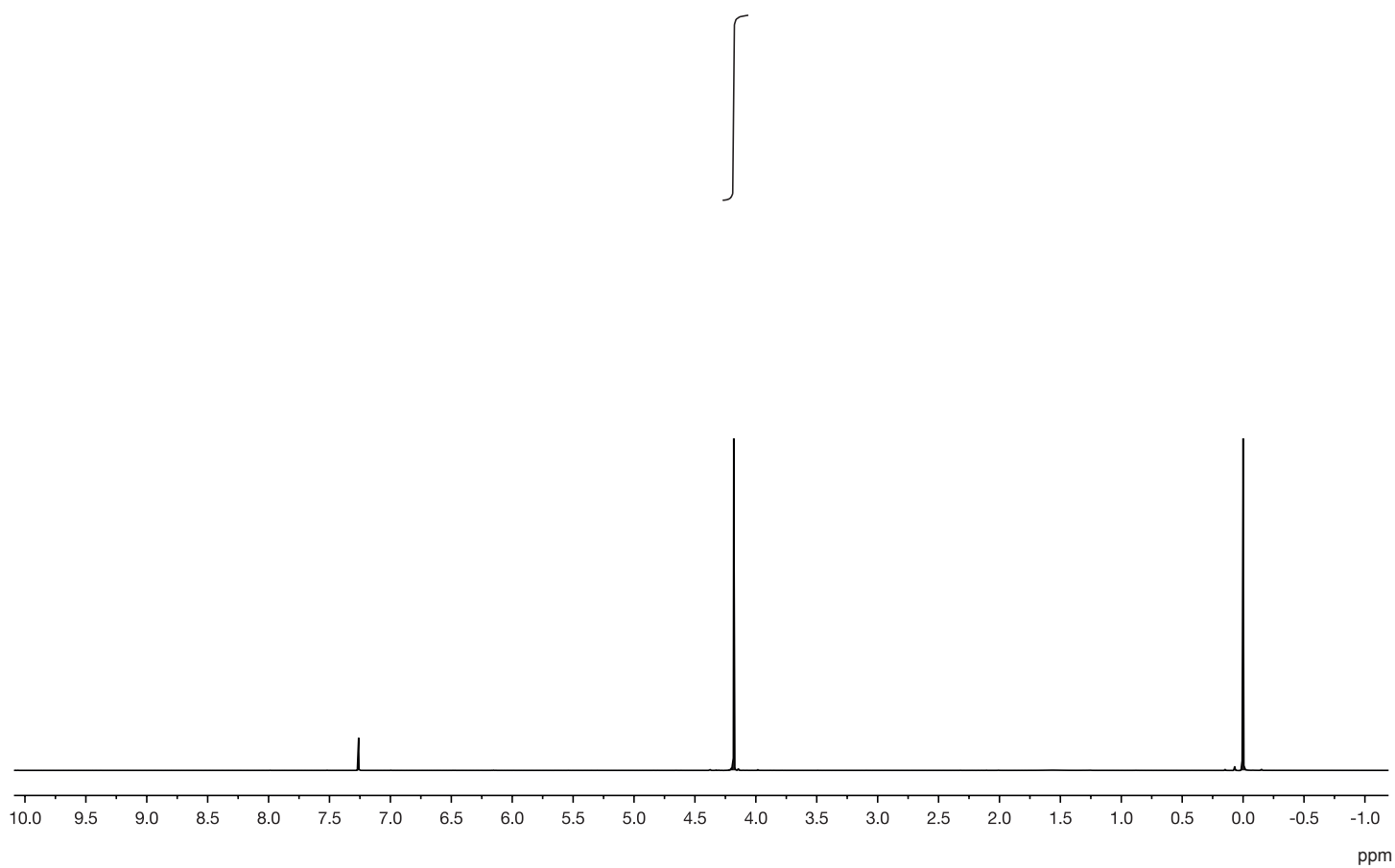
(VI)

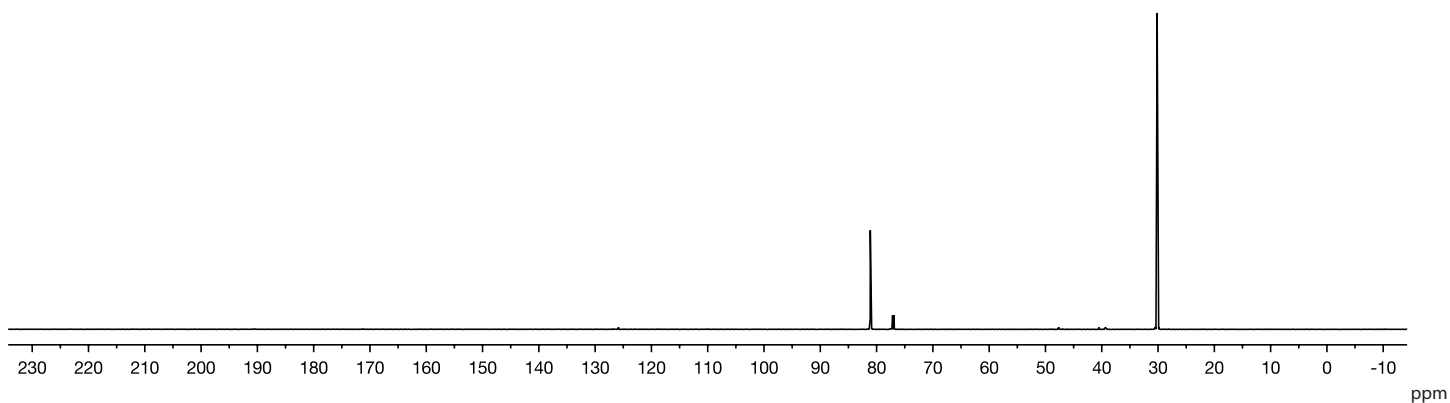
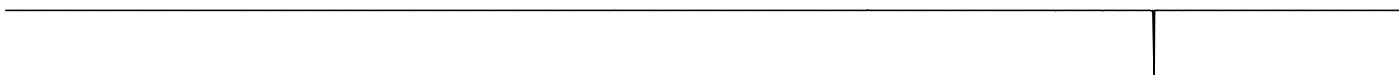
a) Welches Strukturelement im Molekül **C05** ist nicht im IR-Spektrum sichtbar? Begründen Sie.

b) Würde man dieses Strukturelement im Raman-Spektrum sehen? Begründen Sie.



IR: Perkin Elmer Modell Spectrum 100**MS:** EI, 75eV

¹H-NMR: 400 MHz in CDCl₃

¹³C-NMR: 500 MHz in CDCl₃**DEPT 135****DEPT 90**