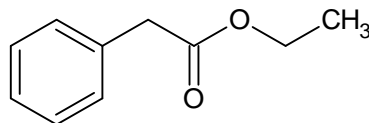


Prüfungsfragenkatalog für Apparative Methoden der Strukturaufklärung (Prof. Kunert Olaf, Prof. Weis Robert)

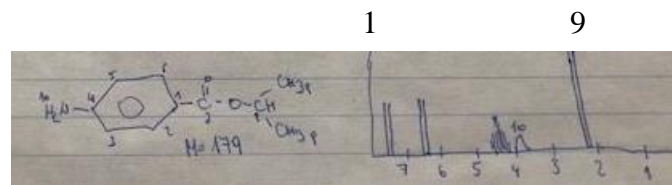
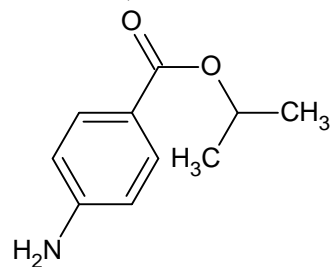
Stand: Jänner 2021

Termin: 01.02.2021 – 2. Teilprüfung

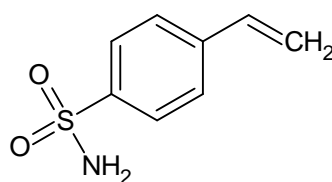
- Ist die Wellenzahl (2Pkte)
 - Direkt proportional der Wellenlänge
 - Indirekt proportional der Wellenlänge (RICHTIG)
 - Kein Zusammenhang
- 4 Gründe warum Carbonylbande nach links verschoben ist? (4Pkte)
- ATR-Technik war aufgezeichnet (6 Pkte)
 - Name der Technik
 - Welche Kristalle können neben Diamant noch verwendet werden?
 - 2 Vor- und Nachteile des Diamanten
- MS-Fragen: (richtiges ankreuzen; 5 Pkte)
 - Auftrennung verschiedener Teilchen erfolgt durch homogenes Magnetfeld (JA)
 - Bei Elektronenstoßtechnik werden gasförmige Moleküle des Elektronenbereiches ionisiert (JA)
 - In einem MS werden absolute Massen bestimmt (NEIN)
 - Es werden nur geladene Moleküle detektiert (JA)
 - Es gibt Elemente mit nur einem Isotop (JA)
- MS Peaks zuordnen:



- Kombibeispiel (MS, IR, NMR)

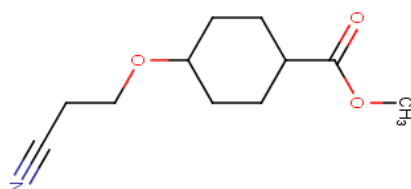


- IR: Wellenbereiche zuordnen:



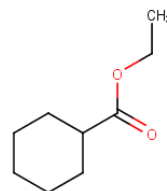
Termin: 31.01.2019 – 2. Teilprüfung

- Nenne 3 Methoden zur Analyse von Feststoffen mit IR, die sich in der Probenvorbereitung unterscheiden und nenne je einen Nachteil.
- Auf was ist vor und nach der Messung mit Chloroform zu achten?
- Welche Schwingungen neben den Normalschwingungen gibt es in der IR noch?
- Massenspektrometrie, ja/ nein Fragen komplett gleich wie bei den Jahren zuvor
- IR – Spektrum: zu diesem Molekül waren ca. 15 Wellenzahlen gegeben und man musste 9 richtig zuordnen



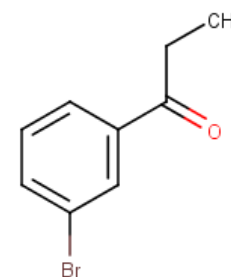
- MS: Zu dieser Struktur waren im Massenspektrum folgende Punkte gegeben, die man mit den Fragmentierungsreaktionen erklären musste:

M+: 164 92 91 65



C₁₀H₁₂O₂

7. Kombibeispiel:
IR, C13, 1H, MS waren gegeben
- Die Struktur finden und nummerieren
 - zum IR- Spektrum waren 5 Wellenzahlen zuzuordnen
 - MS: Fragmentierungsreaktionen angeben
 - Doppelbindungsäquivalente berechnen
 - Im 13C und 1H die Peaks zuordnen



Termin: 01.02.2018 – 2. Teilprüfung; 4 Gruppen 1:45 Std. Zeit
Gruppe D (ua)

