

Universitetet i Oslo

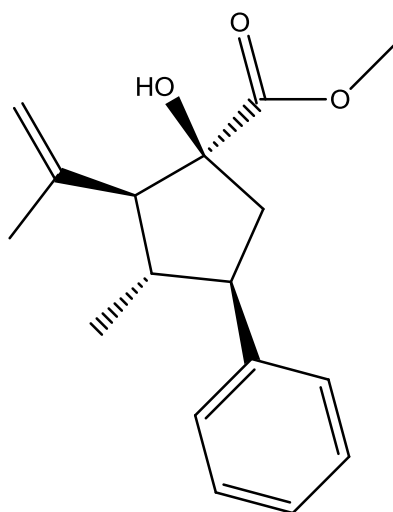
Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet

Eksamen i :	KJM3000
Eksamensdag:	Torsdag 5. juni 2014.
Tid for eksamen:	kl. 09.00 – 13.00 (4 timer).
Oppgavesettet er på 2 sider.	
Vedlegg:	3 vedlegg på hhv. 1, 6 og 1 sider.
Tillatte hjelpemidler:	Lommekalkulator, linjal og molekylbyggesett

Kontroller at oppgavesettet er komplett før du begynner å svare på spørsmålene.

Ved bedømmelse vektlegges oppgavene som angitt.

Oppgave 1 (30%)

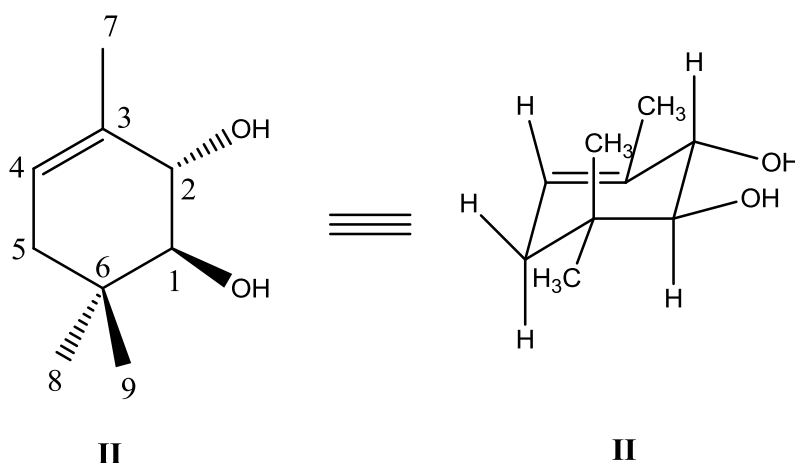


1

- a. Følgende *utvalg* av NMR-data er gitt for forbindelse **1**: ^1H NMR (CDCl_3 , 600 MHz): δ 7.31 (m, 5H), 5.08 (s, 1H), 4.80 (s, 1H), 3.81 (s, 3H), 2.98 (s, 1H), 1.73 (s, 3H), 0.88 (d, $J = 6.3$ Hz, 3H). Signalet ved $\delta = 2.98$ forsvinner når prøven ristes med D_2O . Gi en tilordning av disse signalene.

- b. Følgende IR data er gitt for forbindelse **1**: FTIR (neat): 3523, 3027, 2950, 1729, 1450 cm^{-1} . Gi en tilordning av frekvensene.
- c. Identifiser forbindelsen som gir opphav til massespekteret (EI, 70 eV) gjengitt på vedlegg I. Gjør rede for din tankegang og skriv reaksjonligninger med piler for de markerte ionene slik at vi kan se hvordan du har kommet fram til strukturen.

Oppgave 2 (30%)



Spektroskopiske data for forbindelse **II** er gitt i vedlegg 2.

- a) Følg nummereringen av **II** som angitt i figuren over og gi en så fullstendig tilordning av ^1H - og ^{13}C -NMR spektrene som mulig ved å sette opp en tabell med atom nr. og verdier for kjemiske skift, multiplisitet, koblingskonstanter (J) og antall atomer (integral).
- b) MS-spekteret til etylbenzoat (etylester av benzosyre) er gitt i vedlegg 2. Skriv reaksjonligninger med piler som gjør rede for de avmerkede verdiene i det vedlagte massespekteret. Gjør korte rede for en meget svak topp (ikke synlig i det vedlagte spekteret) ved $m/z = 56,47$.

Oppgave 3 (40%).

