

NMR-Spektrenauswertung und Strukturaufklärung

Für Fortgeschrittene

Dr. Reinhard Meusinger

- Strukturaufklärung
- 2D-NMR-Spektrenauswertung
- Datenbanken
- Internetnutzung
- Stereochemie



506/10

4. – 6. Oktober 2010 · Darmstadt

► GEBÜHREN UND ANMELDUNG

GDCh-Mitglied	€ 1.070,-
Nichtmitglied	€ 1.290,-

Die Gebühren sind einschließlich Begleitmaterial und GDCh-Zertifikat, Kaffeepausen- und Konferenzgetränken, ausschließlich Unterkunft und Mittagessen zu verstehen. Sie unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4 Nr. 21a)bb) UStG).

Melden Sie sich bitte per Internet oder schriftlich bis zum 6.9.2010 (Anmeldeschluss) bei der GDCh-Geschäftsstelle an:

GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER e.V. (GDCh)
Fortbildung
Postfach 90 04 40
60444 Frankfurt am Main

Tel.: +49 69 7917-364/-291, Fax: +49 69 7917-475
E-Mail: fb@gdch.de, Internet: www.gdch.de/fortbildung

Geschäftsführer: Professor Dr. Wolfram Koch
Registernummer beim Vereinsregister: VR 4453 · Registergericht Frankfurt am Main

Mit der Anmeldung werden die **AGB** der GDCh verbindlich anerkannt. Die AGB finden Sie im Internet unter www.gdch.de/teilnahme.

Nach Eingang Ihrer **Anmeldung** erhalten Sie eine Anmeldebestätigung/Rechnung (bei Online-Anmeldungen bitte hierzu die letzte Seite des Buchungsvorgangs ausdrucken) und am Anmeldeschluss ausführliche Informationen zur Veranstaltung.

Sollten mehr als zwei Mitarbeiter Ihres Unternehmens an der Veranstaltung teilnehmen, bieten wir Ihnen ab dem dritten Teilnehmer **10% Preisnachlass** an.

Bis sechs Wochen vor dem Anmeldeschluss ist eine **Stornierung** kostenfrei möglich, innerhalb von sechs Wochen vor dem Anmeldeschluss wird eine Bearbeitungsgebühr von € 50,- erhoben. Bei Stornierungen nach dem Anmeldeschluss oder Nichterscheinen des Teilnehmers wird die gesamte Gebühr fällig. Die Stornierung bedarf der Schriftform. Eine **Vertretung des Teilnehmers** unter schriftlicher Benennung ist kostenlos möglich.

Bei **Absage der Veranstaltung** seitens der GDCh werden die eingezahlten Gebühren in voller Höhe zurückerstattet. Weitere Regressansprüche gegen den Veranstalter sind ausgeschlossen.

► HINWEIS AUF WEITERE VERANSTALTUNGEN

517/10 **Qualitätssicherung im analytischen Labor, Teil I**
Leitung: Prof. Dr. Dr. h.c. Adolf Zschunke
26. Oktober 2010 · Frankfurt am Main

518/10 **Qualitätssicherung im analytischen Labor, Teil II**
Leitung: Prof. Dr. Dr. h.c. Adolf Zschunke
27. Oktober 2010 · Frankfurt am Main

365/10 **Massenspektrometrie basierte Proteomics**
Leitung: Prof. Dr. Bernhard Küster
8. – 11. November 2010 · Freising-Weihenstephan

► VERANSTALTUNGSORT

Technische Universität Darmstadt
Clemens-Schöpf-Institut für Organische Chemie und Biochemie
Petersenstraße 22
64287 Darmstadt

► ANFAHRT

Die Teilnehmer erhalten am Anmeldeschluss eine ausführliche Wegbeschreibung zum Veranstaltungsort.

► UNTERKUNFT

Als geeignete Übernachtungsmöglichkeiten wurden nachfolgende Hotels genannt. Diese Hinweise erfolgen ohne jede Verbindlichkeit:

Hotel Friends Darmstadt, Spessartring 53, 64287 Darmstadt
Tel.: +49 6151 39 15-50, Fax: +49 6151 39 15-52 9
E-Mail: darmstadt@hotelfriends.de
Internet: www.hotel-friends-darmstadt.de

Alpha-City-Hotel, Mühlstraße 72, 64283 Darmstadt
Tel.: +49 6151 1743-0, Fax: +49 6151 6692474

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, dass die Haftung für bestellte und nicht abgenommene Zimmer beim Besteller liegt.

Weitere Unterkünfte erfragen Sie bitte bei:
Wissenschaftsstadt Darmstadt Marketing GmbH
Im Carree 1
64283 Darmstadt
Tel.: +49 6151 1345-13
Fax: +49 6151 1345-36
E-Mail: information@darmstadt.de
Internet: www.darmstadt-marketing.de

INHOUSE-SEMINARE Schulungen nach Ihren Vorstellungen

Individuell, effizient, zeit- und kostensparend – nutzen Sie das Expertenwissen und unser Know-how als langjähriger Seminaranbieter auch für Ihre Inhouse-Schulungen.

Ihre Ansprechpartnerin: Melanie Sakarya
Tel.: +49 69 7917-485 oder E-Mail: fb@gdch.de

ZIEL

Der praktisch orientierte Kurs eignet sich für technische Mitarbeiter und Wissenschaftler mit Grundkenntnissen in der NMR-Spektroskopie.

Der Kurs befähigt die Teilnehmer zur selbstständigen Auswertung mehrdimensionaler ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektren und zum Einsatz dieser Methoden in der Strukturaufklärung. Schwerpunkte der zahlreichen Übungen sind stereochemische Probleme, quantitative Auswertungen und Rechneranwendungen.