8. ATR-Methode:
- Gerät war abgebildet und den Namen aufschreiben
 - Welche Technik wird verwendet?
 - Vor- & Nachteile der Methode aufzählen (2)
 - Welches Material wird beim Kristall verwendet? (Diamant)
 - Vor- & Nachteile vom Verwenden von Diamant (2)
 - alternative Materialien zu Diamant
9. Ankreuzen: Die Absorptionswellenlänge ist
- direkt proportional zur Adsorptionsfrequenz
 - indirekt proportional zu Adsorptionsfrequenz
 - direkt proportional zur Wellenzahl
 - indirekt proportional zur Wellenzahl
10. Was muss man beachten, wenn man in der IR-Messung mit Chloroform in NaCl-Platten arbeitet (2 Sachen aufzählen) - Was muss man bei der Messung einer IR-aktiven, in Chloroform gelösten Substanz beachten? – Was ist der Nachteil bei der Messung mit Chloroform gegenüber der Messung mit KBr und aus welchem Material bestehen die Fenster; worauf ist zu achten?
11. Unterschied zwischen Valenz - und Deformationsschwingungen hinsichtlich Schwingungsrichtung und Frequenz
12. Wie entstehen Kombinationsschwingungen und wie ist die Frequenz ungefähr?
13. Welche Schwingungen neben den Normalschwingungen gibt es in der IR noch?
14. FT-Spektrometer:
- Gerät war zu beschriften mit beweglichem Spiegel
 - Vorteile aufzählen (3)
15. Beispiel Nr. 1 zu Kopplungskonstanten: nur die Kopplungskonstanten berechnen
16. Beispiel Nr. 2 zu Kopplungskonstanten: bei einer Verbindung war ein 1H-Spektrum gegeben und die Kopplungskonstanten waren zu berechnen; danach entscheiden, ob CIS oder TRANS vorliegt (mit kurzer Begründung)
17. MS-Spektrum war gegeben & die Verbindung dazu: im Spektrum waren 4 Werte eingetragen und man musste mithilfe der Umlagerungen & Spaltungen auf die Werte kommen
18. MS-ja/nein
- die Auftrennung verschieden schwerer Teilchen erfolgt durch ein homogenes Magnetfeld
 - bei der Elektronenstoßtechnik werden gasförmige Moleküle durch Elektronenbeschuss ionisiert
 - in einen Massenspektrometer werden absolute Massen bestimmt
 - es werden nur geladene Ionen detektiert
 - es gibt Elemente mit nur einen Isotop
19. Kombinationsbeispiel: 1 Phenyl-2-Pentanone
gegeben waren MS-, IR-, 13C- und 1H-Spektrum
5 Aufgabenstellungen waren zu erledigen:
- Summenformel finden & dazu die Doppelbindungsäquivalente berechnen
 - anschließend gefundene Strukturformel bei den NMR-Spektren aufzeichnen und die Verbindung nummerieren

- c. verschiedene Werte waren beim IR-Spektrum zu interpretieren (ACHTUNG: für jede falsch zugeordnete wird eine richtige abgezogen) (8 Punkte)
- d. beim MS-Spektrum waren 5 Werte gegeben und man muss die Fragmentierungsreaktionen durchführen & aufzeichnen (7 Punkte)
- e. im ^{13}C - und ^1H -Spektrum musste man die einzelnen Signale nun zuordnen & richtig nummerieren (Rechenweg der Inkrementberechnung wurde nicht explizit verlangt, nur die Nummerierung) 14 Punkte

Termin: 15.12.2017 - 1. Teilprüfung - 85 Punkte, Spektrum hatte davon 31P. (mehrere Gruppen (13 Fragen)

