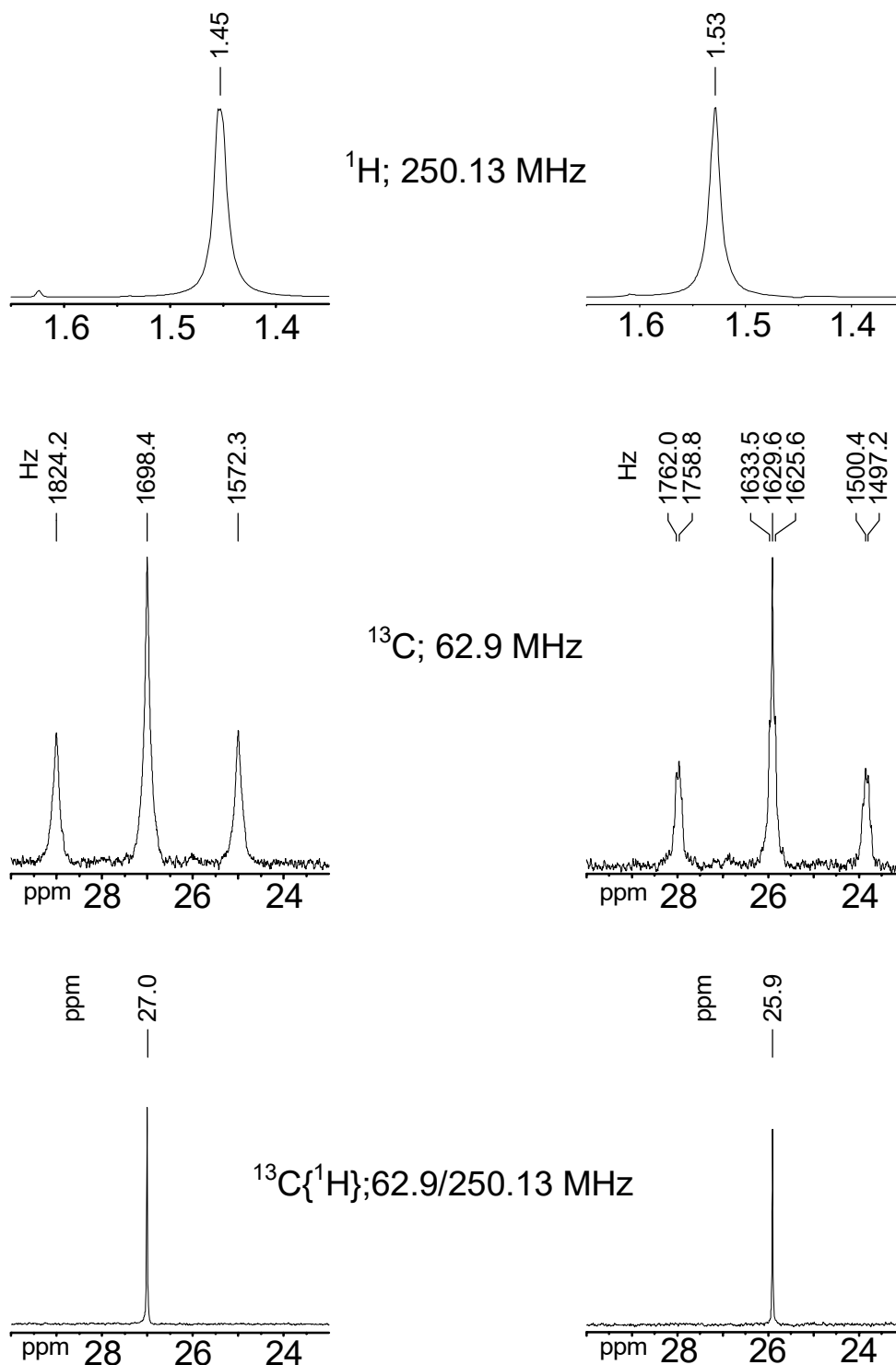
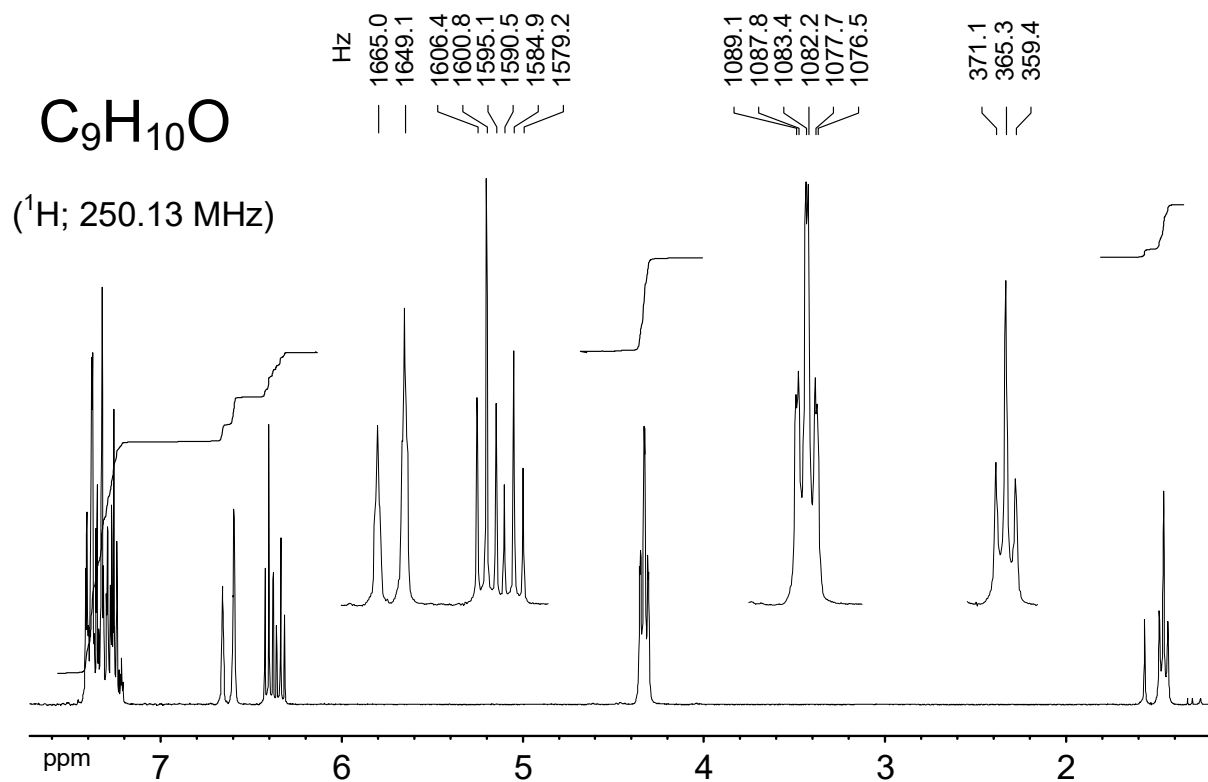


Aufgabe 1



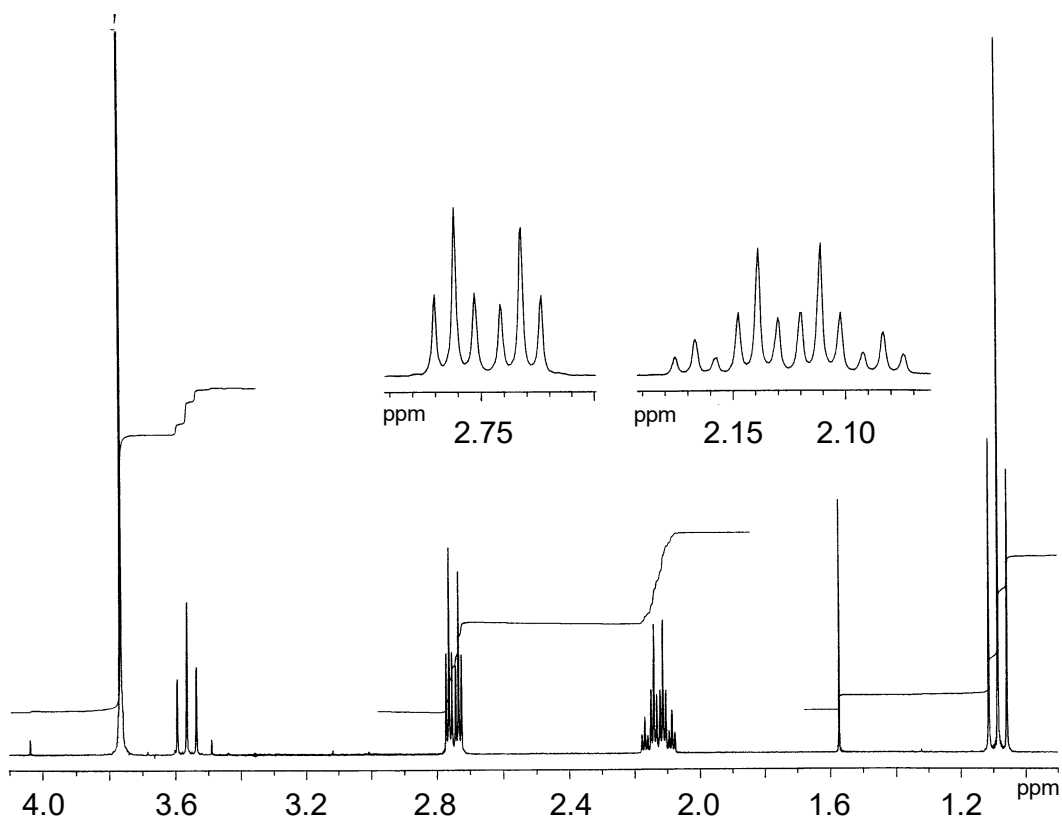
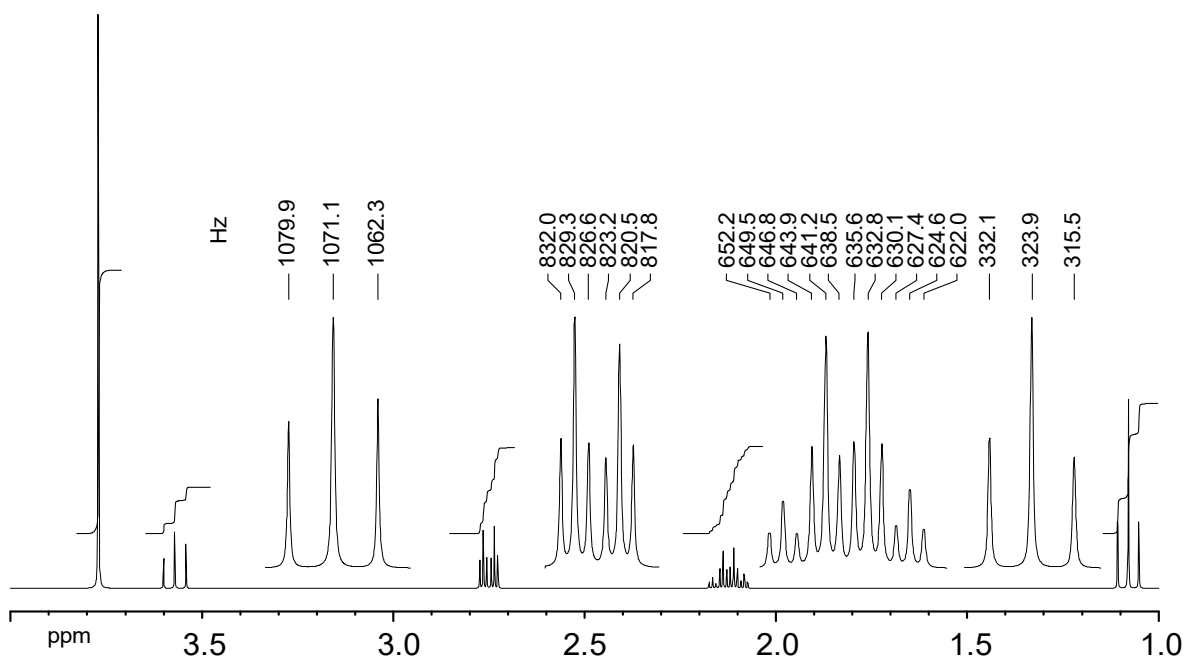
Übungen, Beispiel 1: Die Serie der Spektren gehört zu Cyclohexan und Cyclopentan. Dabei stehen die Spektren zu einer Verbindung jeweils untereinander. Ordnen Sie zu! Welche Information benötigen Sie zu Ihrer Entscheidung?

Aufgabe 2



Übungen, Beispiel 2: Bestimmen Sie Konstitution und Konfiguration!

