

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung von intramolekularen Wasserstoffbrückenbindungen in Hydroxyzinen und verwandten Systemen mit Hilfe der NMR-Spektroskopie und quantenchemischen Berechnungen, um Aufschluss über die Position des Wasserstoffatoms in einer Wasserstoffbrücke zu gewinnen. Zu diesem Zweck wurden die Positionen des brückenbildenden Wasserstoffatoms einiger untersuchten Verbindungen in quantenchemischen Simulationen variiert, sowie der Einfluss dieser Variation auf die Geometrie der untersuchten Moleküle bestimmt. Die aus den um den jeweiligen N...H-Abstand relaxierten Gleichgewichtsgeometrien resultierenden Kernabschirmungen aller an der Wasserstoffbrücke beteiligten Atome wurden auf unterschiedlichen theoretischen Niveaus (B3LYP / PM3) berechnet. Um die theoretisch ermittelten Kernabschirmungen mit den experimentell ermittelten  $^{15}\text{N}$ -chemischen Verschiebungen vergleichen zu können, wurde die absolute Kernabschirmung von Nitromethan und Tetramethylsilan berechnet und als Referenzwert berücksichtigt. Der Vergleich der theoretischen Ergebnisse mit den experimentellen Daten führte in allen Fällen zu Abweichungen im Rahmen der aus der Literatur bekannten Fehlerbreite. Die Gegenüberstellung der aus Lösungs-NMR-spektroskopischen Untersuchungen gewonnenen chemischen Verschiebungen mit den im Festkörper ermittelten isotropen chemischen Verschiebungen zeigte für den Fall der intramolekulare Wasserstoffbrücken ausbildenden Verbindungen eine besser Übereinstimmung als für die Verbindungen die keine Wasserstoffbrücken bilden. Dies ließ den Schluss zu, dass im Falle intramolekularer Wasserstoffbrückenbindungen das Molekülmilieu einen geringeren Einfluss auf die chemische Verschiebung der an der Wasserstoffbrücke beteiligten Kerne besitzt. Die theoretische Berechnung der chemischen Verschiebung ist mit heute standardmäßig verwendeten Rechnersystem problemlos zu bewältigen. Dem Vergleich der so gewonnenen theoretischen Ergebnisse mit den experimentellen Daten der NMR-spektroskopischen Untersuchungen zeigen jedoch noch eine große Fehlerbreite. Sollte es gelingen, die Fehlerbreite in der Berechnung der Kernabschirmungen der Schwerkerne wie  $^{15}\text{N}$  zu reduzieren, wäre aufgrund der nachgewiesenen linearen Abhängigkeit der Kernabschirmung vom N...H-Abstand eine Abstandsbestimmung in hinreichender Genauigkeit möglich. Neue Funktionale lassen eine deutlich geringere Fehlerbreite in der Berechnung der magnetischen Eigenschaften der Kerne erwarten. Unter diesen Voraussetzungen würde sich der Vergleich von theoretisch ermittelten Kernabschirmungen aus systematisch variierten Geometrien eines Moleküls mit Festkörper-NMR-spektroskopischen Ergebnissen als eine gute Erweiterung der Festkörper-NMR-Spektroskopie im Rahmen der Strukturbestimmung von Wasserstoffbrücken und der daran beteiligten Kerne erweisen.