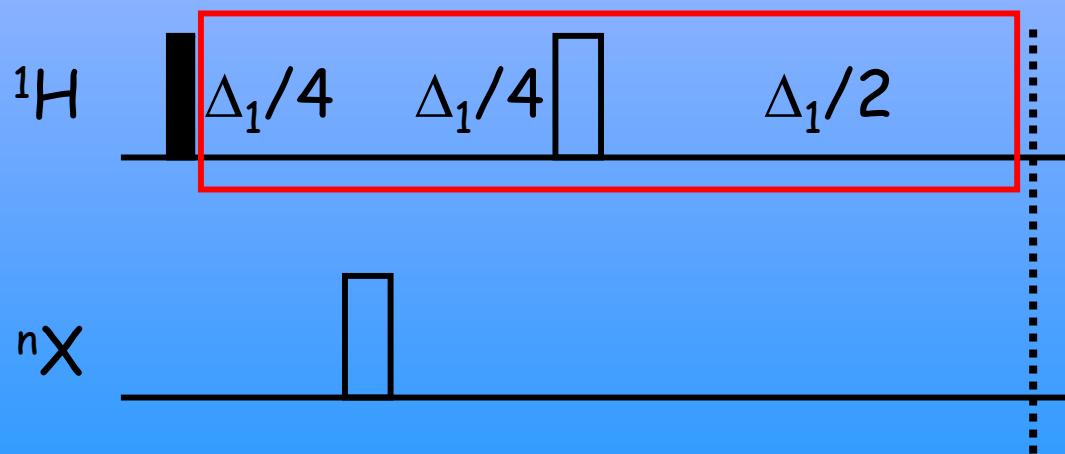


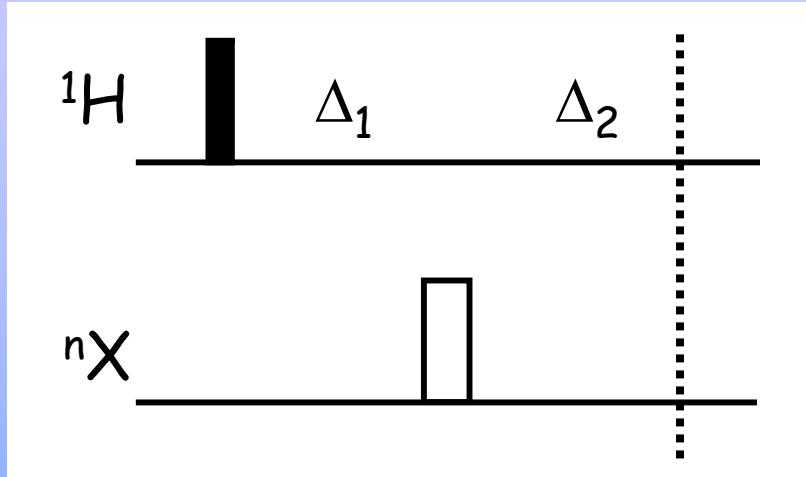
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

- (1) Berechnen Sie mit Hilfe des Produktoperatorformalismus welche Art von Protonen-Magnetisierung am Ende der folgenden Pulsequenz für ein H-X Paar von Kernen ($J_{HX} = 100 \text{ Hz}$) vorliegt, wenn man $\Delta_1 = 10 \text{ msec}$ wählt. (Ein Tip: J_{HH} ist hier nicht relevant)

keine chemische Verschiebung



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II



$$H_z \xrightarrow{90^\circ H_x} -H_y \longrightarrow$$

$$-H_y \cos \pi J_{HX} (\Delta_1 - \Delta_2) -$$

$$-2 H_x X_z \sin \pi J_{HX} (\Delta_1 - \Delta_2) = -H_y$$

$$-H_y \xrightarrow{180^\circ H_x} H_y \longrightarrow$$

$$H_y \cos \pi J_{HX} (\Delta_1/2) - 2 H_x X_z \sin \pi J_{HX} (\Delta_1/2) = 2 H_x X_z$$