Identifiser forbindelsen som gir opphav til spektrene i vedlegg 3. Gi en så fullstendig tilordning av signalene i ^{13}C - og ^1H -NMR spektrene som mulig og gi en kortfattet forklaring. Kommenter kort på EA/MS-, IR- og UV-data som er gitt.

Følgende data er gitt:

Grunnstoffanalyse / Elemental analysis: C:62.62; H:4.96.

HRMS (EI): m/z (M) = 344.0412 (100%), (M+2) = 346.0391 (98%)

UV: $\lambda_{\text{max}} \approx 210 \text{ nm}$, $\epsilon_{\text{max}} \approx 8000$.

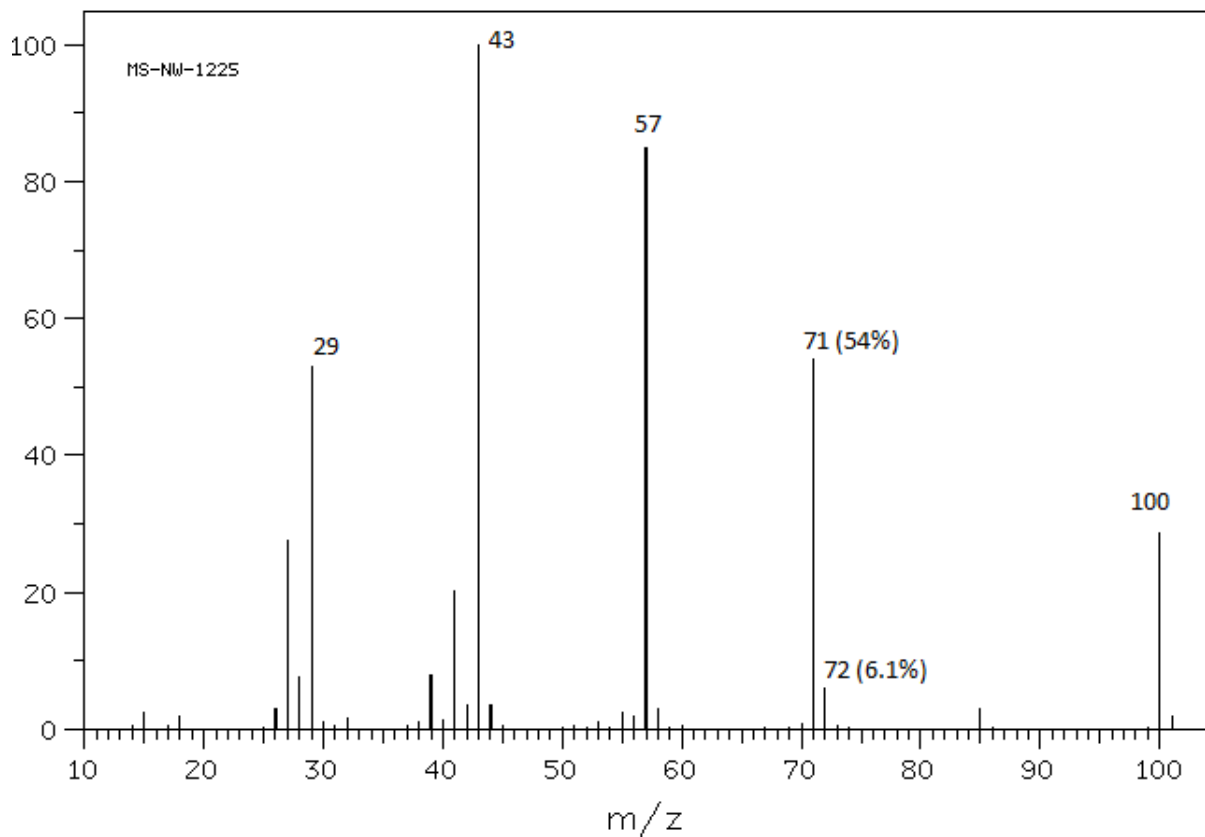
IR: 3100 (m), 2960 (s), 2835 (s), 1774 (s), 1513 (m).

