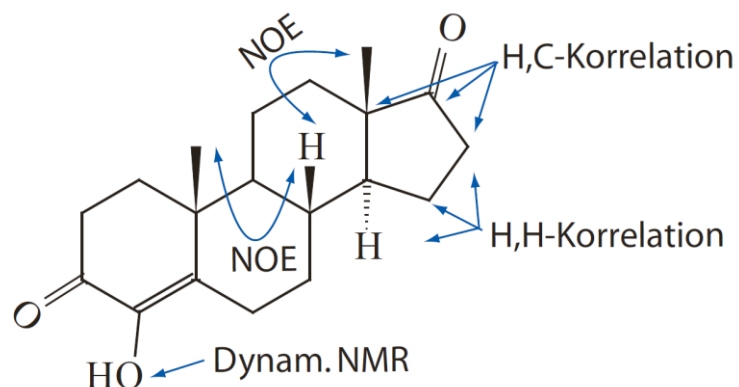


Einsatzbereiche für unterschiedliche NMR-Pulsprogramme



Allgemeine Bemerkungen:

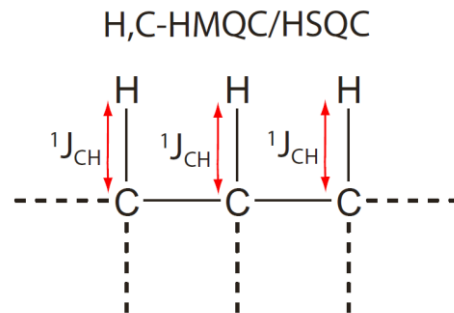
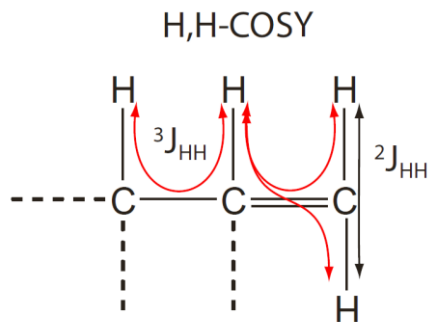
(1) Bei bereits bekannter oder **sehr wahrscheinlicher Struktur** genügt bei ausreichender Zahl charakteristischer Protonen im Molekül die **Aufnahme eines $^1\text{H-NMR-Spektrums!}$**

(2) Sollen außerdem **Isomeren, bzw. Konfigurationen** geklärt werden (z.B. *E/Z* oder *eq/ax*) können zunächst die $^3J_{\text{HH}}$ -Kopplungen aus dem 1D-Spektrum ausgewertet werden (wenn erkennbar) und/oder **1D-NOE-Spektren** aufgenommen werden (AV400 - AV600).

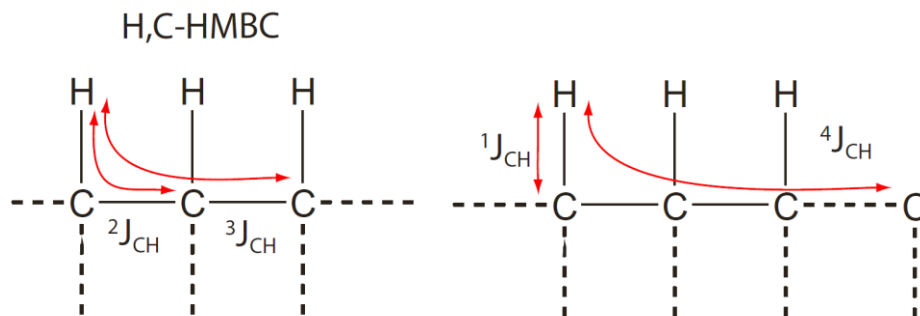
(3) Bei **neuen**, bisher noch unbekannt **Verbindungen** sollte eine **komplette Charakterisierung** durchgeführt werden, d.h. Aufnahme von $^1\text{H-NMR-Spektrum}$, H,H-COSY, H,C-Korrelation über $^1J_{\text{CH}}$ (HMQC oder HSQC) sowie H,C-Korrelation über $^nJ_{\text{CH}}$ (HMBC). Eventuell kann auch noch ein APT- oder (!) $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ -NMR-Spektrum aufgenommen werden.

(4) Bei flexiblen oder in intermolekularem chemischem Austausch befindlichen Verbindungen können zudem dynamische NMR-Spektren bei mehreren Temperaturen aufgenommen werden (AV400 - AV600)

Informationen, die unterschiedliche Spektren liefern können



HMQC kann ohne Phasen-korrektur
prozessiert werden, HSQC/HSQCed
ist phasensensitiv



An sp^2 -Kohlenstoffen (Aromat, Olefin) sind hauptsächlich $^3J_{CH}$ -Kopplungen beobachtbar, an sp^3 -Kohlenstoffen außerdem auch $^2J_{CH}$ -Kopplungen. Weitreichende „long range“-Kopplungen (4J) können ebenfalls auftreten. Durchbrechende $^1J_{CH}$ -Kopplungen sind immer durch Bildung eines Dubletts in der 1H -Dimension mit Abstand entsprechend der Kopplungskonstanten (ca. 110-240 Hz) erkennbar.

1D sel. NOE (dpfgseNOE) oder H,H-NOESY

