

Tentamen "Structuuropheldering"

Docent: Prof.dr. J. Lugtenburg

Donderdag 6 april 2006, collegezaal 1
13.00 – 17.00 uur

In alle onderstaande vraagstukken wordt gevraagd van een onbekende verbinding de structuur te bepalen. Geef hierbij een zo volledig mogelijke motivering. Ken in de spectra zoveel mogelijk pieken toe, in MS spectra en in IR spectra in ieder geval de meest relevante pieken.

LEES DE VRAAGSTUKKEN VOORAL GOED!

1. Het IR spectrum van een vloeibare koolwaterstof met molecuulgewicht 104
2. Welk stereo isomeer van de verbinding C_5H_6O veroorzaakt dit spectrum? Oplosmiddel $CDCl_3$, $25^\circ C$, 60 MHz
3. $C_8H_7BrO_3$ het één proton signaal bij δ 12 is niet weergegeven. (Het 1H NMR signaal bij δ 2.05 en het ^{13}C signaal bij δ 30 zijn van oplosmiddel aceton D6)
4. 4a en 4b een combinatie probleem
5. Van de stof met formule $C_5H_4O_2$ zijn de volgende NMR spectra verkregen: Zie figuren 5 a - 5 f
Geef de structuur van dit molecuul

1. Het IR spectrum van een vloeibare koolwaterstof met moleculair gewicht 104

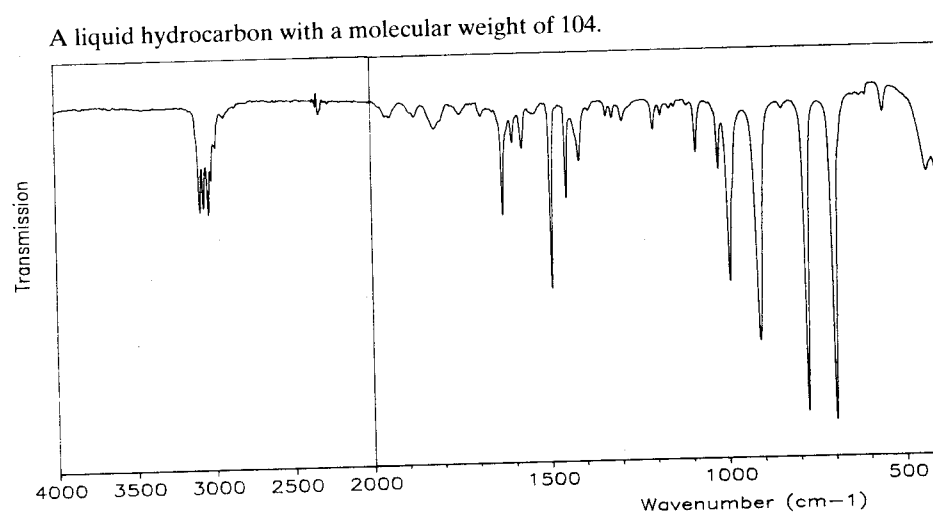
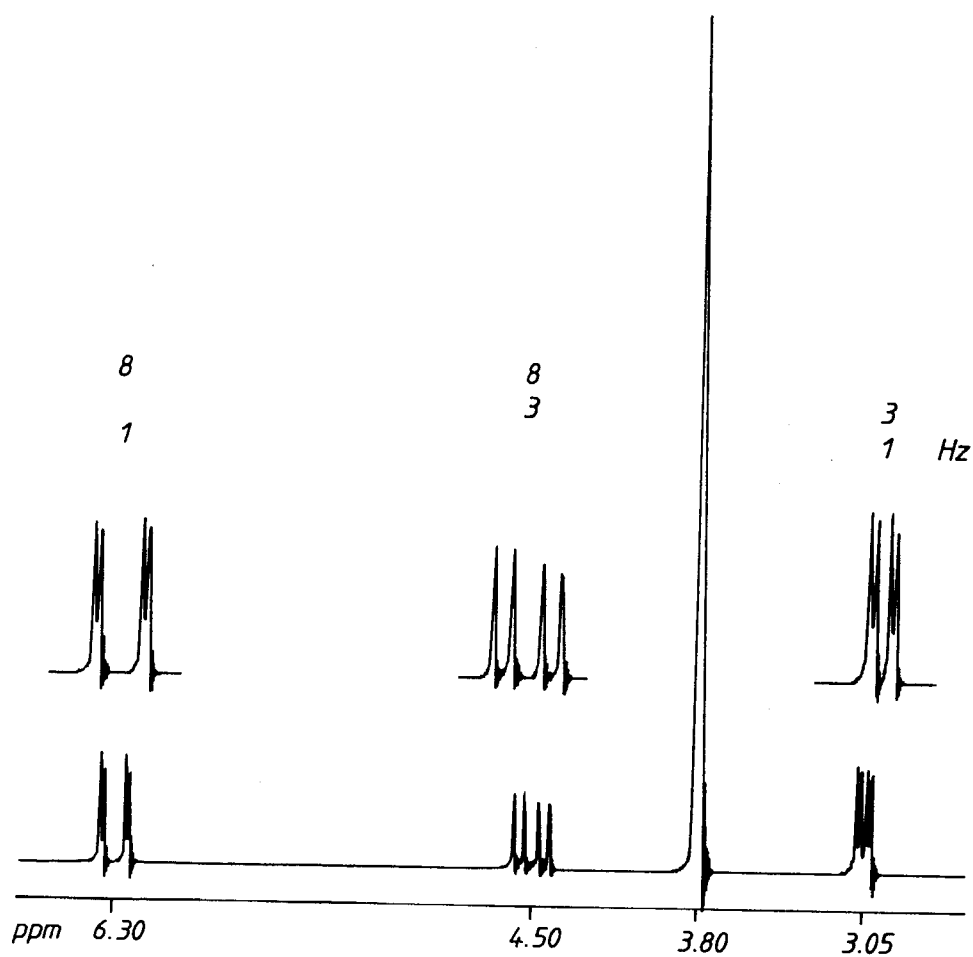


