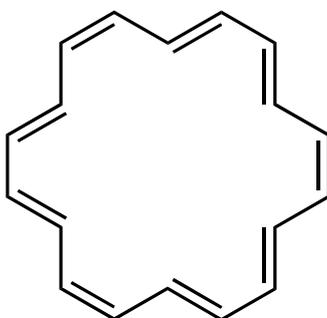


Vorlesung Physikalisch-Organische und Supramolekulare Chemie

Prof. Dr. Christoph A. Schalley

Quickie Nr. 10:

[18]Annulen zeigt zwei Multipletts im ^1H -NMR-Spektrum bei -60°C , eines bei 9,25 ppm, das andere bei -2,9 ppm. Erklären Sie die ungewöhnlichen chemischen Verschiebungen! Knapp oberhalb von Raumtemperatur fallen beide Signale zusammen und es ergibt sich ein mit steigender Temperatur immer schärfer werdendes Signal, das bei 120°C in ein scharfes Singulett bei 5,45 ppm übergeht. Erklären Sie die Temperaturabhängigkeit des NMR-Spektrums und die Signallage bei 5.45 ppm! Warum hat der Ringstromeffekt aromatischer Ringe keine Auswirkungen auf die Lagen der ^{13}C -NMR-Signale? Entwickeln Sie eine Idee, wie Sie trotz dieses Problems die Aromatizität von C_{60} (Fulleren) nachweisen können, obwohl dieses Molekül nur aus C-Atomen besteht!



[18]Annulene shows two multipletts in the ^1H NMR spectrum at -60°C , one at 9.25 ppm, the other one at -2.9 ppm. Explain these quite unusual chemical shifts! Above room temperature, both signals coalesce and with increasing temperature, one sharpening signal evolves which finally is a sharp singlet at 5.45 ppm at 120°C . Give an explanation for the temperature dependence of the NMR spectra and the position of this signal at 5.45 ppm! Why doesn't the ring current effect affect the positions of ^{13}C NMR signals? Develop an idea, how you can experimentally show the aromaticity of C_{60} (fullerene) despite of this problem!