

Ülesanne 1

TMR-katseklaasi kaaluti 170 mg vedelat ainet **A** ja lahustati see 0,6 mL deutereeritud kloroformis (99,8% deuteeriumrikastusega CDCl_3 -s).

Aine **A** andmed:

Molekulivalem: $\text{C}_4\text{H}_{12}\text{N}_2$

Molekulmass: 88,15

Mõõdeti järgnevad TMR spektrid:

- 400,1 MHz ^1H ja ^1H - ^1H COSY TMR spektrid;
- 100,6 MHz ^{13}C , DEPT-90, DEPT-135, $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ TMR spektrid;
- ^1H - ^{13}C HSQC ja ^1H - ^{13}C HMBC TMR spektrid;
- 40,54 MHz $^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ TMR spekter;
- ^1H - ^{15}N HMBC TMR spekter.

Selgituseks:

^1H - ^1H COSY TMR spekter näitab korrelatsiooni erinevate vesinike vahel, ehk kui vesinikud lõhestavad üksteist ($^nJ_{\text{HH}} > 0$ Hz), siis tekib COSY spektris nende vahele korrelatsioonisignaali.

^{13}C DEPT-135 TMR spektris on $\underline{\text{CH}}_2$ -le vastavad signaalid vastandfaasis võrreldes $\underline{\text{CH}}$ ja $\underline{\text{CH}}_3$ -le vastavate signaalidega ning protoneerimata süsinikud ei anna üldse signaali.

^{13}C DEPT-90 TMR spektris on nähtavad vaid $\underline{\text{CH}}$ -le vastavad signaalid.

$^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ tähendab seda, et mõõdetakse ^{13}C TMR spektrit, kus mõõtmise ajal kiiritatakse proovi ^1H sagedusega, mille tulemusena kaovad ^{13}C TMR spektrist ära $^nJ(^1\text{H}-^{13}\text{C})$ lõhenemised.

^1H - ^{13}C HSQC on 2-mõõtmeline vesinik-süsinik korrelatsioonispekter, kus signaalid on vaid nende süsinike ja vesinike vahel, mis on teineteisega otse kovalentselt seotud ($^1J_{\text{CH}}$).

^1H - ^{13}C HMBC on samuti 2-mõõtmeline vesinik-süsinik korrelatsioonispekter, aga signaalid tekivad nende süsinike ja vesinike vahele, mis on üksteisest 2, 3 või harvem ka rohkem keemilist sidet eemal (ehk näitab $^nJ_{\text{CH}} > 0$ Hz, kus $n > 2$).

^1H - ^{15}N HMBC puhul on samuti tingimuseks, et lämmastik ja vesinik oleksid 2 või 3 keemilise sideme kaugusel teineteisest.

$^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ tähendab seda, et mõõdetakse ^{15}N TMR spektrit, kus mõõtmise ajal kiiritatakse proovi ^1H sagedusega, mille tulemusena kaovad ^{15}N TMR spektrist ära $^nJ(^1\text{H}-^{15}\text{N})$ lõhenemised.

Lahenduskäik:

- Teil on kasutada ülalnimetatud spektrid ja TMR korrelatsioonitabelid. Lugege üle, mitu signaali 1D spektritesse tekkis, vaadake ka signaalide integraale ja võrrelge molekuli-valemiga – selle põhjal saate öelda üht-teist molekuli sümmeetria ja asendajate ekvivalentsuse kohta (kas näiteks ^{13}C spektris olevate signaalide arv vastab molekuli valemis olevate süsinike arvuga või on mingid süsinikud ekvivalentsed).
- Leida, mis tüüpi multipllettidega on ^1H ja ^{13}C TMR spektrites tegemist.
- Arvutada ^1H ja ^{13}C TMR spektrites olevate multipllettide jaoks kõik selgelt määratavad lõhestumiskonstandid (ühikuks herts, täpsusega 1 kümnendkoht).

Raportisse kirjutada:

1. Leida toodud TMR spektrite põhjal aine **A** struktuurivalem.



Struktuurivalemite joonistamiseks soovitatakse kasutada vabavaralist tarkvara ACD/ChemSketch (<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>) või tasuta tarkvara CambridgeSoft ChemDraw (http://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemDraw/).

2. Millele (mis aine ja mis isotopomeerile) vastab ^1H TMR spektris väike singlett 7,26 ppm juures? Joonistage struktuurivalem koos isotooptähistega:

3. Millele (mis aine ja mis isotopomeerile) vastab ^{13}C TMR spektris 1:1:1-kujuline tripleti signaal 77,00 ppm juures? Leidke sealt multiplettilt lõhestumiskonstant (ühikuks herts, täpsusega 1 kümnendkoht) ja täpsustage, milliste tuumade tõttu see ^{13}C signaalide lõhestumine tekib. Joonistage struktuurivalem koos isotooptähistega:

Tuletage meelde seminaris räägitut!

4. Esitage aine A täielik TMR spektriinfo (1D ^1H , ^{13}C ja $^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ TMR spektrite kohta) tekstiformaadis kujul nt:

Süü kirjutage aine A süstemaatiline nimetus:

^1H TMR (200,0 MHz, CDCl_3 , 25 °C) δ : 4,44 (s, 1H, OH); 3,18 (q, $^3J_{\text{HH}}=7,1$ Hz, 2H, CH_2); 0,74 (t, $^3J_{\text{HH}}=7,1$ Hz, 3H, CH_3).

^{13}C TMR (50,3 MHz, CDCl_3 , 25 °C) δ : 48,3 (q, $^1J_{\text{CH}} = 140,5$ Hz, CH_3).

$^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ TMR (20,3 MHz, CDCl_3 , 25 °C) δ : 39,6 (NH_2).

PS. Pange tähele, kui täpselt (mitme kümnendkohaga) keemilisi nihkeid ja lõhestumiskonstante märkida!

NB. Pange tähele, et lõhestumiskonstandid esinevad erinevate multipllettide juures paarikaupa.

NB! Signaalide kirjelduste juurde kirjutage täpselt välja, millistele konkreetsetele vesinikele, süsinikele ja lämmastikele aines A TMR signaalid kuuluvad. Selles aitavad teid 2D ^1H - ^{13}C ja ^1H - ^{15}N korrelatsioonispektrid.

PS. ^{13}C TMR spektris 61,5 ppm juures oleva multiplleti analüüsi võite teha poolikult (märkige seda kui „tm“ ehk „triplekti multipllett“, aga ühe lõhestumiskonstandi saate seal ikkagi ära mõõta). Kas oskate valemi $M=2nI+1$ abil öelda, mis tüüpi multipllett see olla võiks?

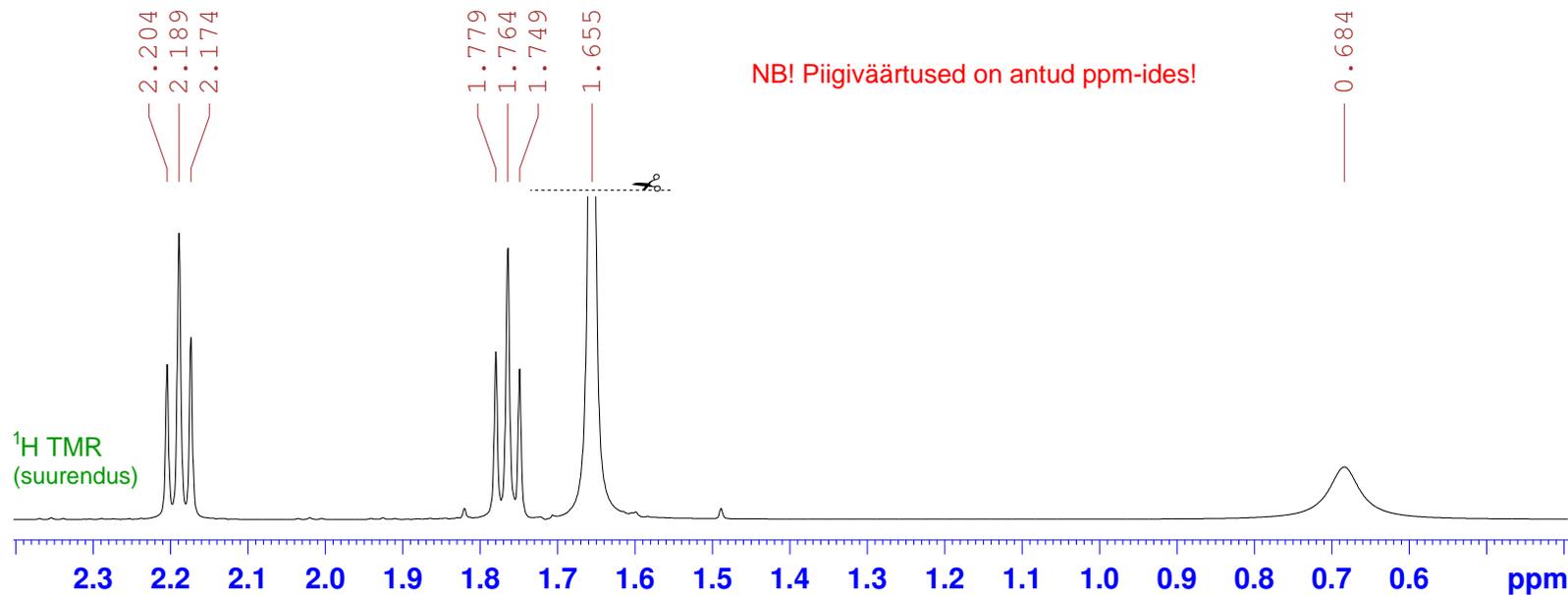
PS. Pange tähele, mis spektromeetri sagedusel konkreetset tuuma mõõdeti! Siin näites ei pruugi raporteeritud spektromeetri sagedus olla sama, mis teile antud spektritel kirjas on.