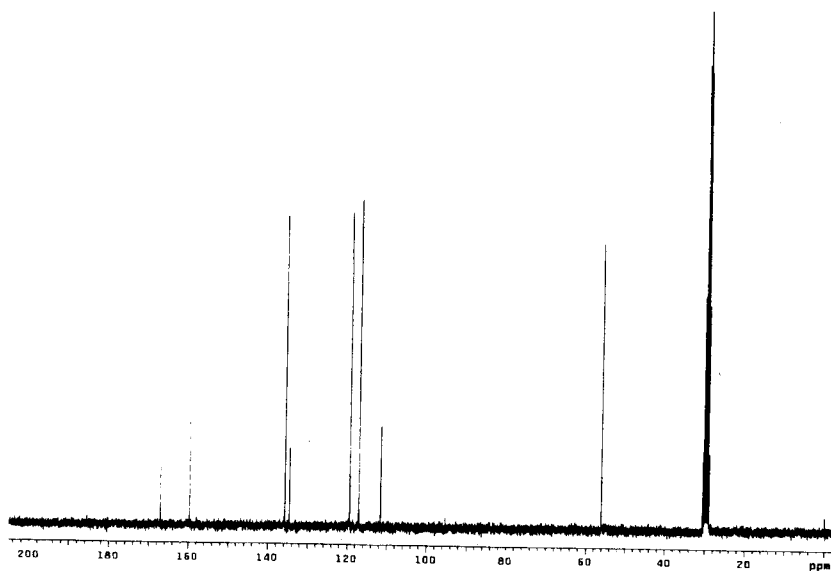
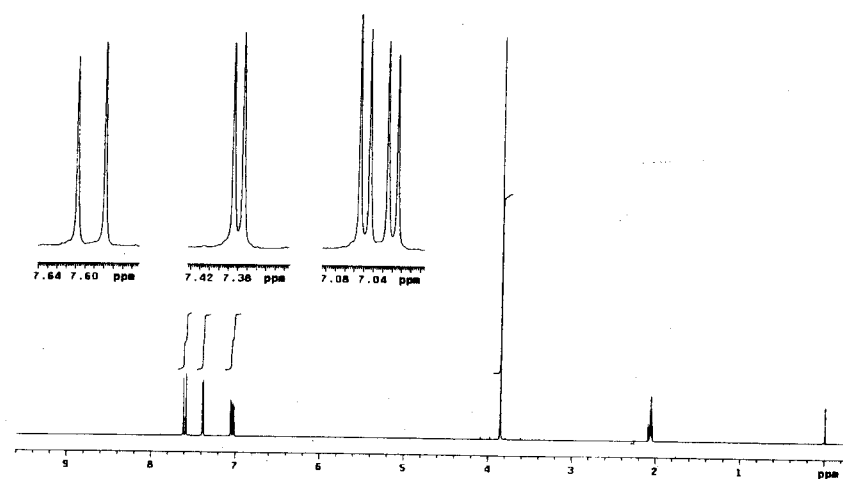
Fig. 1

2. Welk stereo isomeer van de verbinding C_5H_6O veroorzaakt dit spectrum? Oplosmiddel $CDCl_3$, $25^\circ C$, 60 MHz

Fig. 2

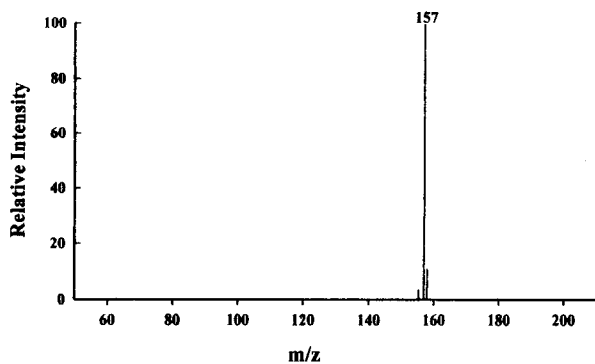


3. $C_8H_7BrO_3$ het één proton signaal bij δ 12 is niet weergegeven.
(Het 1H NMR signaal bij δ 2.05 en het ^{13}C signaal bij δ 30 zijn van oplosmiddel aceton D6).