INHALT

Schwerpunkte des Kurses sind:

- die strukturanalytische Auswertung ein- und zweidimensionaler NMR-Spektren
- Welche Spektrenparameter benötige ich zur Lösung meines Strukturproblems?
- Welche Informationen liefern COSY-, TOCSY-, NOESY-, HSQC- und HMBC-Spektren?
- die Verifizierung von Strukturvorschlägen
- Berechnung chemischer Verschiebungen
- Internet- und Datenbanknutzung
- Anleitung zur Erstellung eigener Strukturvorschläge
- stereochemische Probleme (Konformation und Konfiguration)
- NMR-Spektroskopie von Gemischen
- zahlreiche Übungen
- Hinweise auf praktische Probleme
- Glossar der häufig genutzten Abkürzungen in der NMR-Spektroskopie

ZIELGRUPPE

Naturwissenschaftler, Chemieingenieure und technische Mitarbeiter

VORKENNTNISSE

Grundkenntnisse der NMR-Spektroskopie (wie sie im Basiskurs 505/10 vermittelt werden) sowie der Organischen Chemie werden vorausgesetzt. Kenntnisse zur Spektrometerbedienung sind jedoch nicht erforderlich.

TEILNEHMERZAHL

maximal 16 Personen

PROGRAMM

Montag, 4. Oktober 2010

Zweidimensionale NMR-Methoden

- 9.00 Begrüßung und Vorstellung
- 9.30 Die zweidimensionalen ^1H -NMR-Methoden (F_1_1)
Spektrenparameter und chemische Struktur
H,H-Korrelationen (COSY, TOCSY)
- 11.00 Kaffeepause
- 11.30 Die zweidimensionalen ^{13}C -NMR-Methoden (F_1_2)
Spektrenparameter und chemische Struktur
C,H-Korrelationen (HSQC und HMBC)
- 13.00 Mittagspause
- 14.00 Experimentelle Strukturverifizierung (F_1_3)
- 15.30 Übungen zur Verifizierung (F_1_Ü)
- 17.00 Voraussichtliches Ende des ersten Veranstaltungstages
- 19.00 Gemeinsames Abendessen auf freiwilliger Basis

Dienstag, 5. Oktober 2010

Stereochemische Probleme

- 9.00 Struktur und Stereochemie (F_2_1)
Symmetrische und asymmetrische Moleküle und ihre NMR-Spektren
- 10.30 Kaffeepause
- 11.00 Strukturbestimmung mittels NOE (F_2_2)
Die Kern-Overhauser-Verstärkung (NOE)
NOESY
- 12.30 Mittagspause
- 13.30 Rechnergestützte Strukturverifizierung (F_2_3)
Datenbanken
Internetnutzung
- 15.00 Übungen zur Verifizierung und Dereplikation (F_2_Ü)
- 17.00 Voraussichtliches Ende des zweiten Veranstaltungstages
- 19.00 Gemeinsames Abendessen auf Einladung der GDCh

Mittwoch, 6. Oktober 2010

Quantitative NMR, Gemische und Strukturaufklärung

- 9.00 Quantitative NMR (F_3_1)
Spektrenbearbeitung und Auswertung
- 10.00 Kaffeepause
- 10.30 Qualifizierung von Isomergemischen (F_3_2)
- 12.00 Mittagspause
- 13.00 Strukturaufklärung mit NMR (F_3_3)
DISCO, DBE
- 14.00 Übungen zur Strukturaufklärung (F_3_Ü)
- 16.00 Auswertung mit Abschlussdiskussion
- 17.00 Voraussichtliches Ende der Veranstaltung

KURSLEITER



Dr. Reinhard Meusinger

Technische Universität Darmstadt
Clemens-Schöpf-Institut
für Organische Chemie und Biochemie

- Chemiestudium, Fachchemiker für Analytik und Spektroskopie, Promotion (Leipzig)
- Post-Doc an der TU Wien
- Habilitation in Analytischer Chemie
- Vertretungsprofessur für Organische Chemie, Universität Mainz
- Leiter der NMR-Abteilung am Fachbereich Chemie der TU Darmstadt
- Privat-Dozent für Analytische Chemie, TU Darmstadt
- Beratertätigkeit in der Chemischen Industrie

Arbeitsgebiete: Molekülspektroskopie mit Schwerpunkt NMR, Quantitative Struktur-Eigenschaftsbeziehungen (QSPP)

REFERENTEN

Dr. Reinhard Meusinger Technische Universität Darmstadt
(siehe Kursleiter)
Heinz Kolshorn Universität Mainz

STOFFVERMITTLUNG

Der Kursinhalt wird in Form von Vorträgen und Übungen dargeboten. Die Übungen werden in kleinen Gruppen durchgeführt. Vor Kursende löst jeder Teilnehmer eine Übungsaufgabe selbstständig. Alle Übungen werden gemeinsam ausgewertet. Während des gesamten Kurses stehen den Teilnehmern mehrere Rechner mit verschiedener NMR-Software zur Verfügung.

BEGLEITMATERIAL

Die Teilnehmer erhalten zum Kursbeginn alle Begleitmaterialien und das Buch „NMR-Spektren richtig ausgewertet – 100 Übungen für Studium und Beruf“ sowie nach erfolgreicher Teilnahme ein GDCh-Zertifikat. Die Lösungen zu allen Übungsaufgaben werden am Kursende ausgehändigt.

Obwohl im Text häufig nur von Chemikern, Teilnehmern etc. die Rede ist, sind damit selbstverständlich auch Chemikerinnen, Teilnehmerinnen etc. gemeint.

Änderungen und Ergänzungen vorbehalten