5. Miks pole ^1H ja ^{13}C spektrites ^{15}N -st tingitud signaalide lõhenemisi näha, kuigi tegu on tuumaga, mille spinnkvantarv $I=1/2$ ja seetõttu ikkagi lõhestab ^1H ja ^{13}C signaale?
6. Miks on ^1H TMR spektris signaal 0,68 ppm juures nii lai võrreldes teiste signaalidega (mis tüüpi funktsionaalrühma vesinikele see signaal vastab)?
7. $^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ TMR spektris on lämmastikel erinevad keemilised nihked. Kumb ^{15}N signaal vastab kummale lämmastikule aine A struktuurivalemis (vaadake ka ^1H - ^{15}N korrelatsioonispektrit)? Miks on nende signaalide intensiivsused nii erinevad, kuigi kumbki kuulub vaid ühele lämmastikule (mis tüüpi funktsionaalrühma lämmastikele kumbki signaal vastab)?

Ülesanne on kättesaadav PDF-formaadis aadressilt: <http://kodu.ut.ee/~laurit/AK2/>

Raportit soovin saada oma e-posti aadressile lauri.toom@ut.ee ainult PDF-formaadis.

Raporti 1. versiooni esitamise tähtaeg on 15. mai 2015 kell 17:00. Minupoolse tagasiside põhjal korrektselt parandatud lõpp-versiooni esitamise tähtaeg on 29. mai 2015 kell 17:00.



F2 - Acquisition Parameters

```

INSTRUM      spect
PROBHHD      5 mm BBO BB-1H
PULPROG      zg30
TD            32768
SOLVENT      CDC13
NS            32
DS            0
SWH           6009.615 Hz
FIDRES        0.183399 Hz
AQ            2.7263477 sec
RG            9
DW            83.200 usec
DE            6.00 usec
TE            293.2 K
D1            5.00000000 sec
TD0           1
    
```

===== CHANNEL f1 =====

```

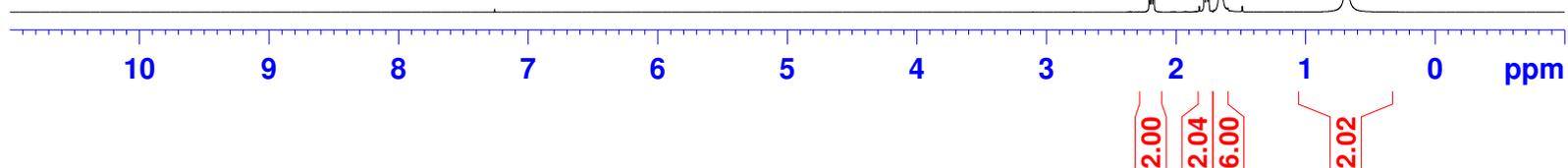
NUC1          1H
P1            14.35 usec
PL1           0.00 dB
SFO1          400.1326008 MHz
    
```

F2 - Processing parameters

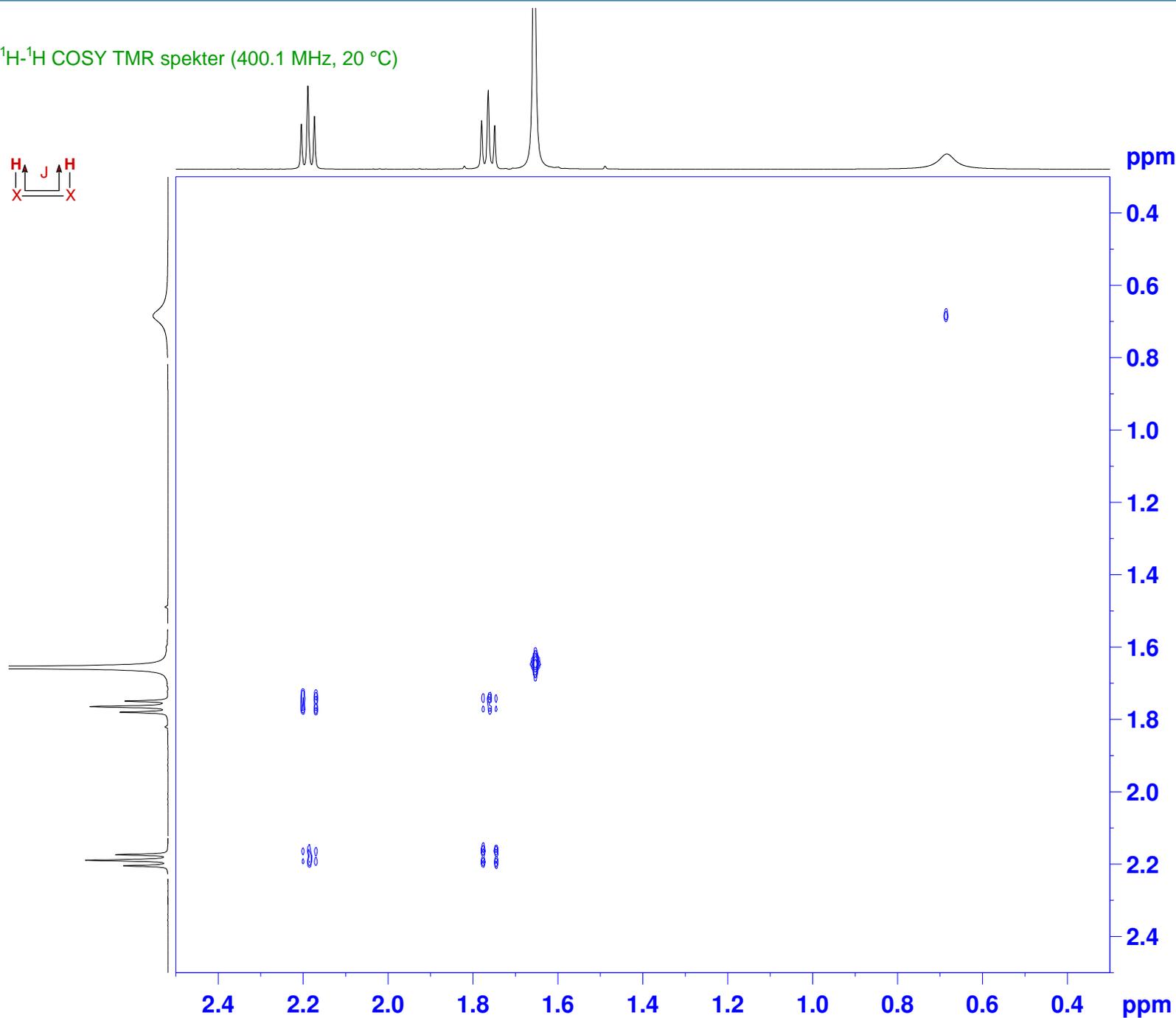
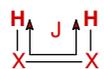
```

SI            32768
SF            400.1300206 MHz
WDW           EM
SSB           0
LB            0.30 Hz
GB            0
PC            1.00
    
```

¹H TMR spekter (400.1 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus -1 kuni +11 ppm)



^1H - ^1H COSY TMR spekter (400.1 MHz, 20 °C)