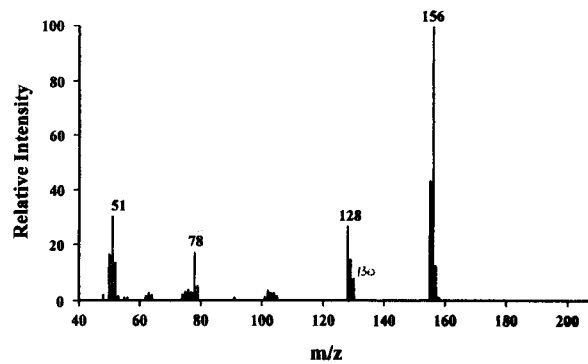


4. 4 a en 4 b een combinatie probleem

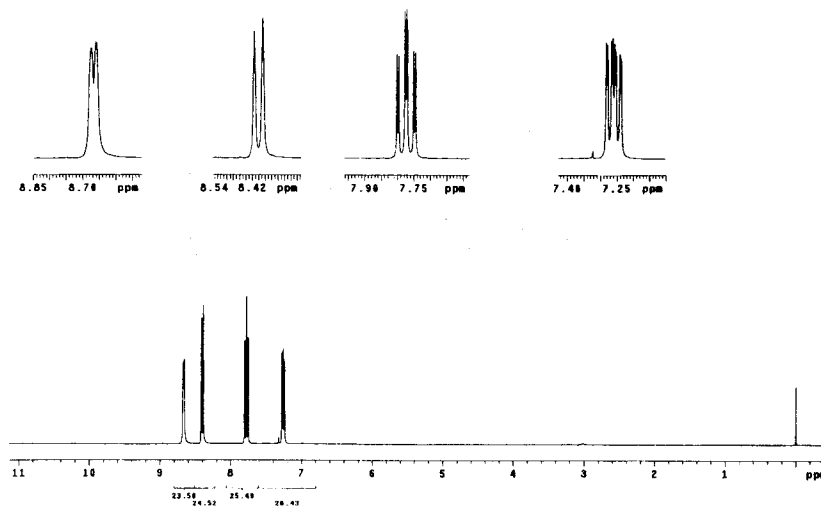
Mass spectrum (CI)



Mass spectrum (EI)



Proton NMR spectrum with expansion (CDCl₃)



Carbon-13 NMR spectrum

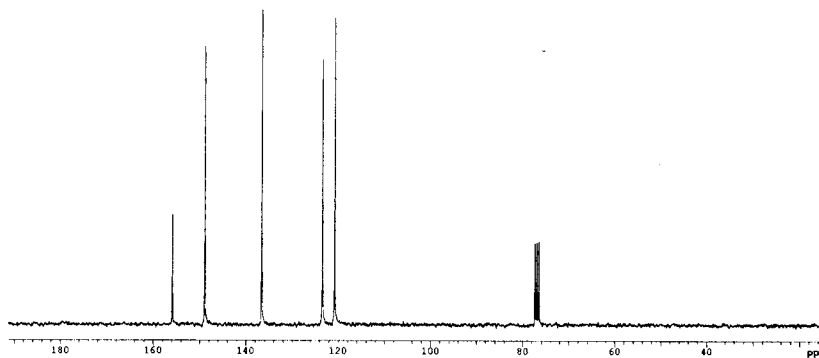
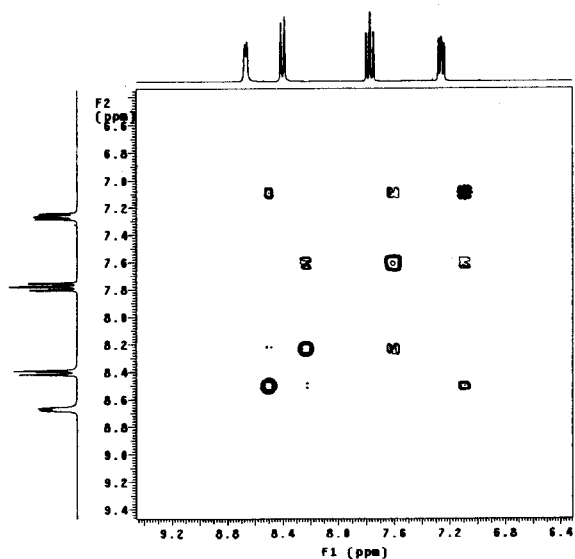
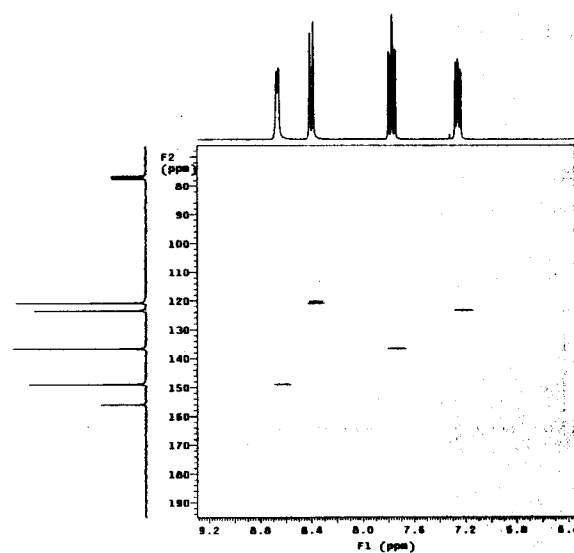


