

## Zweite Klausur zur Vorlesung Spektroskopie und Strukturaufklärung molekularer Verbindungen 2

Vorname: \_\_\_\_\_

Name: \_\_\_\_\_

Matrikelnummer: \_\_\_\_\_

|        |       |       |       |       |       |       |       |       |       |      |
|--------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|
| 1,0    | 1,3   | 1,7   | 2,0   | 2,3   | 2,7   | 3,0   | 3,3   | 3,7   | 4,0   | 5,0  |
| 100–95 | 94–90 | 89–85 | 84–80 | 79–75 | 74–70 | 69–65 | 64–60 | 59–55 | 54–50 | 49–0 |

Ergebnis: Aufgabe 1: Punkte von 20 Punkten,

Aufgabe 2: Punkte von 20 Punkten,

Aufgabe 3: Punkte von 20 Punkten,

Aufgabe 4: Punkte von 20 Punkten,

Aufgabe 5: Punkte von 20 Punkten.

Summe: Punkte. Note: \_\_\_\_\_

### Sicherheitshinweis:

Gefragt ist jeweils ein und nur ein Konstitutionsvorschlag. Auch bei falschen Lösungen werden Teillösungen bzw. Strukturfragmente mit Punkten belohnt. Unter Umständen gibt es sogar mehrere sinnvolle Lösungen, die volle Punktzahl erzielen.

Nicht gefragt sind Strukturzuordnungen, Kopplungskonstanten, Argumente für den Lösungsweg. Dafür gibt es definitiv keine Punkte!

