





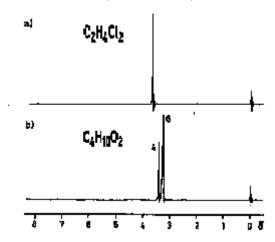
### **Chemische Verschiebung**

1. Zeichnen Sie zu den nachfolgend aufgeführten Stoffen die Strukturformeln! Unterscheiden Sie dann zwischen chemisch äquvalenten und nichtäquivalenten Kernen. Bezeichnen Sie die Strukturen so, dass äquivalente Protonen den gleichen Buchstaben erhalten (A, B, C....). Damit legen Sie die Zahl der Signalgruppen fest. Tragen Sie mit Hilfe der Tabelle NMR-T1 die ungefähre Lage der Signale und die Nummer in der Tabelle ein (siehe Beispiel)!

		$\begin{array}{c c} H_A & H_B \\ H_A -                                  $					
Ethen	Tb	Chlorethan	Tb	Aceton (Propanon)	Tb	Propan-2-ol	Tb
Α δ=		A $\delta = 1.4-1.7$	8	Α δ=		Α δ=	
Β δ=		B $\delta = 3.5 - 3.8$	27	Β δ=		Β δ=	
C δ=		C δ=		C δ=		C δ=	
D δ=		D δ=		D δ=		D δ=	

2-Brom-2-methyl- propan	Tb	Tetramethylsilan (TMS)	Tb	Ethansäureethylester		Ethanal	Tb
Α δ=		Α δ=		Α δ=		Α δ=	
Β δ=		Β δ=		Β δ=	·	Β δ=	
C δ=		C δ=		C δ=		C δ=	
$D \delta =$		D δ=		D δ=		D δ=	

2. Um welche Verbindung könnte es sich handeln (Strukturformel)?



3. Die Signale der Methylprotonen in CH<sub>3</sub>-X verändern ihre Lage charakteristisch als Funktion von X. Ordnen Sie nachstehende Verbindungen nach sinkender Abschirmung der Methylprotonen!

CH <sub>3</sub> -H	CH <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> -F	CH <sub>3</sub> -SH	CH <sub>3</sub> -OH	CH <sub>3</sub> -NH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub> -Si(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>

www.kappenberg.com	Materialien	Spektroskopische Methoden	9/94 bzw. 10/2012	1	
--------------------	-------------	---------------------------	-------------------	---	--







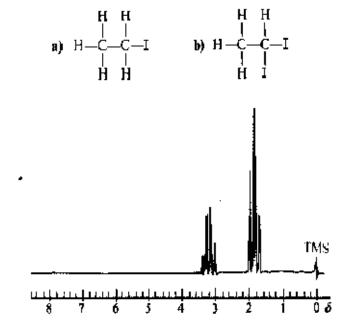
## Spin - Spin - Kopplung

1. Zeichnen Sie zu den nachfolgend aufgeführten Stoffen die Strukturformeln! Unterscheiden Sie dann zwischen chemisch äquvalenten und nichtäquivalenten Kernen. Bezeichnen Sie die Strukturen so, dass äquivalente Protonen den gleichen Buchstaben erhalten (A, B, C....). Tragen Sie die Multiplizität der einzelnen Signalgruppen in die Tabelle ein!

Ethan A: B: C:	Bromethan A: B: C:	Aceton (Propanon) A: B: C:	2-Methylpropanal A: B: C:
D:	D:	D:	D:
Ethansäure	Ethylmethylether	Ethansäuremethylester	Methanal
A:	A:	A:	A:
B:	B:	B:	B:
C:	C:	C:	C:
D:	D:	D:	D:

#### Aufgabe 2:

Mit welcher der beiden Strukturformeln ist das unten abgebildetete Spektrum in Übereinstimmung zu bringen? Geben sie die entsprechenden Multiplizitäten an!









#### Spin-Spin-Kopplung II

**Aufgabe 1**. Konstruieren Sie ein 100 MHz- $^{1}$ H-NMR-Spektrum eines hypothetischen 1,2,3 tri-substituierten Benzolderivates mit den Daten: Chemische Verschiebung ( $\delta$  in Hz!) Kopplungskonstanten (in Hz)

 $H_A = 530 Hz$ 

 $J_{A,B} = 10 \text{ Hz}$ 

 $H_B = 580 Hz$ 

 $J_{A,C} = 4 Hz$ 

 $H_{C} = 630 \text{ Hz}$ 

 $J_{BC} = 8 Hz$ 

- a) Zeichnen Sie nur den Ausschnitt des NMR-Spektrums von 500 Hz bis 650 Hz! Der Maßstab soll 1 cm pro 10 Hz betragen.
- b) Zeichnen Sie die entsprechenden Aufspaltungsbäumchen!