Fig. 4A

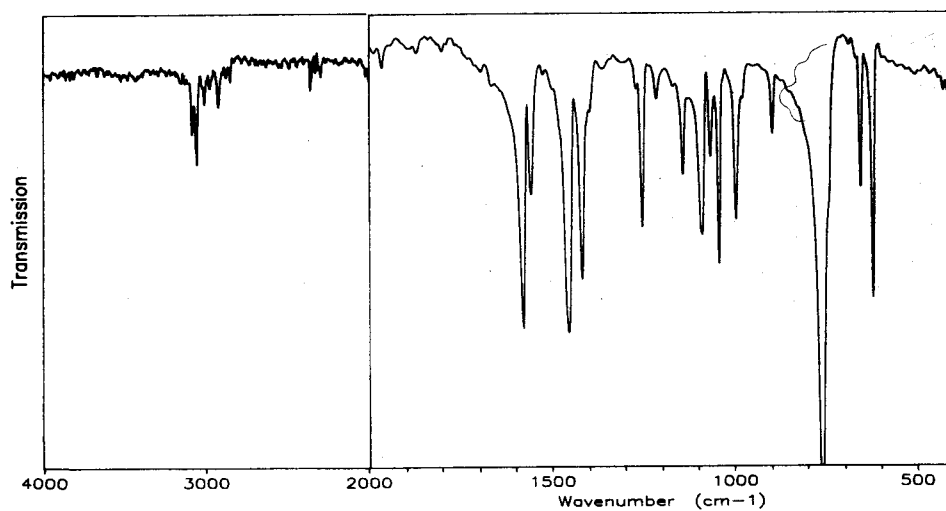
COSY spectrum



HECTOR spectrum



Infrared spectrum (KBr disc)



Ultraviolet-visible spectrum (EtOH, ϵ [236] 10,245, ϵ [242] 8595, ϵ [282] 13,419)

