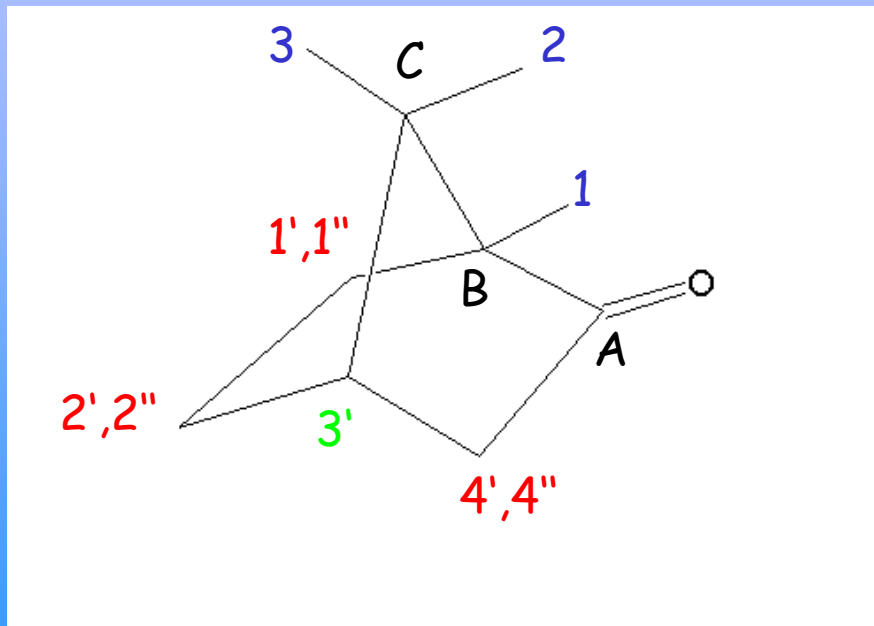


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV

Ordnen Sie die Resonanzen von Campher
anhand der vorgegebenen Spektren zu



3 x CH₃

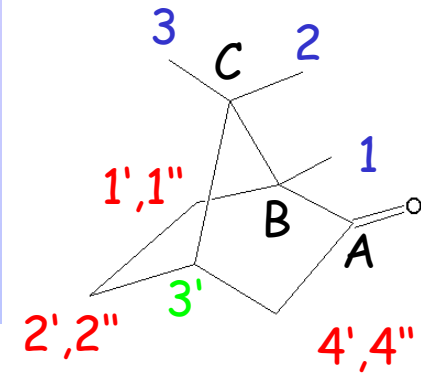
3 x CH₂

(diastereotop !)

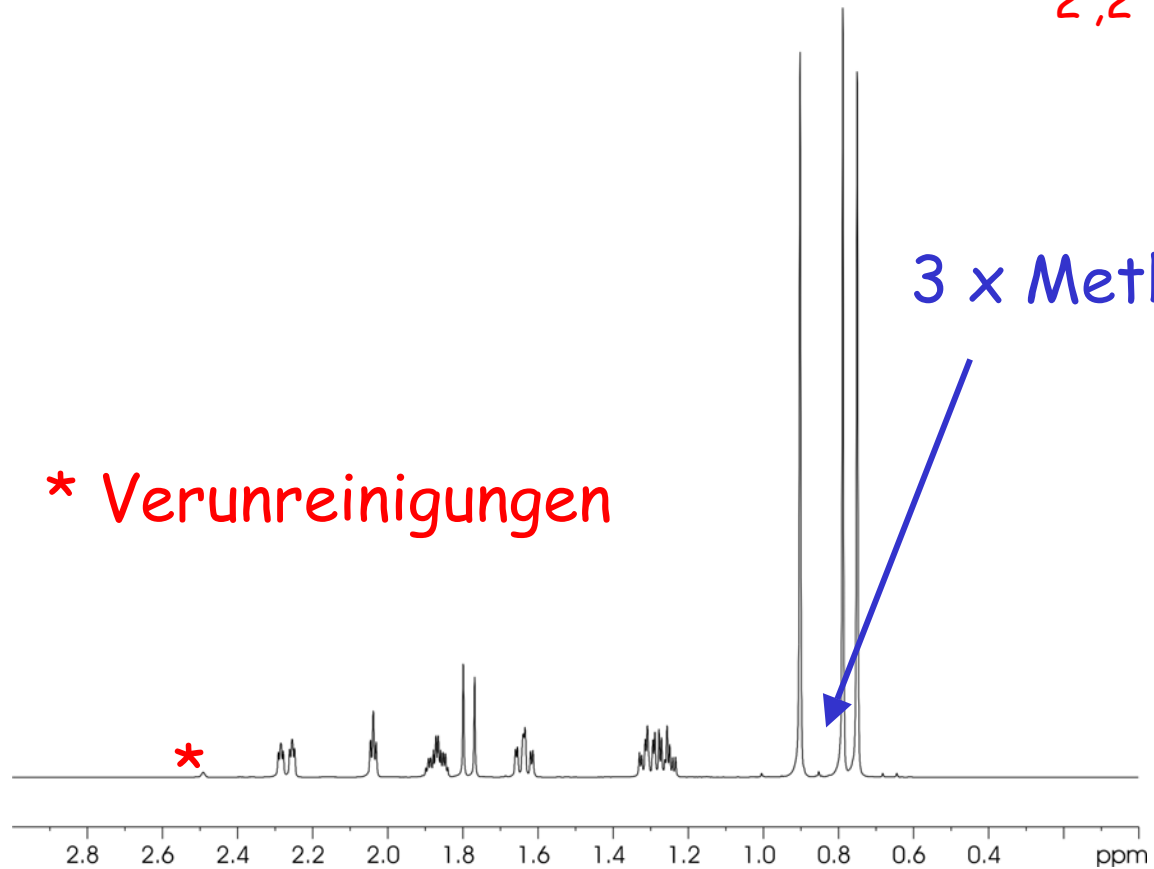
1 x CH

3 x quartär

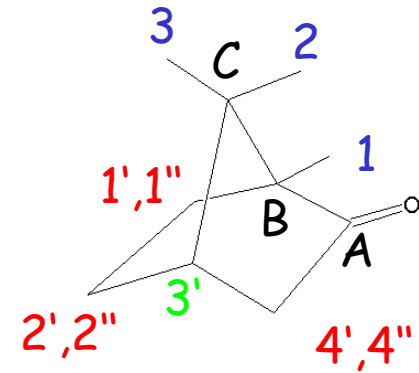
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



