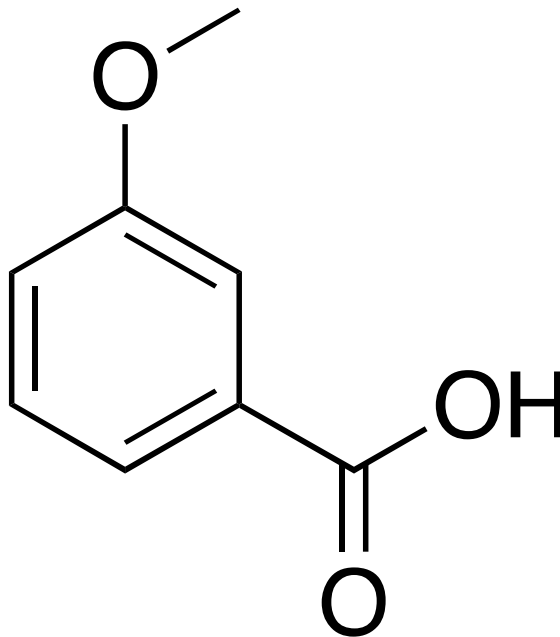


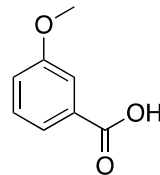
Prüfungsaufgabe 2 Spektrenaufgabe Rückwärtslösung

Im **separaten Handout** finden Sie die IR-, Massen-, ^1H -NMR- und ^{13}C -NMR-Spektren des Moleküls **C06**.



C06

Bearbeiten Sie die folgenden Fragen.



Zum IR-Spektrum (4 Punkte):

(I) Welche Molekülschwingungen verursachen diese Banden im IR-Spektrum?

Bandenposition	Schwingung
1588 cm^{-1}	
1694 cm^{-1}	
2840 cm^{-1}	

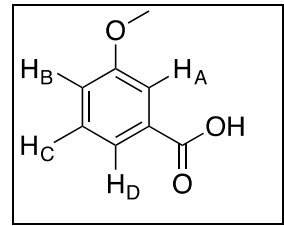
(II) Erklären Sie das breite Bande zwischen 2400 und 3100 cm^{-1} im IR-Spektrum.

Zum Massenspektrum (3 Punkte):

(I) Zeichnen Sie die Fragmente, die zu den Signalen im Massenspektrum bei m/z 135 und 107 führen. (inkl. Ladung)

Zum $^1\text{H-NMR-Spektrum}$ (11 Punkte):

(I) Bei allen vier Multipletts im aromatischen Bereich handelt sich um ein Dublett von Dublett von Dublett (ddd). Welche zwei Multipletts können Sie aufgrund der relativen Grösse der Kopplungskonstanten gut zu ordnen? Erklären Sie und verwenden Sie die Indices in der Abbildung rechts.



(II)

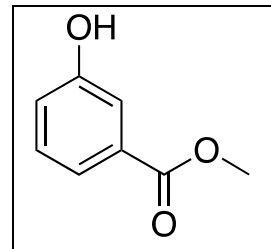
- a)** Berechnen Sie die Kopplungskonstanten für das Multiplett bei 7.17-7.21 ppm.
b) Wie verändert sich der Abstand zwischen den Sublinien dieses Multipletts (in Hz), wenn Sie von einem 500 MHz Spektrometer zu einem 300 MHz Spektrometer gehen?

(III) Wie viele Multipletts mit verschiedener chemischer Verschiebung im $^1\text{H-NMR-Spektrum}$ würden Sie erwarten, wenn die Carboxylgruppe in para-Position zur Methoxygruppe stehen würde. Begründen Sie.

(IV) Generell: Welche Effekte bestimmen den Einfluss einer Methoxygruppe auf die chemische Verschiebung der aromatischen Signale im ^{13}C -NMR-Spektrum? Unterscheiden Sie zwischen ipso, ortho, meta und para Position.

Allgemein (3 Punkte):

(I) Was wären die spektralen Unterschiede zwischen dem rechts abgebildeten Molekül und dem Molekül **C06**? Geben Sie zu jeder unten erwähnten Analysetechnik einen erwarteten Unterschied an.

