

Aufgaben CIP Quiz, Einführungsseminar in die Nutzung der NMRshiftDB (Vorbereitung NMR zum Modul OC-WP im SS 19)

Anmerkung: Bitte verwenden Sie für die folgenden Beispiele die Webadresse <http://laplace.nmr.uni-koeln.de/>. Wenn Sie über Google nach „nmrshiftdb“ suchen finden Sie unseren www-Server, der aber einige der für die Beispiele benutzten, nur lokal gespeicherten Daten nicht besitzt. Loggen Sie sich als user OCP ein. Bitte bearbeiten Sie die Aufgabe **in Zweiergruppen**, aber geben Sie die Daten bitte nur **einmal** ein!

Beispiel 1: Suchfunktion (Verschiebungen und Peaklisten)

Suchen Sie nach einer Verbindung mit den folgenden chemischen Verschiebungen

^{13}C Peakliste:

169.94;0.36

167.28;0.49

150.83;0.39

133.95;0.97

132.19;1.0

125.99;0.96

123.68;1.0

123.42;0.36

21.06;0.79

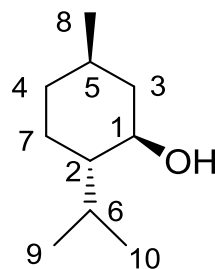
Beispiel 2: Suchfunktion (jcamp.dx)

a) Prozessieren Sie das Spektrum im Unterverzeichnis 2 des Ordners OC-WP mit der Software SpinWorks. Speichern Sie das prozessierte Spektrum anschließend als jcamp.dx-Spektrum. Wählen Sie bei der Suchfunktion von NMRshiftDB die Option „Browse“ in der Spektrensuche (Balken „Search by Spectrum“) und wählen Sie das von Ihnen erzeugte jcamp.dx-Spektrum aus (Name „spectrum.dx“). Klicken Sie anschließend auf „upload file“ und inspizieren Sie die Peakliste. Editieren Sie (falls nötig) und führen Sie eine Suche durch. Welche Verbindung erhalten Sie?

b) Zeichnen Sie die Struktur der Verbindung in der „Predict“-Option und lassen Sie sich die chemischen Verschiebungen vorhersagen. Vergleichen Sie die Werte für die Verschiebungen (Anzeige von Verschiebungen mit der Struktur durch Link „Show structure with shifts“ unter dem simulierten Strichspektrum) mit den Spektrendaten.

Beispiel 3: Halbautomatische Zuordnung (assignment)

Führen Sie mit Hilfe der NMRshiftDB eine Zuordnung der untenstehenden Peakliste durch (Assignment-Tool). Zeichnen Sie dazu die untenstehende Struktur (Stereochemie beachten!) und geben Sie die Peakliste ein. Sehen Sie sich anschließend die Informationen aus der Datenbank zu dieser (bereits eingetragenen) Verbindung an.



¹³C Peaks:

71.5
50.2
45.1
34.6
31.6
25.8
23.2
22.2
21.0
16.1

Beispiel 4:

Überprüfen Sie die Zuordnung für eine Verbindung mit Hilfe des QuickCheck-Tools. **Nutzen Sie zunächst die bereits zugeordnete Struktur (Link „Testzuordnung“)** unter http://www.nmr.chemie.uni-koeln.de/nmr_course.html, zeichnen Sie das Molekül im QuickCheck-Formeleditor und tragen Sie die ¹³C- und ¹H-chemischen Verschiebungen in der Zuordnungstabelle der QuickCheck-Funktion ein. Testen Sie die Zuordnungsqualität anschließend über die QuickCheck-Funktion in NMRshiftDB. Eine ausführlichere Beurteilung der Zuordnungsqualität finden Sie, wenn Sie auf den Link „Show full report“ klicken.

Falls Sie Schwierigkeiten bei der Durchführung dieser Aufgabe haben folgen Sie bitte den Anweisungen auf den Seiten 1 bis 4 im von uns erstellten Handout („Kurzanleitung zur QuickCheck-Funktion...“) das Sie unter dem Link http://laplace.nmr.uni-koeln.de/nmrshiftdbhtml/labhelp/quickcheck_nmrshiftdb2_lab_de.pdf als pdf-Datei herunterladen können.