

Name

Matrikelnummer

Theorieteil

30 Punkte

Hilfsmittel

Kern	Kernspin Quantenzahl /	Gyromagnetisches Verhältnis γ [MHz/T]	Natürliche Häufigkeit
^1H	1/2	42.6	99.98%
^2D	1	6.5	0.02%
^{10}B	3	4.6	20%
^{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: Eigenschaften von Kernspins

11 Punkte

Natriumborhydrid wird hergestellt isotopenrein mit 100% ^2D und 100% ^{11}B und in einem organischen Lösungsmittel wie Tetrahydrofuran gelöst. Bei den NMR-Messungen wird kein Deuteriumlock verwendet.

1. Notieren Sie die Strukturformel des Borhydrids-Ions und kennzeichnen Sie alle NMR-aktiven Kernspins.

2 Punkte

2. Skizzieren Sie das Energielevel-Diagramm für ^{11}B unter Vernachlässigung möglicher J -Kopplungen. Zeichnen Sie die Übergänge zwischen den Spin-Zuständen ein, die quantenmechanisch erlaubt sind. Wie viele Linien erwarten Sie im ^{11}B Spektrum?

3 Punkte

3. Zeichnen Sie einen Splitting-Schlüssel (Kopplungsbaum) für den ^{11}B Kernspin unter Berücksichtigung der $^1\text{J}_{\text{BD}}$ -Kopplung.

4 Punkte

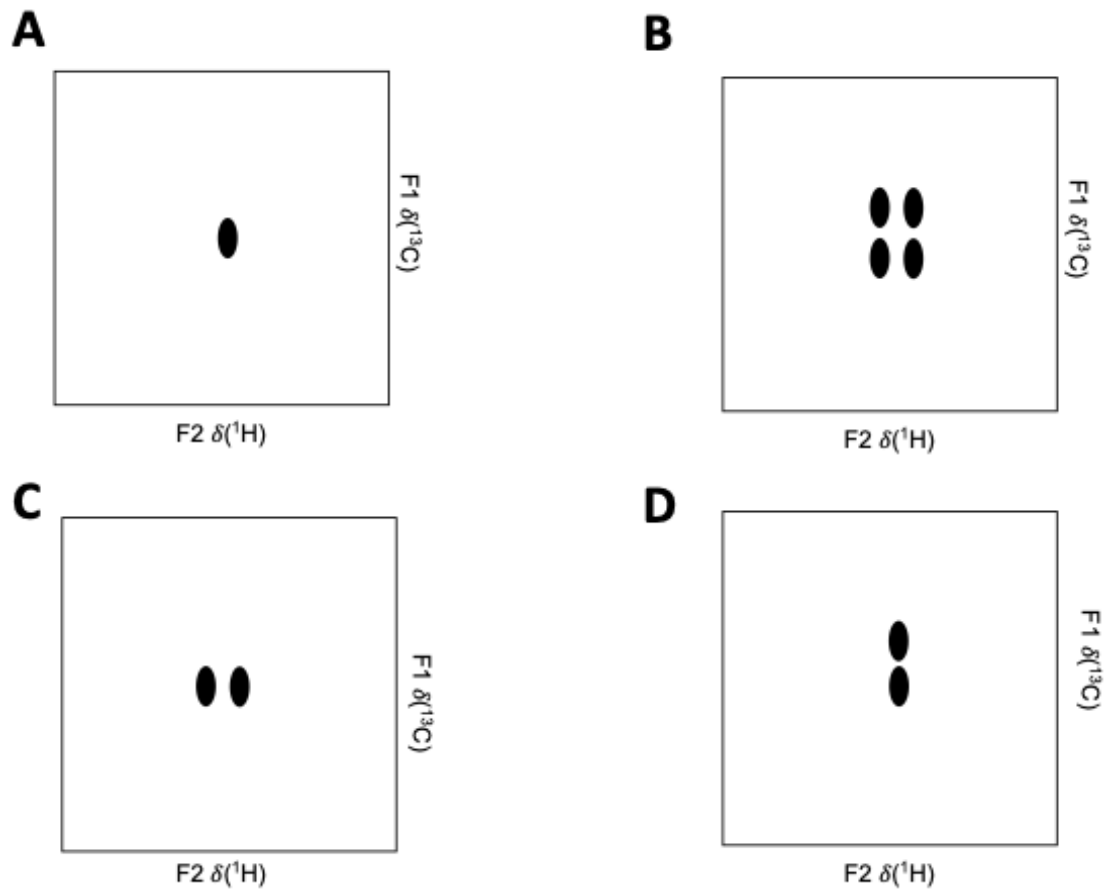
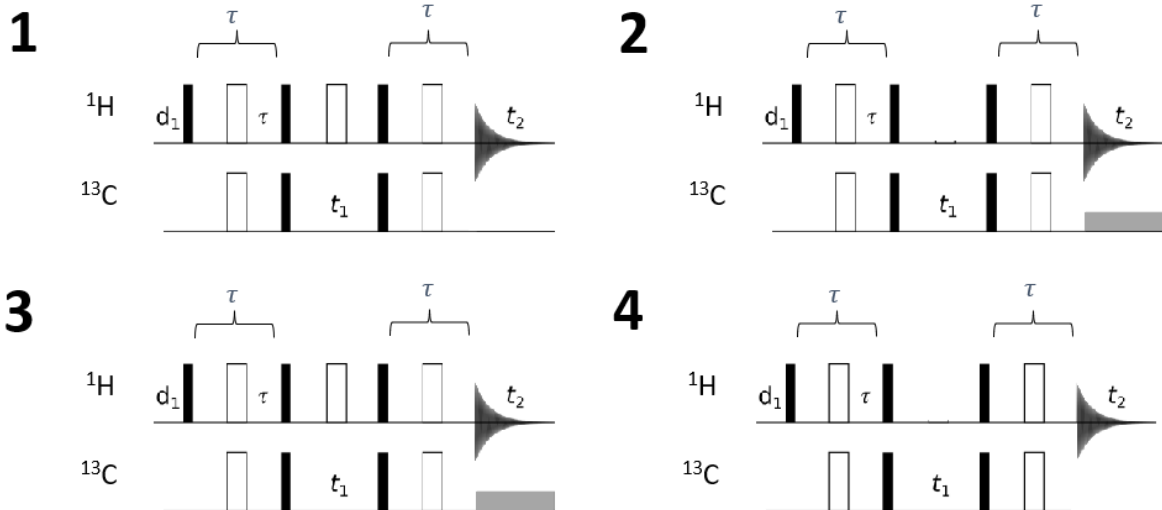
4. Nennen Sie zwei Bedingungen dafür, dass die J -Kopplung im ^{11}B -Spektrum sichtbar ist.

