

Name

Matrikelnummer

Theorieteil

30 Punkte

Hilfsmittel

Kern	Kernspin Quantenzahl I	Gyromagnetisches Verhältnis γ [MHz/T]	Natürliche Häufigkeit
¹ H	1/2	42.6	99.98%
² D	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: NMR Aktive Kernspins

9 Punkte

1. Die Larmor-Frequenz eines Kernspins ist 86 MHz bei 20 T. Was wird hier gemessen?
Volle Punktzahl gibt es nur mit Rechnung und Erklärung.

3 Punkte

2. Benennen Sie, ob die Kernspinquantenzahl folgender drei Isotope jeweils halbzahlig, ganzzahlig oder Null ist. Bitte mit Erklärung.

3 Punkte



3. Wie viele Linien erwarten Sie im ${}^1\text{H}$ Spektrum von dreifach deuterierten Methanmolekülen?
Zeichnen Sie das Kopplungsmuster auf und benennen Sie die Intensitätsverteilung.

3 Punkte

Aufgabe 2: Sensitivität der NMR-Messung

11 Punkte

1. Nennen Sie drei Parameter, welche die Sensitivität der NMR-Messung beeinflussen. Bitte jeweils Namen, Symbol und Einheit der physikalischen Variablen angeben für volle Punktzahl.

3 Punkte

2. Für einen Spin mit $I=1/2$ kann man das Besetzungsverhältnis (die relativen Populationen) der α - und β -Spinzustände quantitativ vorhersagen. Benennen Sie das Physikalische Gesetz, notieren Sie die zugehörige Formel und definieren sie die Variablen.

3 Punkte

3. Wie stark müsste das Magnetfeld sein, damit das Besetzungsverhältnis der α - und β -Spinzustände für ^1H Kernspins bei 25°C 2:1 beträgt? Bitte den Rechenweg angeben. In welcher Größenordnung liegt das Magnetfeld kommerziell erhältlicher NMR-Magnete?

4 Punkte

4. Wie viele FIDs muss man addieren, damit sich das Signal zu Rauschen im Spektrum um den Faktor 20 verbessert?

1 Punkt

Aufgabe 3: NMR-Experimente

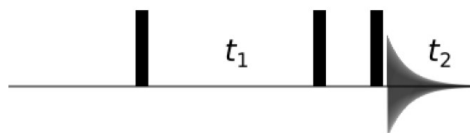
10 Punkte

1. Wofür steht die Abkürzung EXSY? Zu welchem Zweck nimmt man EXSY-Spektren auf?
2 Punkte

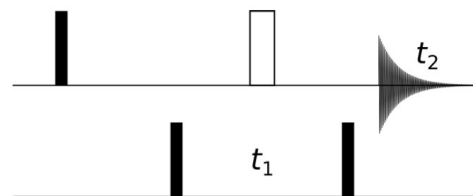
2. Mit welcher der gezeigten Pulssequenzen können Sie ein EXSY-Spektrum aufnehmen?
Markieren Sie in der ausgewählten Sequenz die Mischzeit.

2 Punkte

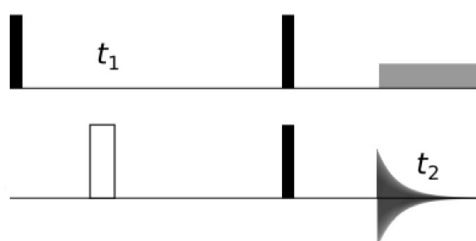
A



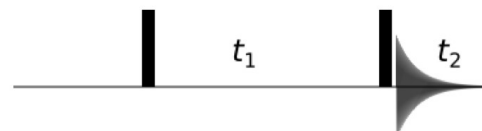
B



C



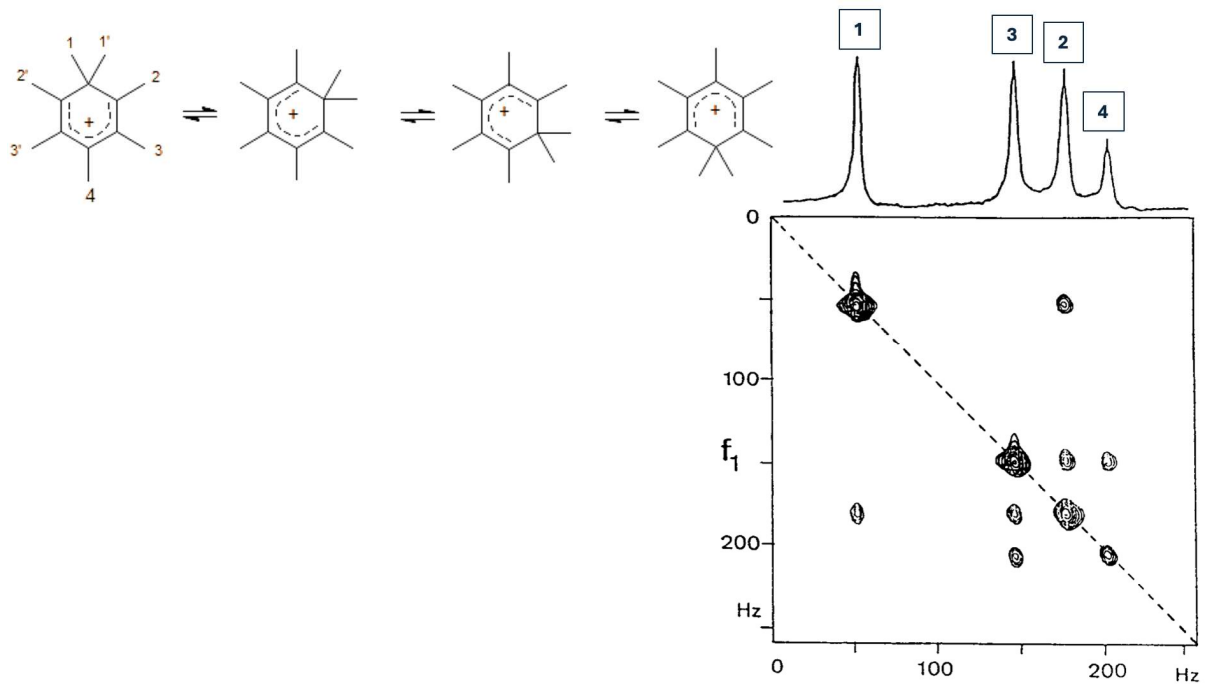
D



3. Wie lang sind Mischzeiten in EXSY-Spektren für gewöhnlich?
Was begrenzt die sinnvollen Mischzeit jeweils nach oben und nach unten?

3 Punkte

4. Die Wanderung der Methylgruppe erfolgt im Heptamethylbenzol-Kation als eine Verschiebung zwischen benachbarten Positionen (1,2-Verschiebung). Das zugehörige EXSY-Spektrum ist Ihnen aus der Vorlesung bekannt.



Es wurde ein Katalysator entdeckt, unter dessen Einfluss die Wanderung der Methylgruppe ausschließlich als para-Verschiebung (1,4-Verschiebung) erfolgt. Skizzieren Sie alle Signale, die Sie in diesem Fall beobachten würden, in das leere Spektrum hinein.

3 Punkte

