

2. Übung zum NMR-Teil der Vorlesung „Methoden der Chemie“ (Lehramt) im WS 18/19

Exkurs „Indirekte (skalare) Kopplung“

$^1J_{CH}$ -Kopplung

H,C-Kopplungen über *eine Bindung* zeigen deutlich den Anteil des s-Charakters des in die HC-Bindung involvierten Atomorbitals (sp, sp² etc.). Man kann eine empirische Regel zur groben Abschätzung aufstellen

$$^1J_{CH}/\text{Hz} \approx 5 \cdot \%(\text{s})$$

Auch die Elektronegativität von weiteren Substituenten am Kohlenstoff beeinflusst die Größe der Kopplungskonstanten.

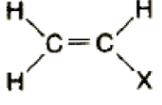
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	125	CH_4	125	CH_3Cl	147
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	157	CH_3OH	141	CH_2Cl_2	177
$\text{HC}\equiv\text{CH}$	250	CH_3CN	136	CHCl_3	208

				
123	128	136	161	205

Abb.: $^1\text{H}-^{13}\text{C}$ -Kopplungskonstanten über eine Bindung (in Hz, Quelle: P.J. Hore, *NuclearMagneticResonance*, Oxford University Press, Oxford, 1995)

$^3J_{HH}$ -Kopplung

Die für Organische Chemiker wichtigsten H,H-Kopplungen sind die über *drei Bindungen* (sog. *vicinale* Kopplungen, $^3J_{HH}$). Für H-C-C-H-Fragmente gilt hier eine Beziehung für die Größe der $^3J_{HH}$ -Kopplung, die vor allem für die Konformationsanalyse wichtig ist. Als einprägsames Hilfsmittel hat sich die *Karplus-Kurve* erwiesen, mit der die Abhängigkeit der Kopplung vom Diederwinkel über drei Bindungen abgeschätzt werden kann:

			$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{X}$
	cis	trans	
X = H	+11.5	+19.0	+8.0
X = Ph	+10.7	+17.5	+7.6
X = Cl	+7.4	+14.8	+7.2
X = CN	+11.8	+17.9	+7.6