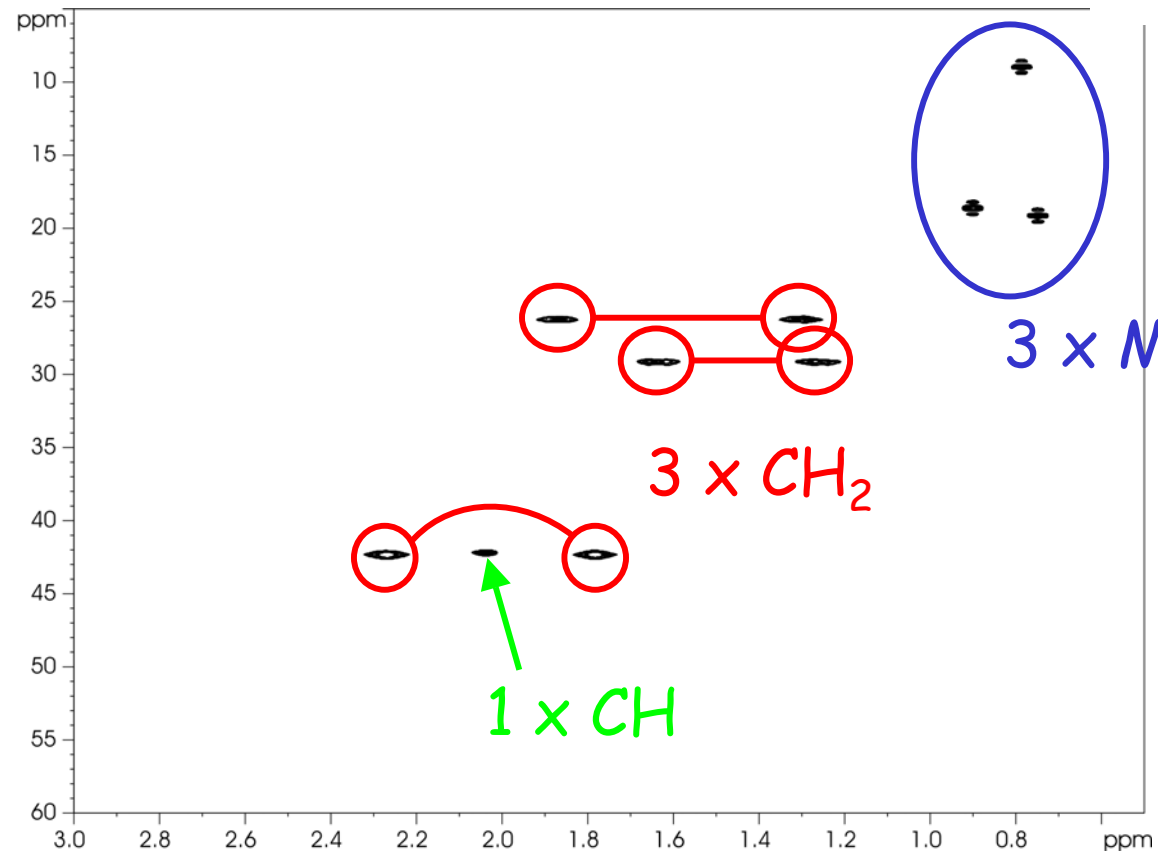
(1) ^1H -1D



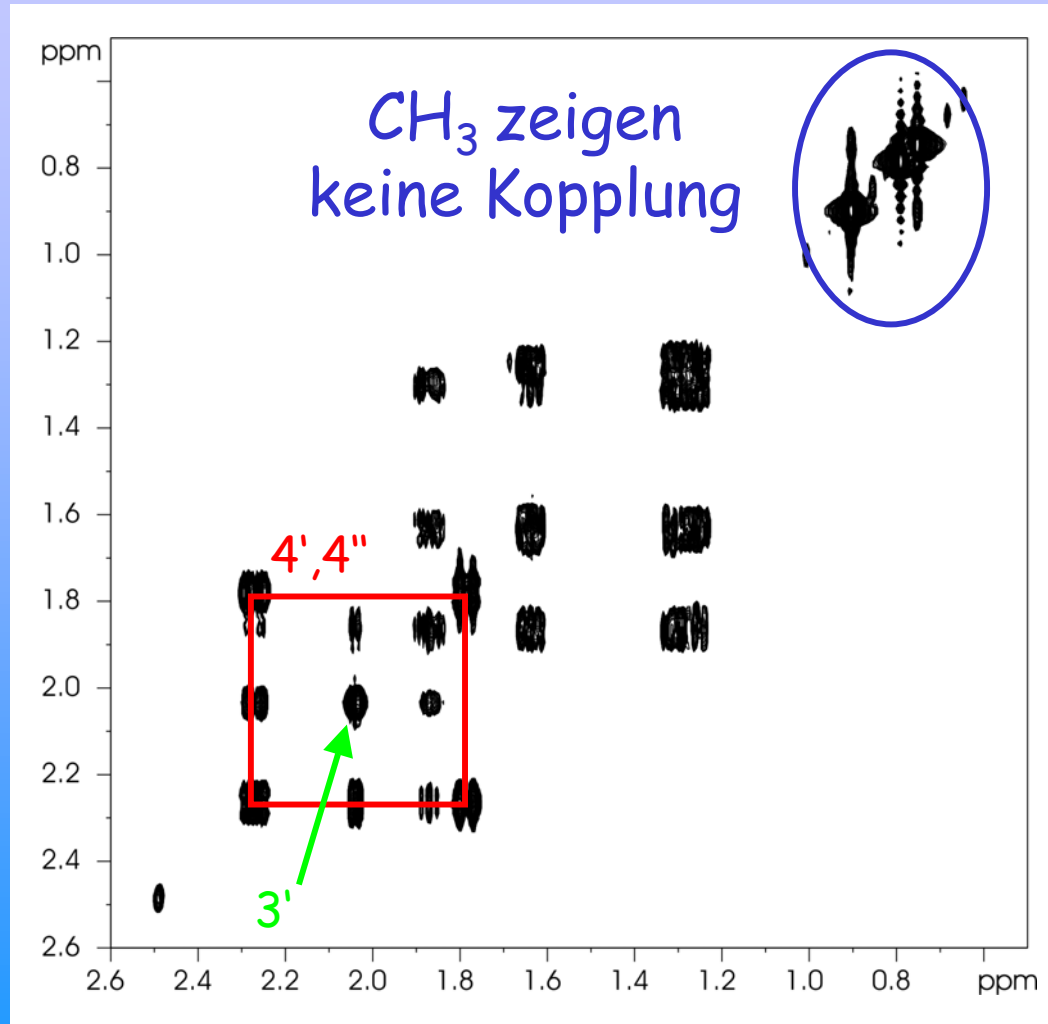
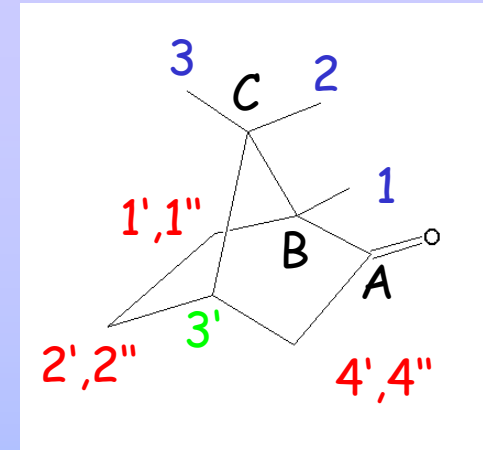