## Aufgabe 1 (20 Punkte)

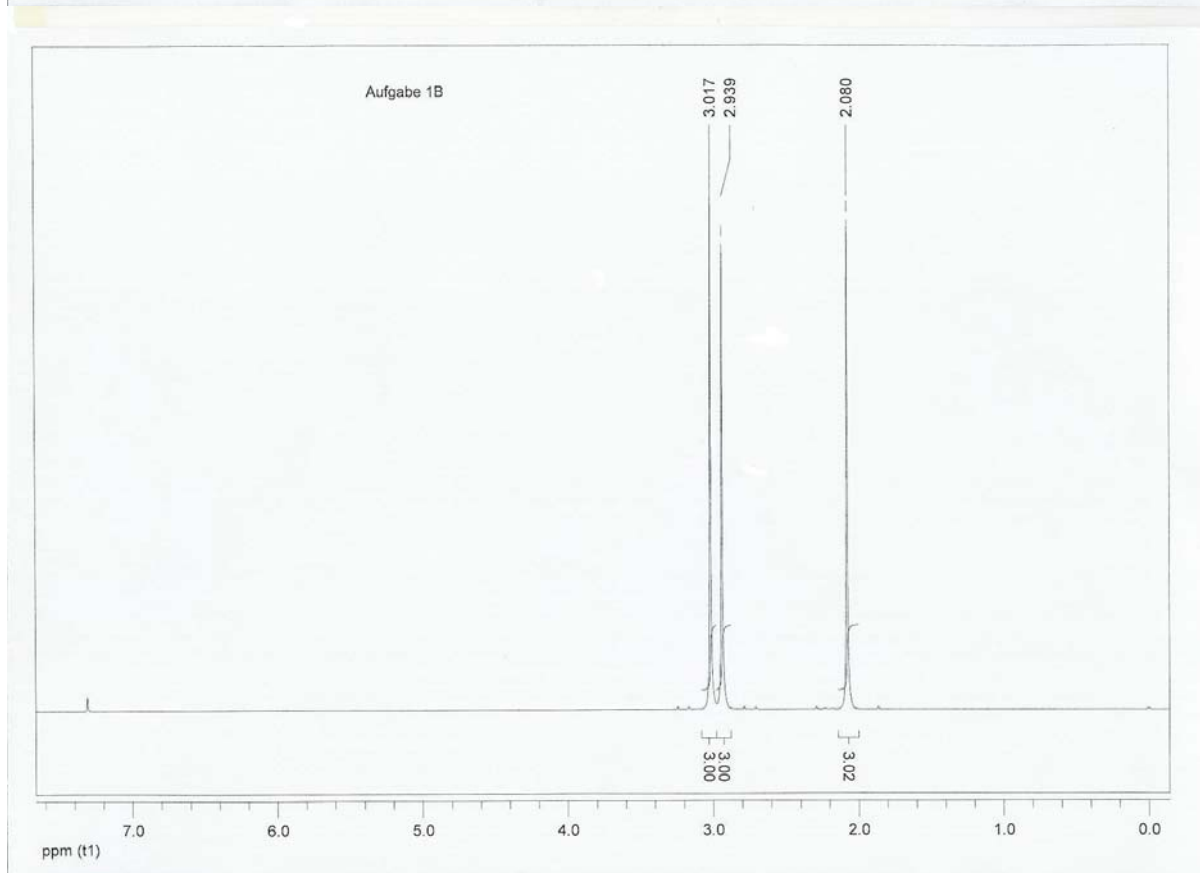
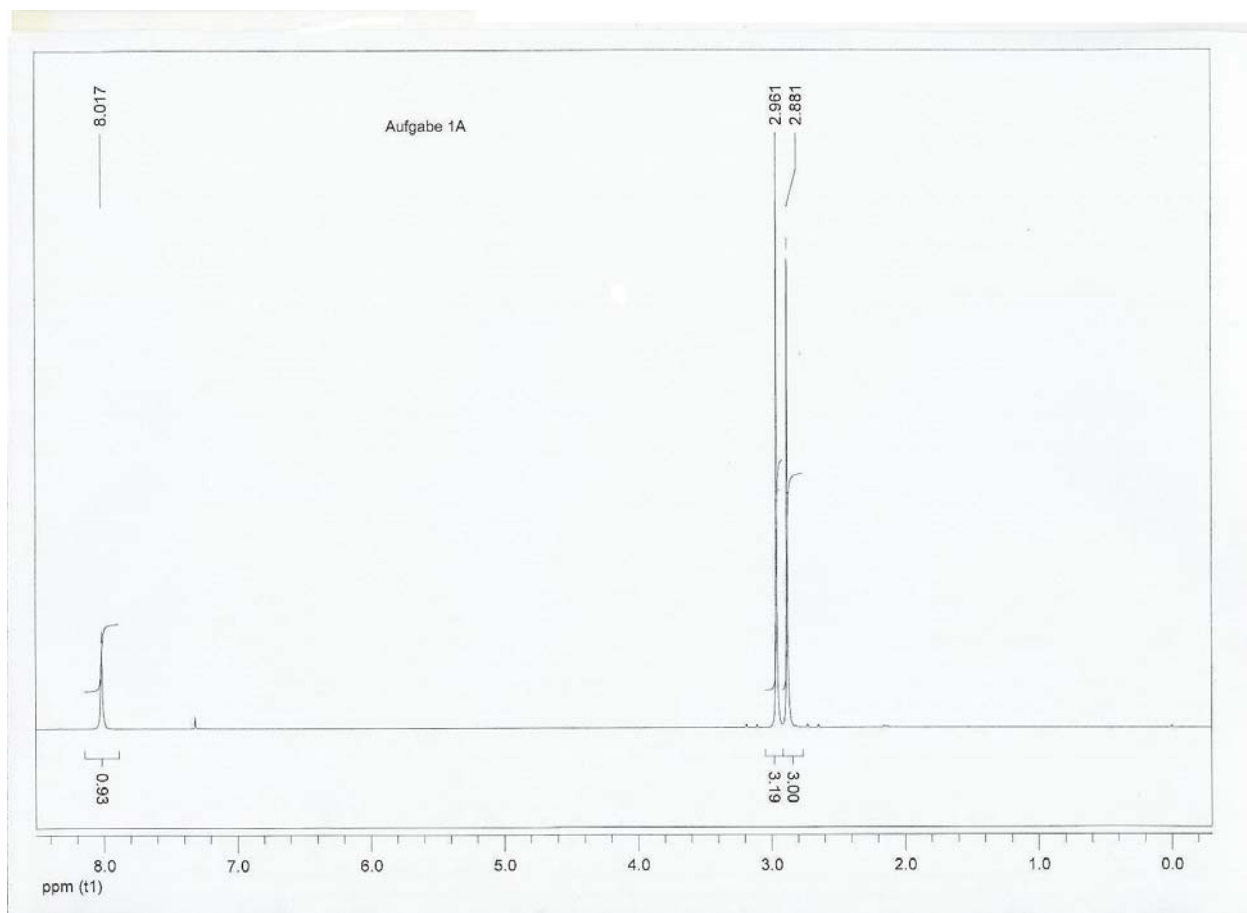
Auf der nächsten Seite (Seite 3) sehen Sie die  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren der Verbindungen **1A** und **1B**. Die anderen Daten der beiden Verbindungen lauten wie folgt:

Verbindung **1A**:  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 31.30$  ( $\text{CH}_3$ ),  $36.43$  ( $\text{CH}_3$ ),  $162.60$  ( $\text{CH}$ ) ppm.  
MS (EI),  $m/z$  (%): 73 (100) [ $\text{M}^+$ ], 58 (10), 44 (80), 42 (30). IR: 2940 (schwach), 2852 (schwach), 1687 (sehr stark), 1384 (mittel), 1086 (mittel)  $\text{cm}^{-1}$ .

Verbindung **1B**:  $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 21.51$  ( $\text{CH}_3$ ),  $35.03$  ( $\text{CH}_3$ ),  $38.00$  ( $\text{CH}_3$ ),  $170.49$  ( $4^\circ\text{-C}$ ). ppm. MS (EI),  $m/z$  (%): 87 (55) [ $\text{M}^+$ ], 72 (12), 44 (100), 43 (40). IR: 2933 (mittel), 2603 (schwach), 1646 (sehr stark)  $\text{cm}^{-1}$ , sowie diverse Banden im Fingerprintbereich.

Aufgabenstellung:

- 1) Geben Sie Strukturvorschläge für die Verbindungen **1A** und **1B** an (je 5 Punkte).
- 2) Erläutern Sie mit Hilfe einer mesomeren Grenzstruktur, warum die beiden Methylgruppen am Stickstoff diastereotop sind (10 Punkte).



## Aufgabe 2 (20 Punkte)

Auf der nächsten Seite (Seite 5) finden Sie das IR- und das  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum einer unbekannt, achiralen Verbindung.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 14.28$  ( $\text{CH}_3$ ),  $21.00$  ( $\text{CH}_3$ ),  $60.44$  ( $\text{CH}_2$ ),  $171.08$  ( $4^\circ\text{-C}$ ) ppm.

MS (EI),  $m/z$  (%): 88 (5) [ $\text{M}^+$ ], 73 (5), 70 (10), 61 (15), 45 (15), 43 (100), 29 (15).

Geben Sie hier **einen** Konstitutionsvorschlag an.