Vedlegg 1 / Attachment 1

Table 4.3 Atomic weights and approximate natural abundance of some isotopes

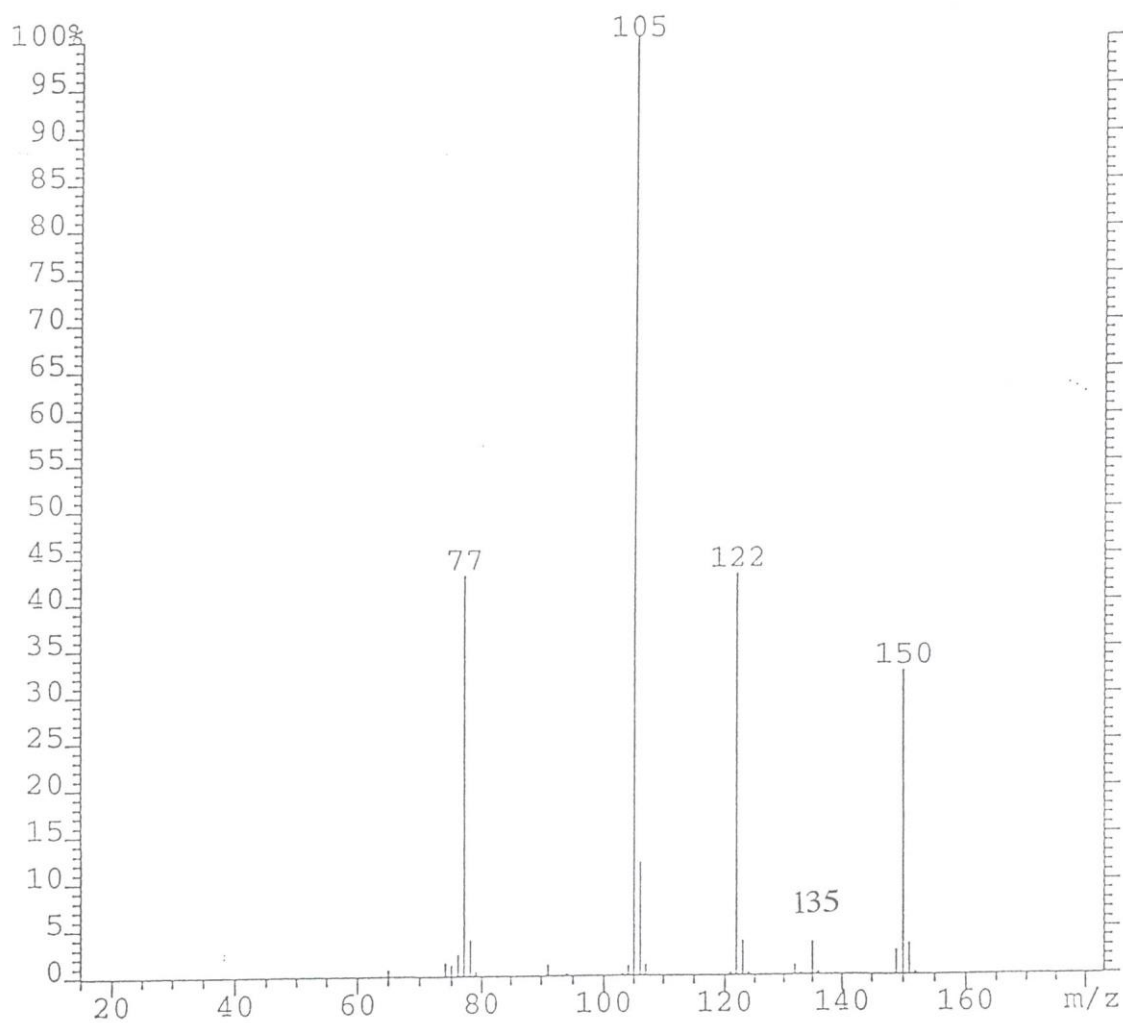
<i>Isotope</i>	<i>Atomic weight</i> (¹² C = 12.000 000)	<i>Natural abundance</i> (%)
¹ H	1.007 825	99.985
² H	2.014 102	0.015
¹² C	12.000 000	98.9
¹³ C	13.003 354	1.1
¹⁴ N	14.003 074	99.64
¹⁵ N	15.000 108	0.36
¹⁶ O	15.994 915	99.8
¹⁷ O	16.999 133	0.04
¹⁸ O	17.999 160	0.2
¹⁹ F	18.998 405	100
²⁸ Si	27.976 927	92.2
²⁹ Si	28.976 491	4.7
³⁰ Si	29.973 761	3.1
³¹ P	30.973 763	100
³² S	31.972 074	95.0
³³ S	32.971 461	0.76
³⁴ S	33.967 865	4.2
³⁵ Cl	34.968 855	75.8
³⁷ Cl	36.965 896	24.2
⁷⁹ Br	78.918 348	50.5
⁸¹ Br	80.916 344	49.5
¹²⁷ I	126.904 352	100