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



(2) HMQC

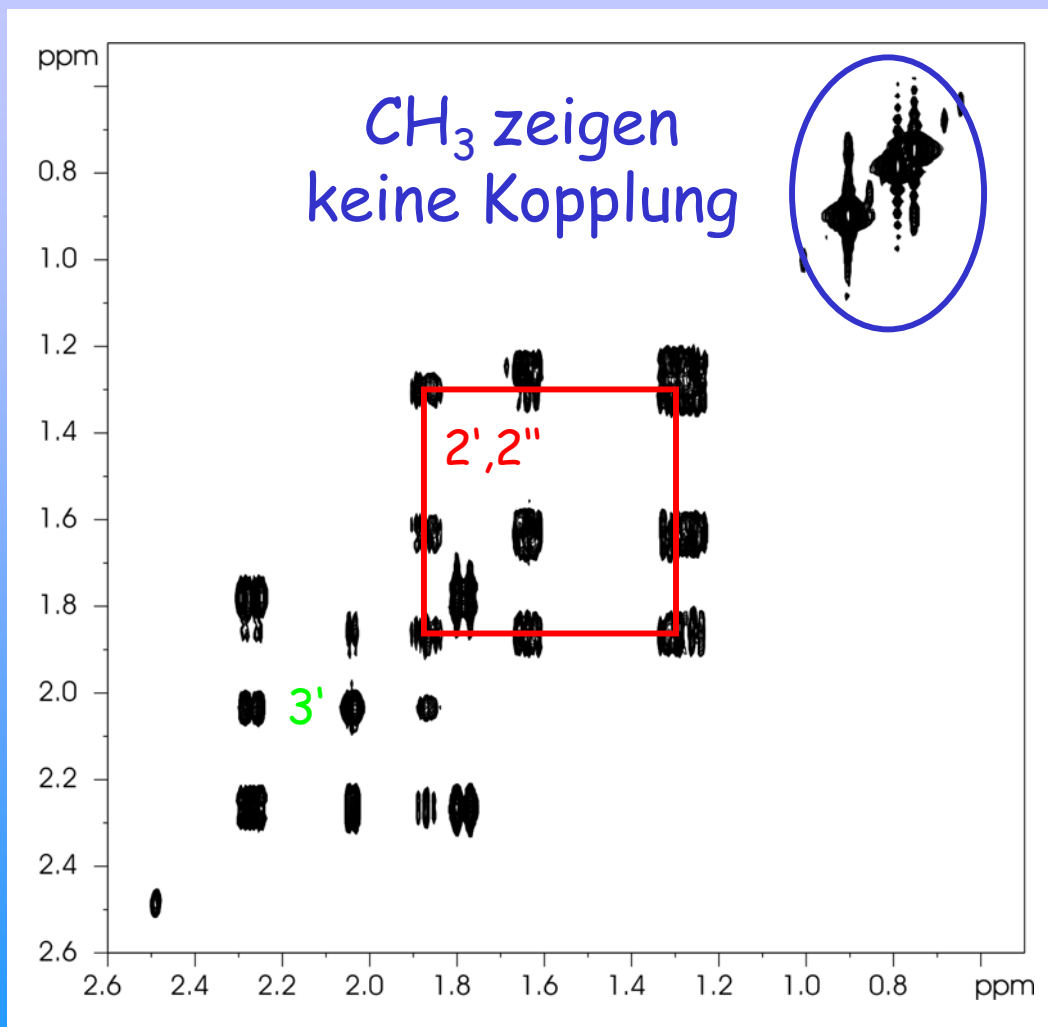
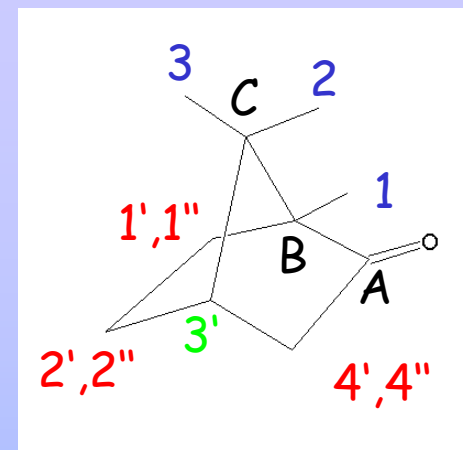


