

# Inhalt

<i>Vorwort</i> .....	V
<i>Inhalt</i> .....	VII
<b>1. Kernmagnetische Resonanz</b> .....	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 $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektroskopie ..	24
<b>2. Puls-Fourier-Transformations-Technik</b> .....	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
<b>3. Chemische Verschiebungen von <math>^{13}\text{C}</math>-Kernen</b> .....	40
3.1. Additivität von Verschiebungssinkrementen .....	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. Heteroaromatoren .....	68
3.3.3. Funktionelle Gruppen .....	70
<b>4. Spin-Kopplungen mit <math>^{13}\text{C}</math>-Kernen</b> .....	74
4.1. Kopplungen zwischen $^{13}\text{C}$ und $^1\text{H}$ .....	76
4.1.1. $^{13}\text{C}, ^1\text{H}$ -Kopplungen über eine Bindung .....	76
4.1.2. $^{13}\text{C}, ^1\text{H}$ -Kopplungen über zwei und mehr Bindungen ..	80
4.2. Kopplungen zwischen $^{13}\text{C}$ und $^{13}\text{C}$ .....	83

4.3. Kopplungen zwischen $^{13}\text{C}$ und Heterokernen .....	84
4.3.1. Kopplungen zwischen $^{13}\text{C}$ und $^{19}\text{F}$ .....	85
4.3.2. Kopplungen zwischen $^{13}\text{C}$ und $^{31}\text{P}$ .....	86
<b>5. Signalzuordnungstechniken in der <math>^{13}\text{C-NMR}</math>-Spektroskopie .....</b>	<b>88</b>
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
<b>6. Einige Beispiele zur Strukturaufklärung .....</b>	<b>104</b>
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
<b>7. Anhang .....</b>	<b>111</b>
7.1. Lösungen der Übungsaufgaben .....	111
7.2. Ausgewählte Literatur .....	117
7.3. Eigenschaften wichtiger Lösungsmittel .....	118
<b>Sachverzeichnis .....</b>	<b>120</b>