

Inhalt

<i>Vorwort</i>	V
<i>Inhalt</i>	VII
1. Kernmagnetische Resonanz	1
1.1. Magnetische Eigenschaften von Atomkernen	1
1.2. Verhalten von Atomkernen im Magnetfeld	4
1.3. Die Resonanzbedingung	7
1.4. Die spektralen Parameter	10
1.4.1. Chemische Verschiebungen	10
1.4.2. Spin-Spin-Kopplungen	14
1.4.3. Signalintensitäten	23
1.5. Das Empfindlichkeitsproblem in der ^{13}C -NMR-Spektroskopie ..	24
2. Puls-Fourier-Transformations-Technik	27
2.1. Das Puls-Experiment	27
2.2. Fourier-Transformation	31
2.3. Mathematische Manipulation des FID	34
2.4. Genauigkeit der spektralen Parameter	37
3. Chemische Verschiebungen von ^{13}C-Kernen	40
3.1. Additivität von Verschiebungsinkrementen	40
3.2. Einflüsse von Substituenten auf chemische Verschiebungen	41
3.2.1. Induktive Effekte	41
3.2.2. Mesomere Effekte	42
3.2.3. Sterische Effekte	44
3.3. Chemische Verschiebungen wichtiger Substanzklassen	48
3.3.1. Kohlenwasserstoffe	49
3.3.1.1. Acyclische Alkane	49
3.3.1.2. Cycloalkane	52
3.3.1.3. Alkene und Cycloalkene	55
3.3.1.4. Alkine und Allene	57
3.3.1.5. Aromaten	57
3.3.2. Substituierte Kohlenwasserstoffe	59
3.3.2.1. Acyclische Alkane	60
3.3.2.2. Cycloalkane	63
3.3.2.3. Nichtaromatische Heterocyclen	64
3.3.2.4. Alkene, Alkine und Allene	64
3.3.2.5. Aromaten	66
3.3.2.6. Heteroaromaten	68
3.3.3. Funktionelle Gruppen	70
4. Spin-Kopplungen mit ^{13}C-Kernen	74
4.1. Kopplungen zwischen ^{13}C und ^1H	76
4.1.1. ^{13}C , ^1H -Kopplungen über eine Bindung	76
4.1.2. ^{13}C , ^1H -Kopplungen über zwei und mehr Bindungen	80
4.2. Kopplungen zwischen ^{13}C und ^{13}C	83

4.3. Kopplungen zwischen ^{13}C und Heterokernen	84
4.3.1. Kopplungen zwischen ^{13}C und ^{19}F	85
4.3.2. Kopplungen zwischen ^{13}C und ^{31}P	86
5. Signalzuordnungstechniken in der ^{13}C-NMR-Spektroskopie	88
5.1. Interpretation von chemischen Verschiebungen und Kopplungskonstanten	88
5.2. Doppelresonanz-Methoden	88
5.2.1. Monochromatische Off-Resonance-Entkopplung	88
5.2.2. Selektive Entkopplung	91
5.2.3. Off-Resonance-Rauschentkopplung	93
5.3. Isotopenmarkierung	94
5.4. Anwendung paramagnetischer Verschiebungsreagenzien	97
5.5. Spin-Gitter-Relaxation	98
6. Einige Beispiele zur Strukturaufklärung	104
6.1. Ein Hexahydro-oxo-thienopyridin	104
6.2. 3'-Amino-3'-desoxy-adenosin-2'-thionphosphorsäure-2':3'-cycloamid	106
6.3. Emmotin-A	108
7. Anhang	111
7.1. Lösungen der Übungsaufgaben	111
7.2. Ausgewählte Literatur	117
7.3. Eigenschaften wichtiger Lösungsmittel	118
<i>Sachverzeichnis</i>	120