1. 2 Verbote für Übergänge, was ist typisch für Übergänge? (3P.)
 2. 4 Anwendungen der UVVis in der Pharmazie
 3. Inkrementberechnung mit alpha ungesättigter Verbindung (7P.)
 4. Prüfung auf Identität: Liste mit 3LM, spez. Abs. berechnen, Abweichung und entspricht es mit 3/6% Toleranz
 5. * Spezif. Absorptionen und Abweichungen berechnen und entspricht die Substanz dem AB
 6. Tabelle gegeben mit LM, spez. Absorption und molaren Absorptionskoeffizient für Vorschrift
 7. c für Probe musste man sich ausrechnen aus Beschreibung (xmg in 10ml, davon 1ml..)
 8. 2 Strukturen CIP Konfig. bestimmen; Prioritäten ordnen – ähnlich wie Phenylalanin
 9. Von Fischer in CIP (doppeltes Vertauschen) D-Ribose → L-Ribose und C4-Epimer zeichnen
10. Richtig/falsch Chiropt. Methoden (10Fragen, 5P.)
- a. Enantiomere haben gleichen Siedepunkt
 - b. Enantiomere haben gleiches Spektrum
 - c. sind alle chiralen Subst. optisch aktiv?
 - d. sind alle Substanzen mit einem c mit 4 versch. Subst. chiral?
 - e. Diastereomere haben spiegelbildliche ORD- und CD-Kurven?
 - f. Meso-Verb. weisen eine Spiegelebene auf?
 - g. auch Phosphor und N-Atome können Asymmetriezentren sein?
 - h. der Drehwert einer Verb. muss immer bei 589nm (Na-D-Linie) gemessen werden
 - i. ein äquimolares Gemisch von Enantiomeren nennt man Racemat
 - j. damit ein Molekül chiral ist, muss es ein asymmetrisches Kohlenstoffatom besitzen
 - k. Geben Diastereomere gleiche UV-Spektren
 - l. Haben Diastereomere gleiche Schmelzpunkte
 - m. Haben Diastereomere spiegelbildliche ORD und CD Kurven
 - n. Sind alle Moleküle optisch aktiv?
11. Wie groß ist der ppm Abstand, wenn man in einem 200MHz Feld einen Abstand von 500Hz zum TMS hat?
12. 2 Möglichkeiten für Rückfall von T1 in S0 Zustand
13. Von L-Zucker, das C4 Epimer und die D-Form zeichnen
14. Rechnung: 5g einer opt. aktiven Subst. ergeben 15°, was ändert sich wenn man nur 1g nimmt?
15. Was ist NOE? Bei welcher Art von Spektrum wird es verwendet? welche Folgen hat es? - Was heißt NOE, in welchem 13C-Spektrum ist es wichtig und wie verändert es das Spektrum optisch
16. Warum sind aldehydische Strukturen so weit nach links verschoben?
17. Spektrum mit 6 Strukturen: die 5 falschen begründen warum sie falsch sind, richtige deutlich markieren, Signale zuordnen, Inkrementberechnung der Cs im Aromaten
18. Zweistrahlphotometer beschriften
19. 4 Begriffe richtig zuordnen → bathochrom, hypsochrom, hyperchrom und hypochrom (Abbildung war gegeben)
20. Anforderung an das Lösungsmittel und die Küvette in der UV / VIS

Termin: 03.02.2016 2. Teilprüfung

1. Warum gibt es bei der FTIR-Methode eine so hohe Wellenzahlenpräzision?
2. Nenne 3 Methoden zur Analyse von Feststoffen mit IR, die sich in der Probenvorbereitung unterscheiden und nenne je einen Nachteil der Methode.
3. Auf was ist VOR und NACH der Messung mit Chloroform zu achten?
4. Zusätzlich gab es ein Kombibeispiel bei dem die Verbindung zu suchen war, Doppelbindungsäquivalente berechnen, Signale richtig zuordnen (IR + NMR) und die Signale des MS mit den Reaktionen herleiten.
5. Außerdem ein Beispiel wo die richtigen Massen, die im MS angezeigt waren, mit den Reaktionen zu finden waren. (Mechanismen aufzeichnen + benennen)

Termin: 15.12.2016

1. Inkrementberechnung (7P.); homoannulares Dien, cisoid
2. Spezifische Absorption ist in der Regel abhängig von (Ja/Nein – 2 P., bei 4 richtigen Antworten 1 P)
Wellenlänge, Konzentration des Arzneistoffs, Schichtdicke, Molekulargewicht, Lösungsmittel

3. Welche Veränderungen verursacht die Verwendung eines polarerer Lösungsmittels bei der Messung eines Carbonyl-Chromophors? Verwenden Sie ggf. die Fachausdrücke auxochrom, bathochrom, hyperchrom, hypochrom und / oder hypsochrom! (4 P) -> Folie aus Skript war gegeben
4. Chemische Verschiebung (MC)
 - umgekehrt proportional zur Magnetfeldstärke
 - proportional zur Magnetfeldstärke
 - unabhängig von der Magnetfeldstärke
5. AB – Tabelle – Prüfung auf Identität (Methanol)
 - spezifische Absorption berechnen (für kurz- und langwellig)
 - Berechnen Sie die prozentuellen Abweichungen von den AB-Werten
 - Beim kurzwelligen Maximum ist eine Abweichung von 3 % erlaubt, beim langwelligen Maximum 6 % . Entspricht die Probensubstanz?
6. Chirooptische Methoden (Ja / Nein)
 - haben Enantiomere den gleichen Siedepunkt?
 - Auch Phosphor- und Stickstoffatome können Asymmetriezentren sein
 - Der Drehwert einer optisch aktiven Verbindung muss immer bei 589 nm (Natrium-D-Linie) gemessen werden
 - Damit ein Molekül chiral ist, muss es ein asymmetrisches Kohlenstoffatom aufweisen
 - Chirale Moleküle sind optisch aktiv
7. 2 Moleküle
 - Markieren Sie in den folgenden Molekülen alle asymmetrischen Zentren mit einem *
 - Bestimmen Sie für die folgenden Moleküle die korrekte Konfiguration (R,S) nach CIP
8. L-Phenylalanin – Korrekte Bezeichnung nach CIP?
9. a.) Optische Drehung: 3,00 g getrocknete Substanz werden in Wasser zu 30,0 ml gelöst. Die optische Drehung, in einer Schichtdicke von 2 dm gemessen, muss zwischen $-0,50^\circ$ und $+0,05^\circ$ liegen. (3 P)
 b.) b.) Was verändert sich, wenn die Schichtdicke 10 cm beträgt? (3 P.)
10. Was bezeichnet man in der NMR-Spektroskopie als Dacheffekt? Wann tritt er auf?
11. Nennen Sie 2 Vorteile und 1 Nachteil, den die Entkopplung der Protonen während der Aufnahme eines ^{13}C -NMR-Spektrums mit sich bringt.
12. Zimtsäure (500 Hz) – cis oder trans?-Begründung
13. NMR-Spektrum (Aromat – 6 Verbindungen zur Auswahl) (28 P)
 - * Richtige Verbindung deutlich markieren
 - * Warum kann man die anderen Verbindungen ausschließen? (1 Grund jeweils)
 - * Signale im Spektrum zuordnen
 - * Inkremente für aromatische C-Atome berechnen