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



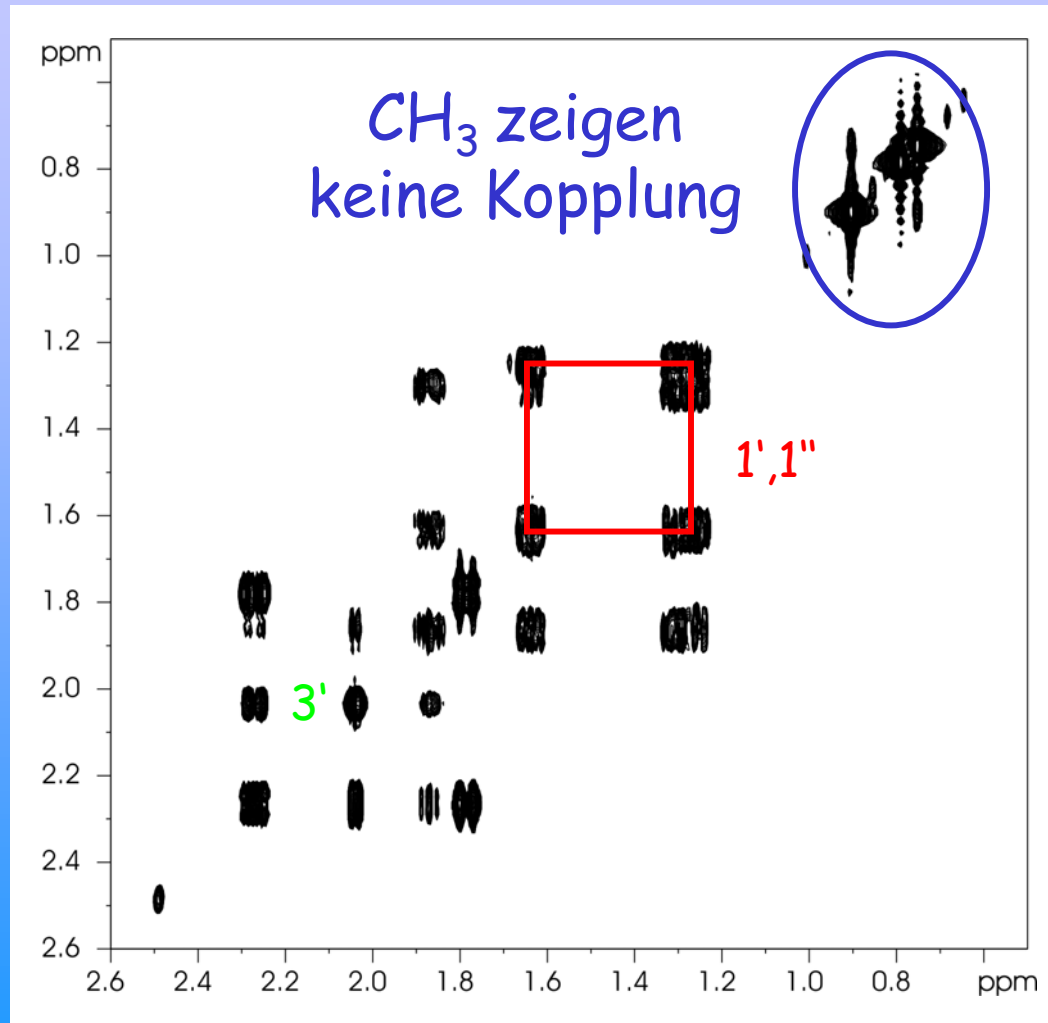
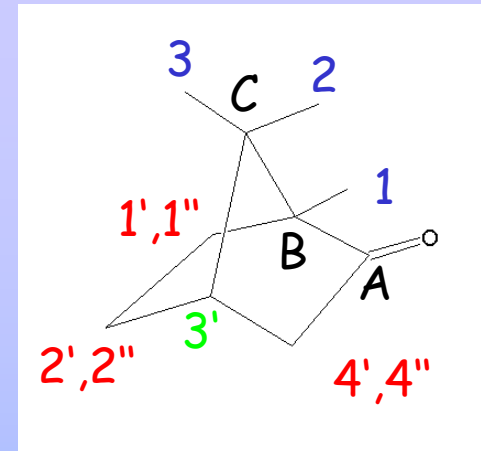
4', 4'' können aufgrund der chemischen Verschiebung und der fehlenden Kopplung zu anderen CH₂ und der Kopplung zu 3' zugeordnet werden