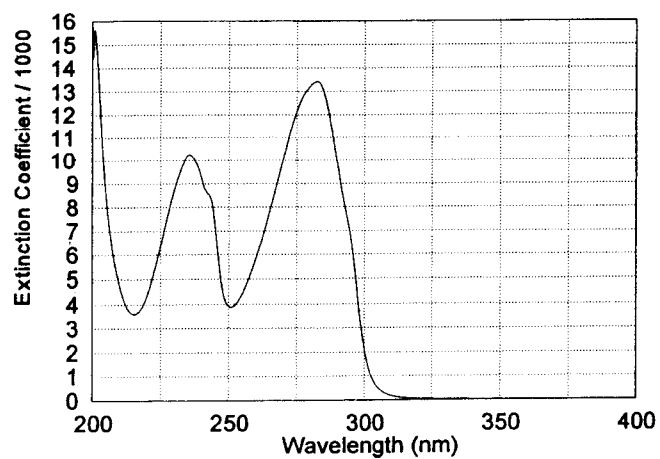


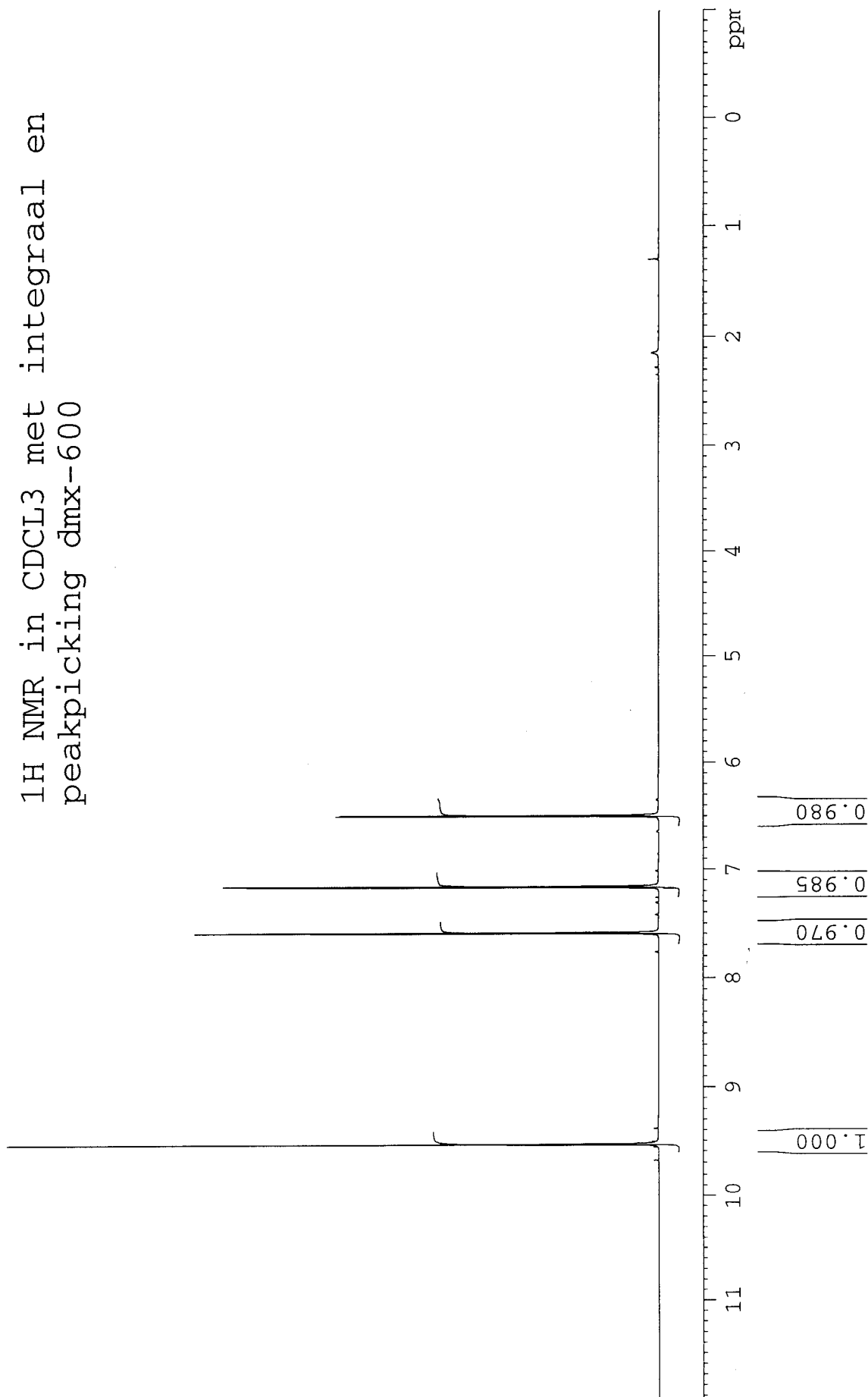
Fig. 4b

5. Van de stof met formule $C_5H_4O_2$ zijn de volgende NMR spectra verkregen: Zie figuren 5 a - 5 f
Geef de structuur van dit molecule.