Oppgave 1c /Task 1c: MS (EI, 70 eV):



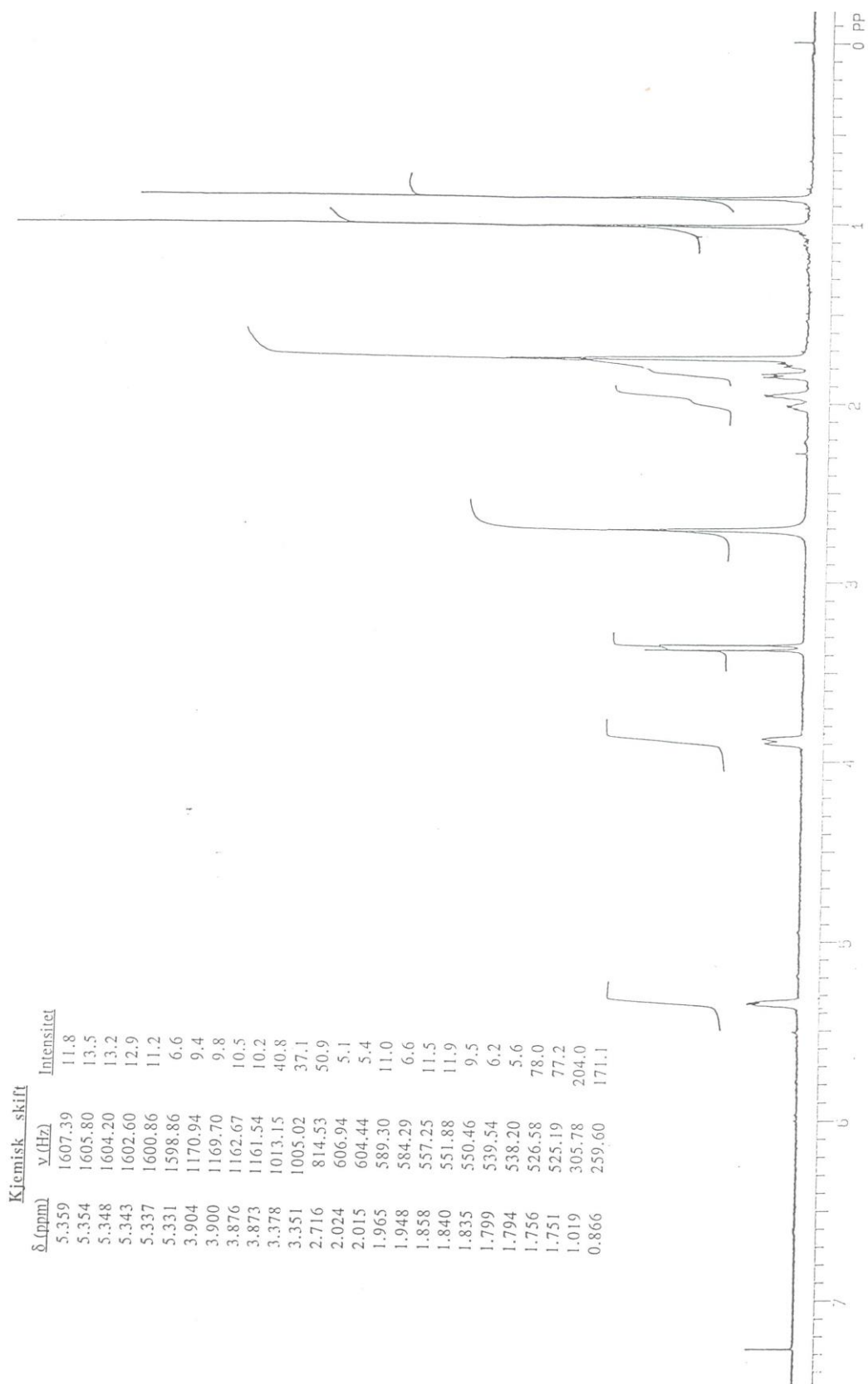
Vedlegg 2 / Attachment 2

Oppgave 2b / task 2b): MS-data for etyl benzoate / ethyl benzoate (EI, 70 eV)