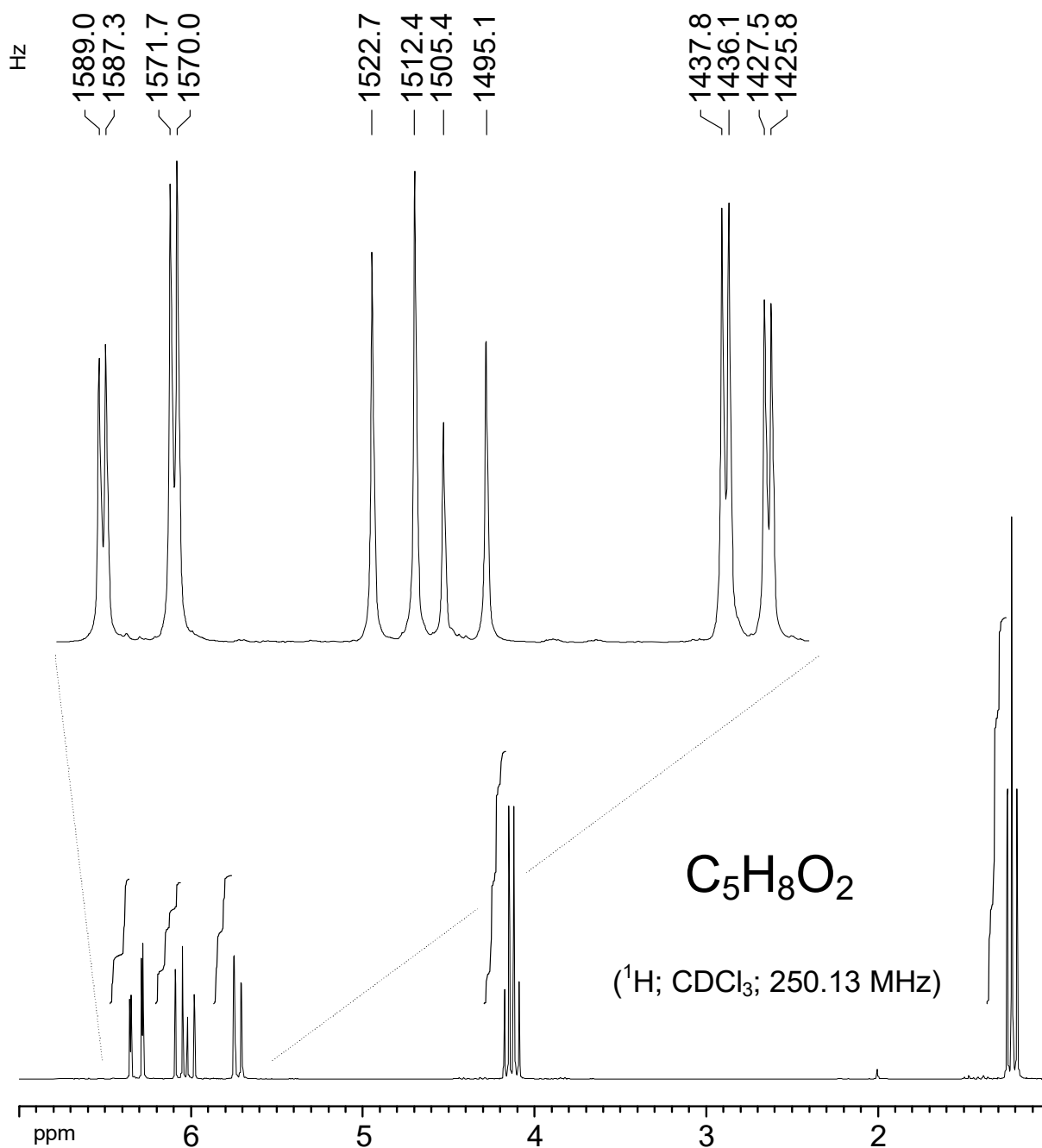
Aufgabe 3



Übungen, Beispiel 3: Ordnen Sie das 300 MHz- ^1H -Spektrum eines disubstituierten Acetylens der Summenformel $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}_4$ zu! Bestimmen Sie die Konstitution und interpretieren Sie die Kopplungskonstanten!

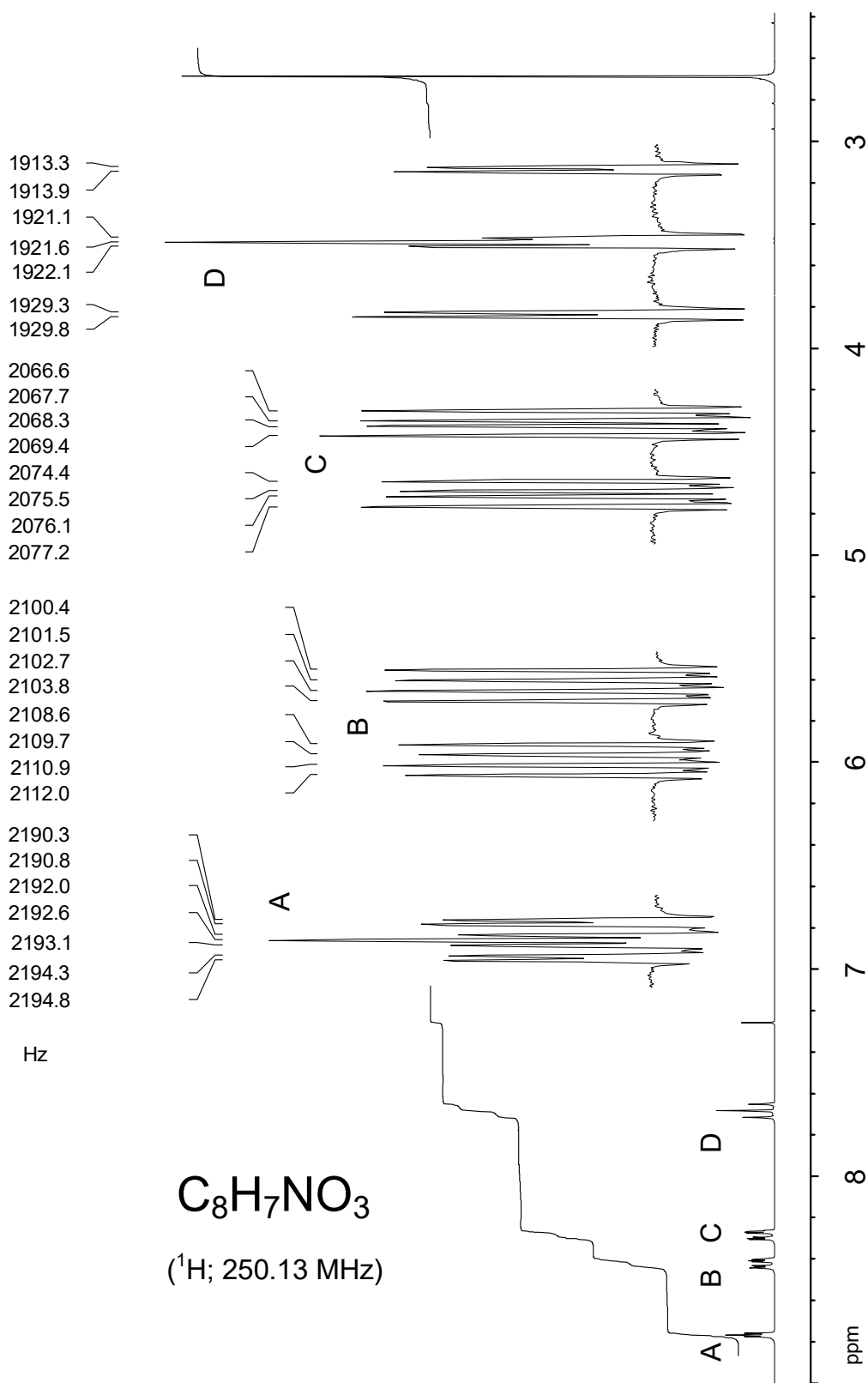
Oben: simuliertes Spektrum; *unten:* eingescanntes Originalspektrum

Aufgabe 4



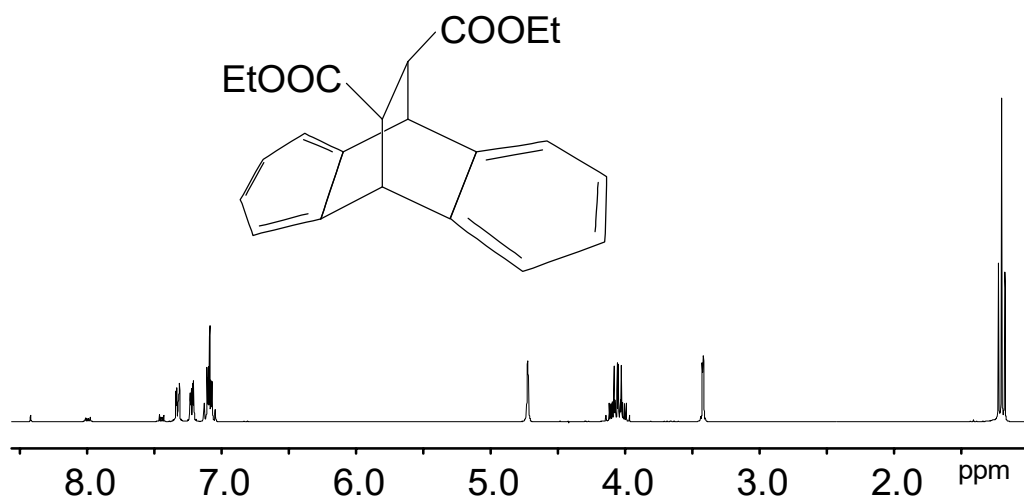
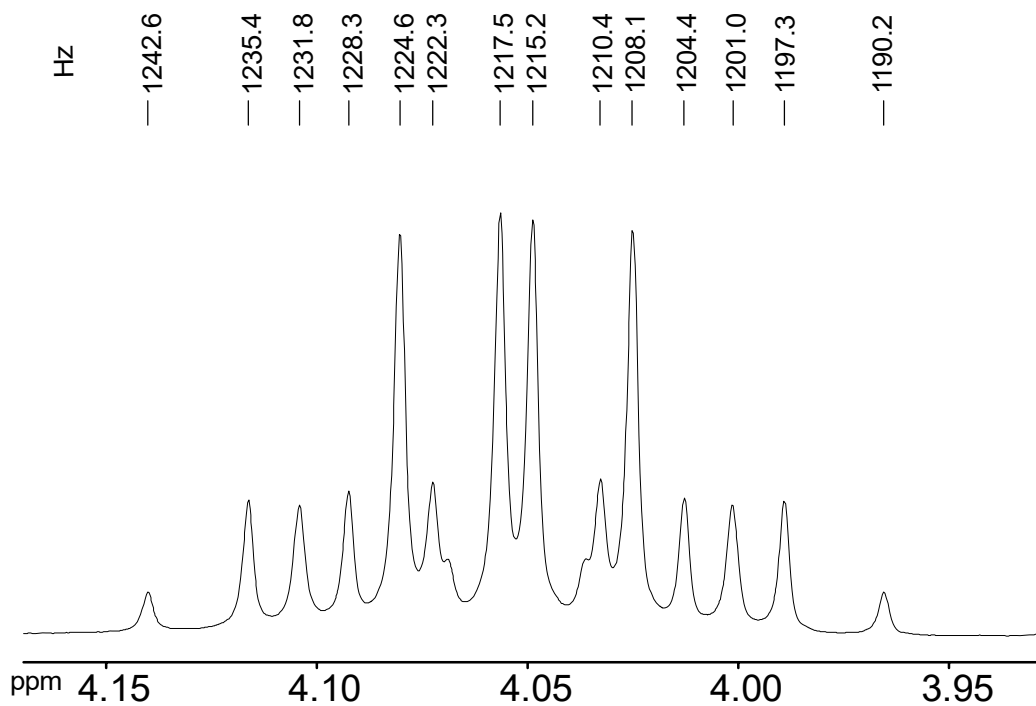
Übungen, Beispiel 4: In der Verbindung kommen vier der häufigsten Kopplungskonstanten vor. Ermitteln Sie die Konstitution! Extrahieren Sie drei der Kopplungskonstanten! Ordnen Sie die Protonen - soweit möglich - stereochemisch richtig den NMR-Signalen zu! *Anmerkung:* die Integrale wurden zur besseren Übersicht ein wenig nach links verschoben.