Termin: 30.06.2015

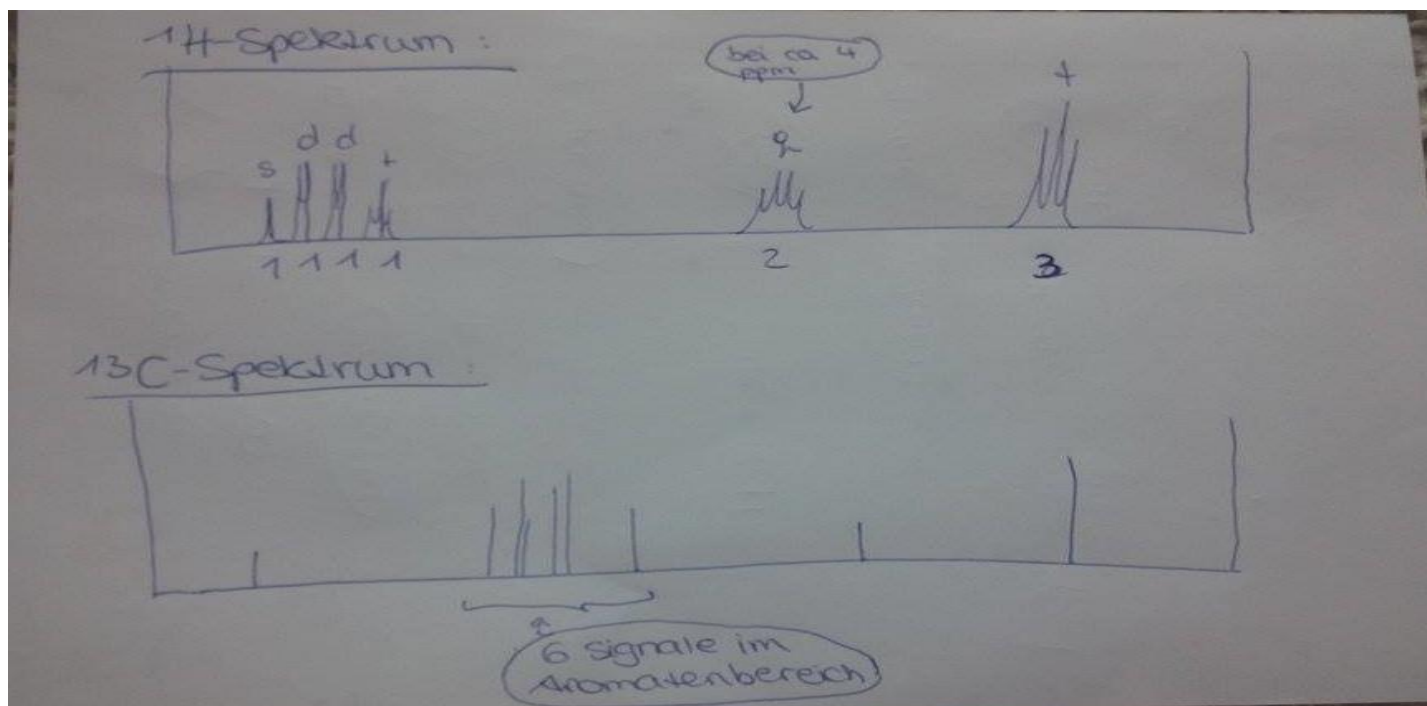
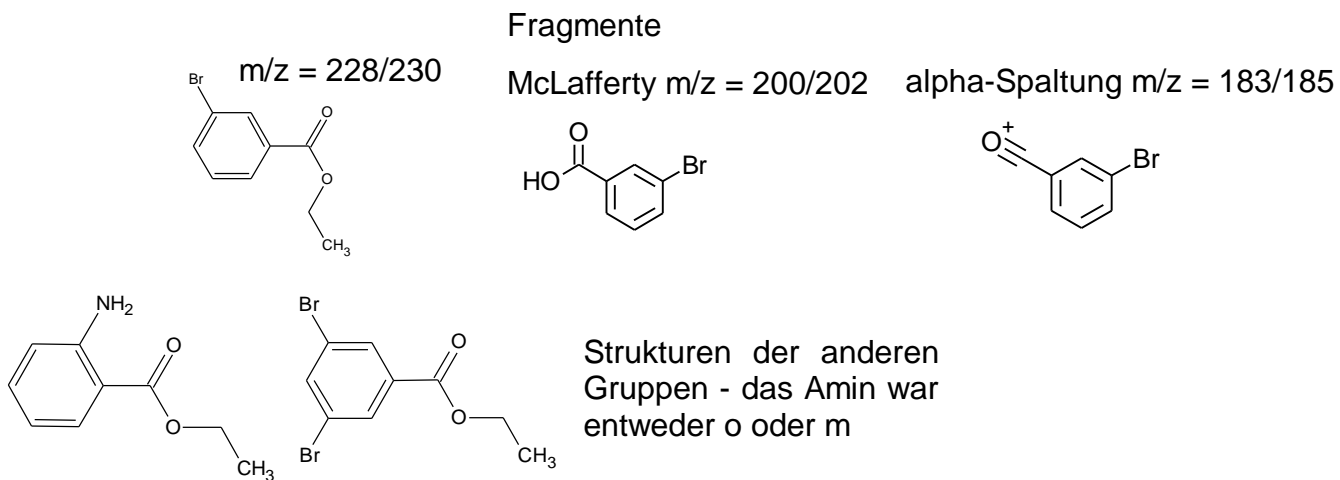
Gruppe A 2. Teilprüfung 1,5 Stunden Zeit, ca. 75 erreichbare Punkte

