

Name

Matrikelnr.

Spektroskopie 2 (NMR) WS 2023 Klausur

12.12.2023

Theorieteil

25 Punkte

Hilfsmittel

Kern	Kernspin Quantenzahl I	Gyromagnetisches Verhältnis γ [MHz/T]	Natürliche Häufigkeit
^1H	1/2	42.6	99.98%
^2D	1	6.5	0.02%
^{11}B	3/2	13.7	80%
^{13}C	1/2	10.7	1%
^{14}N	1	3.1	99.6%
^{15}N	1/2	-4.3	0.4%
^{19}F	1/2	40.1	100%
^{23}Na	3/2	11.3	100%
^{29}Si	1/2	-8.5	5%
^{31}P	1/2	17.2	100%

Naturkonstanten

Planck-Konstante/Wirkungsquantum	h	$6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	c_0	$2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
Boltzmann-Konstante	k_B	$1.381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

Aufgabe 1: Interaktionen von Kernspins

6 Punkte

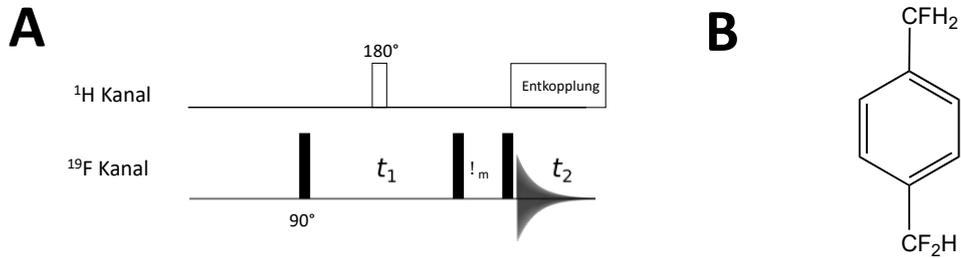
Betrachten Sie das Pyridin-Molekül.

1. Geben Sie die Strukturformel mit expliziten Wasserstoff-Atomen an. Markieren Sie chemisch und magnetisch äquivalente ^1H Kernspins.
1 Punkt
2. Welcher Anteil der ^1H Kernspins unterliegt mindestens einer ^3J -Kopplung?
1 Punkt
3. Welcher Anteil der ^1H Kernspins unterliegt einer ^1J -Kopplung? Zu welcher Art Kernspin?
1 Punkt
4. Erwarten Sie, dass Sie im ^1H NMR-Spektrum eine Aufspaltung durch die skalare Kopplung zu Kernspins des Stickstoff-Atoms sehen?
Diskutieren Sie anhand der Eigenschaften der Isotope des Stickstoffs.
4 Punkte