2 Punkte

Aufgabe 2: NMR-Experimente

9 Punkte

Gezeigt sind vier Varianten eines zweidimensionalen NMR-Experiments und Skizzen der jeweils erhaltenen Spektren, wenn man Benzol misst.



1. Benennen Sie die Kategorien dieser Experimente:
Sind sie homonuklear oder heteronuklear?
Sind Sie direkt oder invers detektiert?

2 Punkte

2. Was ist der Name dieses Experiments (englischer Name und Abkürzung).

1 Punkt

3. Ordnen Sie die Spektren und Pulssequenzen zu, jeweils mit kurzer Begründung.

4 Punkte

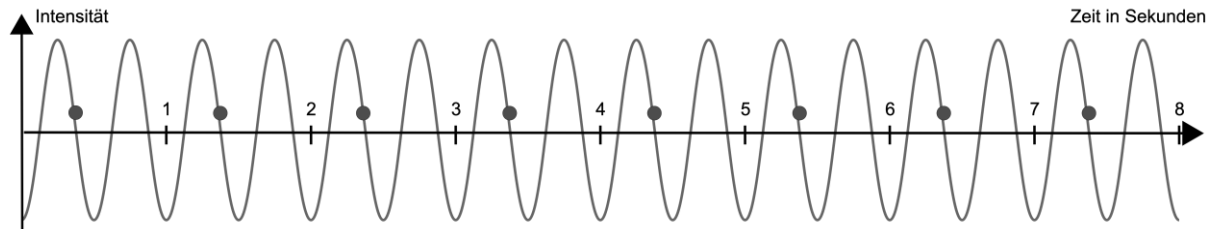
4. Für welche Art von J-Kopplungen ist dieses NMR-Experiment geeignet? Welches Experiment steht Ihnen für andere Arten von J-Kopplungen zwischen ^1H und ^{13}C Kernspins zur Verfügung (Name und Abkürzung)?

2 Punkte

Aufgabe 3: Signalverarbeitung

10 Punkte

Gezeigt ist ein am Computer simuliertes Messsignal und diskrete Zeitpunkte (Kreise), an denen das Messsignal ausgelesen wird.



1. Welche echte Frequenz hat dieses Signal?

1 Punkt

2. Was ist die Abtastrate (englisch sampling rate)?

1 Punkt

3. Nennen Sie zwei Frequenzen, die mit allen Messpunkten vereinbar wären, aber nicht der echten Frequenz entsprechen. Nach welchem Prinzip können Sie diese Frequenzen finden?

4 Punkte

4. Angenommen das Messsignal wäre ein FID in einer NMR-Messung, wie lang wäre die T_2 Zeit des Kernspins?

1 Punkt

5. Nennen Sie zwei Unterschiede zwischen dem gezeigten synthetischen Signal und einem Signal, das aus einer echten physikalischen Messung stammt?

2 Punkte

6. Nennen Sie ein Beispiel für den Stroboskop-Effekt, das **nicht** aus der NMR-Spektroskopie stammt.

1 Punkt