## Aufgabe 3 (20 Punkte)

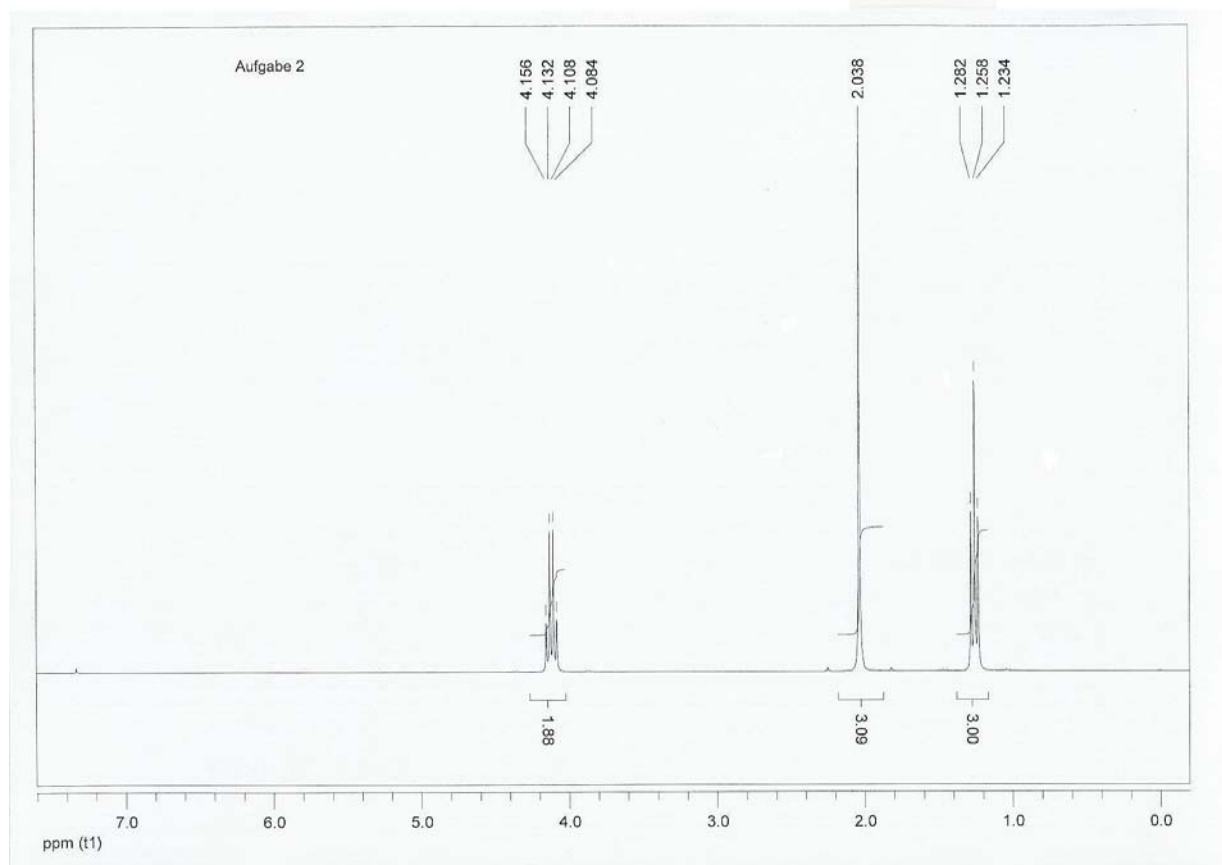
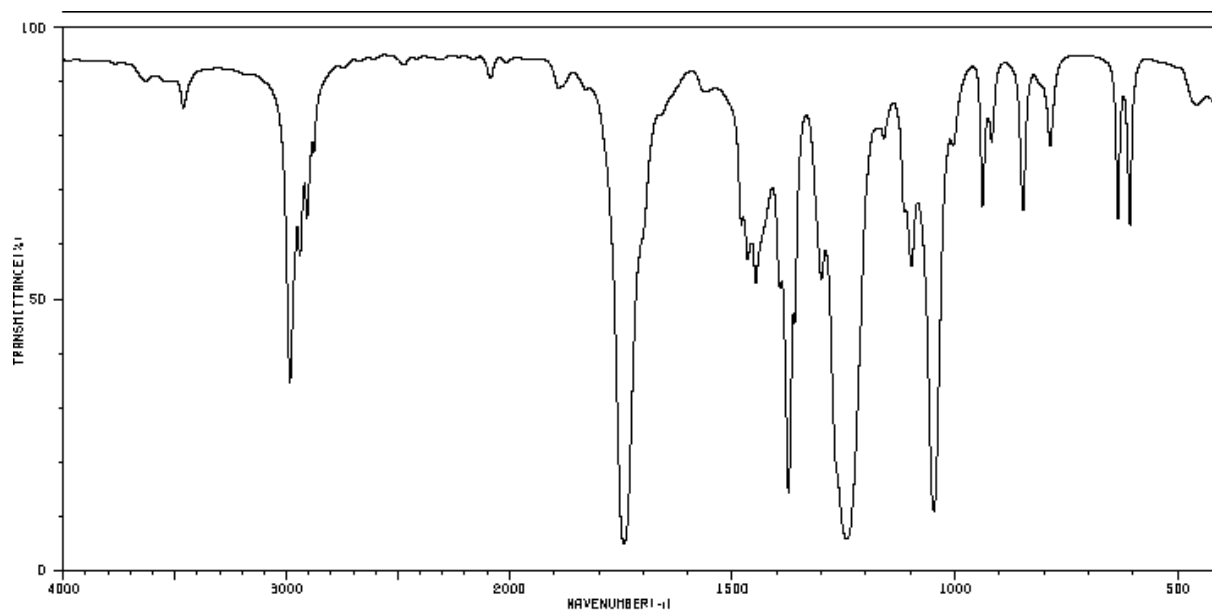
Auf der übernächsten Seite (Seite 6) finden Sie das IR- und das  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum einer unbekannt, achiralen Verbindung.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 22.95$  ( $\text{CH}_3$ ),  $68.47$  ( $\text{CH}$ ) ppm.