Aufgabe 5



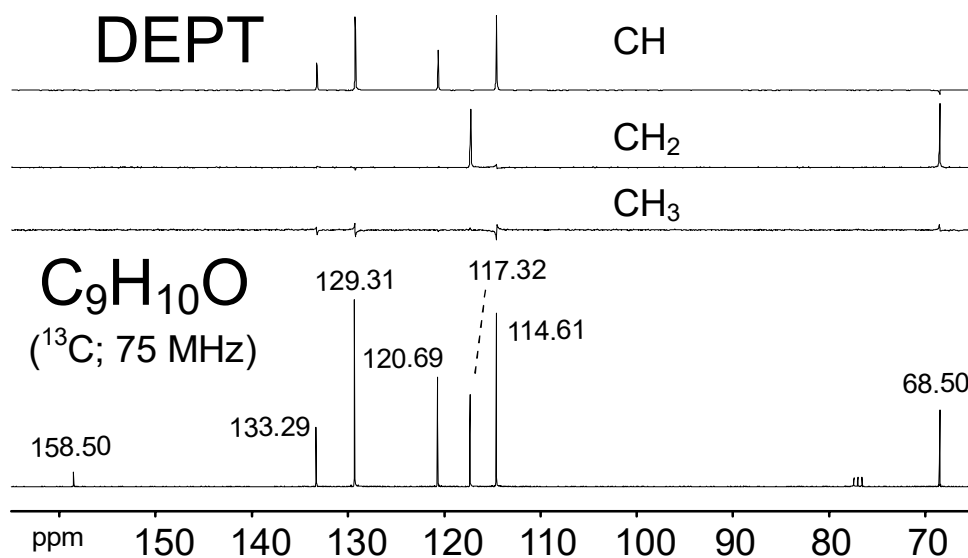
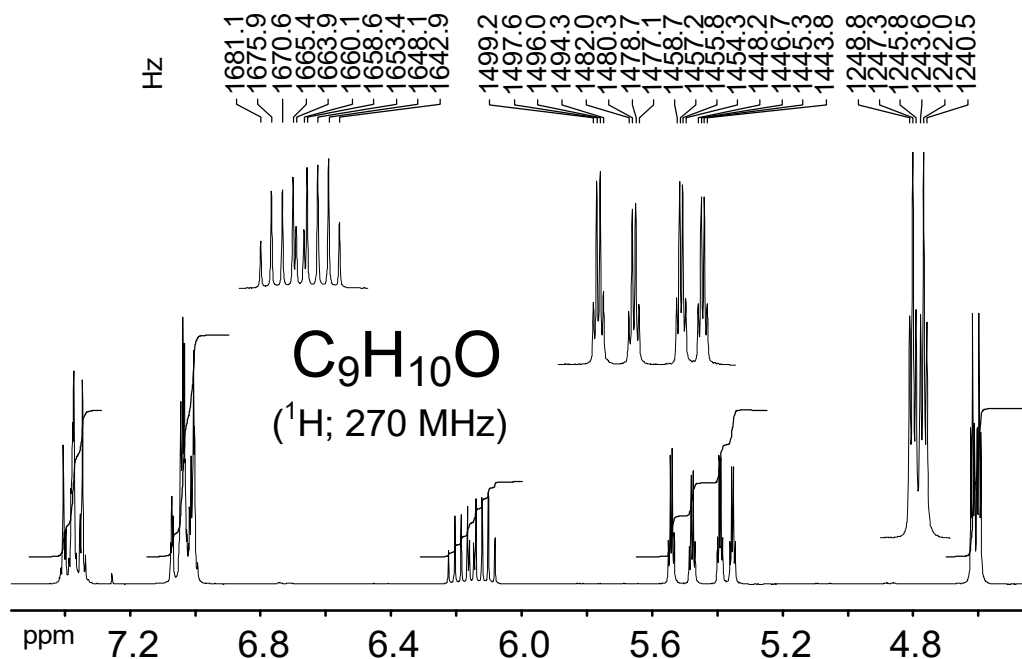
Übungen, Beispiel 5: Bestimmen Sie die Konstitution! Ermitteln Sie den Betrag aller Kopplungskonstanten! Anmerkung: Der Stickstoff ist nicht in einem Ringsystem gebunden.

Aufgabe 6



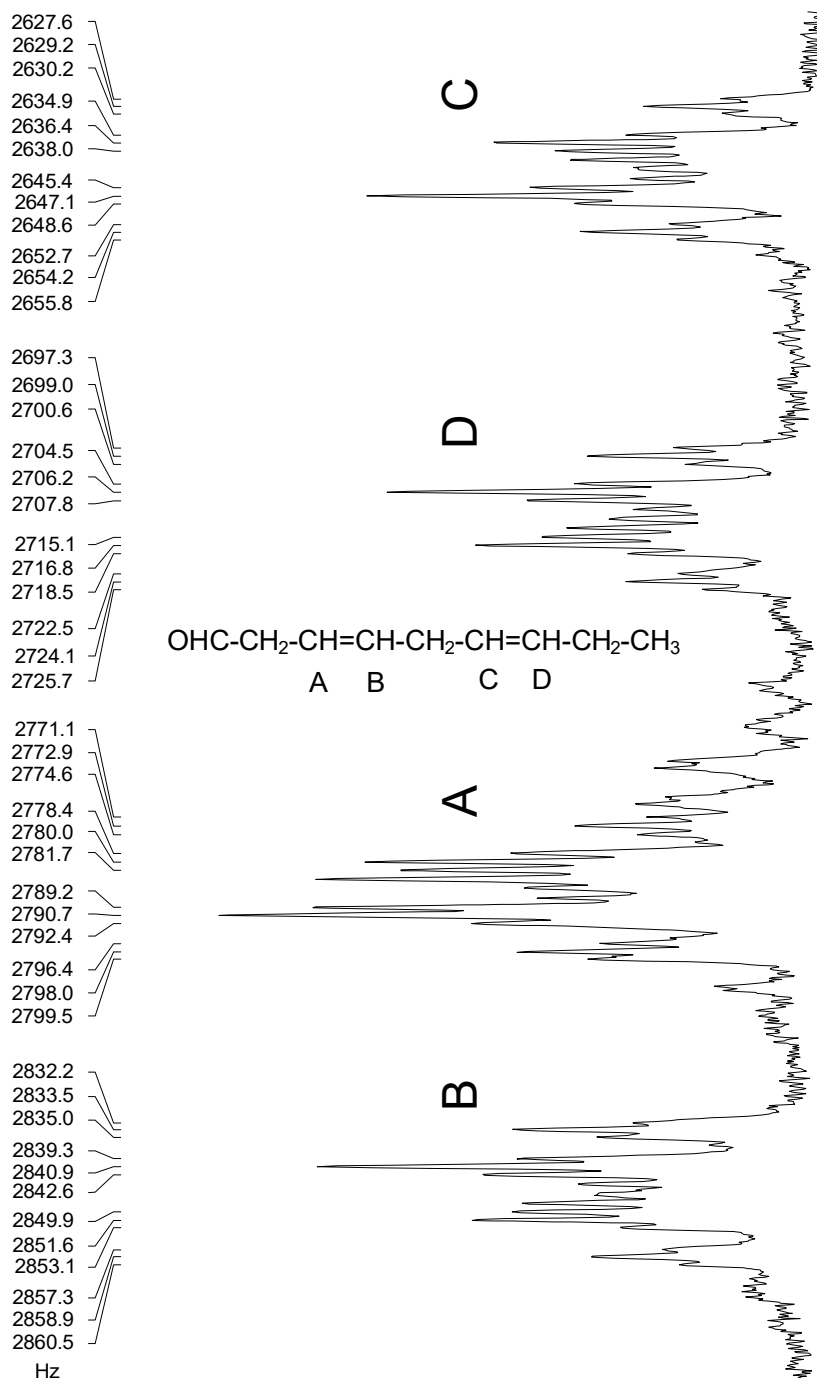
Übungen, Beispiel 6: Die genannte Verbindung entstand durch Addition von Fumarsäurediethylester an Anthracen in Gegenwart von AlCl_3 . Welche Protonen rufen das Multipllett bei 4 ppm hervor? Benennen Sie das zugehörige Gesamtpinsystem nach der bekannten Nomenklatur!

Aufgabe 7



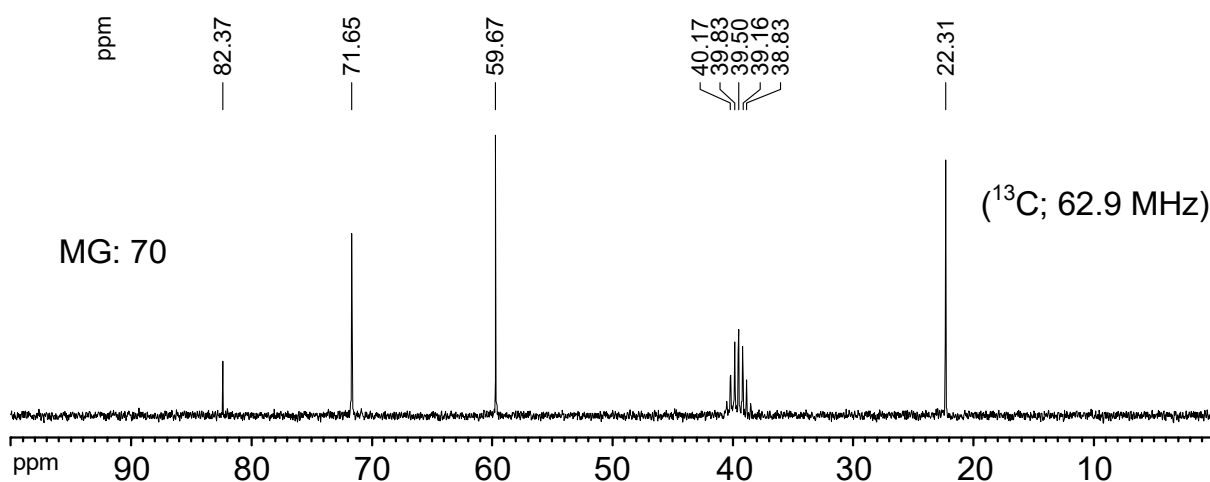
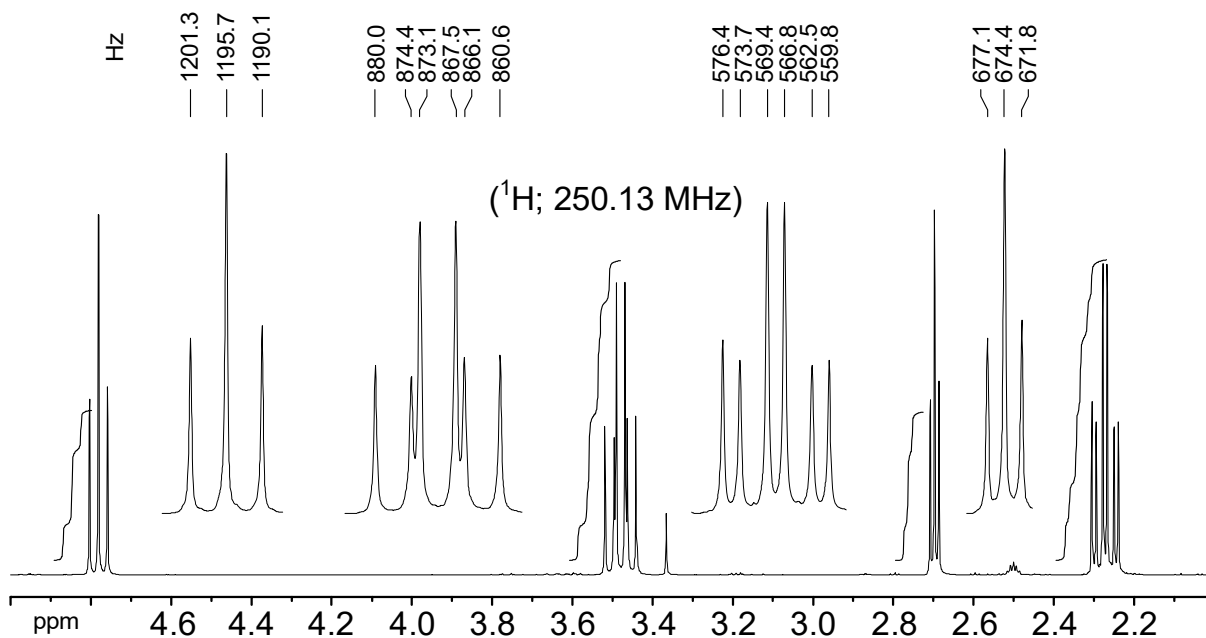
Übungen, Beispiel 7: Bestimmen Sie Konstitution und Konfiguration der Verbindung! Bestimmen Sie alle Kopplungskonstanten zwischen den nichtaromatischen Protonen! Ordnen Sie alle nichtaromatischen Protonen stereochemisch korrekt zu!