**Aufgabe 2:** Die folgende Abbildung zeigt eine Reihe von Aufspaltungsbildern für jeweils 3 verschiedene Protonen oder Protonengruppen, die jeweils von links beginnend mit A, B und C bezeichnet sind.

- a) Ermitteln Sie die Intensitäten I (die Anzahl der Protonen jeder Gruppe)! Summieren Sie dazu die Strecken!
- b) Geben Sie die Kopplungskonstanten J<sub>AB</sub>, J<sub>AC</sub>, und J<sub>BC</sub> an! (Suchen Sie Ihnen bekannte Kopplungsmuster, die evtl. auch ineinander verschoben sind! Messen Sie die Abstände der einzelnen Linien einer Gruppe und schauen Sie bei den anderen Gruppen, ob dort diese Abstände auch vorkommen)! Maßstab: 2 cm pro 10 Hz.

A (I: )

B (I: )

C (I: )

A (I: )

B (I: )

C (I: )



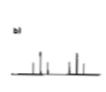
A (I: )



B (I: )



C (I: )

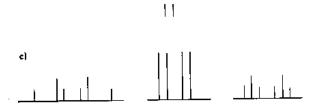


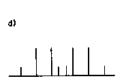
A (I: )

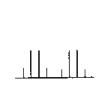


B (I: )







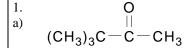






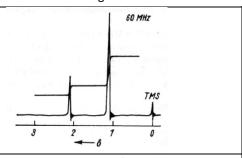
#### Kombinierte Aufgaben

Ordnen Sie dem Spektrum die jeweilige Verbindung zu! Begründen Sie Ihre Entscheidung!



$$b_0$$
 (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>C-CH<sub>2</sub>-C

b) 
$$(CH_3)_3C - CH_2 - C < 0$$
  
 $CH_3)_3C - CH_2 - C < 0$   
 $CH_3)_2CH - C - CH_2 - CH_3$ 

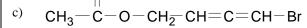


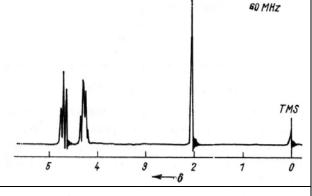
2. O 
$$CH_3 - C - O - CH_2 - C = C - CH_2 - Br$$

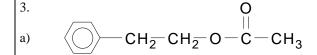
b)  $CH_3 - O - C - CH_2 - C = C - CH_2 - Br$ 

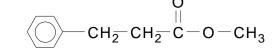
c)  $CH_3 - C - O - CH_2 - C = C - CH_2 - Br$ 

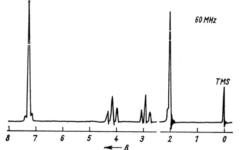
b) 
$$CH_3 - O - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - Br$$







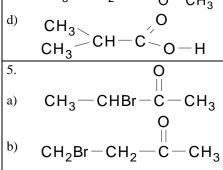


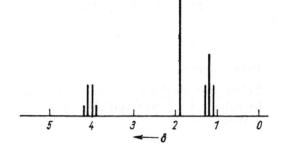


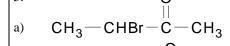
b)

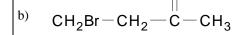
b) 
$$CH_3-C_O-CH_2-CH_3$$

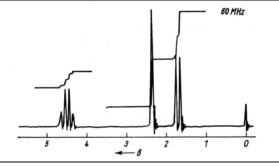
c) 
$$CH_3-CH_2-C$$
O- $CH_3$ 













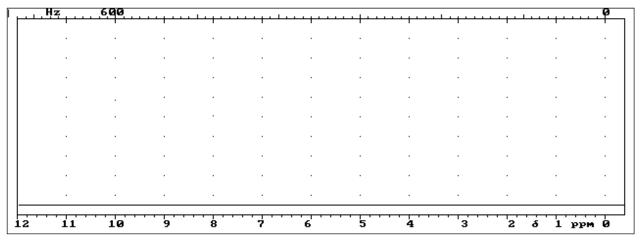




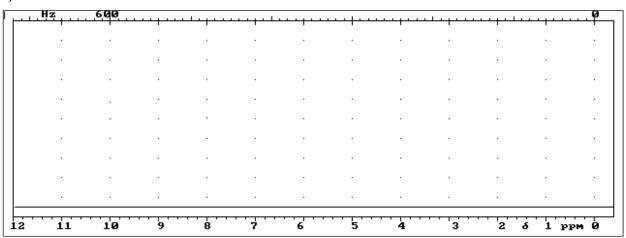
### Spektren

Zeichnen Sie die ungefähren NMR-Spektren für die folgenden Substanzen! Ermitteln Sie anhand der Tabellen die ungefähre chemische Verschiebung der Signalgruppen. Zeichen Sie das zu erwartende Kopplungsschema!