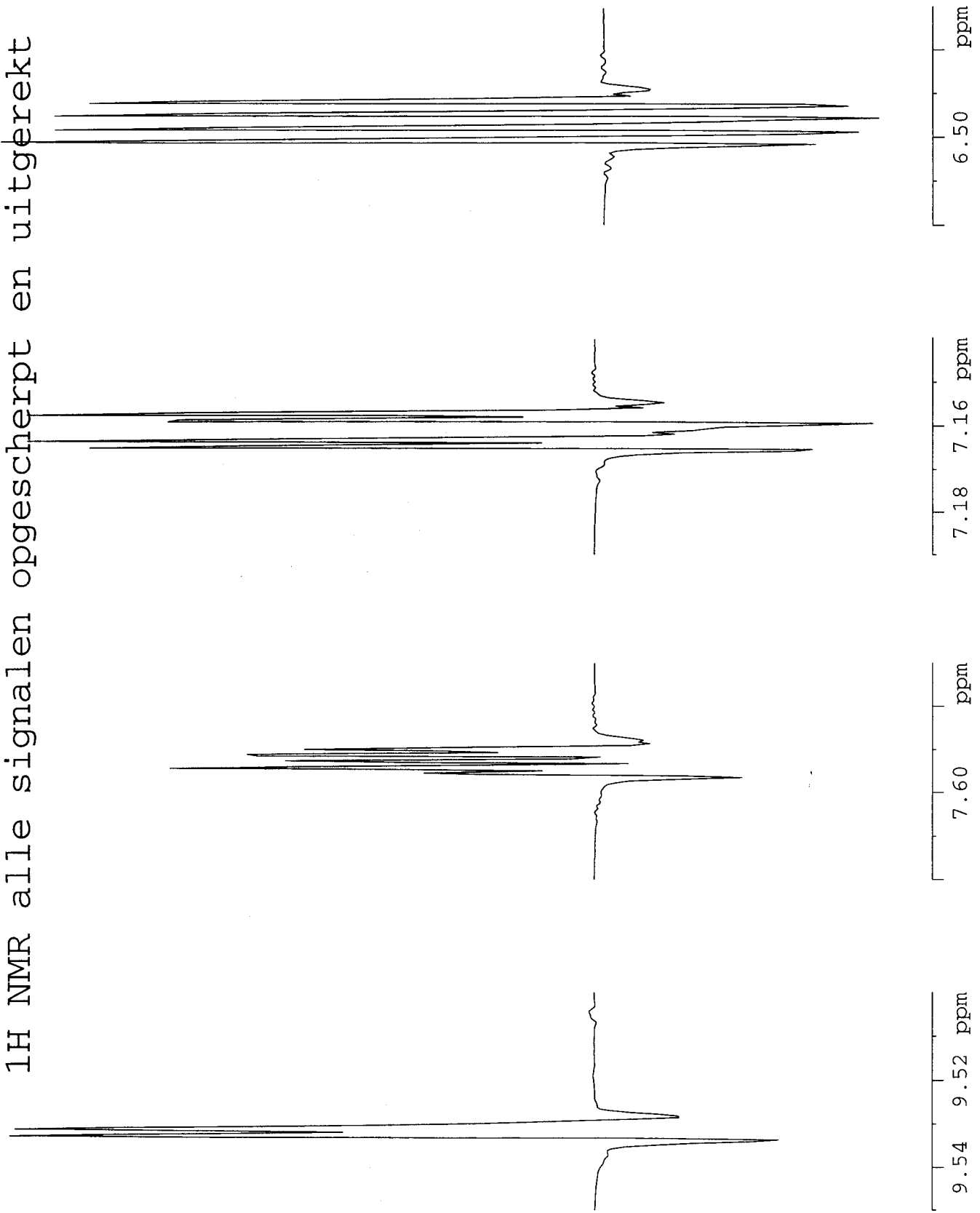
1H NMR in CDCL3 met integraal en
peakpicking dmx-600