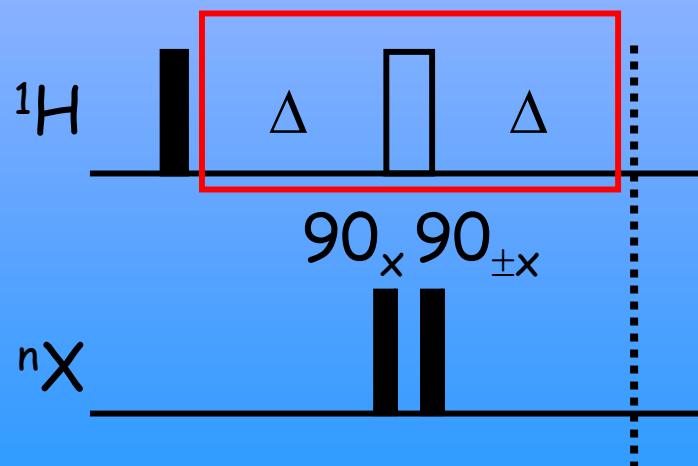
wenn $\Delta_1 = 10 \text{ msec}$, $J_{HX} = 100 \text{ Hz}$

d.h. antiphase obwohl $\Delta_1 = 1/J$

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

(2) Die folgende Pulssequenz wird zweimal ausgeführt, einmal hat der zweite 90° -X-Puls die Phase x , einmal die Phase $-x$. Berechnen Sie für ein H-X Paar von Kernen, welche Protonen-Magnetisierung in beiden Fällen am Ende vorliegt wenn $\Delta = 1/2J_{HX}$ (auch hier ist J_{HH} nicht relevant). Wie unterscheiden sich die beiden?

keine chemische Verschiebung



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

$$H_z \xrightarrow{90^\circ H_x} -H_y \longrightarrow$$

$$H_y \cos \pi J_{HX} \Delta - 2 H_x X_z \sin \pi J_{HX} \Delta = 2 H_x X_z$$

$$\xrightarrow{90^\circ C_x} -2 H_x X_y \xrightarrow{90^\circ C_x} -2 H_x X_z$$

anderes
Vorzeichen

$$\xrightarrow{90^\circ C_x} -2 H_x X_y \xrightarrow{90^\circ C_{-x}} 2 H_x X_z$$

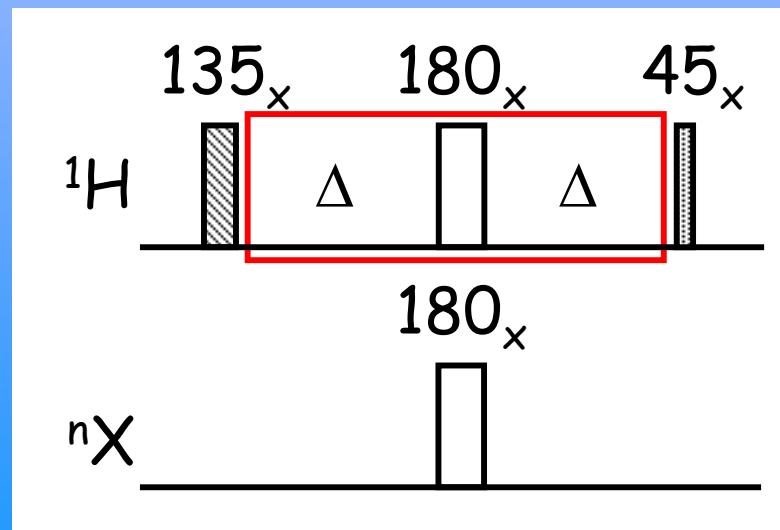
$$\longrightarrow \mp 2 H_x X_z \cos \pi J_{HX} \Delta \mp H_y \sin \pi J_{HX} \Delta = \mp H_y$$

Die Pulssequenz heißt auch „Halbfilter“

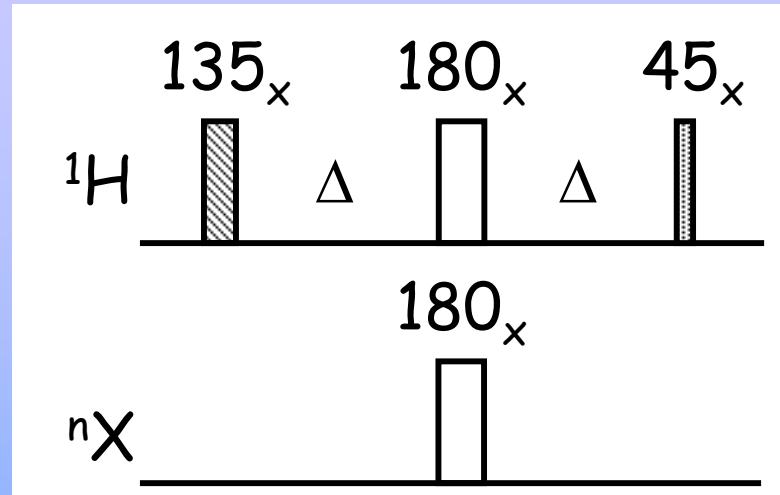
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

