

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Übung I

- (1) Zwei Signale liegen im Protonenspektrum bei 1.45 und 4.57 ppm, das Spektrometer hat eine Frequenz von 400.13 MHz. Wie weit liegen die Signale in Hz bzw. in rad/sec auseinander ?
- (2) Die Resonanzfrequenz von Protonen bei einer Feldstärke von 14.1 Tesla liegt bei 600.13 MHz. Berechnen Sie unter Verwendung der gyromagnetischen Verhältnisse die Resonanzfrequenz von  $^{31}\text{P}$ .
- (3) Zwei Signale liegen im Spektrum bei 1250 Hz und 1340 Hz. Wie groß ist der Unterschied in der chemischen Verschiebung in ppm an einem 600 MHz-Spektrometer (600.13 MHz) ?
- (4) In welchem Winkel zur x,y-Ebene liegt das effektive Magnetfeld an einem 500 MHz-Spektrometer bei einem on-resonance  $90^\circ$ -Puls von 25  $\mu\text{sec}$  und einem offset von 5 ppm ?

- (5) Das gyromagnetische Verhältnis des Elektrons beträgt  $\gamma_e = 1.76 \times 10^{11} \text{ (sT)}^{-1}$ . Was ist der Besetzungsunterschied der beiden Spinzustände in einem Magnetfeld das 600 MHz Protonen-NMR-Frequenz entspricht ?
- (6) Bei der Messung des NOE-Effektes wird gefunden, dass die Intensitäten von 2 NOE-Effekten sich um den Faktor 2 unterscheiden, was kann man daraus für die beiden Abstände schließen ?
- (7) Bei der Messung der longitudinalen Relaxationszeit mit dem „inversion recovery“ Experiment findet man den Nulldurchgang bei 1 sec. Was bedeutet das für die Zeitkonstante  $T_1$  ?
- (8) Bei einer Messung findet man eine Kopplungskonstante von 9 Hz. Die Karpluskurve hat die Form  $J = 6.4 \cos^2 \theta - 1.4 \cos \theta + 1.9$ . Was kann man über den Winkel  $\theta$  sagen ?
- (9) Welchen Winkel zueinander haben 2 Kerne im Rahmen des Vektormodells am Ende der folgenden Pulssequenz wenn ihre Frequenz 100 Hz und 200 Hz beträgt und die Werte  $\Delta_1 = 1 \text{ msec}$  und  $\Delta_2 = 1.5 \text{ msec}$  betragen ?