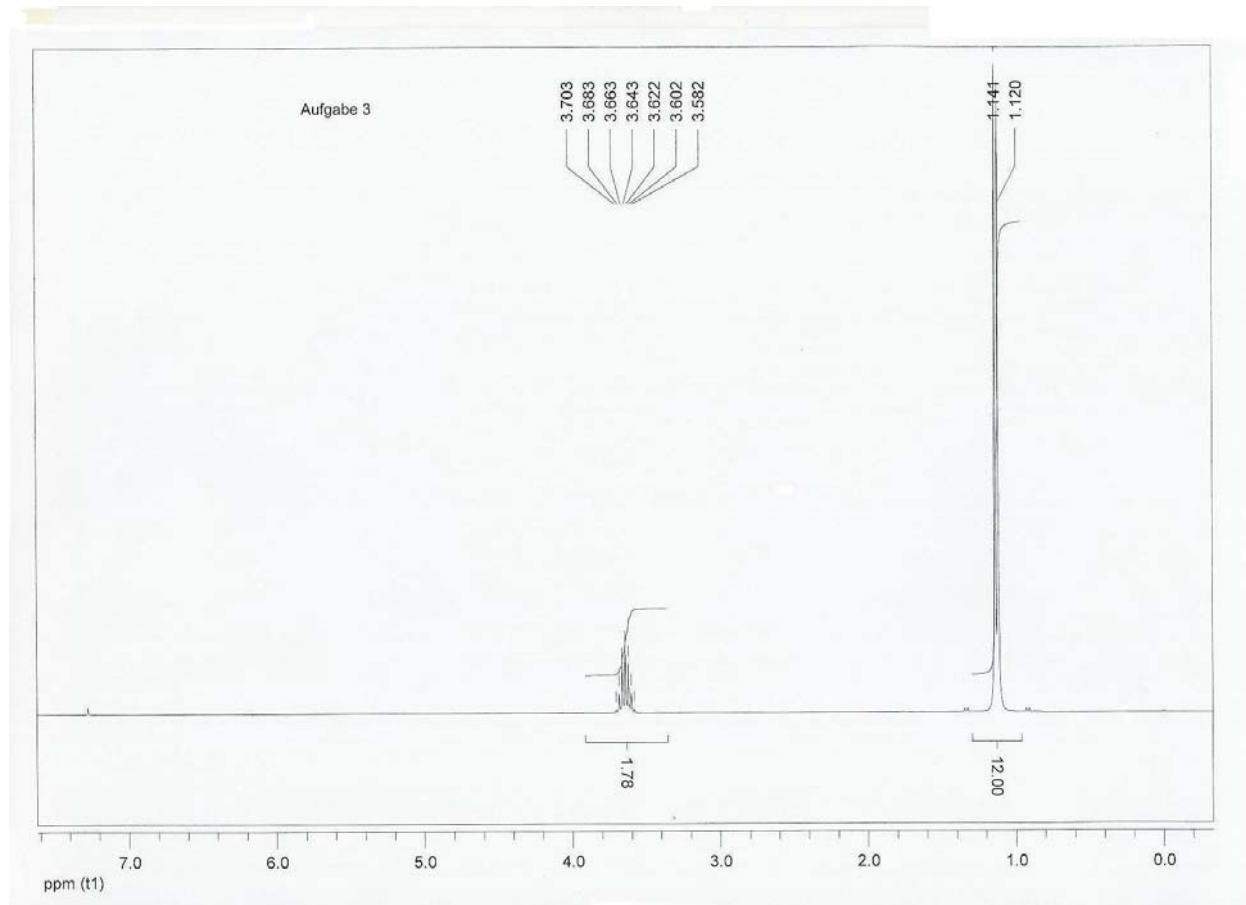
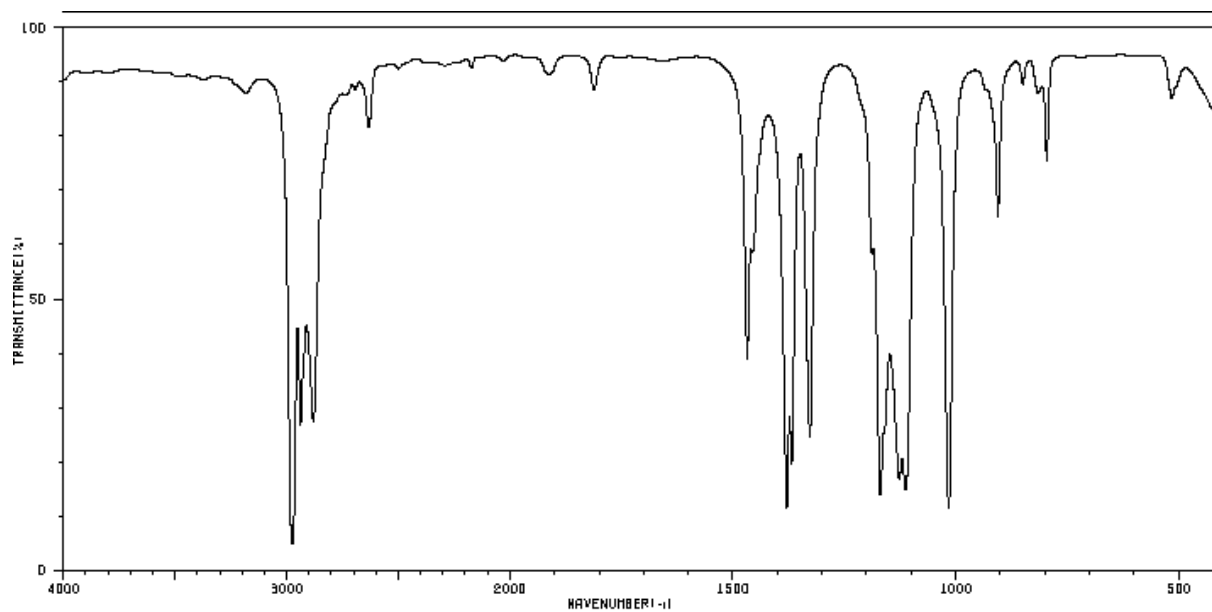
MS (EI),  $m/z$  (%): 102 (2) [ $\text{M}^+$ ], 87 (20), 59 (10), 45 (100), 43 (40).