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



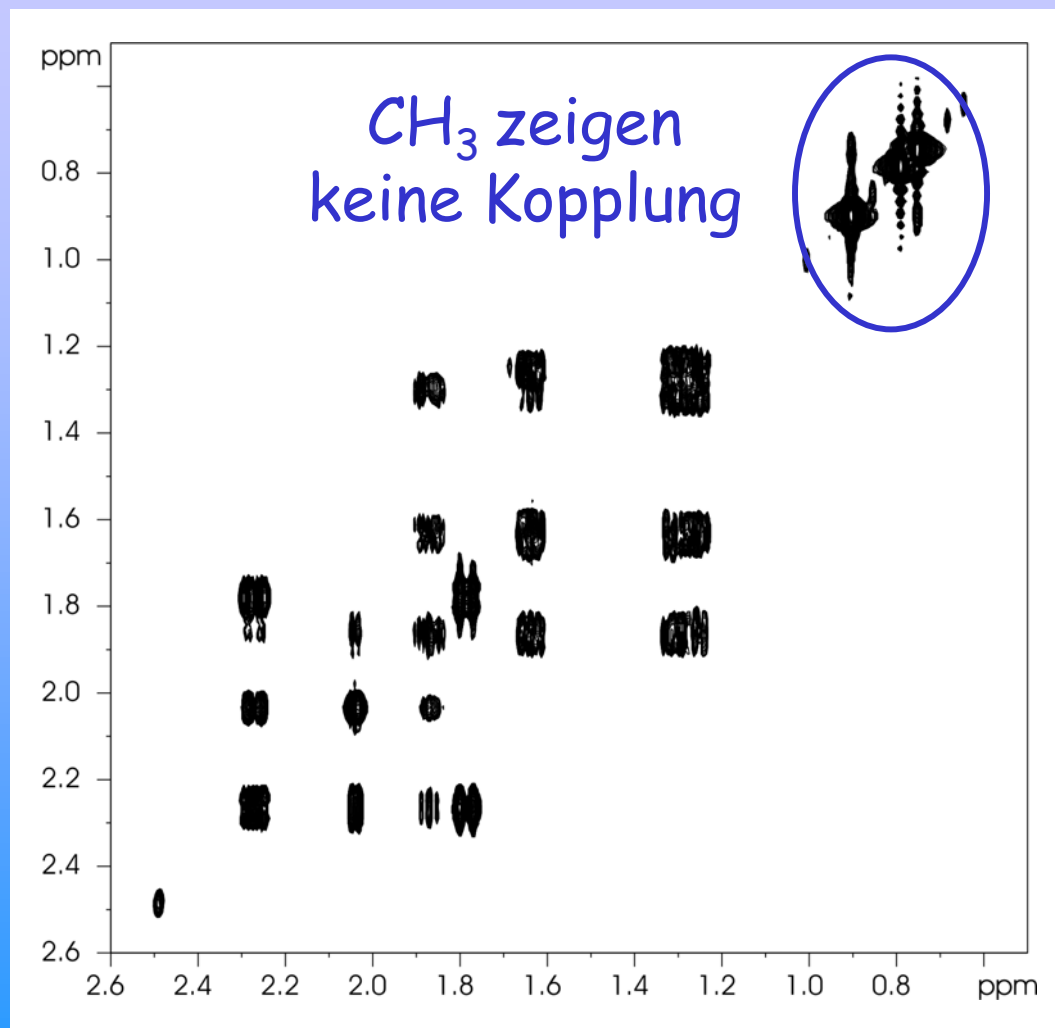
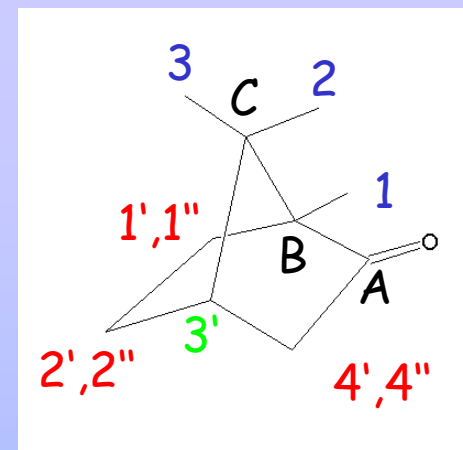
2', 2'' können aufgrund der chemischen Verschiebung und der Kopplung zu 3' zugeordnet werden

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV

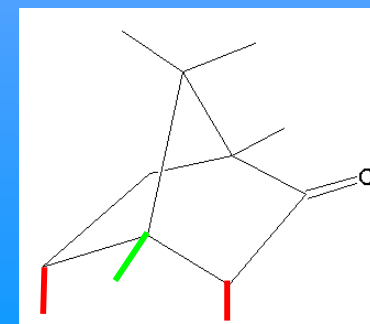


1',1'' bleiben dann übrig, die Kopplung zu 3' fehlt

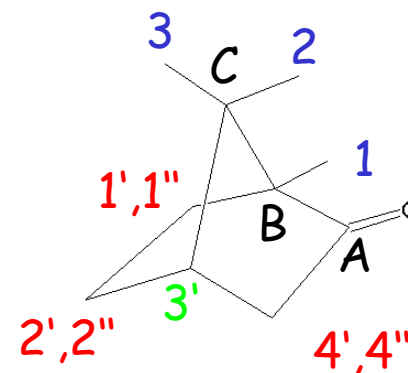
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