Aufgabe 8



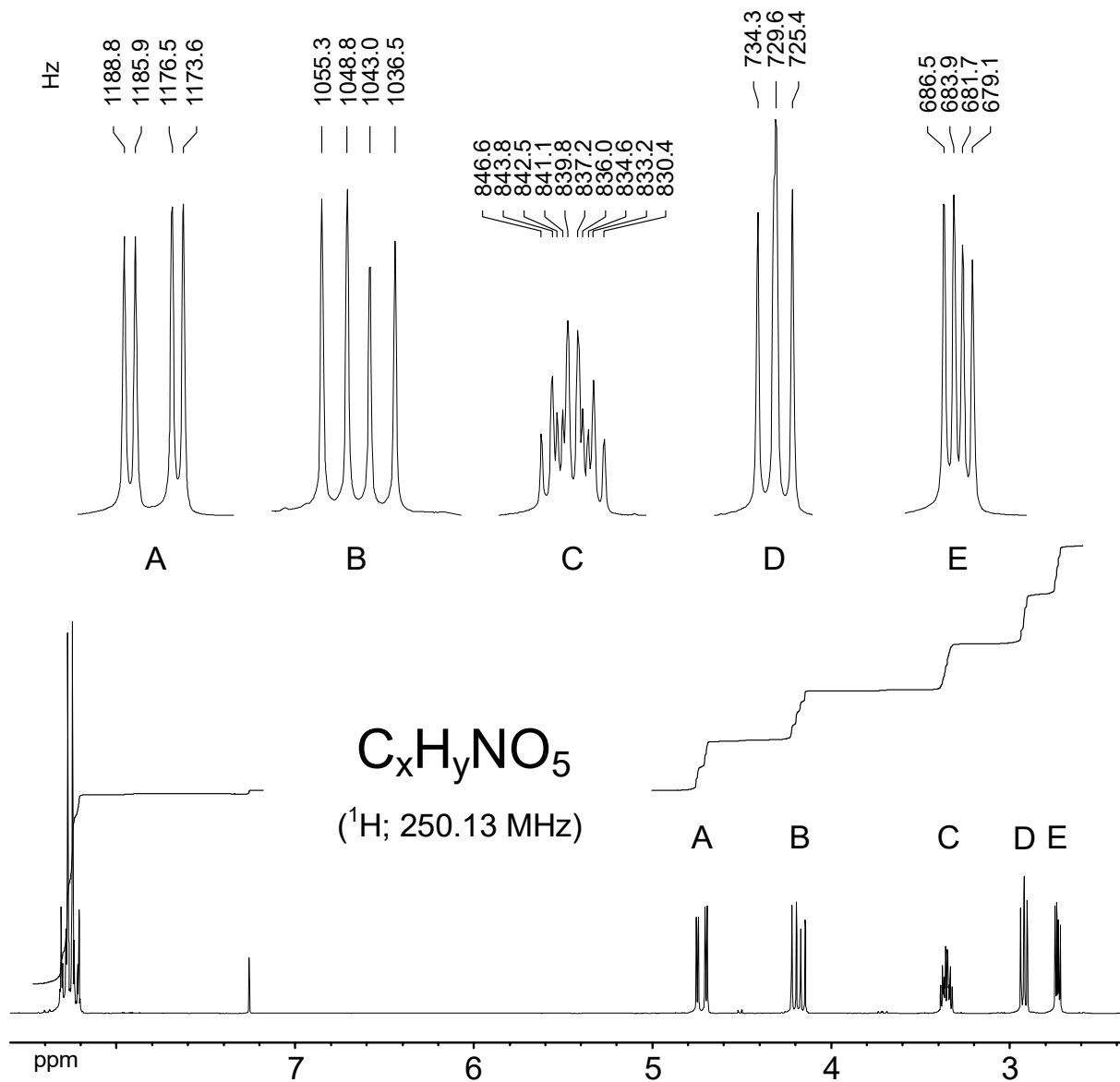
Übungen, Beispiel 8: Ein aus einem Fisch isolierter Naturstoff weist zwei Doppelbindungen unbekannter Konfiguration auf. Die Zuordnung der olefinischen Protonen wurde durch ein DQF-COSY ermittelt. Das abgebildete Spektrum zeigt nur den Spektrenausschnitt im Bereich der olefinischen Protonen. Überlegen Sie sich die theoretische Multipllettstruktur jedes olefinischen Protons und versuchen Sie dann alle Kopplungskonstanten zu extrahieren und daraus die Konfiguration der Doppelbindungen zu bestimmen! Die Angabe der Meßfrequenz ist zur Lösung dieser Aufgabe nicht nötig. Warum? (Hinweis: $^3J_{\text{aliphatisch}} \approx 7$ Hz, $^3J_{\text{olefinisch}} \approx 8 \dots 18$ Hz, $^4J_{\text{long-range}} \approx 1..2$ Hz)!

Aufgabe 9



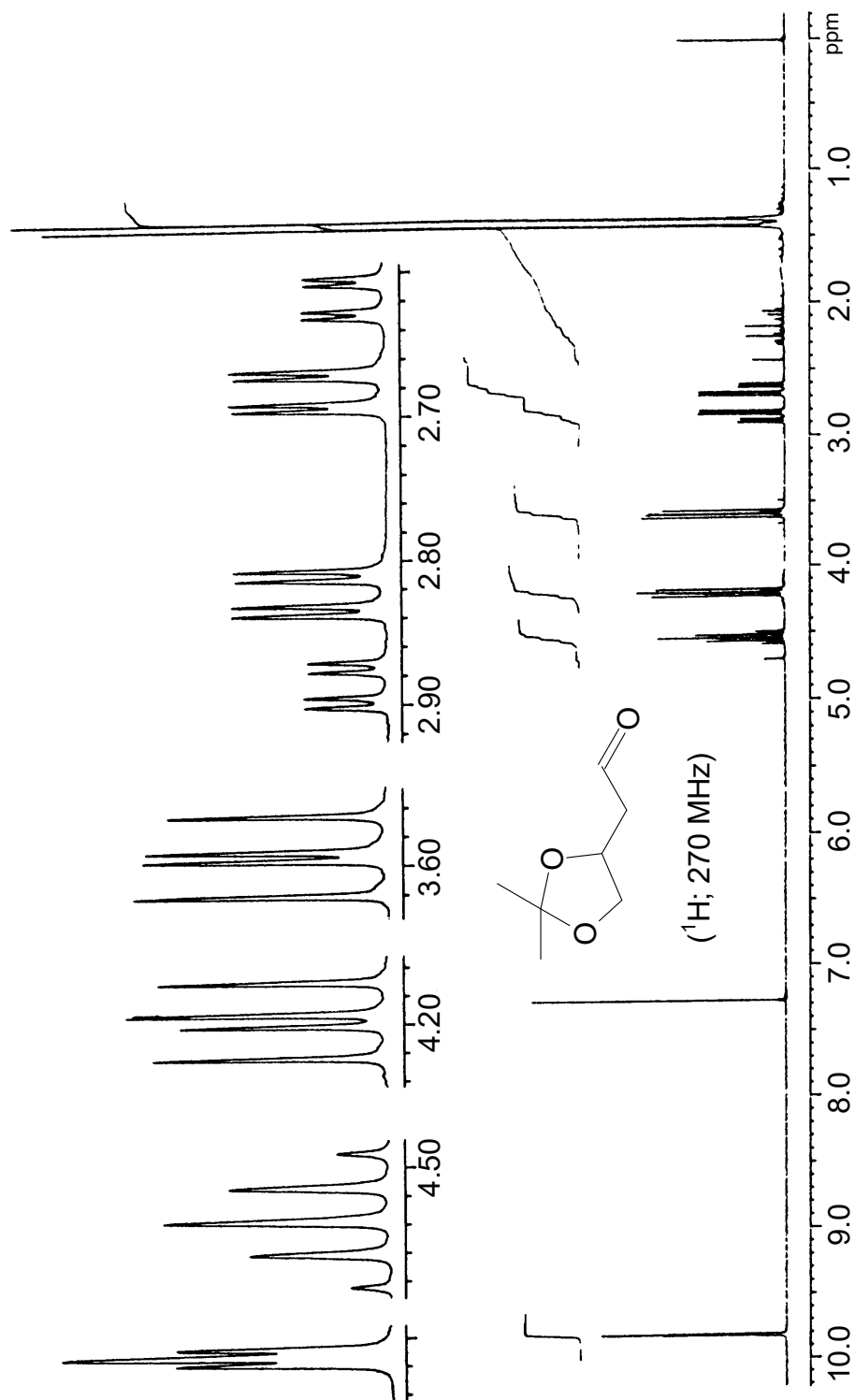
Übungen, Beispiel 9: Bestimmen Sie aus den vorhandenen Spektren die Konstitution der Verbindung mit dem angegebenen Molekulargewicht! Welches Lösungsmittel wurde verwendet? Würden Sie ein identisches Protonenspektrum in jedem beliebigen Lösungsmittel erwarten? Ordnen Sie alle Signale zu, analysieren Sie jedes Protonenmultiplett und extrahieren alle homonuklearen Kopplungskonstanten. Beachten Sie bitte, daß die Reihenfolge der Protonenmultipletts in der Ausschnittsvergrößerung nicht der Reihenfolge der Multipletts im Übersichtsspektrum entspricht!

Aufgabe 10



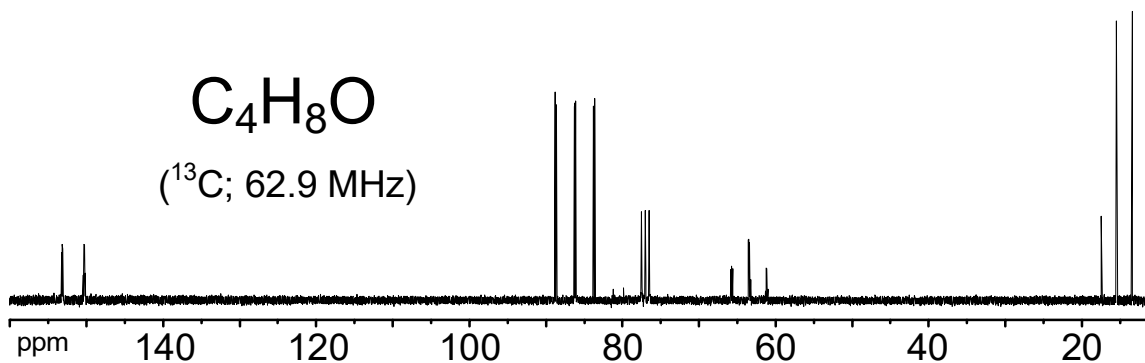
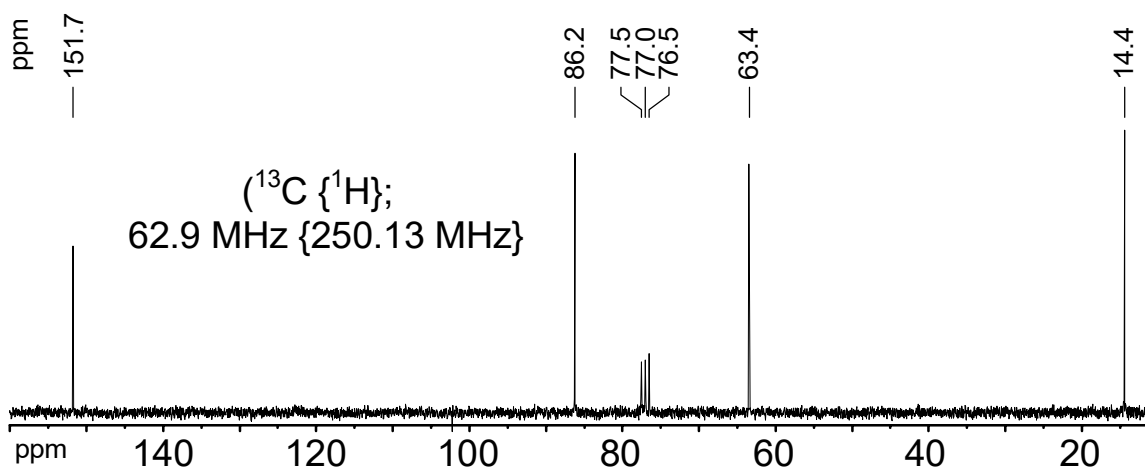
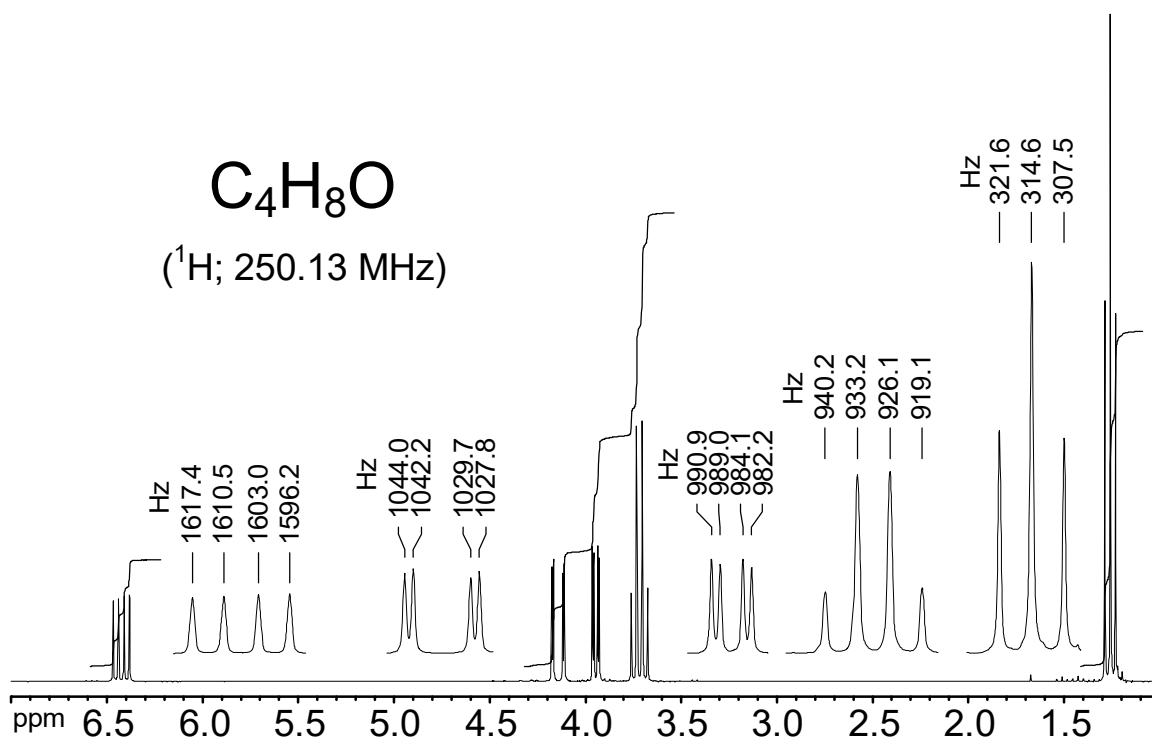
Übungen, Beispiel 10: Bestimmen Sie die Konstitution des vorliegenden Nitrobenzoesäureesters (in CDCl_3)! Alle Protonensignale unterhalb von 5 ppm entstammen O-C-H-Segmenten!