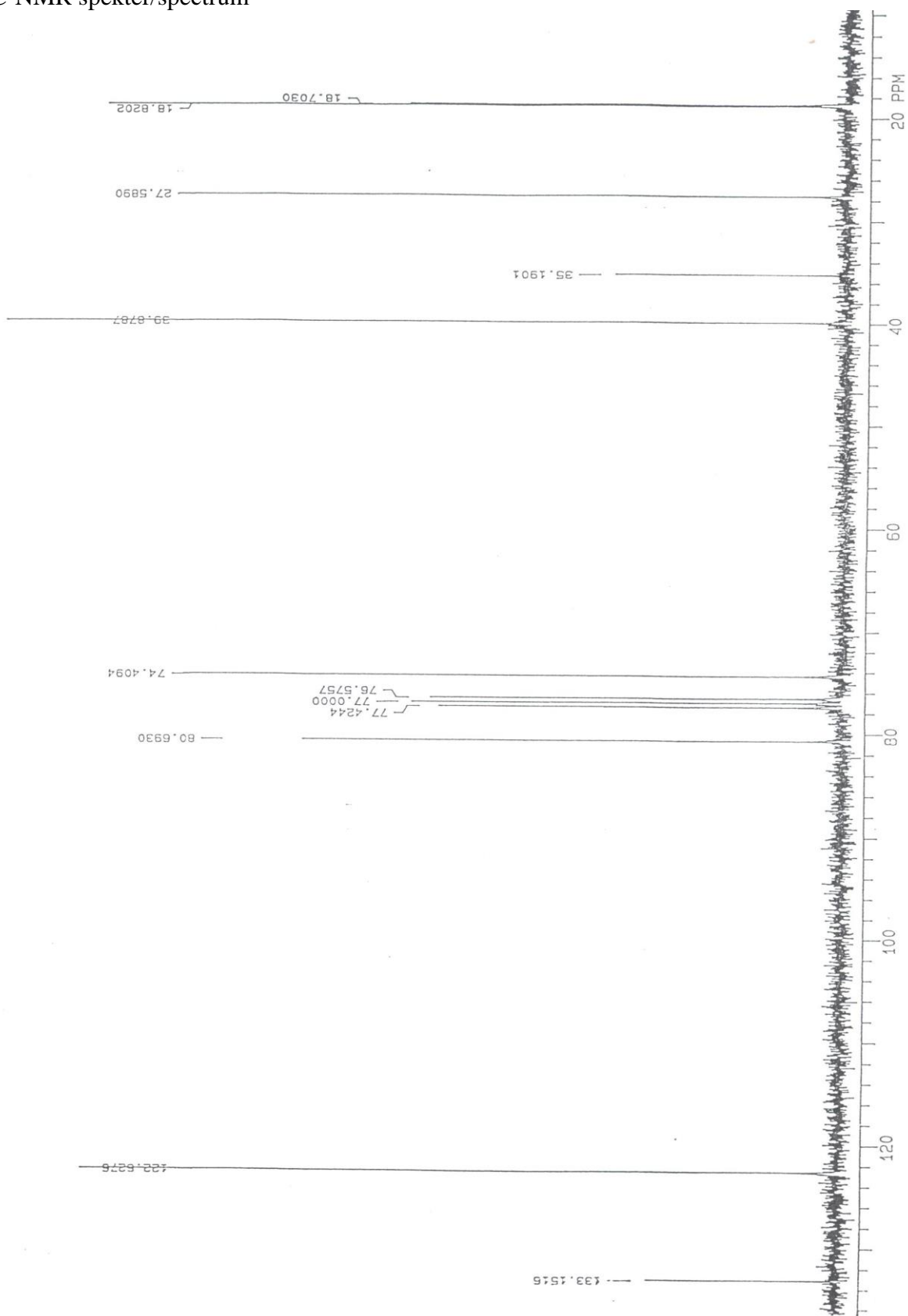


Oppgave 2a / task 2a: NMR-data

¹H-NMR spekter/spectrum



¹³C-NMR spekter/spectrum



^{13}C -DEPT spektra/spectra