Geben Sie hier **einen** Konstitutionsvorschlag an.

## Spektren für Aufgabe 2



## Spektren für Aufgabe 3



### Aufgabe 4 (20 Punkte)

Auf der nächsten Seite (Seite 8) finden Sie das IR- und das  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum einer unbekannt, achiralen Verbindung.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 24.02$  ( $\text{CH}_3$ ),  $34.18$  ( $\text{CH}$ ),  $125.79$  ( $\text{CH}$ ),  $126.42$  ( $\text{CH}$ ),  $128.34$  ( $\text{CH}$ ),  $148.83$  ( $4^\circ\text{-C}$ ) ppm.

MS (EI),  $m/z$  (%): 120 (25) [ $\text{M}^+$ ], 105 (100), 91 (8), 79 (9), 77 (11), 51 (10).

Geben Sie hier **einen** Konstitutionsvorschlag an.

### Aufgabe 5 (20 Punkte)

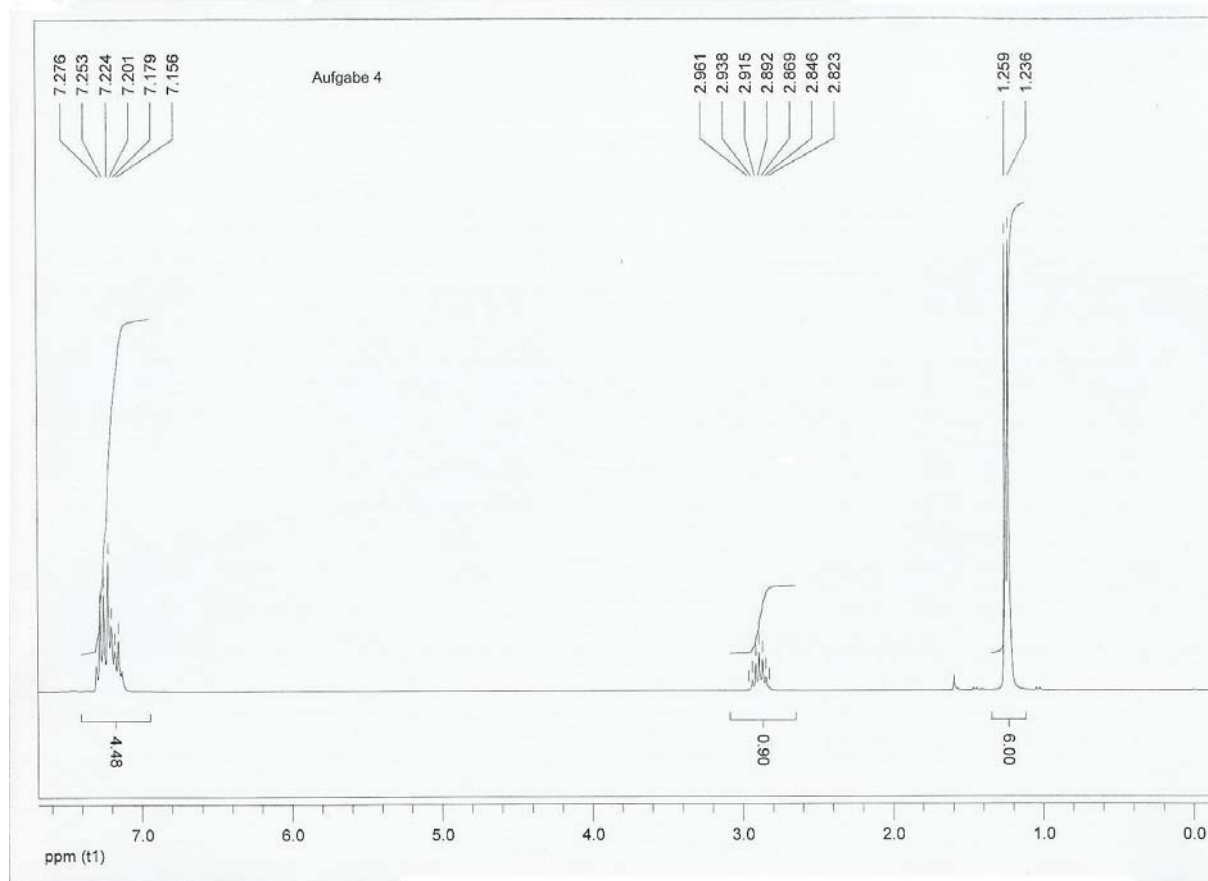
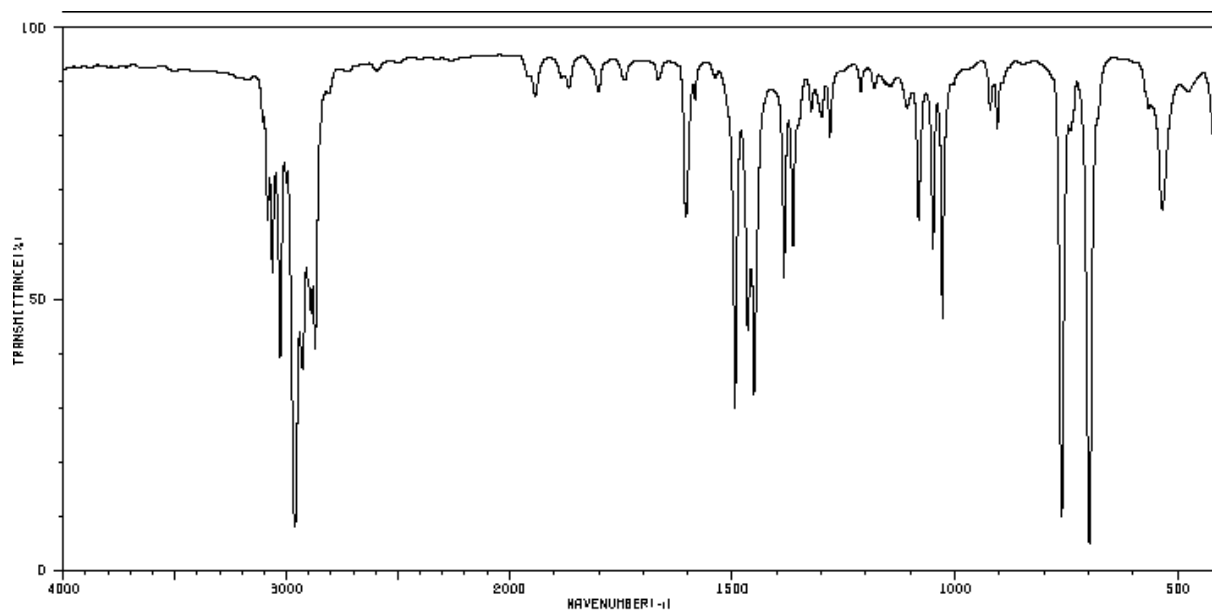
Auf der übernächsten Seite (Seite 9) finden Sie das IR- und das  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum einer unbekannt, achiralen Verbindung.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta = 14.33$  ( $\text{CH}_3$ ),  $60.90$  ( $\text{CH}_2$ ),  $128.34$  ( $\text{CH}$ ),  $129.57$  ( $\text{CH}$ ),  $130.62$  ( $\text{C}$ ),  $132.80$  ( $\text{CH}$ ),  $166.54$  ( $4^\circ\text{-C}$ ) ppm.

MS (EI),  $m/z$  (%): 150 (20) [ $\text{M}^+$ ], 122 (30), 105 (100), 77 (40), 51 (20).

Geben Sie hier **einen** Konstitutionsvorschlag an.

## Spektren für Aufgabe 4





## Spektren für Aufgabe 5