F2 - Acquisition Parameters
 INSTRUM spect
 PROBHD 5 mm BBO BB-1H
 PULPROG cosygpqf
 TD 2048
 SOLVENT CDCl3
 NS 2
 DS 8
 SWH 1600.512 Hz
 FIDRES 0.781500 Hz
 AQ 0.6398452 sec
 RG 14.2
 DW 312.400 usec
 DE 6.00 usec
 TE 293.2 K
 d0 0.00000300 sec
 D1 1.50000000 sec
 d13 0.00000400 sec
 D16 0.00020000 sec
 IN0 0.00062480 sec

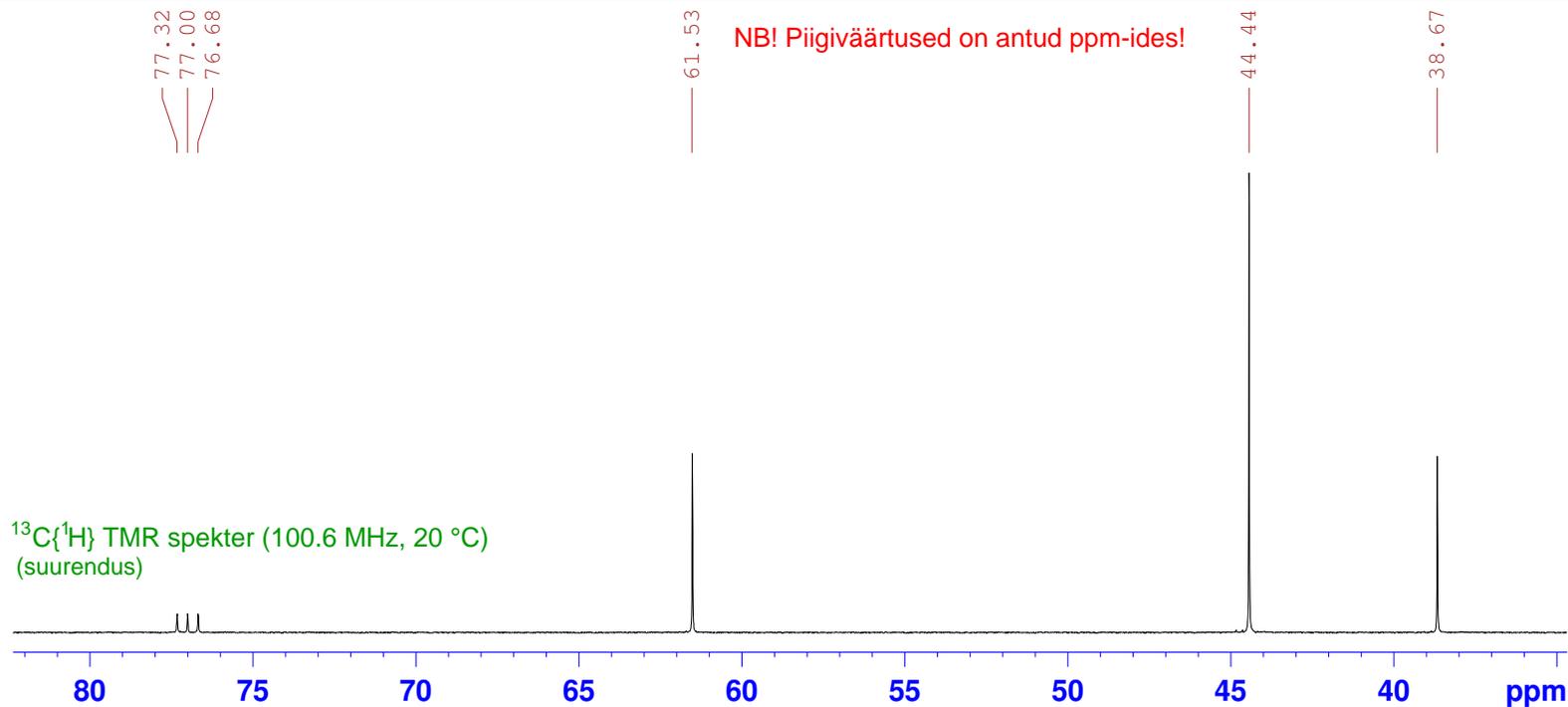
==== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P0 14.35 usec
 P1 14.35 usec
 PL1 0.00 dB
 SFO1 400.1306642 MHz

==== GRADIENT CHANNEL =====
 GPNAM1 SINE.100
 GPNAM2 SINE.100
 GPZ1 10.00 %
 GPZ2 10.00 %
 P16 1000.00 usec

F1 - Acquisition parameters
 ND0 1
 TD 128
 SFO1 400.1307 MHz
 FIDRES 12.504002 Hz
 SW 4.000 ppm
 FnmODE QF

F2 - Processing parameters
 SI 2048
 SF 400.1300206 MHz
 WDW SINE
 SSB 0
 LB 0.00 Hz
 GB 0
 PC 1.40

F1 - Processing parameters
 SI 256
 MC2 QF
 SF 400.1300206 MHz
 WDW SINE
 SSB 0
 LB 0.00 Hz
 GB 0

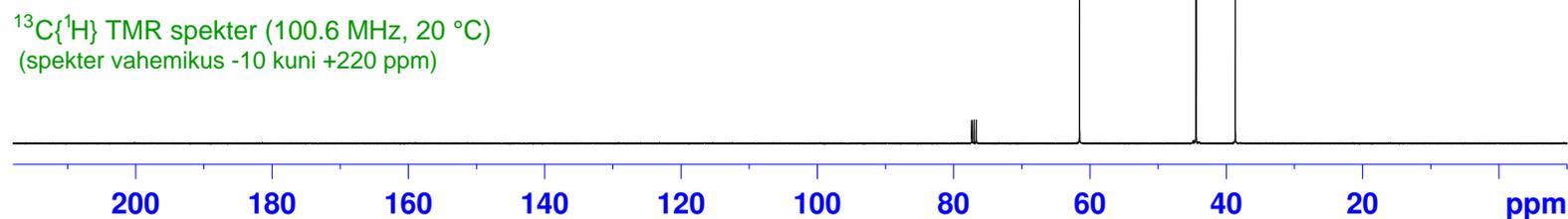


```
F2 - Acquisition Parameters
INSTRUM      spect
PROBHD       5 mm BBO BB-1H
PULPROG      zgpg30
TD           65536
SOLVENT      CDC13
NS           80
DS           0
SWH          24038.461 Hz
FIDRES       0.366798 Hz
AQ           1.3631988 sec
RG           32800
DW           20.800 usec
DE           6.00 usec
TE           293.3 K
D1           2.00000000 sec
d11          0.03000000 sec
DELTA        1.89999998 sec
TD0          1
```

```
===== CHANNEL f1 =====
NUC1         13C
P1           9.50 usec
PL1          -2.00 dB
SFO1         100.6228298 MHz
```

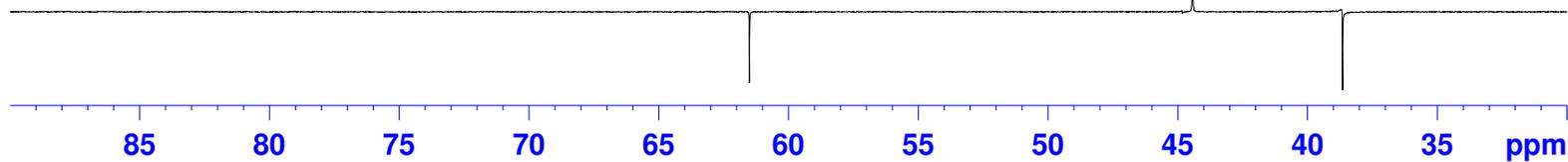
```
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2     waltz16
NUC2         1H
PCPD2       70.00 usec
PL12        13.76 dB
PL13        14.00 dB
PL2         0.00 dB
SFO2         400.1316005 MHz
```

```
F2 - Processing parameters
SI           32768
SF           100.6128264 MHz
WDW          EM
SSB          0
LB           1.00 Hz
GB           0
PC           1.40
```



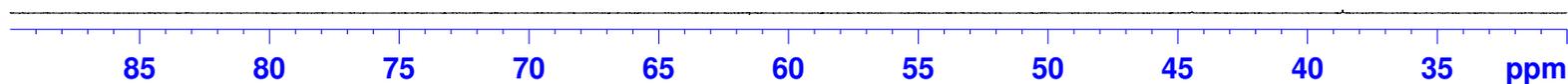
¹³C DEPT-135 TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)

CH₂ ↓
CH, CH₃ ↑



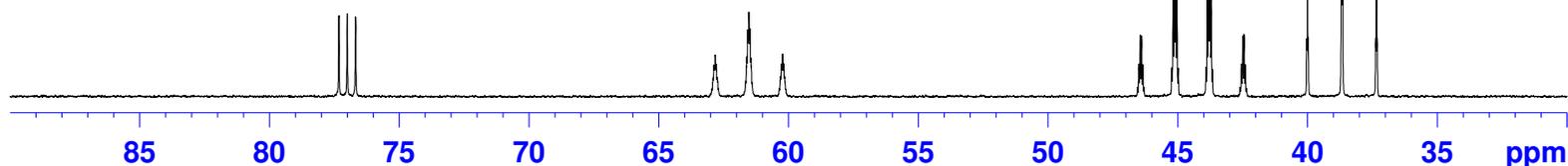
¹³C DEPT-90 TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)

CH ↑ NB! Pange tähele, et siin spektris signaale ei olegi!