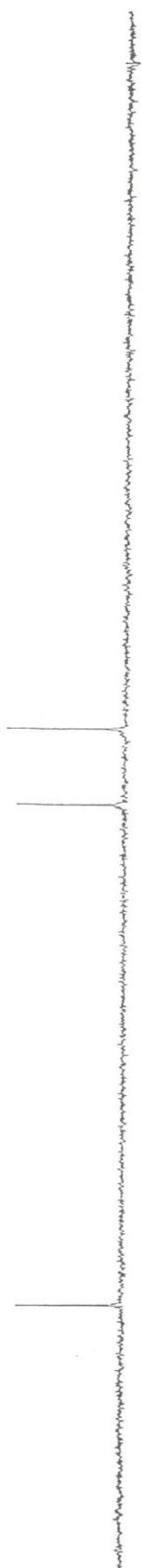
CH3 CARBONS



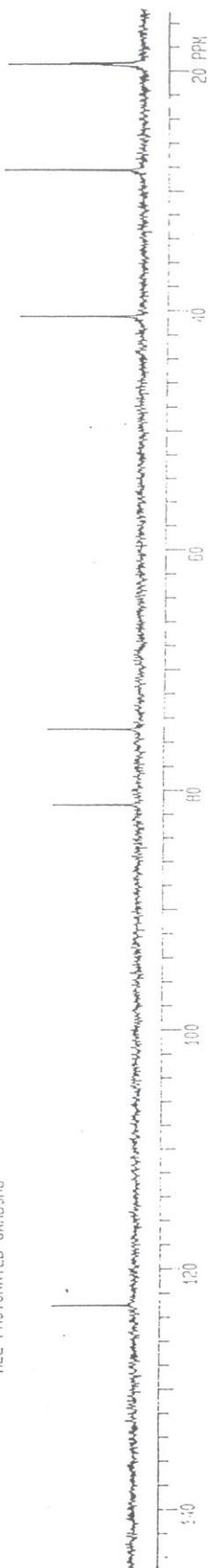
CH2 CARBONS



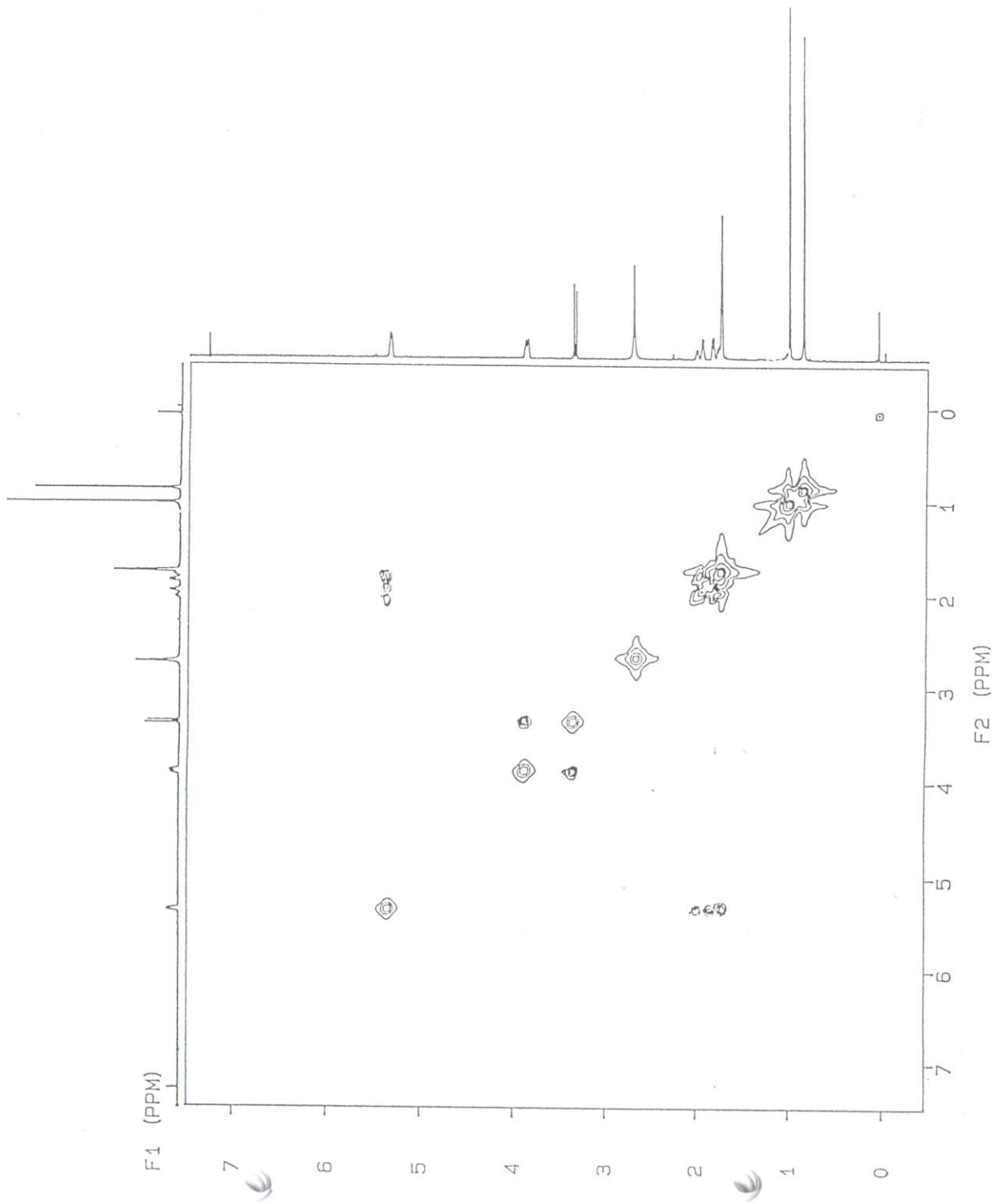