1. FT-IR-Spektrometer -Skizze war gegeben. Benenne die einzelnenBautsteine und zähle 3 Vorteile auf
2. Skizze von MIR war gegeben. Welche Methode ist hier dargestellt. Nenne 3 Vorteile und 2 Nachteile (8 Pkt.)
3. welche Valenzschwingungen sind nicht IR-aktiv? (1Pkt.)
4. Massenspektrometrie zum Ankreuzen (siehe Altfragen)
5. Berechne die Kopplungskonstanten der Zimtsäure! Ist sie trans oder cis. Begründe deine Antwort.
6. Ein weiteres Bsp. war gegeben bei dem lediglich die Kopplungskonstanten berechnet werden mussten. (5 Pkt.)
7. Kombinationsbsp. (meta-subst. Aromat + Ester + CH_2 + CH_3 + Br) Orden min 8 Zahlen der IR-Tabelle

- zu. Nummeriere deine gefundene Struktur und ordne alle Signale im Spektrum zu (14 Pkt.). Berechne die Doppelbindungsäquivalente. Zeichne die Fragmente und ev. Reaktionsmechanismus zu den dazugehörigen Zahlen im MS.
- Was sind Oberschwingungen und wie ist ihre Frequenz, oder so ähnlich.
 - Erkläre den Unterschied zw. Valenz- und Deformationsschwingung hinsichtlich ihrer Schwingungsrichtung und Frequenz.

Ad7.

Andere Strukturen (andere Gruppen)



Termin: 29.05.2015 1. Teilprüfung - Insgesamt 13 Fragen, 1,5 Stunden Zeit.

1. Ca. 8 Fragen zum Ankreuzen
 - geben Diastereomere gleiche UV-Spektren
 - haben Diastereomere gleiche Schmelz- und Siedepunkte
 - sind alle chiralen Moleküle optisch aktiv
2. Warum ist 13 C nicht integrierbar?
3. L-Threose: Epimer und D-Enantiomer aufzeichnen
4. Nenne 2 Rückkehrmöglichkeiten von T1 zu S0?
5. Rechenbeispiel:
 - 0,475 mg werden in 10ml Methanol gelöst. Tabelle mit 3 verschiedenen LM geben (Methanol, HCl,..), langwellig, kurzwellig, spezif. Absorption, Epsilon. Zusätzlich ein Spektrum gegeben (langwellige A : 0,95?, kurzwellig A: 0,27)
 - Berechne die spezifischen Absorptionen
 - Entspricht die Substanz?
 - Berechne die prozentuelle Abweichung von spez. A und Epsilon
6. Ordne zu und nenne den Effekt:
 - 200 - 800 nm
 - 10 cm
 - 800nm - 50um
7. Nenne 3 Gründe warum 13 C nur entkoppelt angezeigt werden kann?