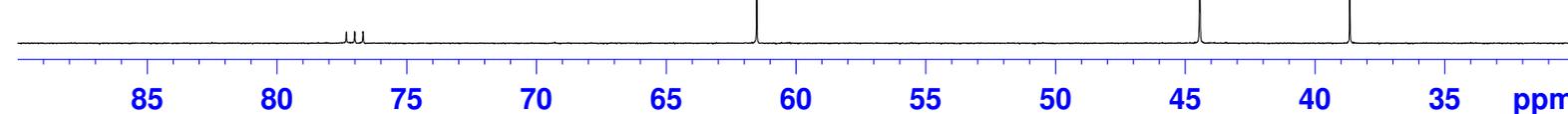


¹³C TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)

Vaadake ka suurendusi järgmistel lehtedel!



¹³C{¹H} TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)



NB! Pange tähele integraale!

1.01 2.07 1.00

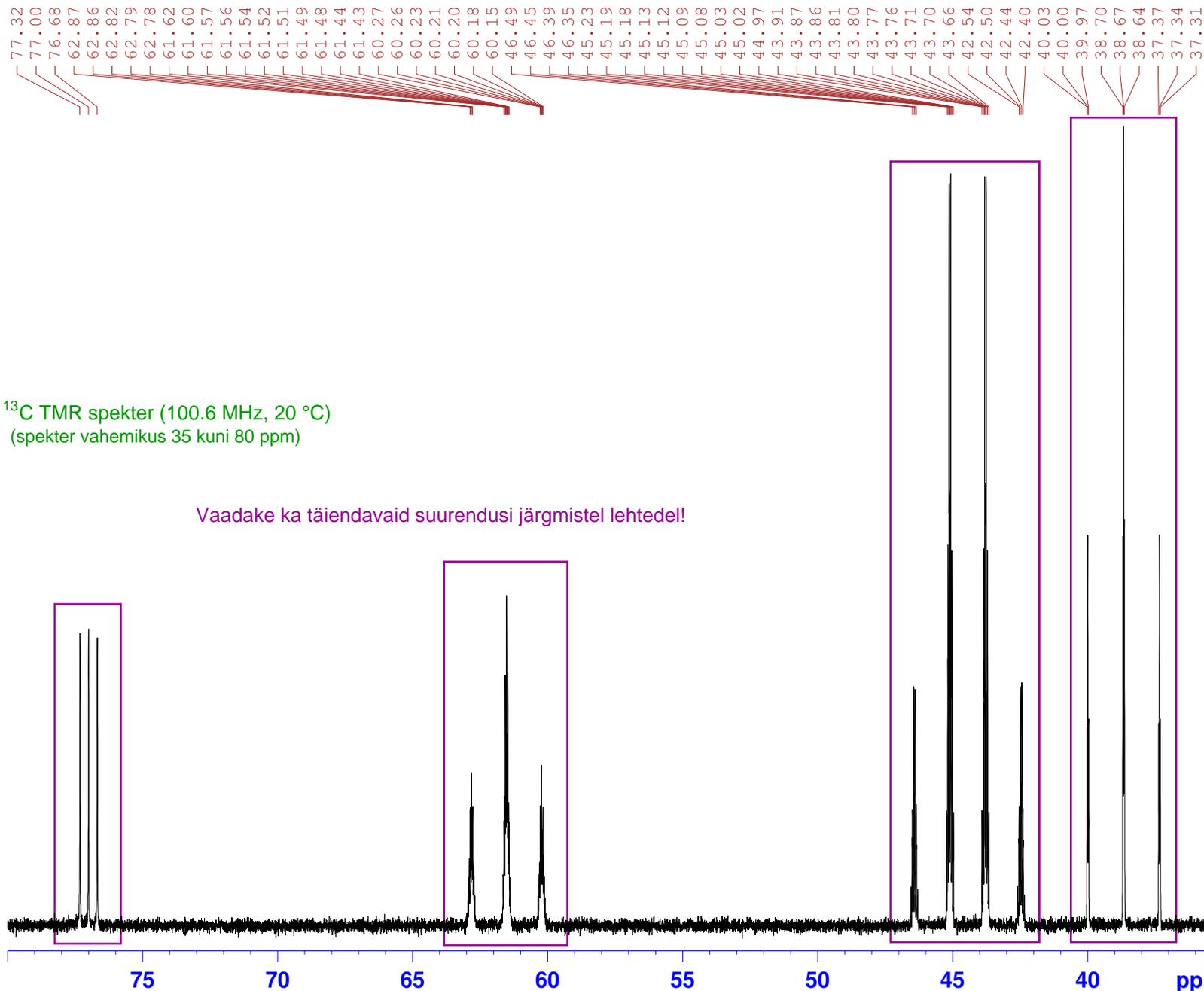
F2 - Acquisition Parameters
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT CDCl3
NS 80
DS 0
SWH 24038.461 Hz
FIDRES 0.366798 Hz
AQ 1.3631988 sec
RG 32800
DW 20.800 usec
DE 6.00 usec
TE 293.3 K
D1 2.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
DELTA 1.89999998 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.50 usec
PL1 -2.00 dB
SFO1 100.6228298 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 70.00 usec
PL12 13.76 dB
PL13 14.00 dB
PL2 0.00 dB
SFO2 400.1316005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 32768
SF 100.6128264 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 1.00 Hz
GB 0
PC 1.40

NB! Piigiväärtused on antud ppm-ides!



¹³C TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus 35 kuni 80 ppm)

Vaadake ka täiendavaid suurendusi järgmistel lehtedel!

Current Data Parameters
NAME 2-Dimethylaminoethylamin
EXPNO 5
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20090527
Time 18.09
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT CDC13
NS 256
DS 0
SWH 24038.461 Hz
FIDRES 0.366798 Hz
AQ 1.3631988 sec
RG 32800
DW 20.800 usec
DE 6.00 usec
TE 293.2 K
D1 2.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
TD0 1

==== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.50 usec
PL1 -2.00 dB
SFO1 100.6228298 MHz