Aufgabe 11

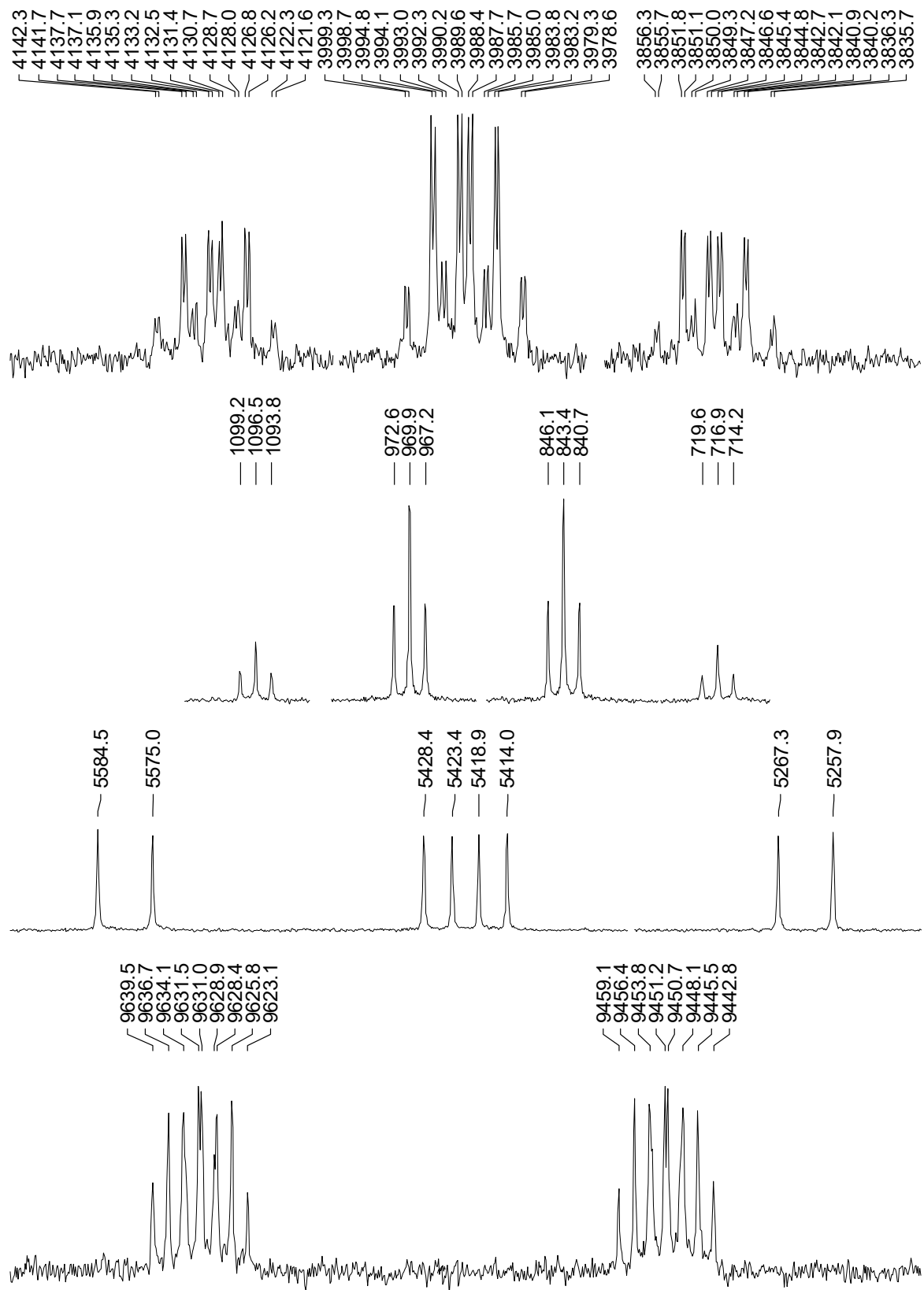


Übungen, Beispiel 11: Ordnen Sie soweit wie möglich zu! Erklären Sie die Multipletts! Ist die Verbindung rein? Welches Lösungsmittel wurde verwendet?

Aufgabe 12

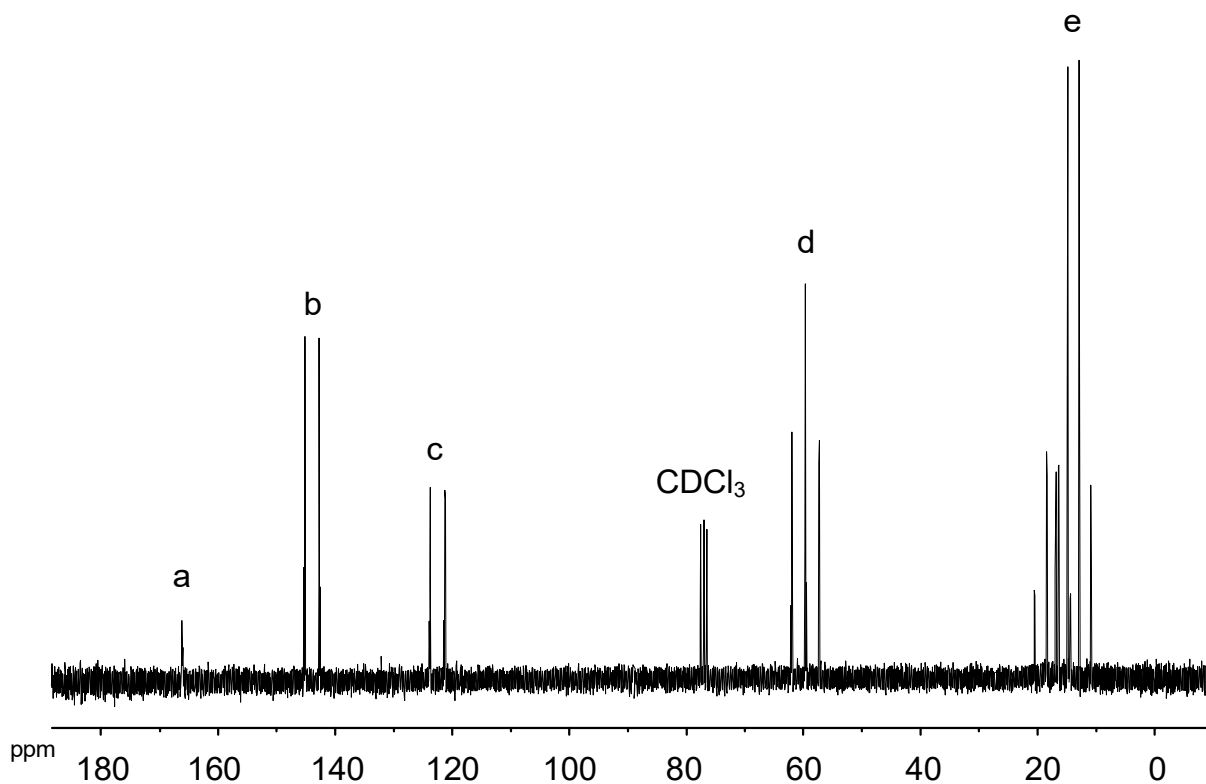
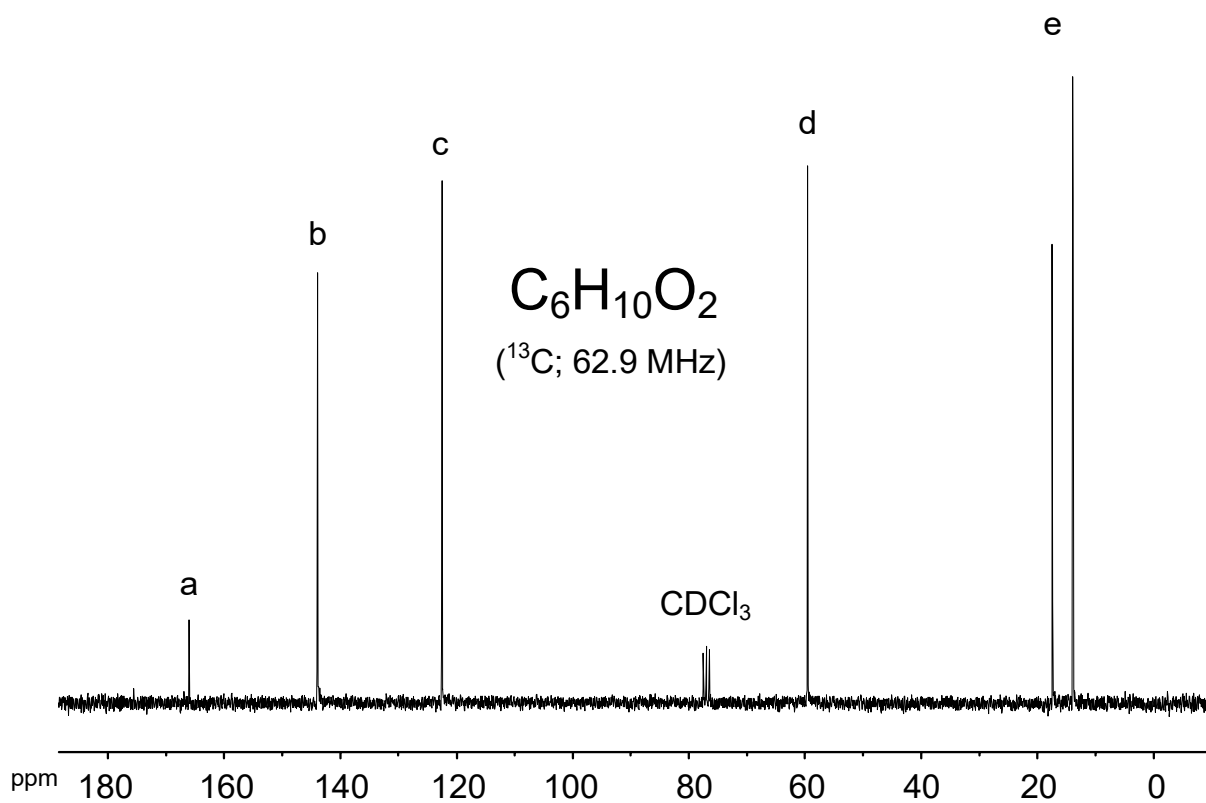


Übungen, Beispiel 12 (Blatt 1): Bestimmen Sie die Konstitution, extrahieren Sie alle Kopplungskonstanten (auch die heteroskalaren) und ordnen diese so weit wie möglich zu!