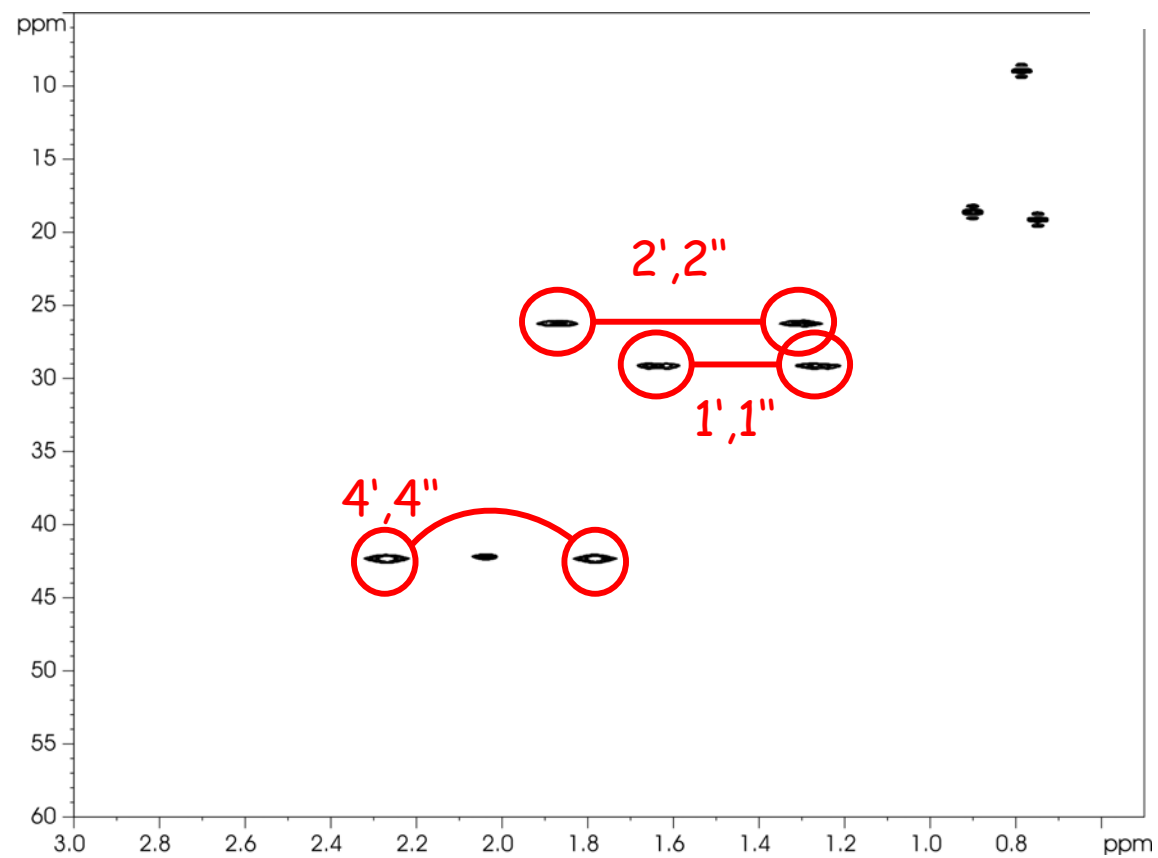
Bei 4',4'' und 2',2'' gibt es jeweils nur eine Korrelation zu 3', aufgrund der Struktur sind zwei Kopplungen sehr klein, man kann diastereotop zuordnen



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV

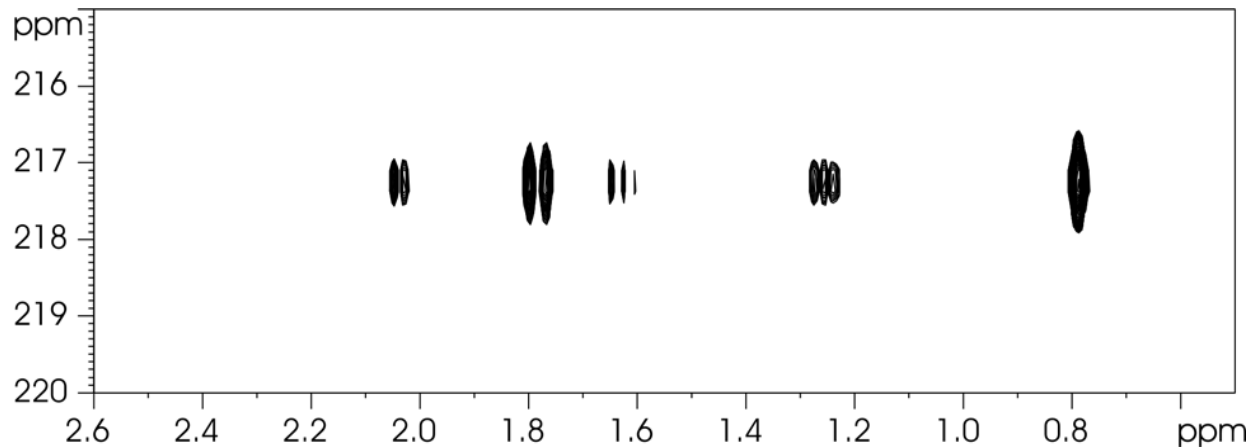
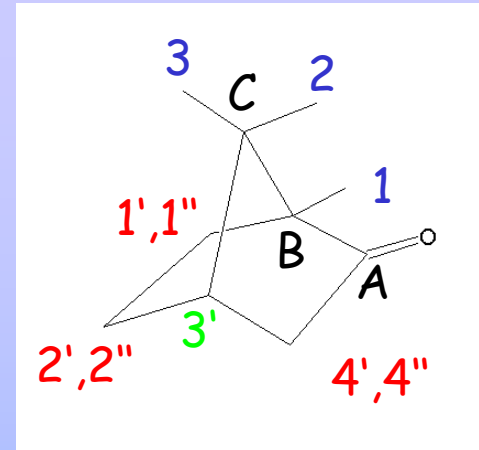