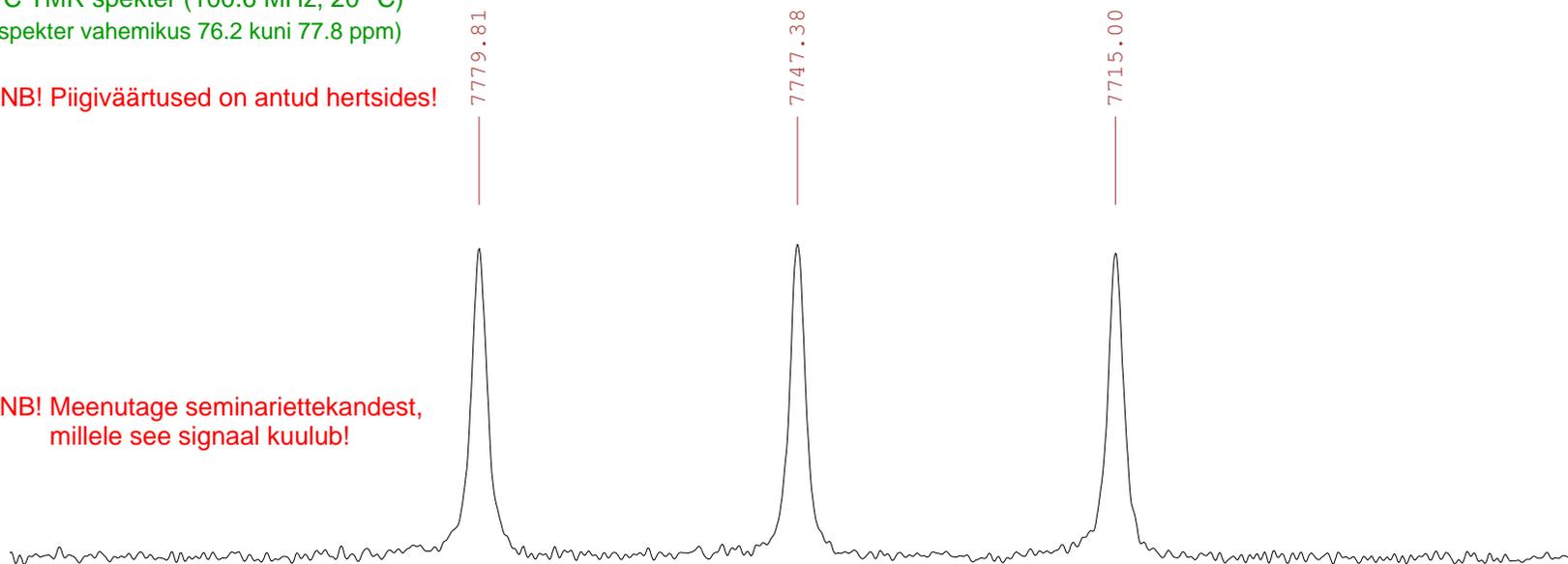
==== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 70.00 usec
PL12 13.76 dB
PL2 0.00 dB
SFO2 400.1316005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 262144
SF 100.6128265 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.10 Hz
GB 0
PC 1.40

¹³C TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus 76.2 kuni 77.8 ppm)

NB! Piigiväärtused on antud hertsides!

NB! Meenutage seminariettekandest,
millele see signaal kuulub!



Current Data Parameters
NAME 2-Dimethylaminoethylamin
EXPNO 5
PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20090527
Time 18.09
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT CDC13
NS 256
DS 0
SWH 24038.461 Hz
FIDRES 0.366798 Hz
AQ 1.3631988 sec
RG 32800
DW 20.800 usec
DE 6.00 usec
TE 293.2 K
D1 2.00000000 sec
d11 0.03000000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.50 usec
PL1 -2.00 dB
SFO1 100.6228298 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 70.00 usec
PL12 13.76 dB
PL2 0.00 dB
SFO2 400.1316005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 262144
SF 100.6128265 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.10 Hz
GB 0
PC 1.40

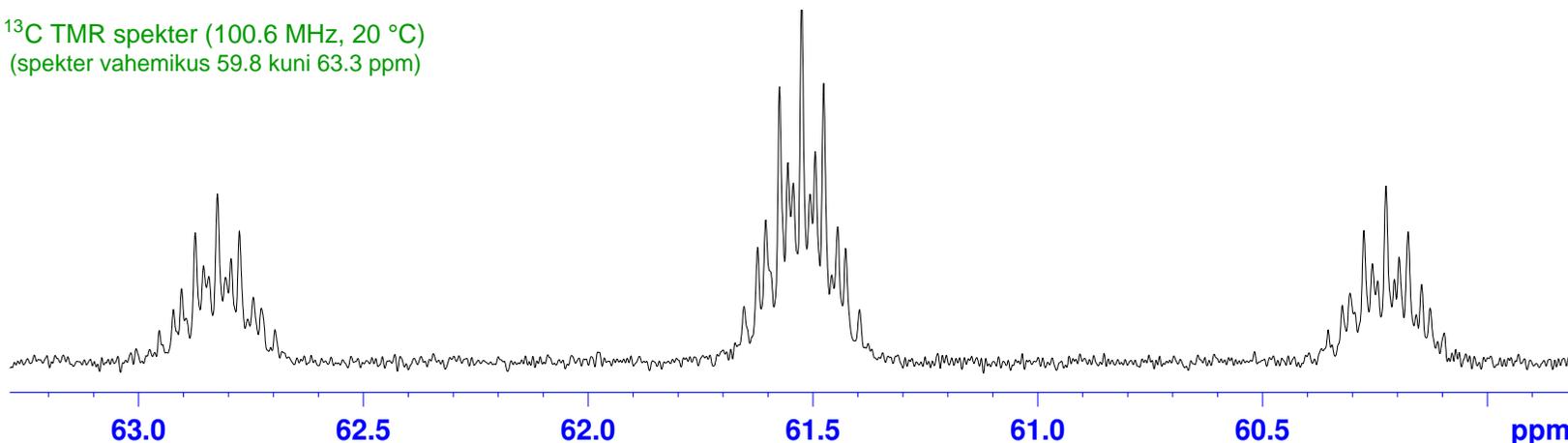
77.7 77.6 77.5 77.4 77.3 77.2 77.1 77.0 76.9 76.8 76.7 76.6 76.5 76.4 ppm

6333.94
6330.77
6328.96
6325.89
6324.03
6320.93
6317.88
6316.02
6312.91
6311.10
6308.06

6203.10
6200.05
6198.25
6195.15
6193.30
6192.07
6190.20
6188.30
6187.15
6185.27
6182.15
6180.35
6177.25

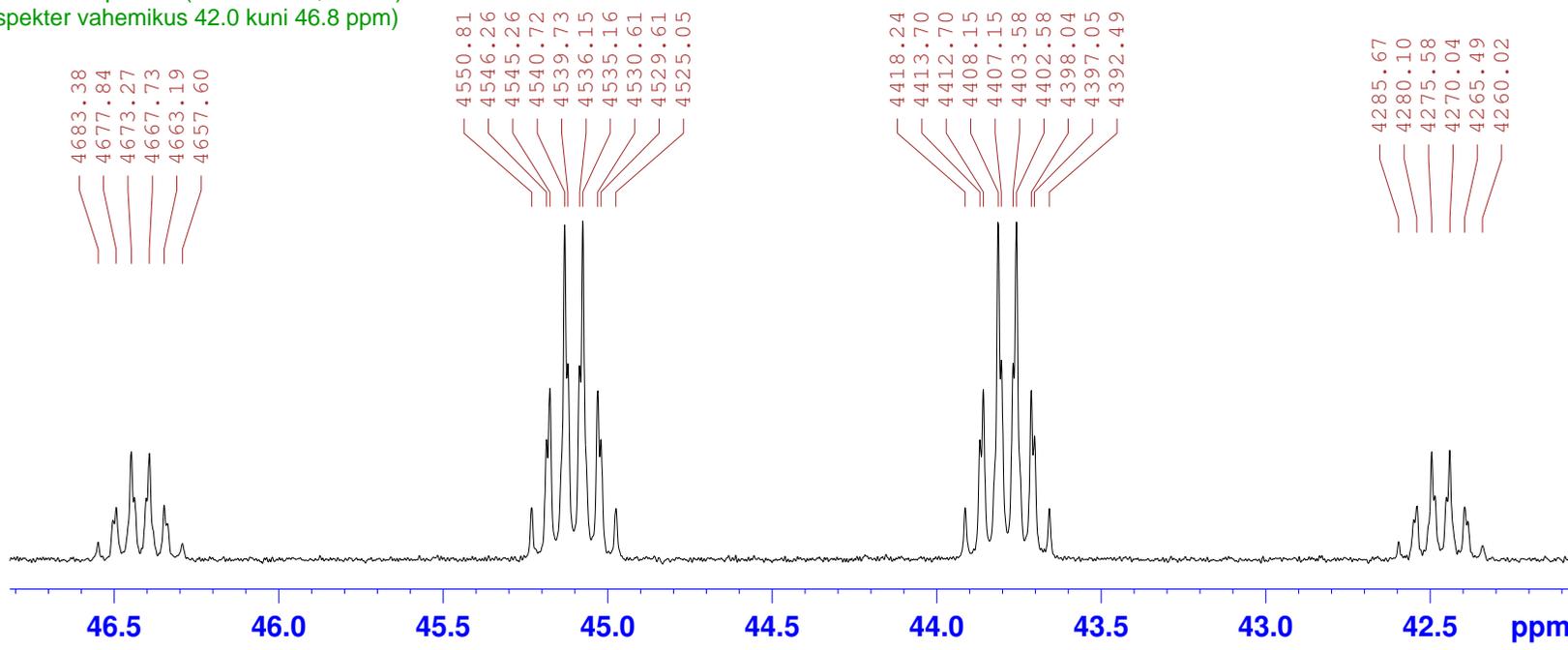
6072.37
6069.22
6067.49
6064.39
6062.49
6059.45
6057.55
6056.52
6054.50
6051.47
6049.56
6046.42

¹³C TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus 59.8 kuni 63.3 ppm)



¹³C TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus 42.0 kuni 46.8 ppm)

NB! Piigiväärtused on antud hertsides!