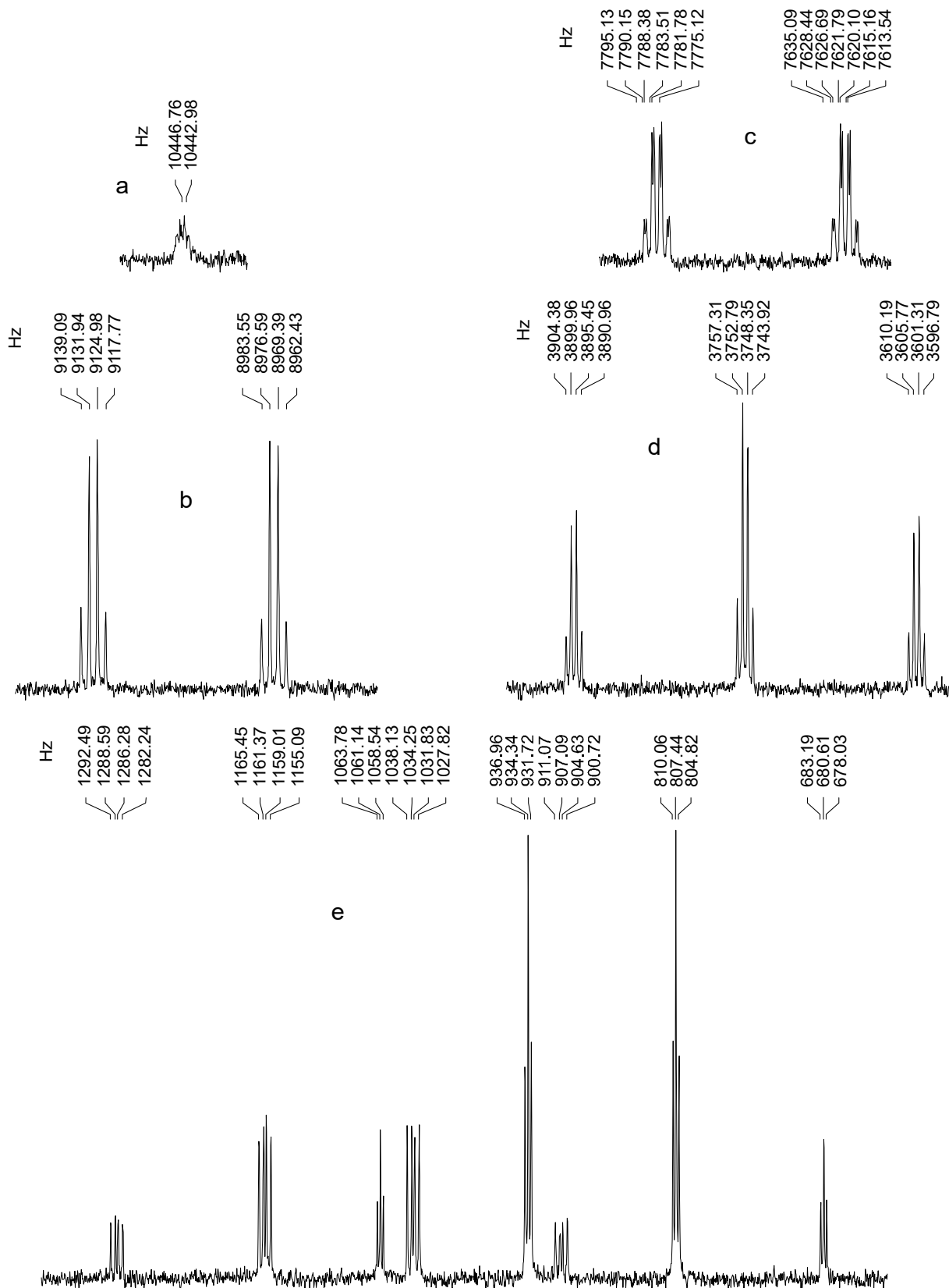


Übungen, Beispiel 12 (Blatt 2): An den lückenhaften Stellen innerhalb der Multipletts wurde im Interesse einer übersichtlicheren Darstellung jeweils ein 100 Hz breiter Bereich (ausschließlich Grundlinie mit Rauschen) herausgeschnitten

Aufgabe 13

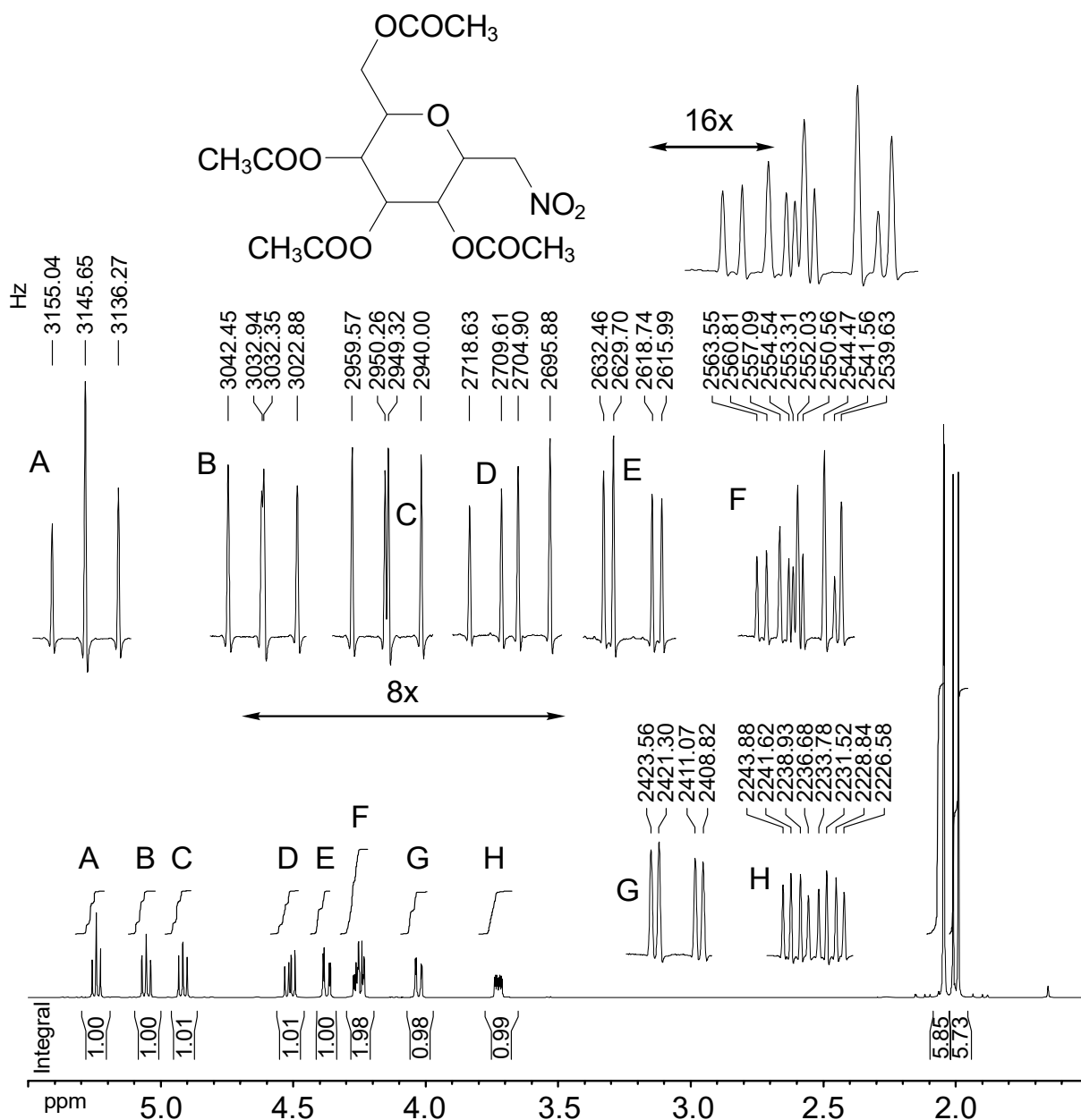


Übungen, Beispiel 13 (Blatt 1): Bestimmen Sie die Konstitution! Die obere Abbildung beinhaltet das breitbandentkoppelte ^{13}C -Spektrum, die untere das gekoppelte ^{13}C -Spektrum. Die Buchstaben markieren gespreizte Bereiche.



Übungen, Beispiel 13 (Blatt 2): Gespreizte Abschnitte aus dem gekoppelten ^{13}C -Spektrum. Die Buchstaben markieren identische Multipletts wie auf Blatt 1.

Aufgabe 14

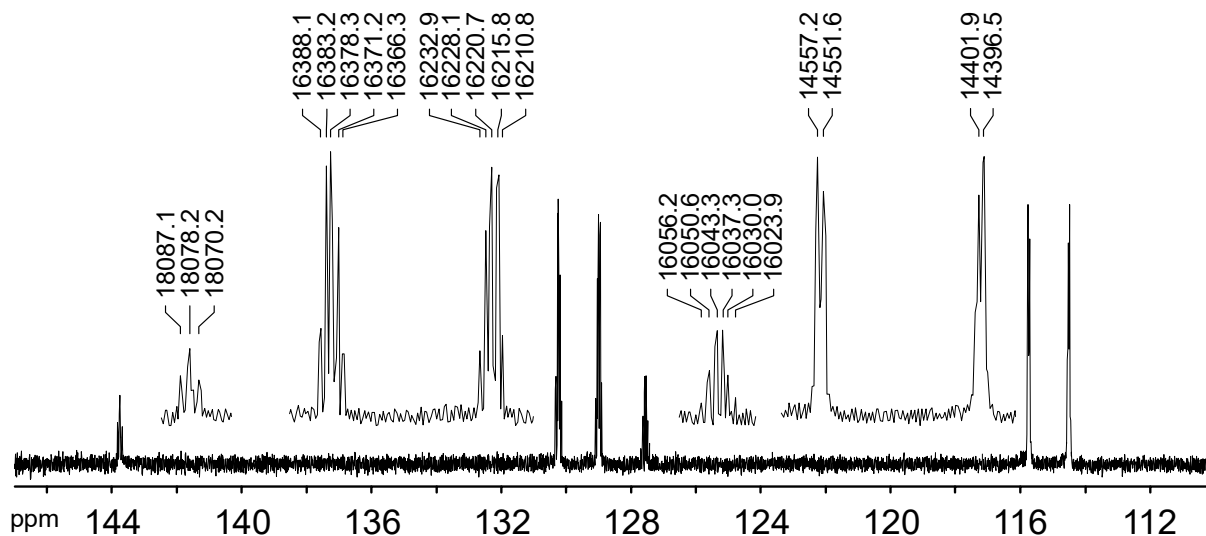
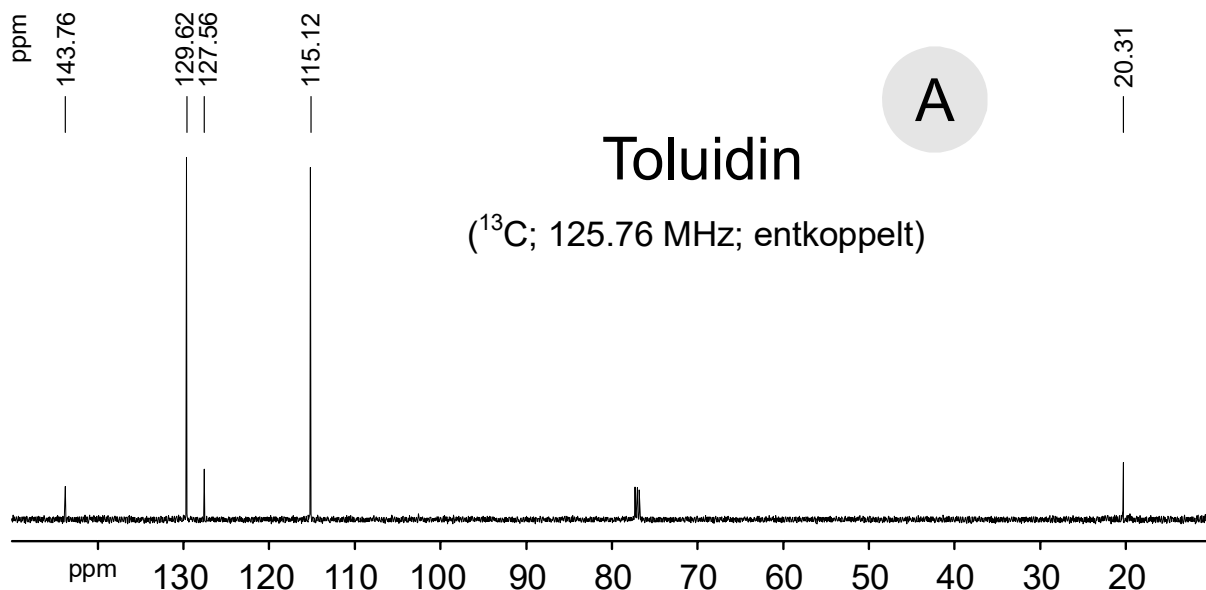


Übungen, Beispiel 14 (Blatt 1): Ermitteln Sie aus dem 600-MHz-Protonenspektrum Konformation und relative Konfiguration des angegebenen Zuckerbausteins! Extrahieren Sie alle Kopplungskonstanten! Ordnen Sie alle koppelnden Protonen zu! Interpretieren Sie die beiden überlagerten Multipletts 1. Ordnung bei ca. 4.25 ppm (Signalgruppe F)!