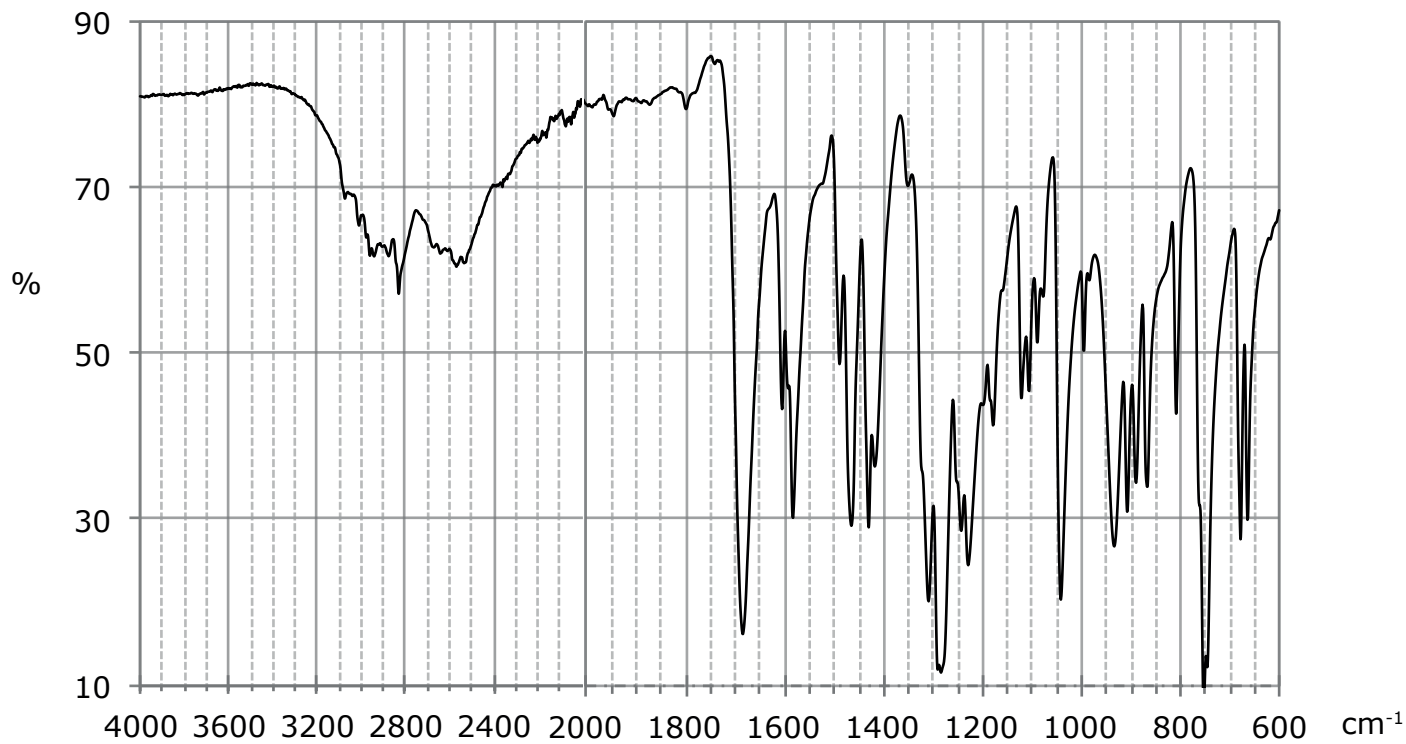


IR:

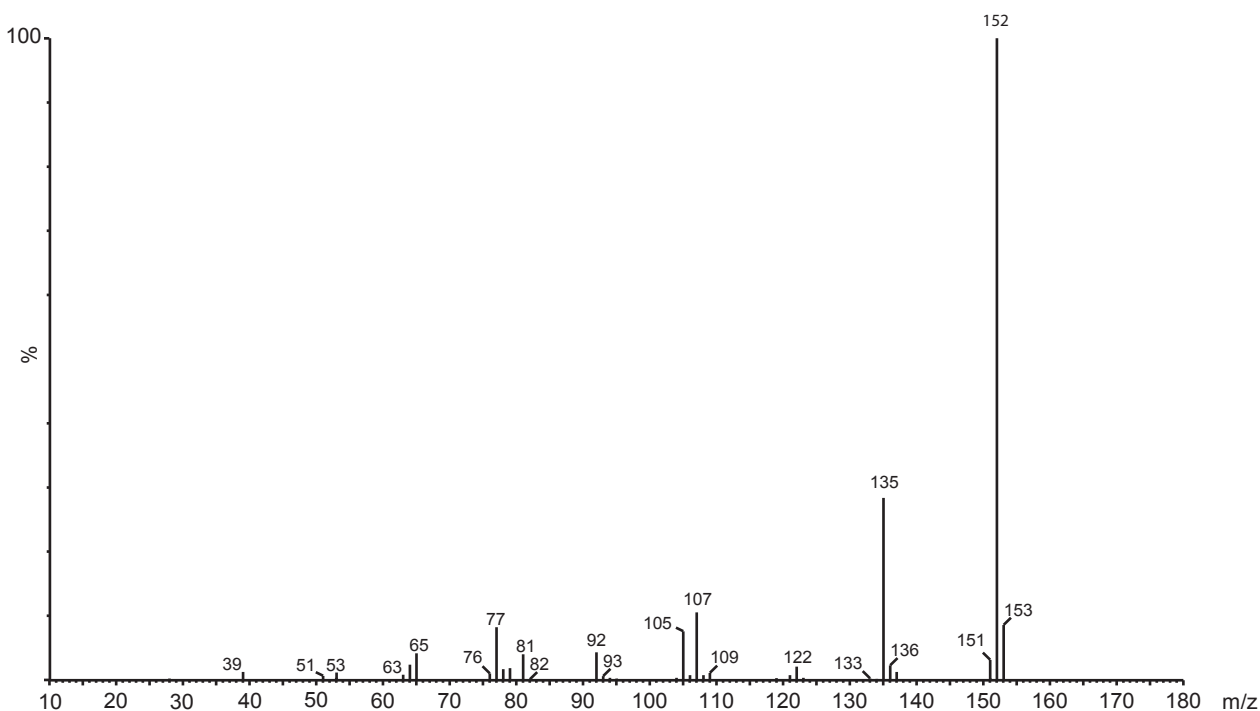
MS:

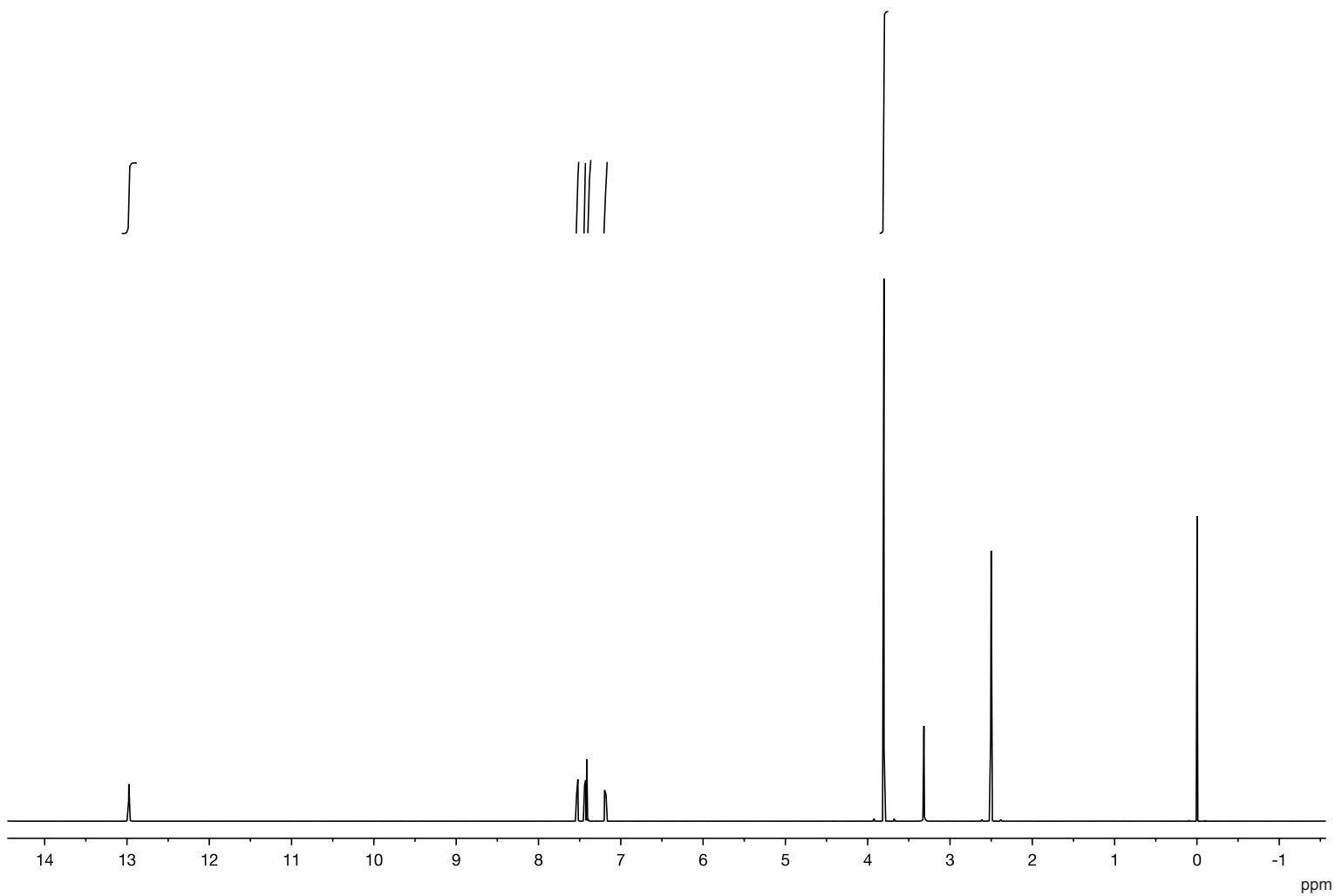
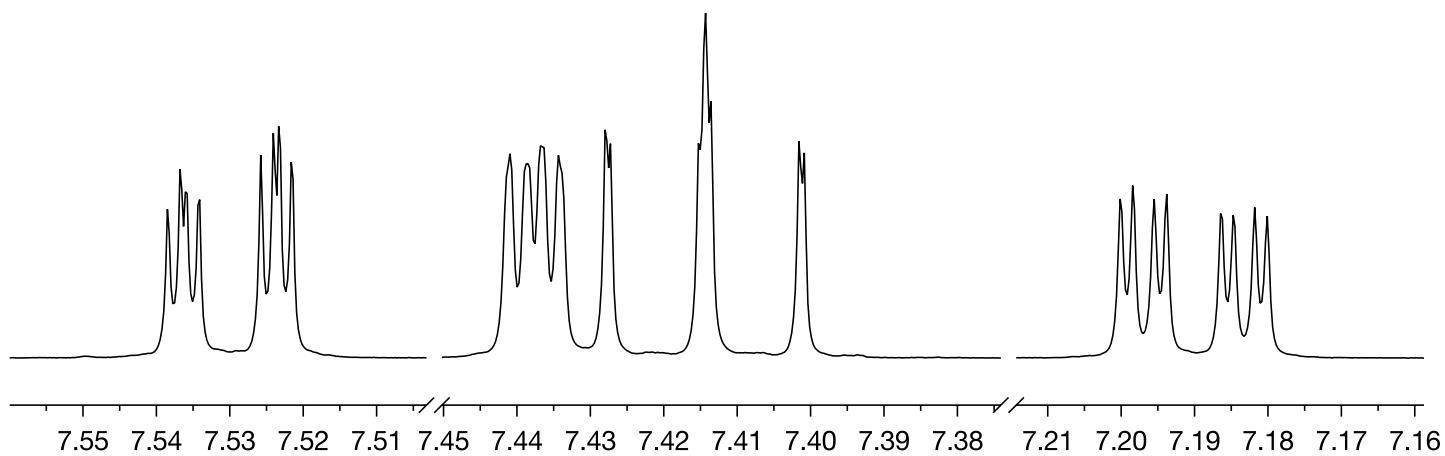
^1H -NMR-Spektrum:

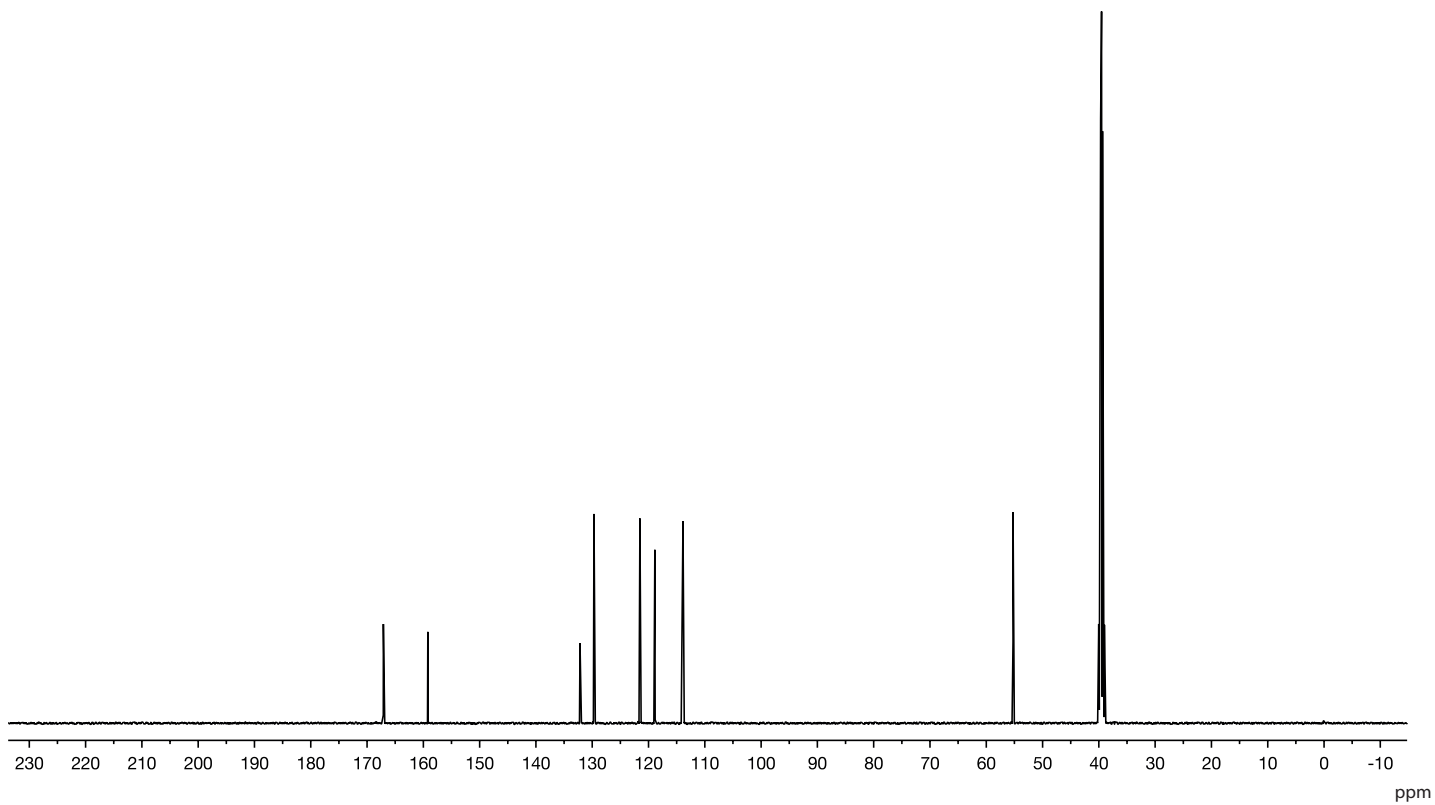
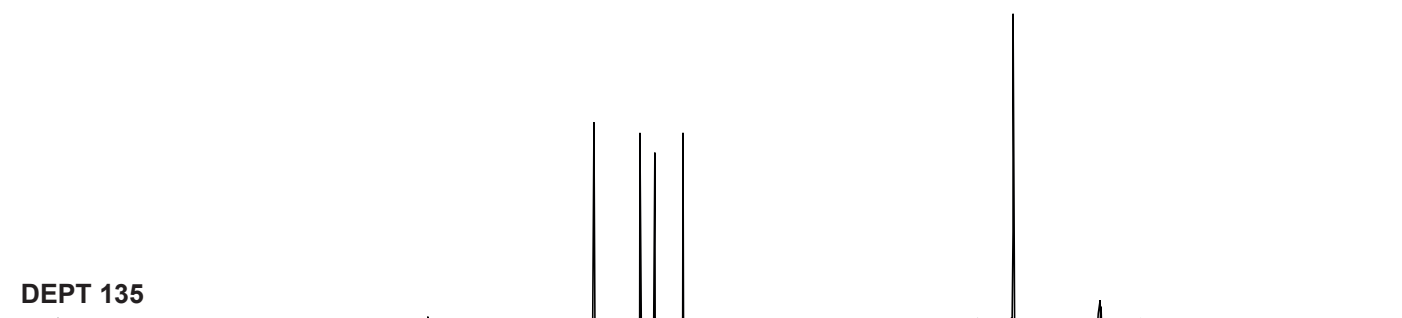
IR: Perkin Elmer Modell Spectrum 100



MS: EI, 75eV



$^1\text{H-NMR}$: 500 MHz in DMSO-d6

^{13}C -NMR: 500 MHz in DMSO-d₆**DEPT 135****DEPT 90**