Current Data Parameters
NAME 2-Dimethylaminoethylamin
EXPNO 5
PROCNO 1

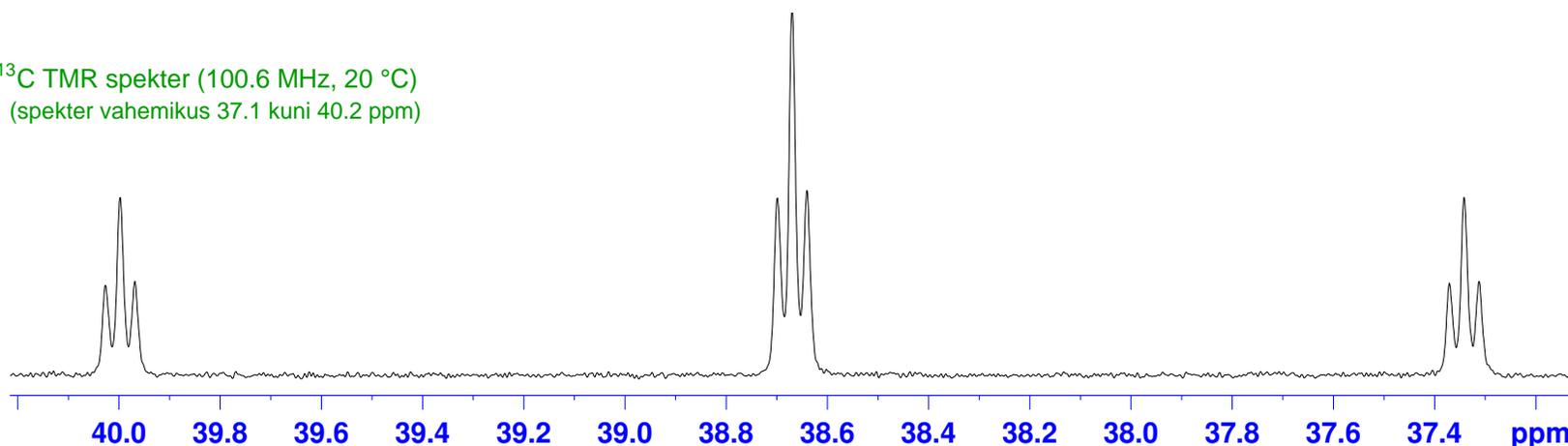
F2 - Acquisition Parameters
Date_ 20090527
Time 18.09
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG zgpg30
TD 65536
SOLVENT CDC13
NS 256
DS 0
SWH 24038.461 Hz
FIDRES 0.366798 Hz
AQ 1.3631988 sec
RG 32800
DW 20.800 usec
DE 6.00 usec
TE 293.2 K
D1 2.0000000 sec
d11 0.0300000 sec
TD0 1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 13C
P1 9.50 usec
PL1 -2.00 dB
SFO1 100.6228298 MHz

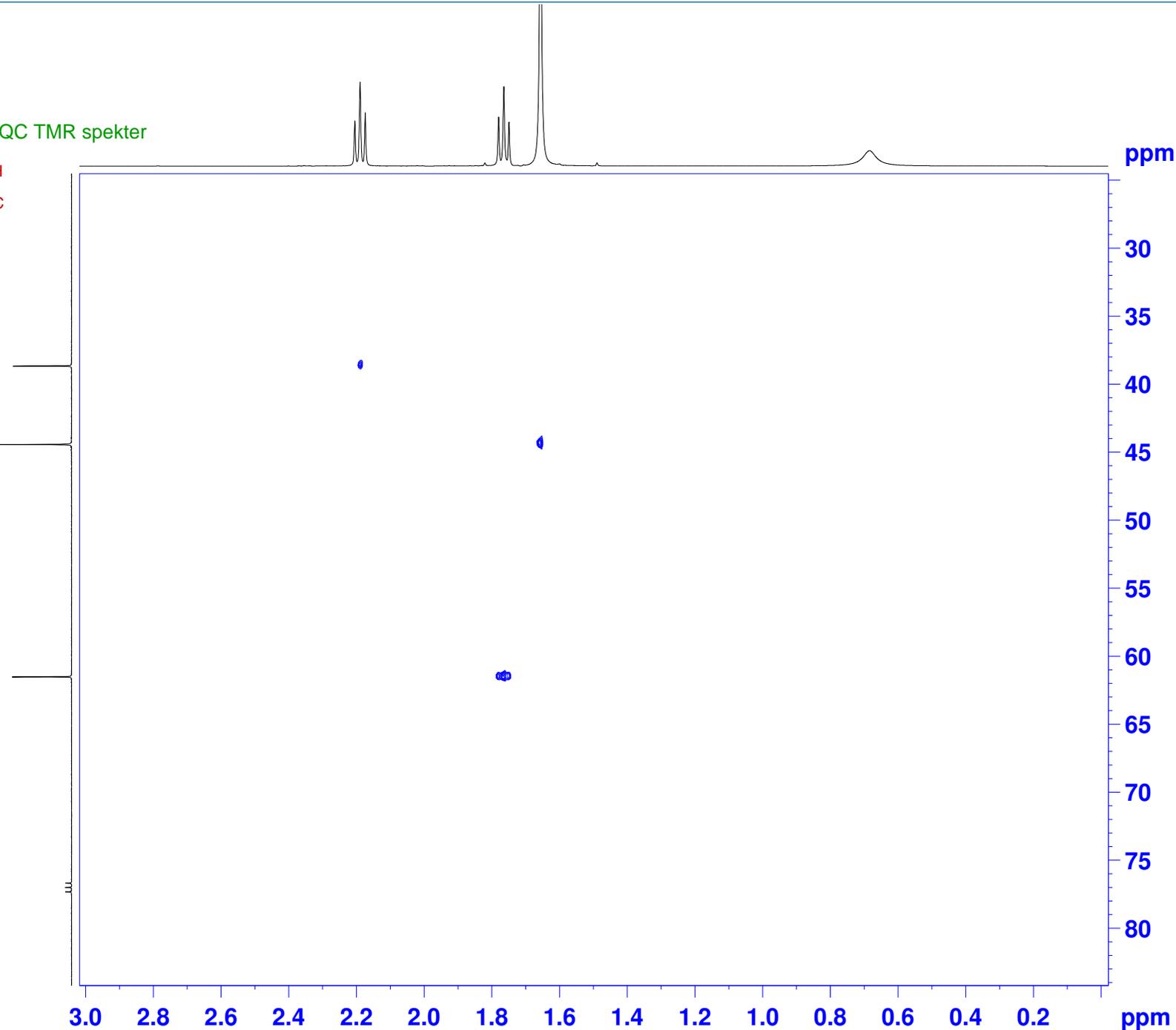
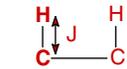
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 waltz16
NUC2 1H
PCPD2 70.00 usec
PL12 13.76 dB
PL2 0.00 dB
SFO2 400.1316005 MHz

F2 - Processing parameters
SI 262144
SF 100.6128265 MHz
WDW EM
SSB 0
LB 0.10 Hz
GB 0
PC 1.40

¹³C TMR spekter (100.6 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus 37.1 kuni 40.2 ppm)