CH CARBONS



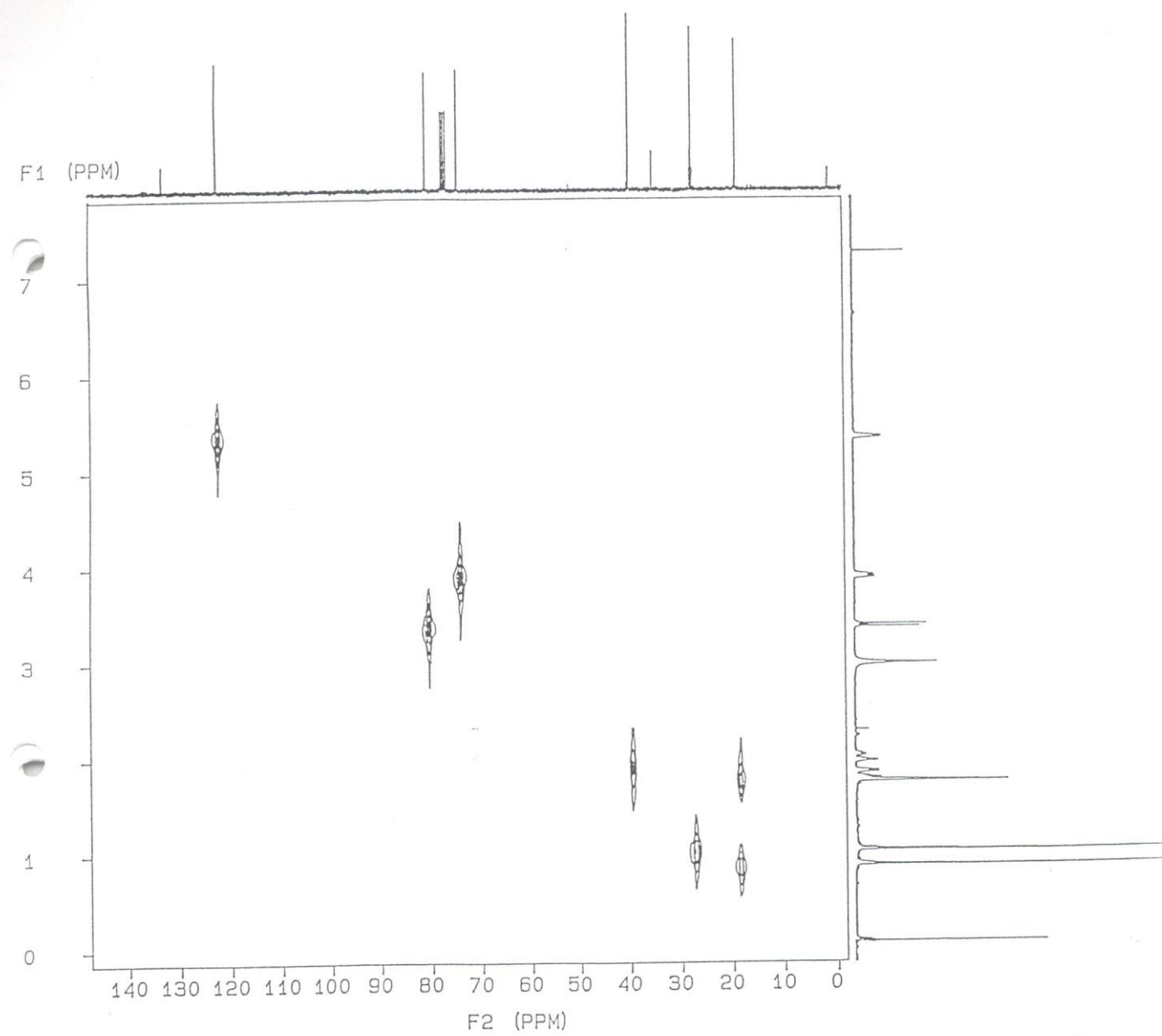
ALL PROTONATED CARBONS



H-H korrelasjon/correlation



C-H korrelasjon/correlation