6.492
6.494
6.498
6.500
7.157
7.158
7.163
7.164
7.591
7.593
7.594

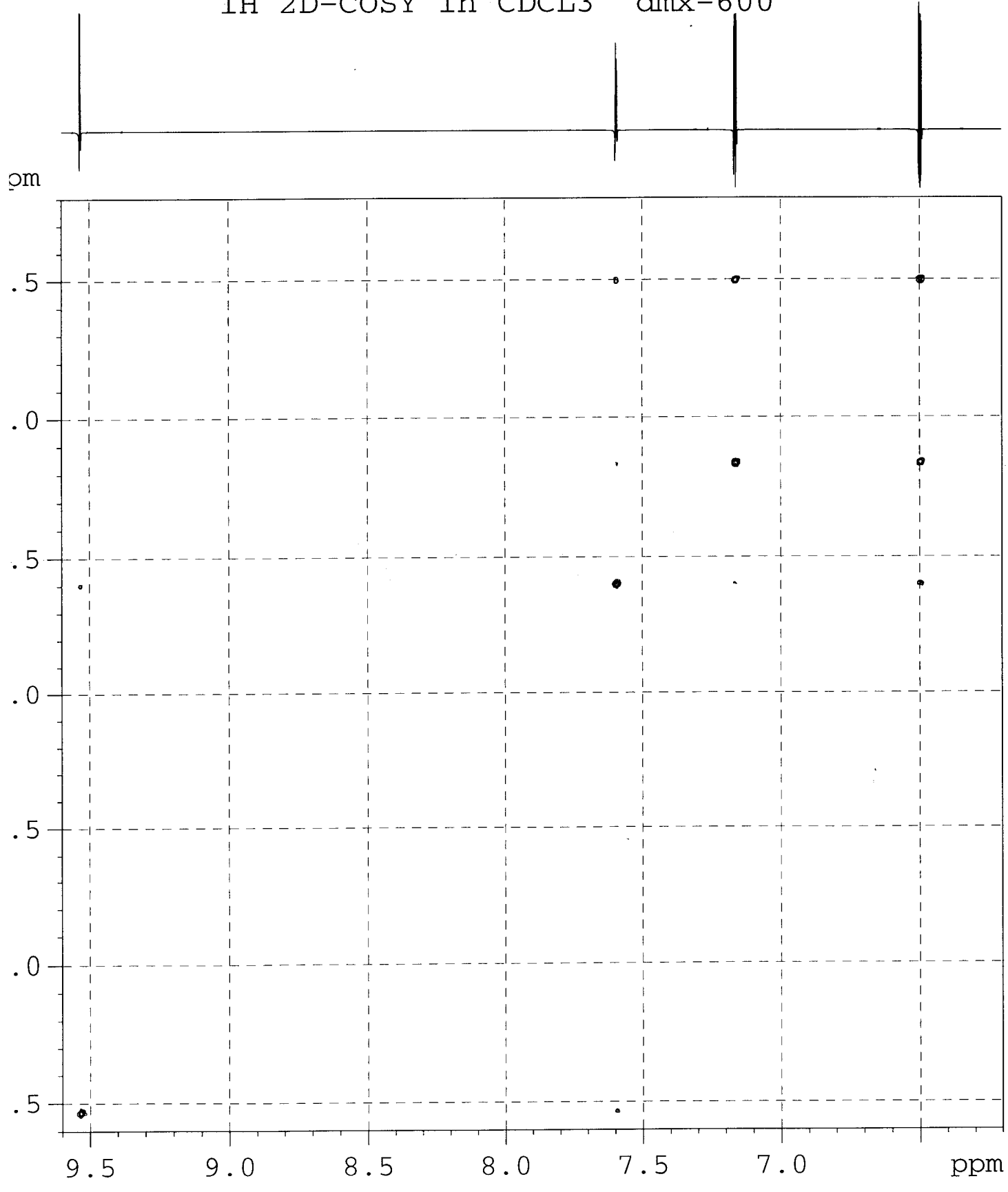
9.531

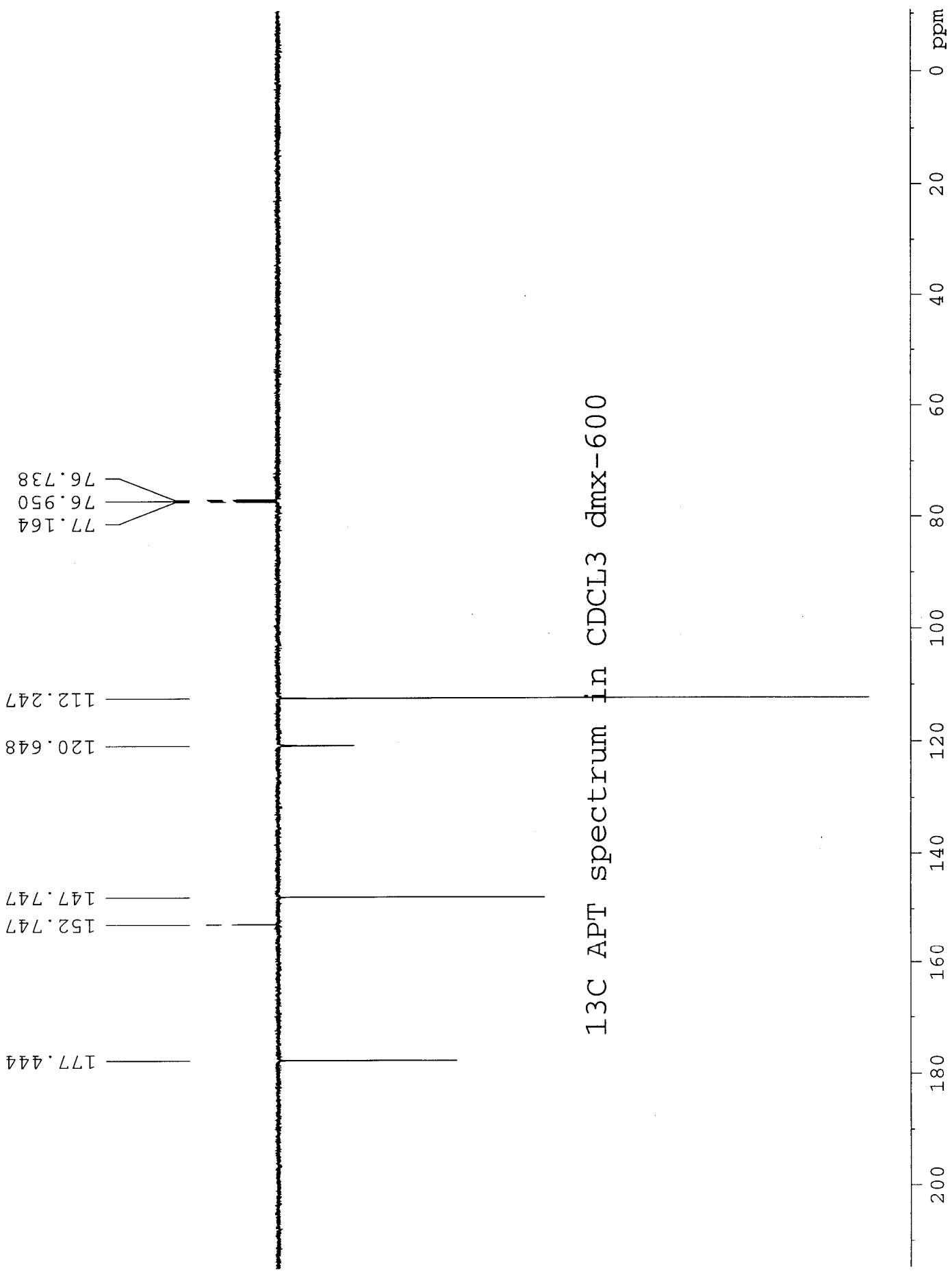


1H NMR alle signalen opgescherpt en uitgerekt