^1H - ^{13}C HSQC TMR spekter



```

F2 - Acquisition Parameters
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG hsqcetgp
TD 2048
SOLVENT CDCl3
NS 2
DS 16
SWH 1600.512 Hz
FIDRES 0.781500 Hz
AQ 0.6398452 sec
RG 18400
DW 312.400 usec
DE 6.00 usec
TE 293.6 K
CNST2 130.0000000
d0 0.00000300 sec
D1 1.50000000 sec
d11 0.03000000 sec
d13 0.00000400 sec
D16 0.00020000 sec
d4 0.00192308 sec
DELTA 0.00123470 sec
DELTA1 0.00091508 sec
IN0 0.00008280 sec
STICNT 64
ZGOFPTS

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 14.35 usec
p2 28.70 usec
P28 2000.00 usec
PL1 0.00 dB
SFO1 400.1306642 MHz

===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2 garp
NUC2 13C
P3 9.50 usec
p4 19.00 usec
PCPD2 60.00 usec
PL12 13.00 dB
PL2 -2.00 dB
SFO2 100.6183027 MHz

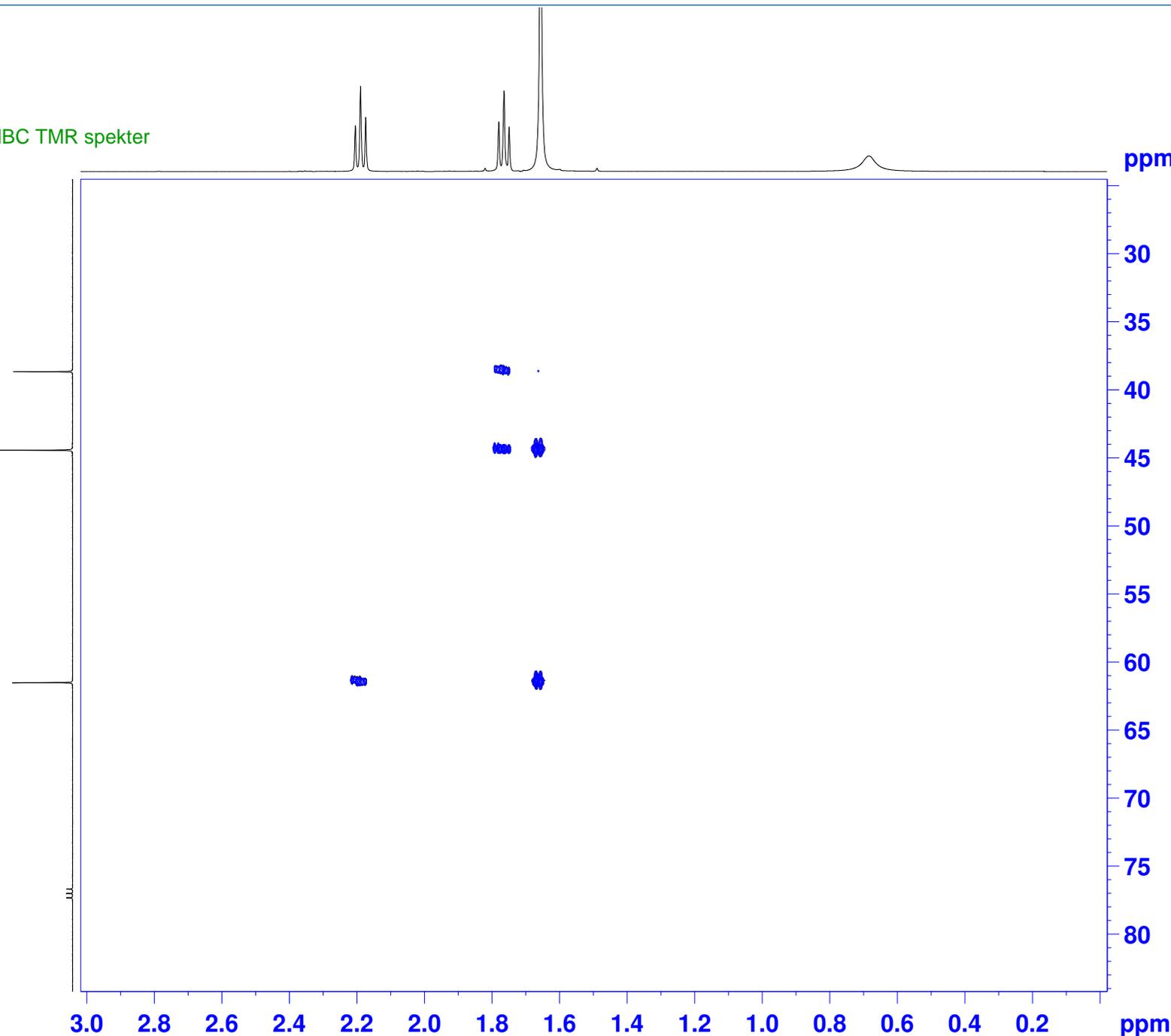
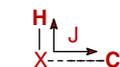
===== GRADIENT CHANNEL =====
GPNAM1 SINE.100
GPNAM2 SINE.100
GPZ1 80.00 %
GPZ2 20.10 %
P16 1000.00 usec

F1 - Acquisition parameters
NDO 2
TD 128
SFO1 100.6183 MHz
FIDRES 47.176933 Hz
SW 60.015 ppm
FnMODE Echo-Antiecho

F2 - Processing parameters
SI 2048
SF 400.1300289 MHz
WDW QSINE
SSB 2
LB 0.00 Hz
GB 0
PC 1.40

F1 - Processing parameters
SI 256
MC2 echo-antiecho
SF 100.6128275 MHz
WDW QSINE
SSB 2
LB 0.00 Hz
GB 0
    
```

^1H - ^{13}C HMBC TMR spekter



```
F2 - Acquisition Parameters
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG hmbcgp1pdqf
TD 2048
SOLVENT CDCl3
NS 2
DS 16
SWH 1600.512 Hz
FIDRES 0.781500 Hz
AQ 0.6398452 sec
RG 16400
DW 312.400 usec
DE 6.00 usec
TE 293.1 K
CNST13 8.0000000
CNST2 130.0000000
d0 0.00000300 sec
D1 1.50000000 sec
D16 0.00020000 sec
d2 0.00384615 sec
d6 0.06250000 sec
IN0 0.00008280 sec
```

```
===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 14.35 usec
p2 28.70 usec
PL1 0.00 dB
SFO1 400.1306642 MHz
```

```
===== CHANNEL f2 =====
NUC2 13C
P3 9.50 usec
PL2 -2.00 dB
SFO2 100.6183027 MHz
```

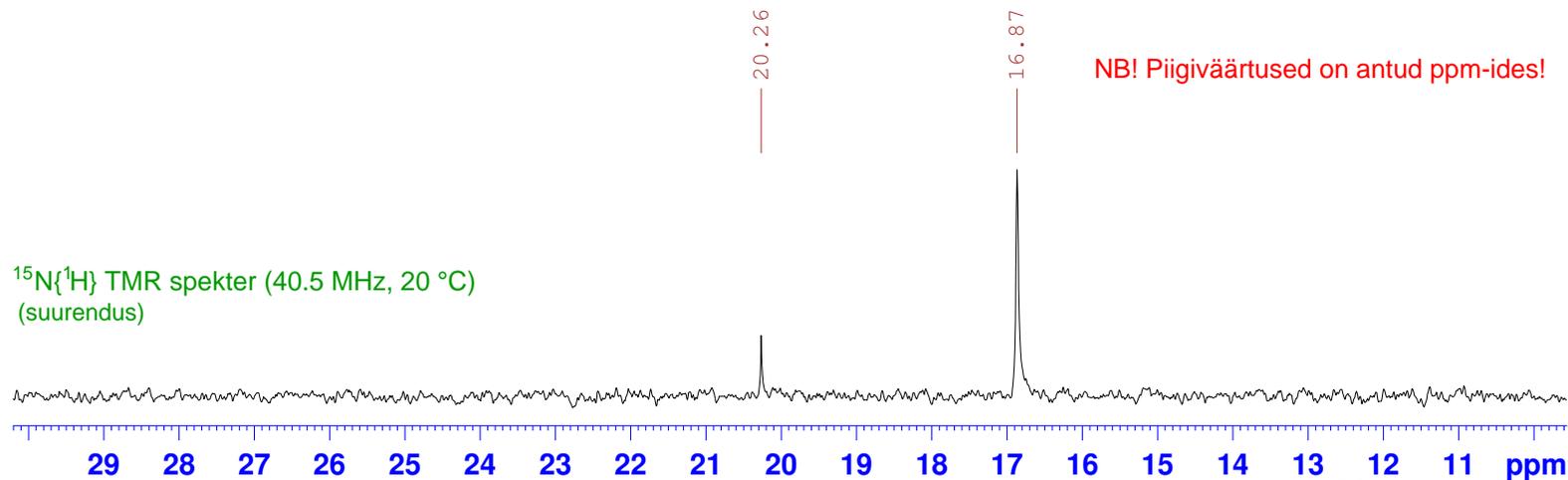
```
===== GRADIENT CHANNEL =====
GPNAM1 SINE.100
GPNAM2 SINE.100
GPNAM3 SINE.100
GPZ1 50.00 %
GPZ2 30.00 %
GPZ3 40.10 %
P16 1000.00 usec
```

```
F1 - Acquisition parameters
ND0 2
TD 128
SFO1 100.6183 MHz
FIDRES 47.176933 Hz
SW 60.015 ppm
FnMODE QF
```

```
F2 - Processing parameters
SI 2048
SF 400.1300158 MHz
WDW SINE
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
PC 1.40
```