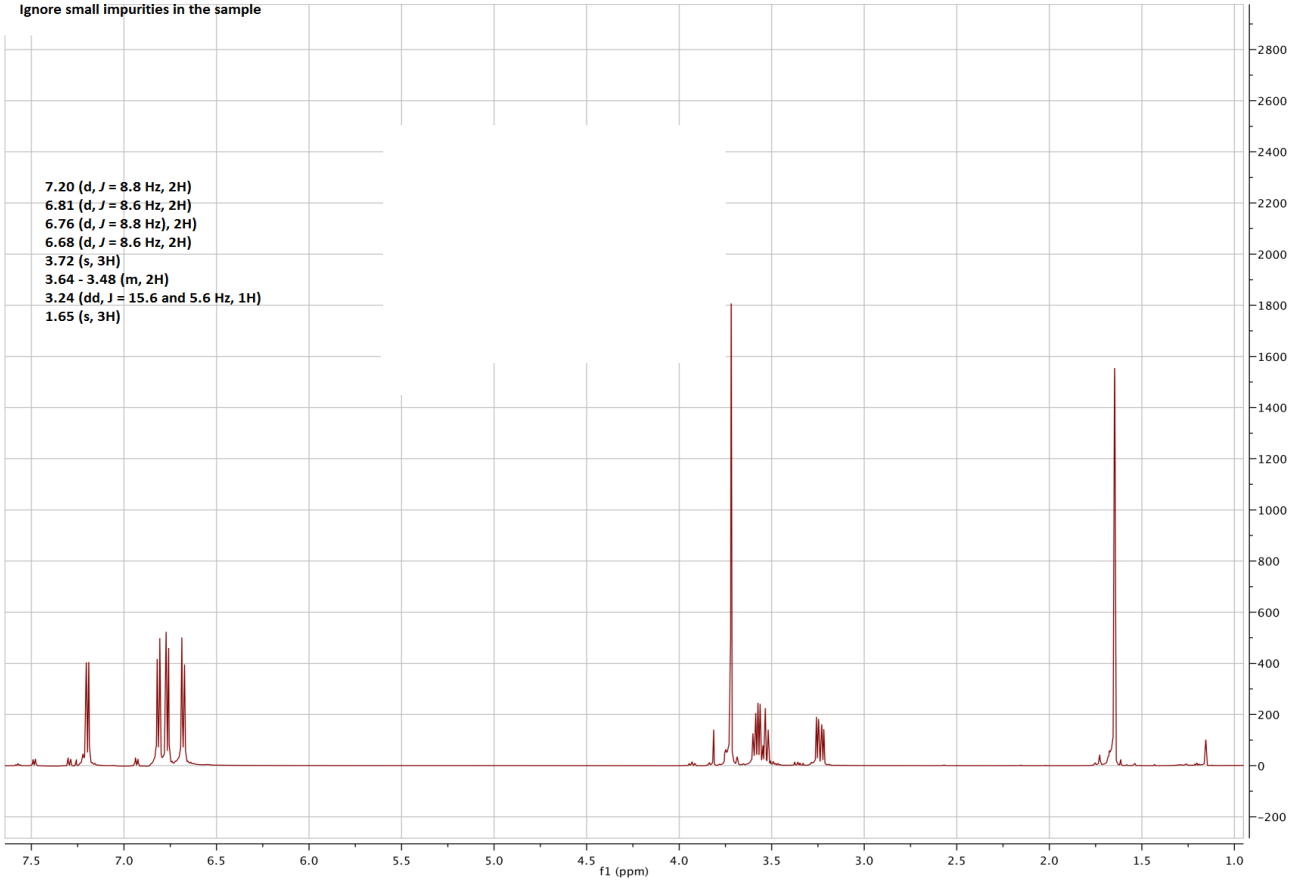


Vedlegg 3 / Attachment 3

400 MHz, CDCl₃

¹H NMR

Ignore small impurities in the sample



100 MHz, CDCl₃

¹³C NMR