(2) HMQC

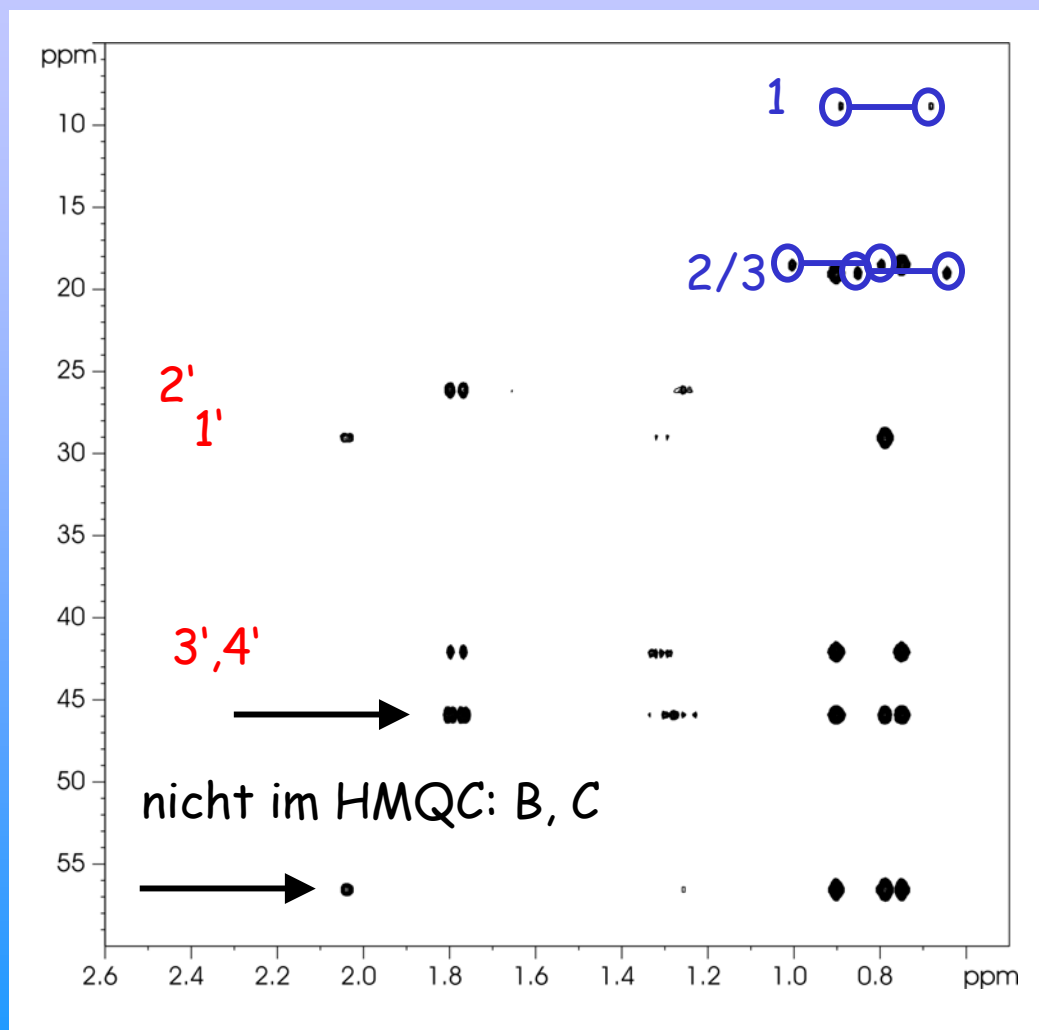
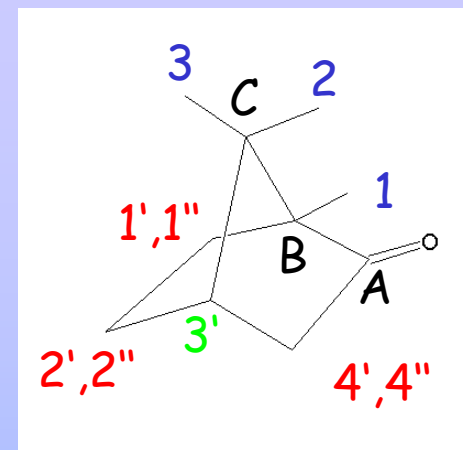


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV

Die Zuordnung von A ist trivial, es ist der
einzige Kohlenstoff bei > 200 ppm.
Er zeigt Kopplungen zu fast allen
Protonen im Molekül

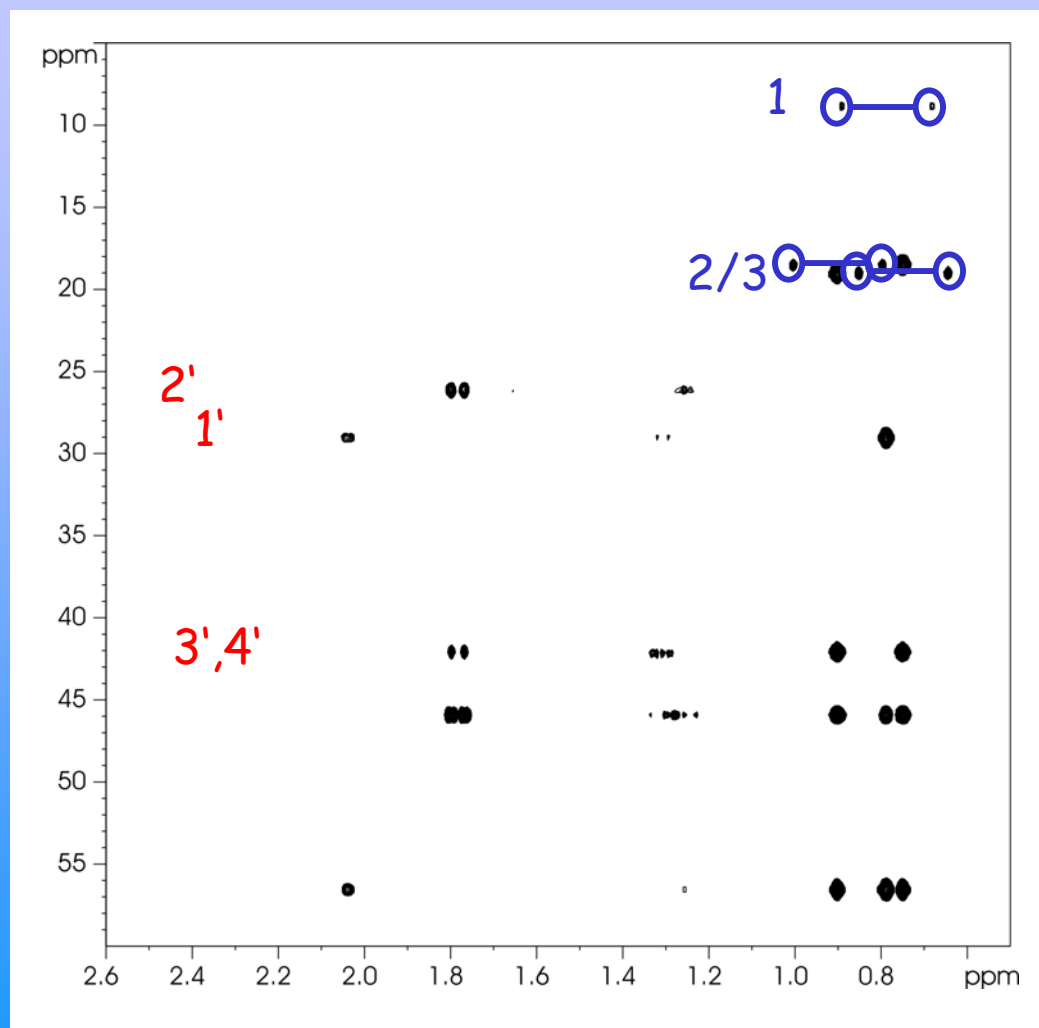
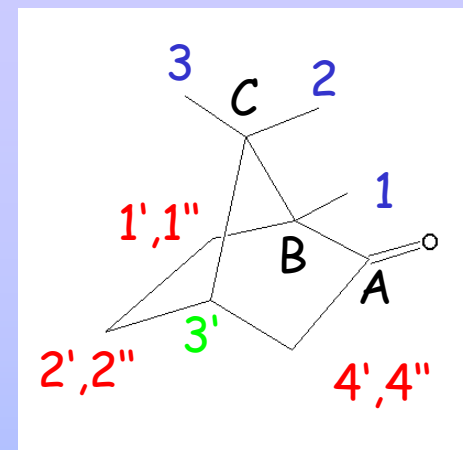


