

## 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, sp<sup>2</sup> 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	$\text{CH}_4$	125	$\text{CH}_3\text{Cl}$	147
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	157	$\text{CH}_3\text{OH}$	141	$\text{CH}_2\text{Cl}_2$	177
$\text{HC}\equiv\text{CH}$	250	$\text{CH}_3\text{CN}$	136	$\text{CHCl}_3$	208






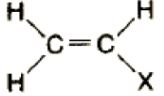
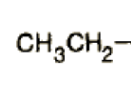
				
123	128	136	161	205

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:

			
	cis	trans	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{X}$
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