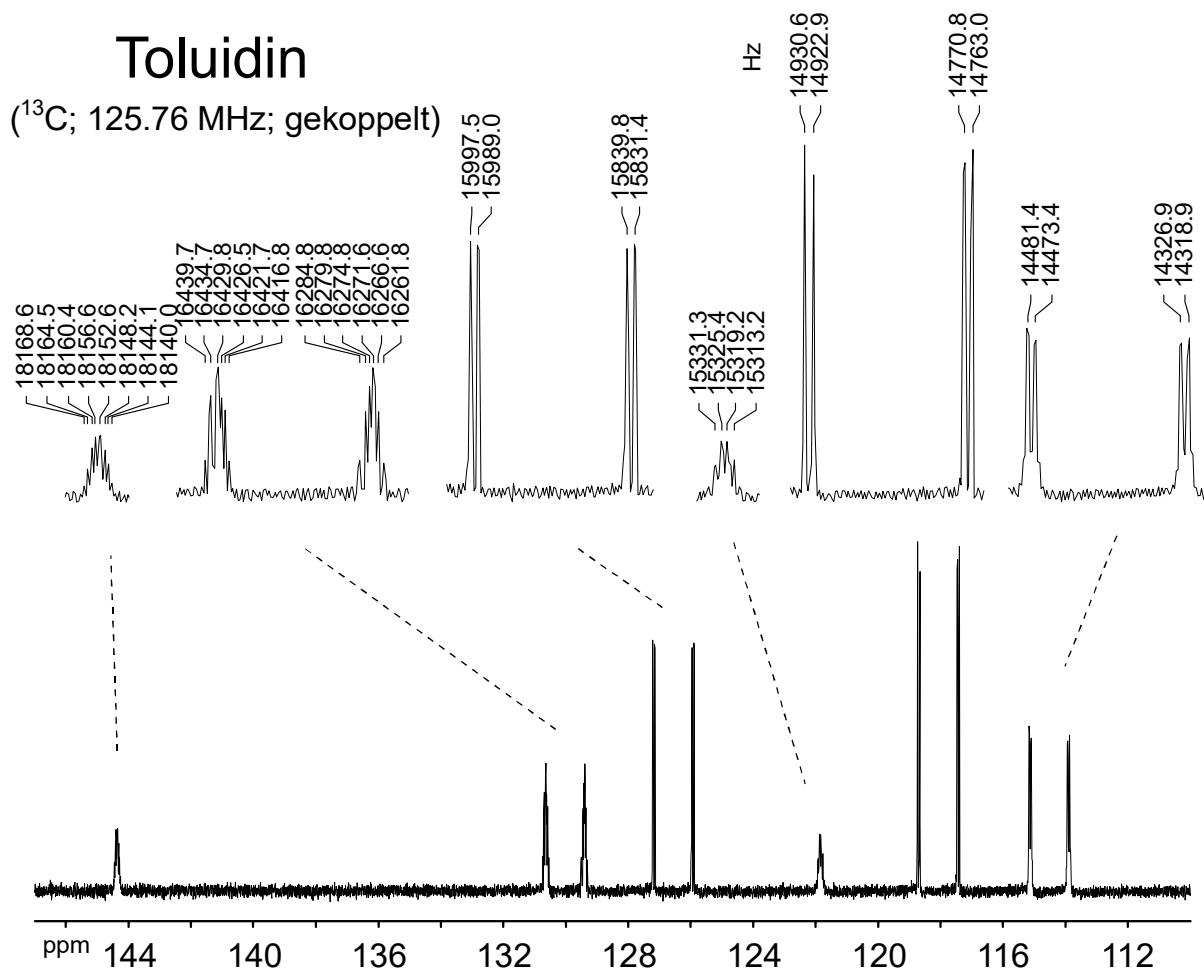
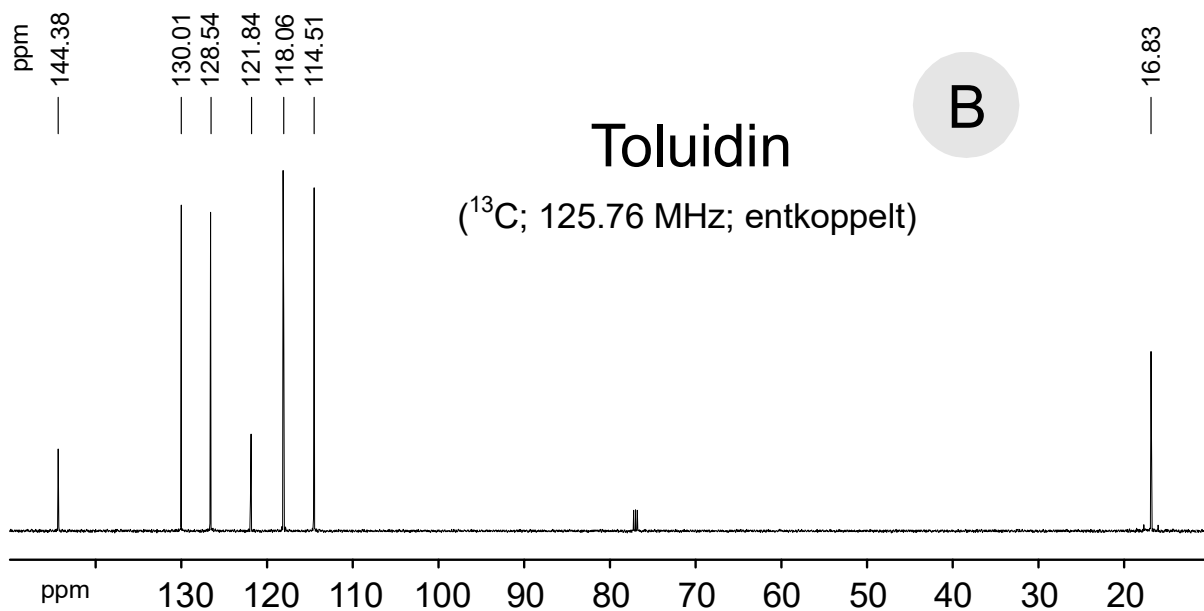
Anmerkung: Wenn Sie nicht gerade Experte auf dem Gebiet der Zuckerchemie sind, werden Sie bei der Signalzuordnung zwei mögliche Lösungen erhalten. Betrachten Sie hier beide Lösungen als korrekt!

Die Ausschnittsvergrößerungen wurden einer Lorentz-zu-Gauß-Transformation unterworfen.

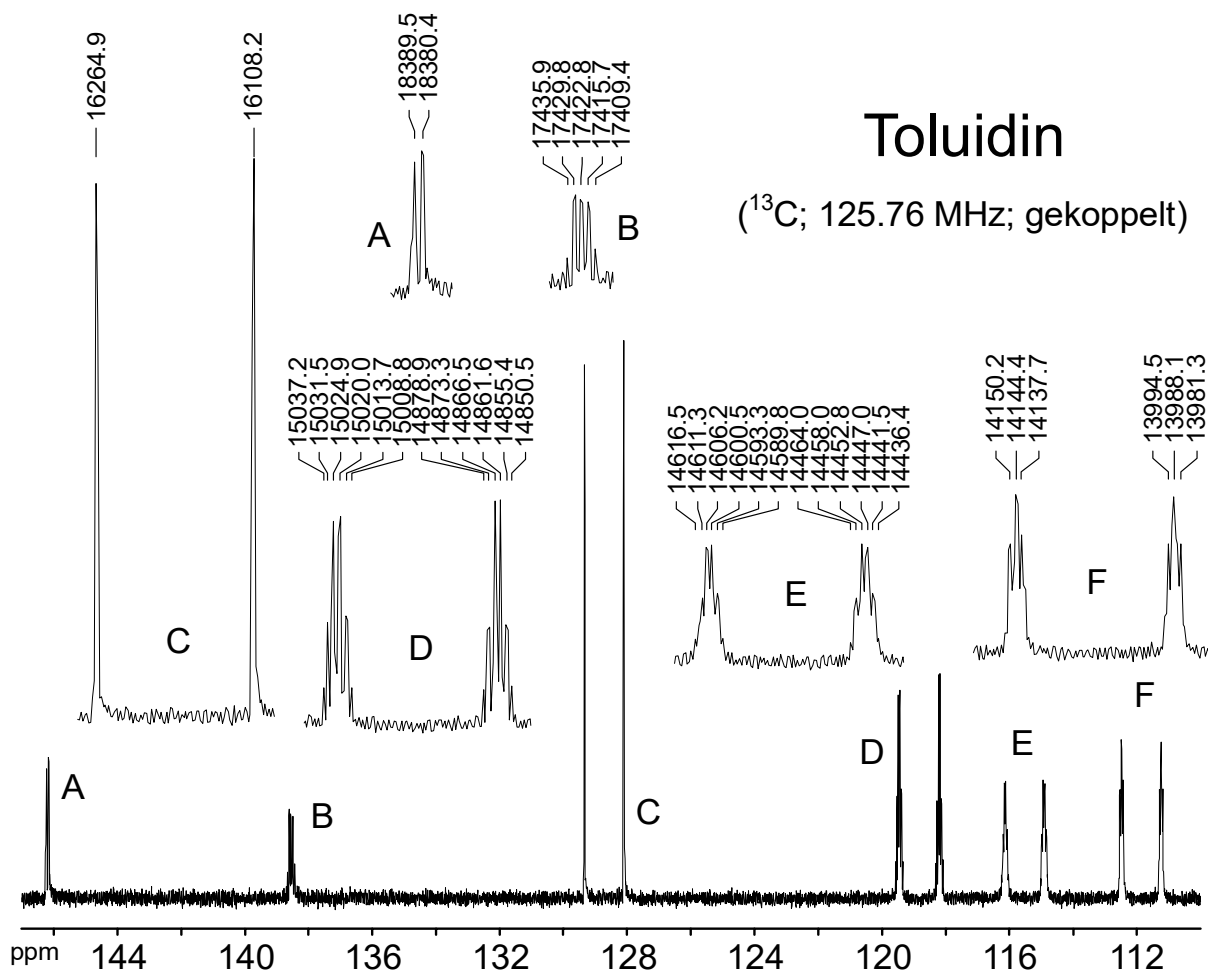
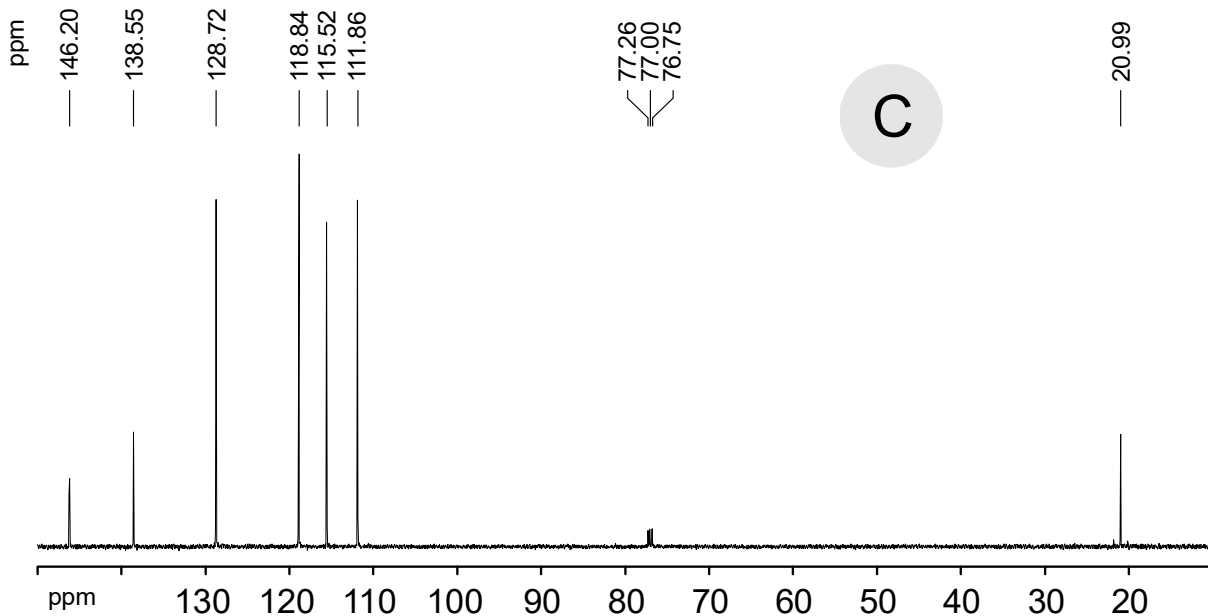
Aufgabe 15