(3) Berechnen Sie mit Hilfe des Produktoperatorformalismus welche Art von Protonen-Magnetisierung am Ende der folgenden Pulsequenz vorliegt. Zum einen für ein Proton das direkt an einen X-Kern gebunden ist, zum anderen für eines das nicht an einen X-Kern gebunden ist. $J_{HX} = 100 \text{ Hz}$, $\Delta = 5 \text{ msec}$ (J_{HH} ist hier wieder nicht relevant)

keine chemische Verschiebung



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II



$$H_z \xrightarrow{135^\circ H_x} H_z \cos(135^\circ) - H_y \sin(135^\circ) \xrightarrow{\Delta}$$

$$H_z \cos(135^\circ) - H_y \sin(135^\circ) + {}^xH_z \cos(135^\circ) + {}^xH_x {}^zX_z \sin(135^\circ)$$

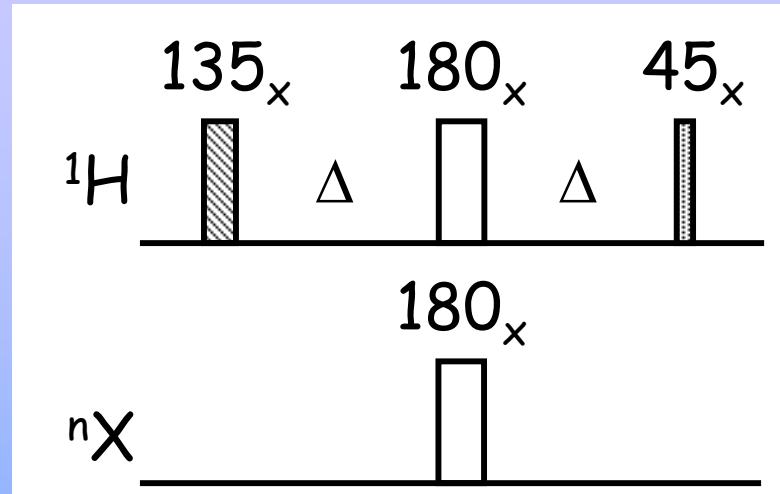
$$\xrightarrow{180^\circ H_x}$$

$$180^\circ X_x$$

$$-H_z \cos(135^\circ) + H_y \sin(135^\circ)$$

$$- {}^xH_z \cos(135^\circ) - {}^xH_x {}^zX_z \sin(135^\circ)$$

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II



$$-H_z \cos(135^\circ) + H_y \sin(135^\circ)$$

$$- {}^xH_z \cos(135^\circ) - {}^xH_x X_z \sin(135^\circ)$$

$\xrightarrow{\Delta}$

$$-H_z \cos(135^\circ) + H_y \sin(135^\circ)$$

$$- {}^xH_z \cos(135^\circ) - {}^xH_y \sin(135^\circ)$$

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

$45^\circ H_x$ 

$$\begin{aligned} & - H_z \cos (135^\circ) \cos (45^\circ) \\ & + H_y \cos (135^\circ) \sin (45^\circ) \\ & + H_y \sin (135^\circ) \cos (45^\circ) \\ & + H_z \sin (135^\circ) \sin (45^\circ) \\ & - {}^xH_z \cos (135^\circ) \cos (45^\circ) \\ & + {}^xH_y \cos (135^\circ) \sin (45^\circ) \\ & - {}^xH_y \sin (135^\circ) \cos (45^\circ) \\ & - {}^xH_z \sin (135^\circ) \sin (45^\circ) \end{aligned}$$

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

$$\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta$$

$$\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$$

$$\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta$$

$$\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \beta$$

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung II

→ $- H_z \cos (180^\circ)$

$+ H_y \sin (180^\circ)$

$- {}^X H_z \cos (90^\circ)$

$- {}^X H_y \sin (90^\circ)$

→ $+ H_z - {}^X H_y \sin (90^\circ)$

360° Puls für Protonen
die nicht an X gebunden sind

90° Puls für Protonen
die an X gebunden sind

TANGO-Puls !!