

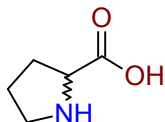
Ülesanne 5

TMR-katseklaasi kaaluti aminohape *proliin* (X mg, 99% puhtusega) ja sisestandardiks veeslahustuv krooneeter *18-crown-6* (6,72 mg, 99% puhtusega) ja lahustati see 0,6 mL deutereeritud vees (D₂O-s).

Mõõdeti ¹H TMR spekter (400,1 MHz) ning integreeriti sellel nii uuritava aine kui ka sisestandardi signaalid.

Andmed ja struktuurivalemid:

Proliin

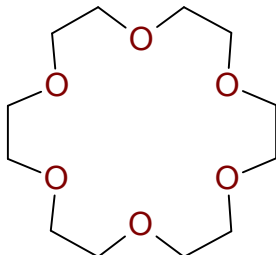


Molekulivalem: C₅H₉NO₂

Molekulmass: 115.130

¹H NMR (400.1 MHz, D₂O) δ: 4.79 (bs, 2H, NH+COOH); 4.15 (m, 1H, CH-2); 3.45 (m, 1H, CH_{2α-5}); 3.36 (m, 1H, CH_{2β-5}); 2.37 (m, 1H, CH_{2α-3}); 2.10 (m, 1H, CH_{2β-3}); 2.09-1.97 (m, 2H, CH₂₋₄).

18-Crown-6



Molekulivalem: C₁₂H₂₄O₆

Molekulmass: 264.315

¹H NMR (400.1 MHz, D₂O) δ: 3.71 (s, 24H, 12×CH₂).

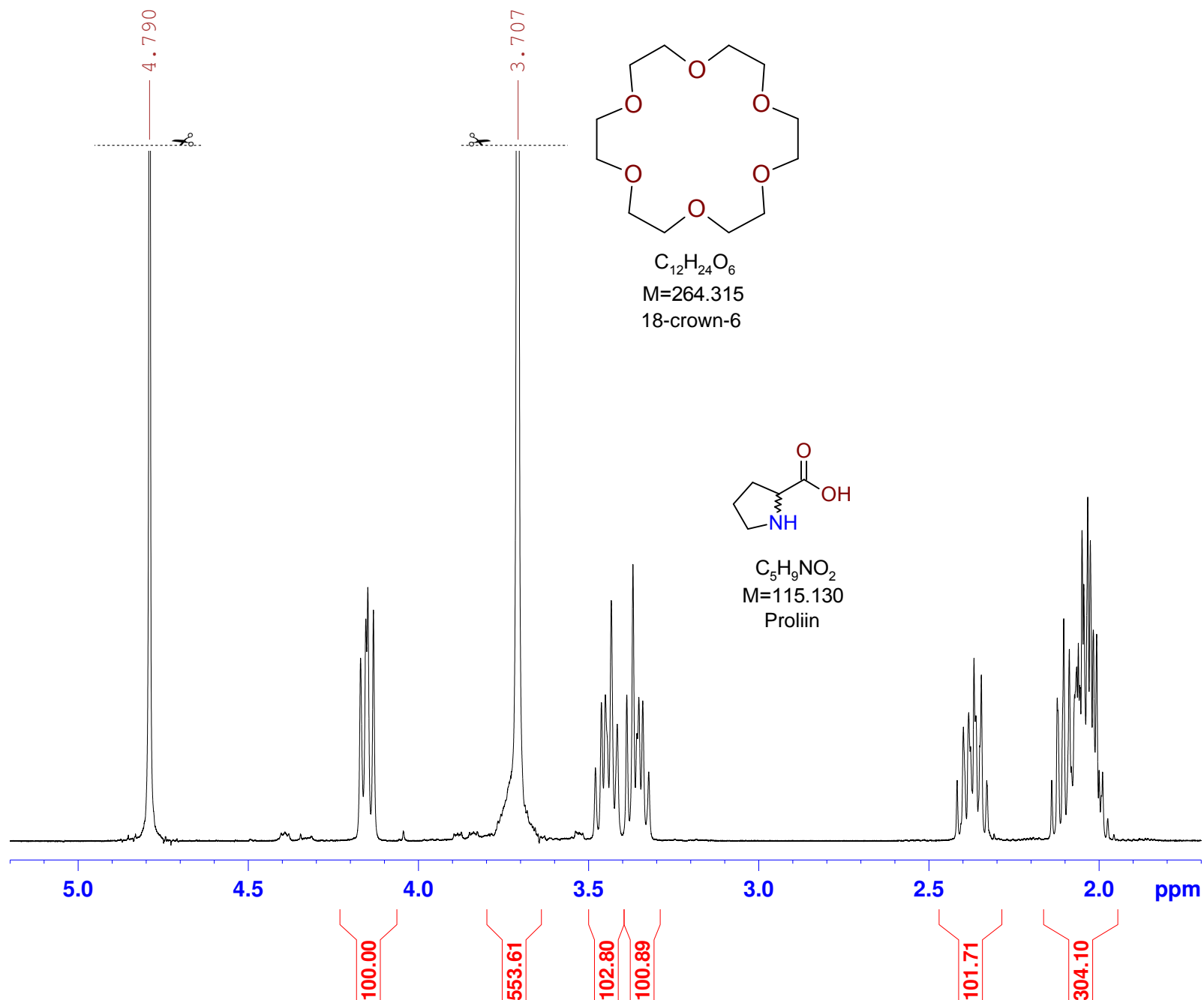
Raportisse kirjutada:

- Arvutage TMR-katseklaasi kaalutud aminohappe proliini kogus milligrammides.
Näidake kindlasti ära lahenduskaik ning pöörake tähelepanu ka sellele, mitme täivenumbri täpsusega vastus esitada!

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.

Proliin (X mg, 99% puhtusega) ja 18-crown-6 (6,72 mg, 99% puhtusega) segati kokku, lahustati D2O-s ning mõõdeti 1H TMR spekter.



```

Current Data Parameters
NAME          L-Proline
EXPNO         1
PROCNO        1

F2 - Acquisition Parameters
Date_         20120410
Time          10.54
INSTRUM       spect
PROBHD        5 mm BBO BB-1H
PULPROG       zg30
TD            81920
SOLVENT       D2O
NS            32
DS            4
SWH           5617.978 Hz
FIDRES        0.068579 Hz
AQ            7.2909298 sec
RG            114
DW            89.000 usec
DE            6.00 usec
TE            298.2 K
D1            10.0000000 sec
TD0           1

===== CHANNEL f1 =====
NUC1          1H
P1            14.35 usec
PL1           0.00 dB
SFO1         400.1320006 MHz

F2 - Processing parameters
SI            131072
SF            400.1299645 MHz
WDW           EM
SSB           0
LB            0.00 Hz
GB            0
PC            1.00
    
```