Übungen, Beispiel 15 (Blatt 1): Gegeben sind von den drei isomeren Toluidinen jeweils das vollständige entkoppelte Kohlenstoffspektrum, sowie der Aromatenausschnitt des gekoppelten Kohlenstoffspektrums. Die gekoppelten Spektren wurden so registriert, daß Kopplungskonstanten < 2 Hz nicht mehr aufgelöst werden. Welches Spektrum gehört zu o-, m- bzw. p-Toluidin? Ordnen Sie möglichst alle Signale zu! Extrahieren Sie soviele Kopplungskonstanten wie möglich! Versuchen Sie, die Multipllettstruktur aufzulösen! Welches Intensitätsverhältnis für die einzelnen Linien liegt theoretisch in jedem der aufgelösten Multipletts vor?

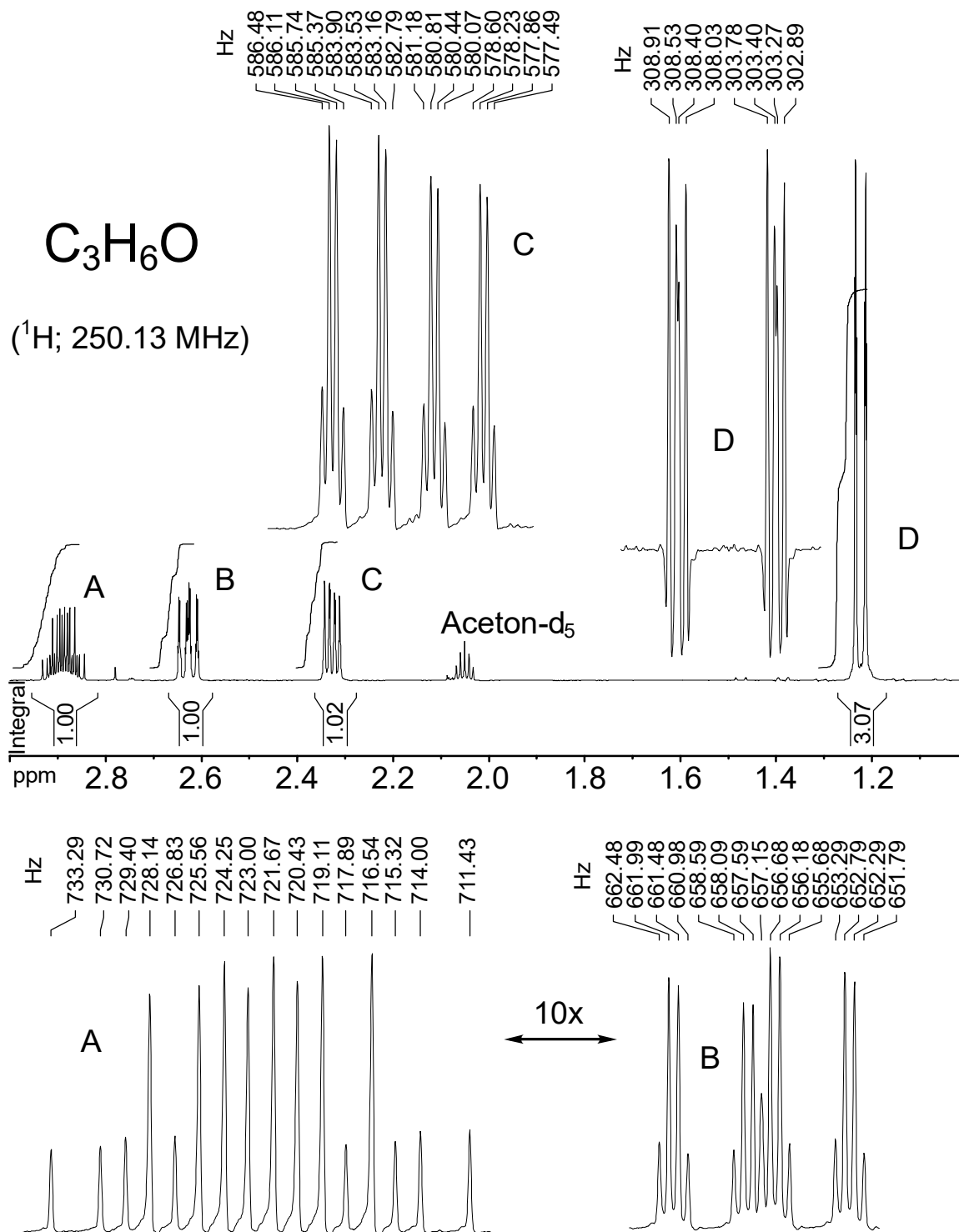


Übungen, Beispiel 15 (Blatt 2): Bedenken Sie bei der Lösung, daß heteronukleare Kopplungen in Phenylringen über drei Bindungen eine Größe von ca. $|^3J_{C,H}| \approx 8$ Hz erreichen. Kopplungen über zwei oder mehr als drei Bindungen zeigen Kopplungskonstanten, deren Betrag < 2 Hz ist.



Übungen, Beispiel 15 (Blatt 3): Auch die von den Protonen der Methylgruppe ausgehenden Kopplungen sollten Sie in einigen Multipletts wiederfinden!

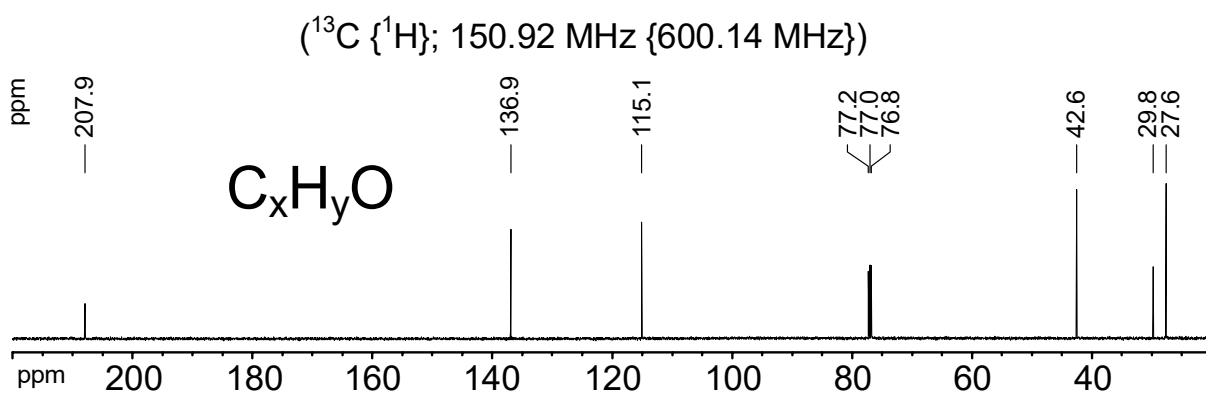
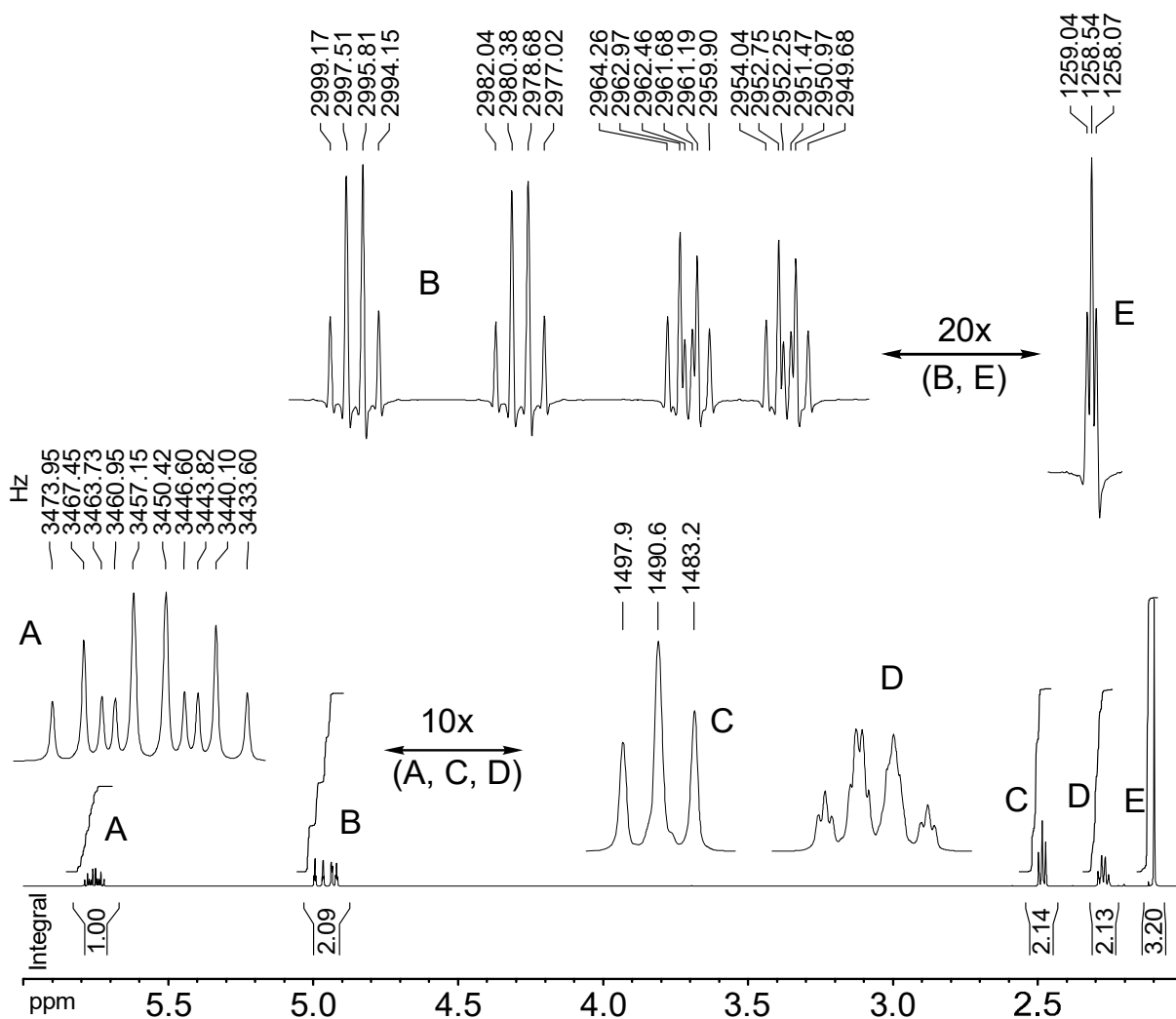
Aufgabe 16



Übungen, Beispiel 16: Bestimmen Sie die Konstitution! Ermitteln Sie alle Kopplungskonstanten und erklären Sie die Kopplungsmuster! Ordnen Sie alle Signale stereochemisch korrekt zu!

Anmerkung: Zur Aufklärung der Konstitution muß man die komplizierten Kopplungsmuster nicht verstehen. Es genügen einfache Überlegungen.

Aufgabe 17



Übungen, Beispiel 17: Bestimmen Sie Konstitution und Konfiguration! Ermitteln Sie möglichst viele Kopplungskonstanten! Ordnen Sie alle Protonensignale stereochemisch korrekt zu!

Anmerkungen: Versuchen Sie keine Analyse von Multipllett **D**! Einige Multiplletts wurden einer Lorentz-zu-Gauß-Transformation unterworfen.