2. Gruppe

1. UV-Vis Inkremente
2. 2-Strahlphotometer beschriften
3. UV-Vis Bandenspektren: Warum erhält man keine scharfen Linien?
4. Lösungsmittelleffekte bzgl. Lösungsmittel
5. Erkläre Bathochromen/Hyprochromen Effekt
6. Gegeben war eine AB-Tabelle mit: Lösungsmittel, A 1% 1cm und Epsilon. Vergleich der Probe mit den AB-Werten. (Vgl. Beispiel Reserpin im Skript)
7. Dacheffekt
8. Warum sind Olefine weiter links/rechts im Spektrum (?)
9. D,L Struktur zeichnen, und passendes Epimer (Glukose)
10. R,S einzeichnen
11. Ja/Nein Fragen zu optischen Methoden (Enantiomere, Diastereomere)
12. Rechnung: 5g Substanz gibt $\alpha = 15^\circ$; wieviel α ergibt 1g Substanz bei gleichen Bedingungen
13. NMR-Spektrum (Begründung warum die anderen auszuschließen sind, C1-C4 berechnen, ...)

3. Gruppe

1. Welche Veränderungen verursacht die Verwendung eines polareren Lösungsmittels bei der Messung eines Carbonyl-Chromophors? Verwenden Sie ggf. die Fachausdrücke auxochrom, bathochrom, hyperchrom, hypochrom und/oder hysochrom
2. Nennen Sie 3 Gründe warum man in der UV-Spektroskopie keine Linien- sondern Bandenspektren erhält
3. Welche Voraussetzungen müssen Lösungsmittel erfüllen damit sie in der UV-Spektroskopie eingesetzt werden können?
4. Inkrementberechnung
5. Photometer beschriften
6. Prüfung auf Identität: Untenstehende Tabelle
7. Ja/Nein:
 - Enantiomere zeigen identische UV Spektren
 - Schmelzpunkte sind identisch für enantiomere Verbindungen
 - Diastereomere Verbindungen haben spiegelbildliche ORD und CD-Kurven
 - Meso-Verbindungen weisen eine Spiegelebene auf
 - Auch Phosphor- und Stickstoffatome können Asymmetriezentren sein

Ergänzungen und neue Fragen an: graz.download@pharmapoint.at

- Der Drehwert einer optisch aktiven Verbindung muss immer bei 589nm (Natrium-D-Linie) gemessen werden.
- Der molare Drehwert hängt von dem verwendeten Lösemittel und von der Meßtemperatur ab.
- Ein äquimolares Gemisch von Enantiomeren nennt man Racemat
- Damit ein Molekül chiral ist, muss es ein asymmetrisches Kohlenstoffatom aufweisen
- Chirale Moleküle sind optisch aktiv

8. a. Zeichnen Sie für die Fischer-Konvention dargestellten L-Threose ein Epimer und die D-Threose
- b. Markieren Sie in den folgenden Molekülen alle asymmetrischen Kohlenstoffatome mit einem *
- c. Bestimmen Sie für die folgenden Moleküle die korrekte Konfiguration (R,S)
9. 5 g einer optisch aktiven Verbindung A zeigen bei 589 nm in Methanol bei 25°C und einer Schichtdicke von 2dm eine optische Drehung α von +15°. Welche Drehung beobachtet man wenn man stattdessen 1 g des Enantiomers von A eingewogen werden? Kurze Begründung!
10. Warum sind die Signale aromatischer Protonen – im Vergleich zu olefinischen Protonen – so weit in Richtung hoher Frequenzen verschoben?
11. Nennen Sie 2 Vorteile und einen Nachteil, den die Entkopplung der Protonen während der Aufnahme eines ¹³C-NMR-Spektrums mit sich bringt.
12. Was bezeichnet man in der NMR-Spektroskopie als Dacheffekt? Wann tritt er auf?
13. NMR- Spektrum

Termin: 01. 07. 2014 - 2. Teilprüfung – 1,5 Std. Zeit

1. Was man bei der Messung im IR- Spektrum bei NaCl Zellen mit Chloroform beachten muss.
2. Was Oberschwingung und was Kombinationsschwingungen sind

Weitere Gruppe:

1. IR war gegeben und man musste die Inkremente berechnen
2. Welches LM wird bei FT-Spektrometer bevorzugt und warum?
3. FT-Spektrometer war gegeben und man musste es Beschriften
4. ATR-Kristall war aufgezeichnet u man musste den Strahlengang erklären
5. NMR von Zimtsäure war gegeben; Kopplungskonstanten berechnen, liegt die DB cis oder trans vor? Warum?
6. Ja/Nein Fragen zu Massenspektrometrie
7. 2-Ethoxybenzamid - NMR war gegeben; Signale zuordnen; Kopplungskonstanten bestimmen, Inkremente berechnen
8. In welchem Wellenbereich läuft IR-Spektroskopie ab?
9. Unterschied zw. Wellenzahl und Absorptionswelle; zw. Valenz- und Schwingungsrichtung

Termin: 23. 5. 2014 – 1. Teilprüfung 1,5 Std. Zeit

1. UV-VIS Inkremente berechnen
2. Wovon ist die Spezifische Absorption abhängig?
3. UV/VIS was ist ein Singulett, was ist ein Triplett und Rückkehrmöglichkeiten?
4. Lösungsmittelleffekt bei UV-Chromophor?
5. UV-VIS AB-Tabelle war gegeben + spezifische Absorption berechnen
6. Was ist der Dacheffekt?
7. Chemische Verschiebung zum Ankreuzen
8. Chirale Zentren bei 2 Verb. *einzeichnen
9. L-Phenylalanin – Korrekte Bezeichnung nach CIP?
10. 5 g Substanz gibt $\alpha = 15^\circ$; 1 g Substanz gibt bei gleichen Bedingungen welchen α und warum?
11. Ja / Nein Fragen über die chiroptischen Methoden
12. ¹³C und ¹H Spektren waren gegeben + 6 Verbindungen zur Auswahl; man musste die Signale zuordnen, begründen warum man eine Struktur ausschließt; Inkremente bei ¹³C berechnen und die richtige Struktur genau markieren

Ergänzungen und neue Fragen an: graz.download@pharmapoint.at

Termin: 5. 7. 2013 - 2. Teilprüfung gruppe B – 1,5 Std.

1. Teile Beschriften von FT-IR-Spektrum
 2. Skizze aus den Skript wo die Reflexion zu sehen war.
 - welche Messtechnik der IR ist dargestellt? ATR
 - 2 Materialien die als Kristall verwendet werden
 - 2 Vor- und 2 Nachteile
 3. Worauf ist bei der Wahl des Lösungsmittels zur Reinigung der zur IR-Messung verwendete NaCl Fenster zu achten?
 4. Unterschied Valenz und Deformationsschwingung hinsichtlich Schwingungsrichtung und Frequenz
 5. Wellenzahl abhängig von Absorption:
 - indirekt proportional
 - direkt proportional
 - kein Zusammenhang
 6. JA/NEIN
 - die Auftrennung verschieden schwerer Teilchen erfolgt durch ein homogenes Magnetfeld
 - bei der Elektronenstoßtechnik werden gasförmige Moleküle durch Elektronenbeschuss ionisiert
 - in einen Massenspektrometer werden absolute Massen bestimmt
 - es werden nur geladene Ionen detektiert
 - es gibt Elemente mit nur einen Isotop
 7. Spektrum von Zimtsäure, durch Berechnung von Kopplungskonstanten entscheiden ob cis oder trans und Entscheidung kurz begründen
 8. H1 Spektrum von einer aromatischen Verbindung. Chemische Verschiebung von H berechnen und Signale zuordnen und Kopplungskonstanten berechnen.
 9. Kombinationsbeispiel: Das Molekül zeichnen und in allen Spektren die Signale zuordnen. Fragmente bzw. Mechanismen zeichnen von den Signalen im Massenspektrum.
- Weitere Fragen:
1. Welches Lösungsmittel wird bei FT-Spektrometer bevorzugt und warum?
 2. ATR Kristall ist gegeben; Beschriften und den Strahlengang erklären
 3. Kombinationsbeispiel: IR war gegeben und man musste die Inkremente berechnen

1. Teilprüfung blaue Gruppe (6. 6. 2013 – 1 Std. zeit)

1. Inkrementberechnung
2. Wovon ist die spezifische Absorption abhängig (JA/NEIN)
 - Wellenlänge
 - Lösungsmittel
 - Konzentration
 - Schichtdicke
 - Molekulargewicht
3. Dacheffekt
4. In der UV-Spektroskopie wird was als Singulett und was als Triplett bezeichnet? Beispiel für Rückkehrmöglichkeit vom angeregten in den Grundzustand.
5. Chemische Verschiebung (richtiges Ankreuzen)
 - umgekehrt proportional zu Magnetfeldstärke
 - proportional zu Magnetfeldstärke
 - unabhängig von der Magnetfeldstärke
6. Lösungsmittelleffekte (Abbildung von Seite 15 beschreiben gegebenenfalls hypochrom, hyperchrom.. als Begriffe verwenden)
7. Chiralitätszentren einzeichnen
8. Bestimmen ob R- oder S- Konfiguration
9. Enantiomere haben (JA/NEIN)
 - gleichen Siedepunkt
 - gleiche UV-Spektren
 - Drehung mit unterschiedlichen Vorzeichen
 - sind alle chiralen Substanzen optisch aktiv
 - alle Substanzen mit einen C mit 4 verschiedenen Substituenten chiral?
10. 5 g Substanz hat eine Drehung von 15 Grad bei 2 cm Schichtdicke in Methanol. Welche Drehung ist bei 1 g der Substanz bei sonst gleichen Bedingungen zu erwarten? Erklärung dazu.