Aufgabe 2: Pulssequenzen

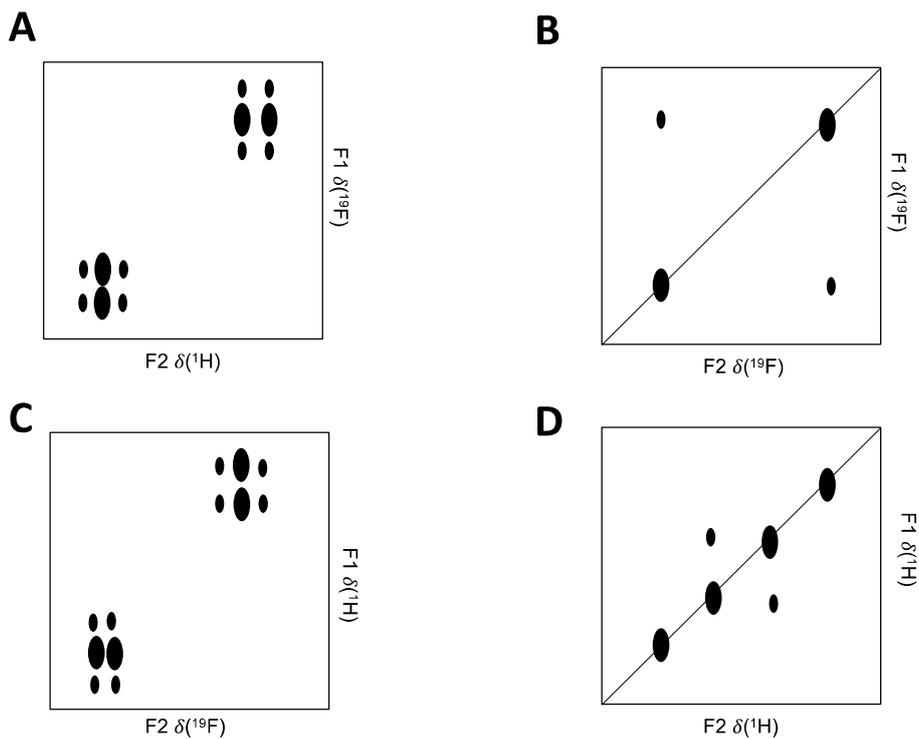
6 Punkte

Sie messen nun die Pulssequenz an dem gezeigten kleinen Molekül auf. Das Molekül wurde zuvor gelöst in deuteriertem DMSO.



1. Welches der gezeigten vier zweidimensionalen NMR-Spektren erhalten Sie nach der Prozessierung?
Begründen Sie Ihre Wahl.

2 Punkte



2. Welches Akronym verwendet man für dieses NMR-Experiment? Wofür steht diese Abkürzung?

1 Punkt

3. Erwarten Sie in dem NMR-Spektrum aus Aufgabenteil 1 nur positive oder nur negative Signale oder beide gleichzeitig? Begründen Sie.

2 Punkte

4. Markieren Sie im zeitlichen Verlauf der Pulssequenz in Abbildung A die Radiofrequenz-Kanäle überall dort, wo die zugehörigen Kernspins transversale Magnetisierung ergeben.

1 Punkt

Aufgabe 3: Datenaufnahme und Prozessierung

8 Punkte

1. Nennen Sie die vier allgemeinen Bestandteile eines zweidimensionalen NMR-Experiments. Schreiben Sie jeweils einen Satz, was durch jeden Schritt erreicht wird.

4 Punkte

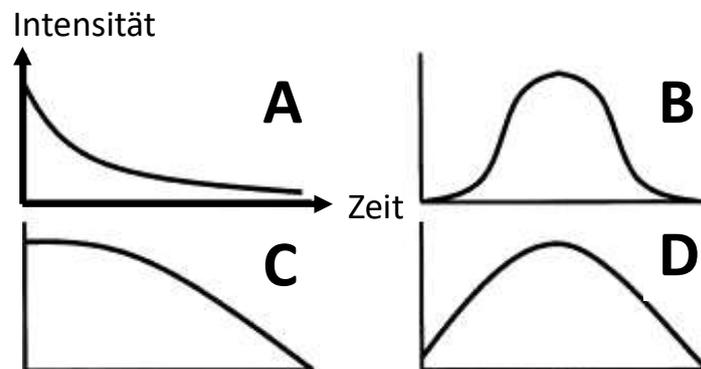
2. Warum ist die direkte Dimension in zweidimensionalen Spektren oft besser aufgelöst als die indirekte Dimension?

2 Punkte

3. Sie möchten das Signal zu Rauschen Verhältnis in Ihrem Spektrum verbessern. Mit welcher der vier gezeigten Apodisierungs-Funktionen (englisch: Window Function) multiplizieren Sie Ihr Zeit-Signal vor der Fourier-Transformation?

Bitte mit Begründung.

2 Punkte



Aufgabe 4: Elektronenspin-Resonanz

5 Punkte

Das Elektron hat die Spin-Quantenzahl $\frac{1}{2}$.

Sein gyromagnetisches Verhältnis beträgt: $\gamma_e = 28025 \text{ MHz T}^{-1}$

1. Bei welcher Frequenz erfolgt Elektronenspin-Resonanz in einem Magnetfeld der Stärke 1.25 Tesla. Geben Sie das Ergebnis in Gigahertz an.

1 Punkt

2. Welcher Wellenlänge der elektromagnetischen Strahlung entspricht das Ergebnis aus Aufgabenteil 1?

1 Punkt

3. Wie viel größer ist das magnetische Moment des Elektrons gegenüber dem des Protons?

1 Punkt

4. Genau genommen ist das gyromagnetische Verhältnis des Elektrons negativ, das des Protons positiv. Welchen Effekt haben die unterschiedlichen Vorzeichen auf die Bewegung der magnetischen Momente von Elektronen bzw. Protonen im statischen Magnetfeld?

2 Punkte