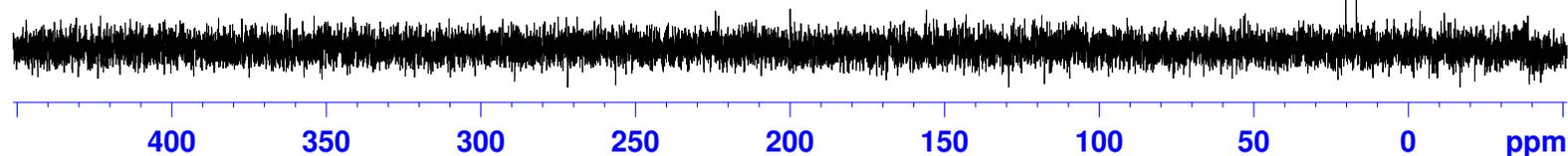
```
F1 - Processing parameters
SI 256
MC2 QF
SF 100.6128275 MHz
WDW SINE
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
```

$^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ TMR spekter (40.5 MHz, 20 °C)
(suurendus)



NB! Pange tähele signaalide intensiivsusi!
Molekulis on 2 lämmastikuaatomit, aga üks neist annab tugevama signaali kui teine lämmastik.

$^{15}\text{N}\{^1\text{H}\}$ TMR spekter (40.5 MHz, 20 °C)
(spekter vahemikus -50 kuni +450 ppm)



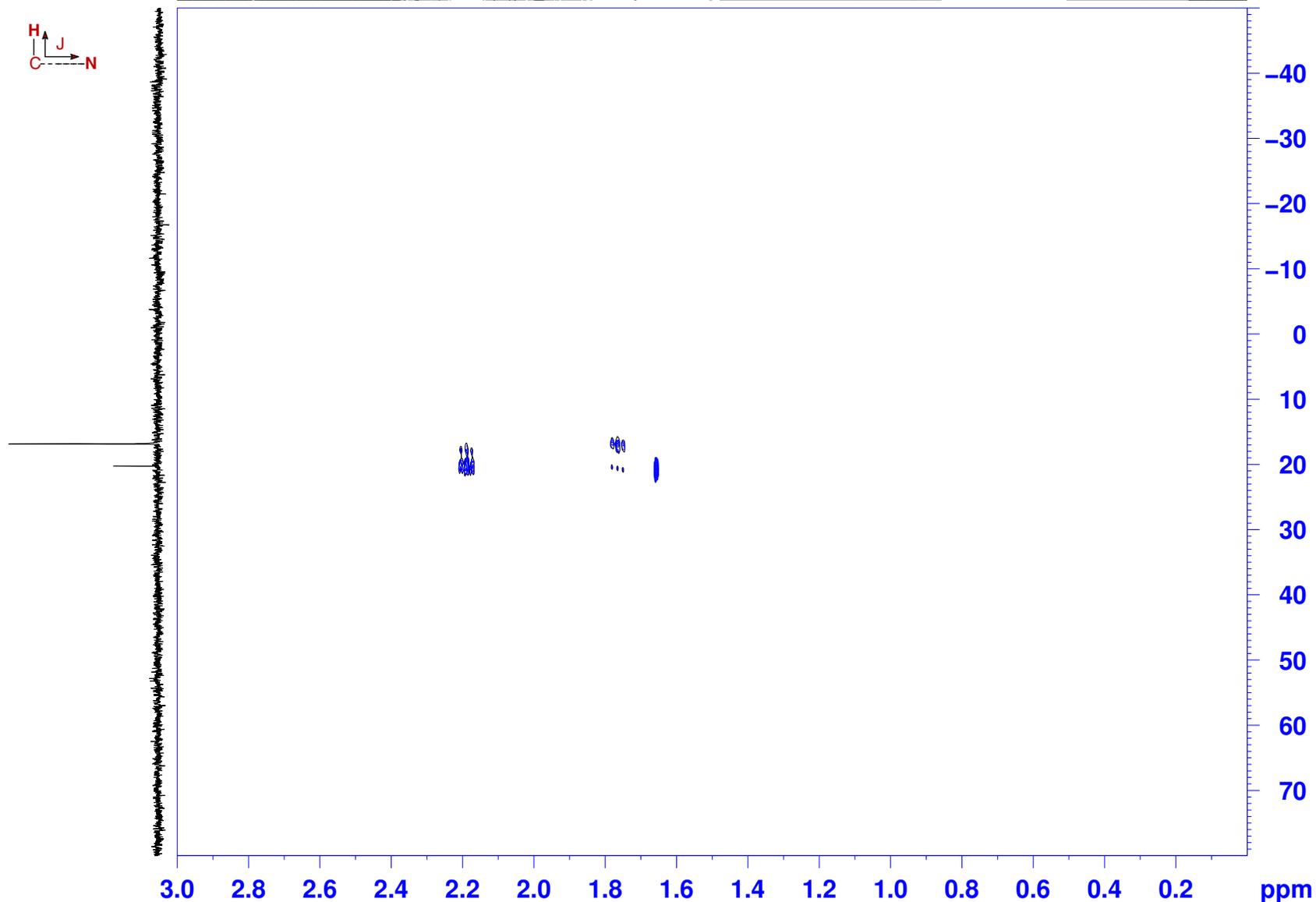
```
F2 - Acquisition Parameters
INSTRUM      spect
PROBHD       5 mm BBO BB-1H
PULPROG      zgpg30
TD           65536
SOLVENT      CDC13
NS           396
DS           4
SWH          20380.436 Hz
FIDRES       0.310981 Hz
AQ           1.6078665 sec
RG           46300
DW           24.533 usec
DE           6.00 usec
TE           293.3 K
D1           10.00000000 sec
d11          0.03000000 sec
DELTA        9.89999962 sec
TD0          1
```

```
===== CHANNEL f1 =====
NUC1          15N
P1            14.90 usec
PL1           -3.00 dB
SFO1          40.5529300 MHz
```

```
===== CHANNEL f2 =====
CPDPRG2      waltz16
NUC2          1H
PCPD2        70.00 usec
PL12         13.76 dB
PL13         14.00 dB
PL2           0.00 dB
SFO2          400.1307202 MHz
```

```
F2 - Processing parameters
SI           65536
SF           40.5448210 MHz
WDW          EM
SSB          0
LB           1.00 Hz
GB           0
PC           1.00
```

^1H - ^{15}N HMBC TMR spekter



```

F2 - Acquisition Parameters
INSTRUM spect
PROBHD 5 mm BBO BB-1H
PULPROG hmbcplpndqf
TD 2048
SOLVENT CDC13
NS 80
DS 16
SWH 1400.560 Hz
FIDRES 0.683867 Hz
AQ 0.7311860 sec
RG 16400
DW 357.000 usec
DE 6.00 usec
TE 293.2 K
CNST13 8.0000000
CNST2 95.0000000
d0 0.0000300 sec
D1 1.89999998 sec
D16 0.0020000 sec
d2 0.00526316 sec
d6 0.06250000 sec
IN0 0.00002465 sec

===== CHANNEL f1 =====
NUC1 1H
P1 14.35 usec
p2 28.70 usec
PL1 0.00 dB
SFO1 400.1306002 MHz

===== CHANNEL f2 =====
NUC2 15N
P3 14.90 usec
PL2 -3.00 dB
SFO2 40.5529300 MHz

===== GRADIENT CHANNEL =====
GPNAM1 SINE.100
GPNAM2 SINE.100
GPNAM3 SINE.100
GPZ1 70.00 %
GPZ2 30.00 %
GPZ3 50.10 %
P16 1000.00 usec

F1 - Acquisition parameters
ND0 2
TD 244
SFO1 40.55293 MHz
FIDRES 83.131050 Hz
SW 500.185 ppm
FnMODE QF

F2 - Processing parameters
SI 4096
SF 400.1300189 MHz
WDW SINE
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
PC 1.40

F1 - Processing parameters
SI 512
MC2 QF
SF 40.5448210 MHz
WDW SINE
SSB 0
LB 0.00 Hz
GB 0
    
```