Ergänzungen und neue Fragen an: graz.download@pharmapoint.at

11. Spezifische Absorption berechnen. 0,96 mg in 10 ml gelöst. 1 ml in einer 1 ml Küvette gemessen Dicke 1 cm. Tabelle von Arzneibuch war gegeben mit kurzwellig und langwellig. Wie viel % Abweichung und entspricht es den Arzneibuch? (es kam eine sehr hohe Abweichung heraus)
ACHTUNG: Die Probe wird immer in 2 ml. Chloroform gelöst!!!!
12. ¹³C und ¹H Spektrum und 6 sehr ähnliche aromatische Verbindungen. Herausfinden welche das richtige ist, begründen warum es die anderen nicht sind und die Signale zuordnen. (waren die meisten Punkte)
13. Vorteil und Nachteil von Entkopplung in ¹³C Spektrum.

Weitere Gruppe 1. Teilprüfung

1. Inkremente von Chromophor bei UV/VIS Spektroskopie waren zu bestimmen/ berechnen
2. 0,960 mg Arzneistoff werden mit 10 ml Wasser verdünnt und daraus 1 ml entnommen. Es war eine Tabelle gegeben mit LM Methanol, HCl. Gefragt war die spezifische Absorption des Arzneistoffs und ob sie den verlangten Absorptionen entsprechen Kurzwelliges Maximum 3 % und langwelliges Maximum 6 %. ACHTUNG die Probe wird immer in 2 ml Chloroform gelöst!!
3. 5 g optische Substanz hat 0,15 ° α bei einer Schichtdicke von 2 cm. 1 g Enantiomer wird dazugegeben – was passiert bei gleichen Bedingungen?
4. Zum Ankreuzen: Chemische Verschiebung ist : *direkt proportional zur Magnetfeldstärke
 - Nicht direkt proportional zur Magnetfeldstärke
 - Unabhängig von der Magnetfeldstärke
5. Lösungsmittelleffekte bei UV-VIS erklären – Grafik auf Folie S 14 war gegeben
6. Phenylalanin war in der Fischer-Projektion gegeben und man musste sie in die CIP-Projektion umwandeln und die Konfiguration bestimmen
7. Vitamin C und eine weitere Struktur war gegeben (Vitamin K od E), alle chiralen Zentren mussten mit einem * gekennzeichnet werden.
8. 2 weitere Strukturen waren gegeben -> hier war die genaue Konfiguration nach CIP zu bestimmen
9. ¹H NMR und ¹³C NMR war von einer Substanz gegeben. Man musste die richtige Substanz aus 6 verschiedenen ermitteln, die Inkremente fürs ¹³C berechnen und begründen warum es die 5 restlichen Strukturen nicht sein können
10. Nennen Sie min. 1 Vorteil/Nachteil der Protonenentkopplung
11. Wahr/Falsch-Aussagen zu chiroptischen Methoden (zum Ankreuzen)

1. Teilprüfung Juni 2012

1. UV-VIS, IR & Radiowellen, welche Wellenlänge und welchen Effekt?
2. Lambert Beer'sches Gesetz: Rechenaufgabe mit den Formeln
3. Bathochromer Effekt – Beschreibung
4. UV-VIS Inkrementberechnung
5. UV-VIS: Identitätsprüfung, Tabelle
 1. -kurzwelliges Maximum Abw. von +/-3 %
 2. -langwelliges Maximum Abw. von +/-6 %
6. Chiralitätszentren mit * kennzeichnen
7. Prioritäten ordnen und Konfiguration bestimmen
8. L-Threose: zeichne Epimer; zeichne D-Threose
9. ..g einer Substanz A zeigt Drehung von .. °, ..g der Substanz A mit denselben Bedingungen zeigt welche Drehung?
10. Vor / Nachteile der Entkopplung von Protonen
11. Warum NMR-Spektren bei bestimmten Verbindungen verschoben werden?
12. Tabelle: ankreuzen wahr / falsch über chiroptische Methoden
13. Ein NMR-Spektrum: ¹H und ¹³C Substanz zuordnen