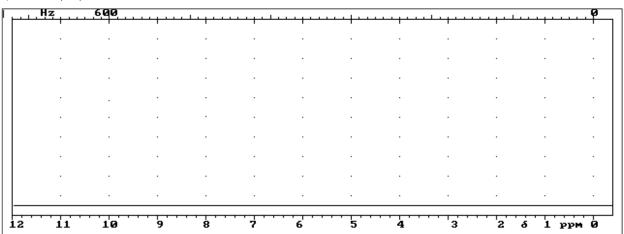
#### a) Chlor-methan



#### b) Chlor-ethan



## c) 1-Chlor-propan





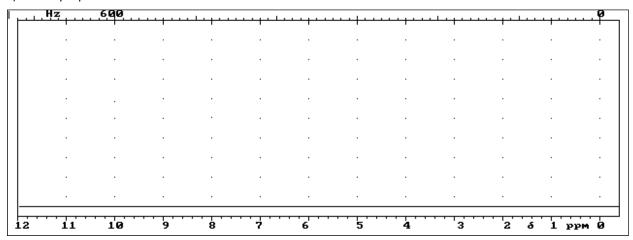




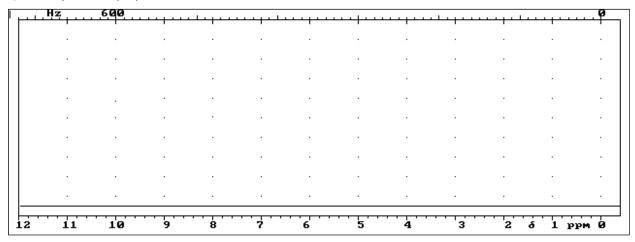
#### Spektren

Zeichnen Sie die ungefähren NMR-Spektren für die folgenden Substanzen! Ermitteln Sie anhand der Tabellen die ungefähre chemische Verschiebung der Signalgruppen. Zeichen Sie das zu erwartende Kopplungsschema!

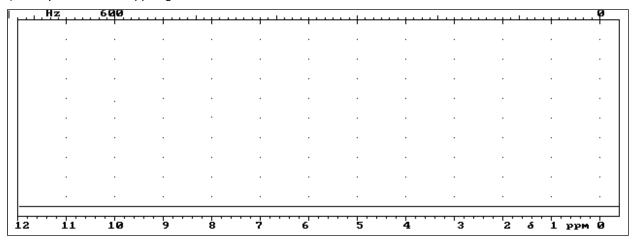
#### d) 2-Chlorpropan



#### e) 2-Methyl-2-chlor-propan



#### f) Phenylalkohol mit Kopplung über das Sauerstoffatom





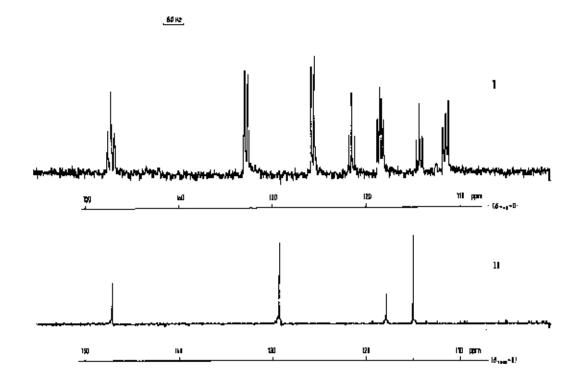




## <sup>13</sup>C-NMR-Spektroskopie

1. Nachfolgend sind das OFF-Resonanz- und das Breitband- entkoppelte Spektrum von Anilin abgebildet. Analysieren Sie das Spektrum und ordnen Sie die Lage der Signale zu. Zeichnen Sie Aufspaltungsbäumchen!

Angabe: Kopplungskonstanten:  ${}^{1}J_{C-H} = 160 \text{ Hz}$ ,  ${}^{2}J_{C-C-H} = 1-2 \text{ Hz}$ ,  ${}^{3}J_{C-C-C-H} = 6-10 \text{ Hz}$ .



2. Gegeben sei folgende Struktur und das zugehörige 13C rauschentkoppelte Spektrum mit der Multiplizität. Schreiben Sie die entsprechende Signalnummer an das entsprechende C-Atom in der Strukturformel!