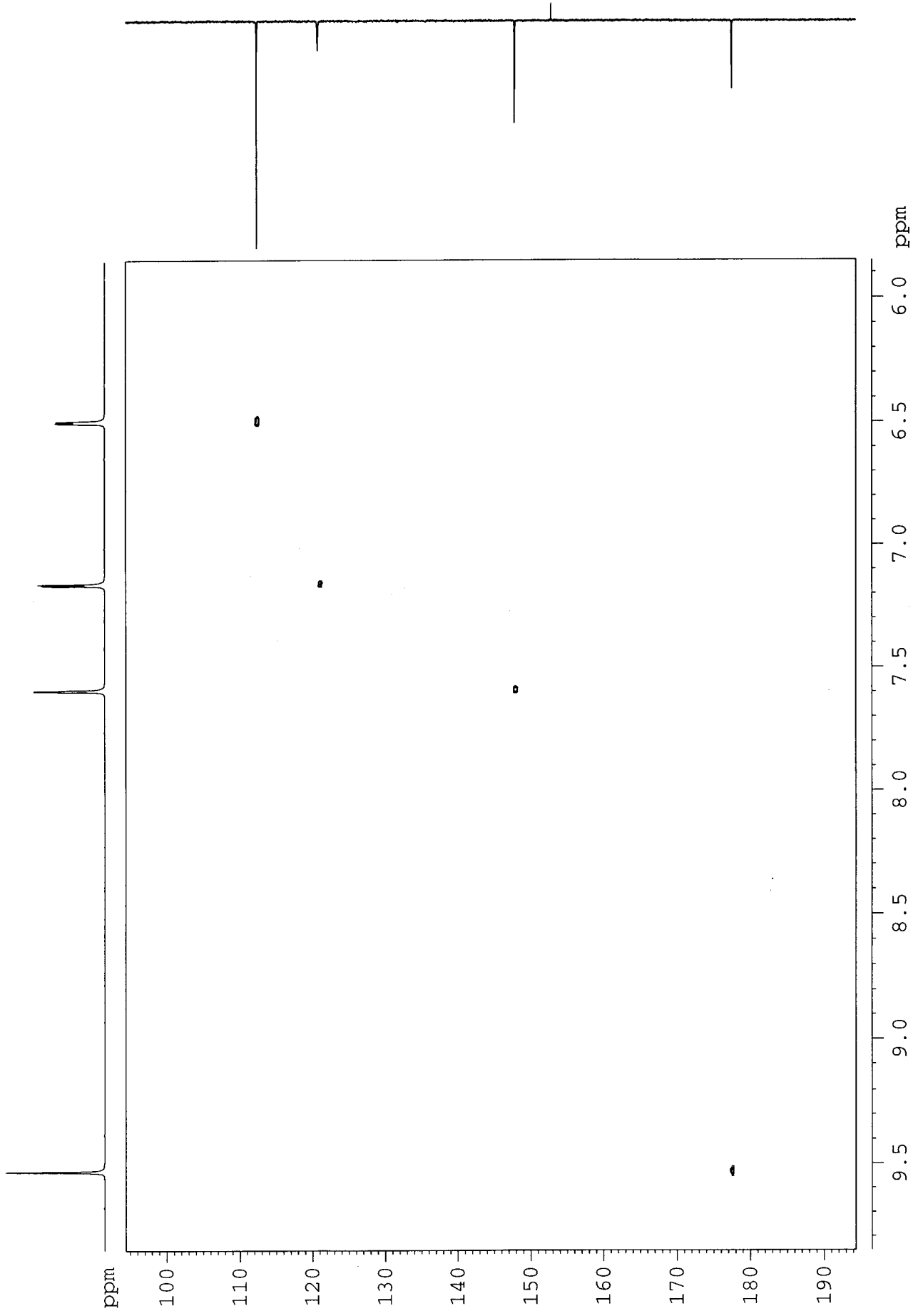


1H 2D-COSY in CDCL3 dmx-600





1H-13C HSQC spectrum in CDCL3 dmX-600



^{13}C inadequate spectrum in CDCl_3 dmx-60