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



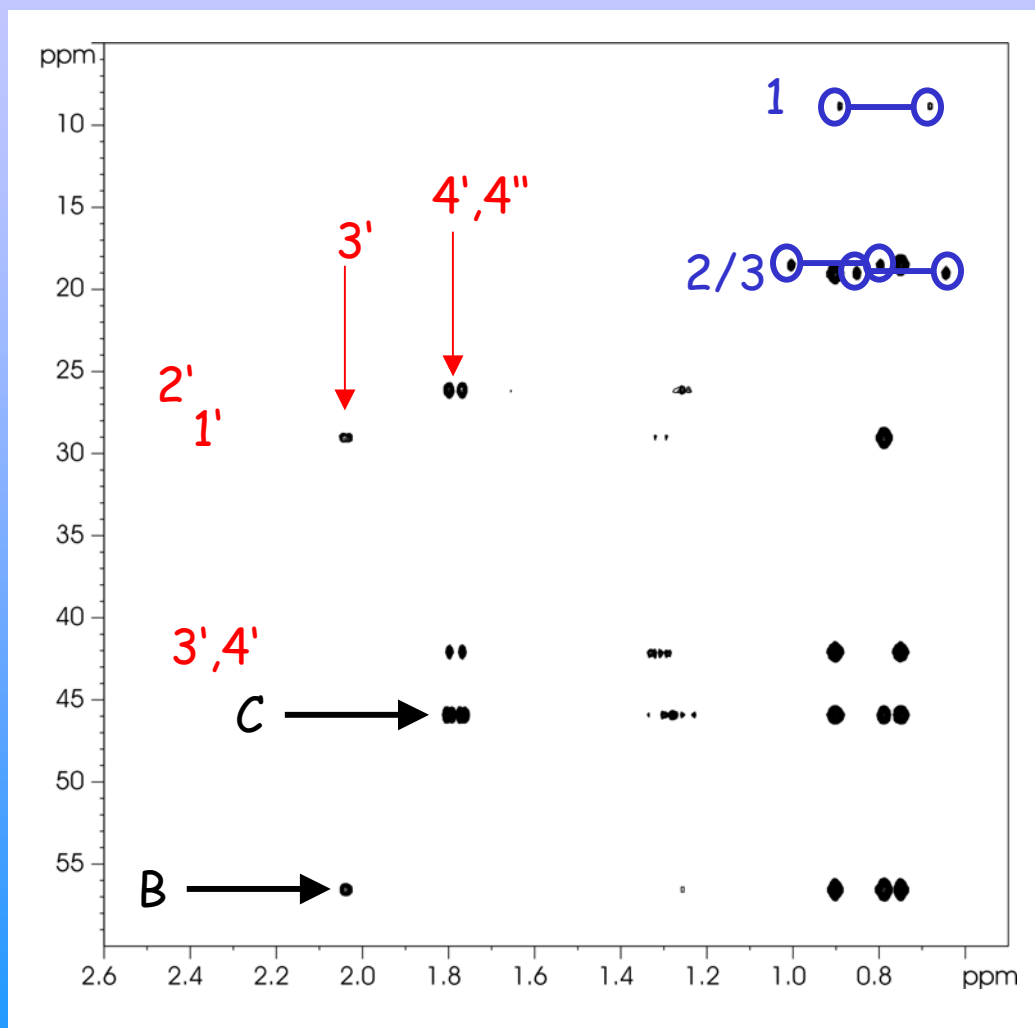
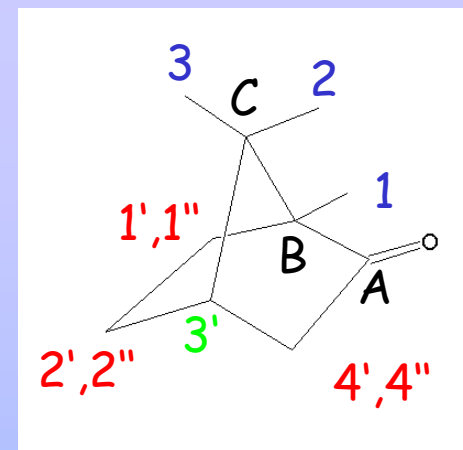
Die 3 CH_3 zeigen
Restsignale im HMBC
2/3 und 1 lassen sich
aufgrund der
Korrelationen
untereinander
unterscheiden
Man wird 2/3 nicht
diastereotop zuordnen
können

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



B und C werden sich
aufgrund der
Korrelationen der
CH₃ nicht
unterscheiden lassen
und das ist auch nicht
einfach

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV

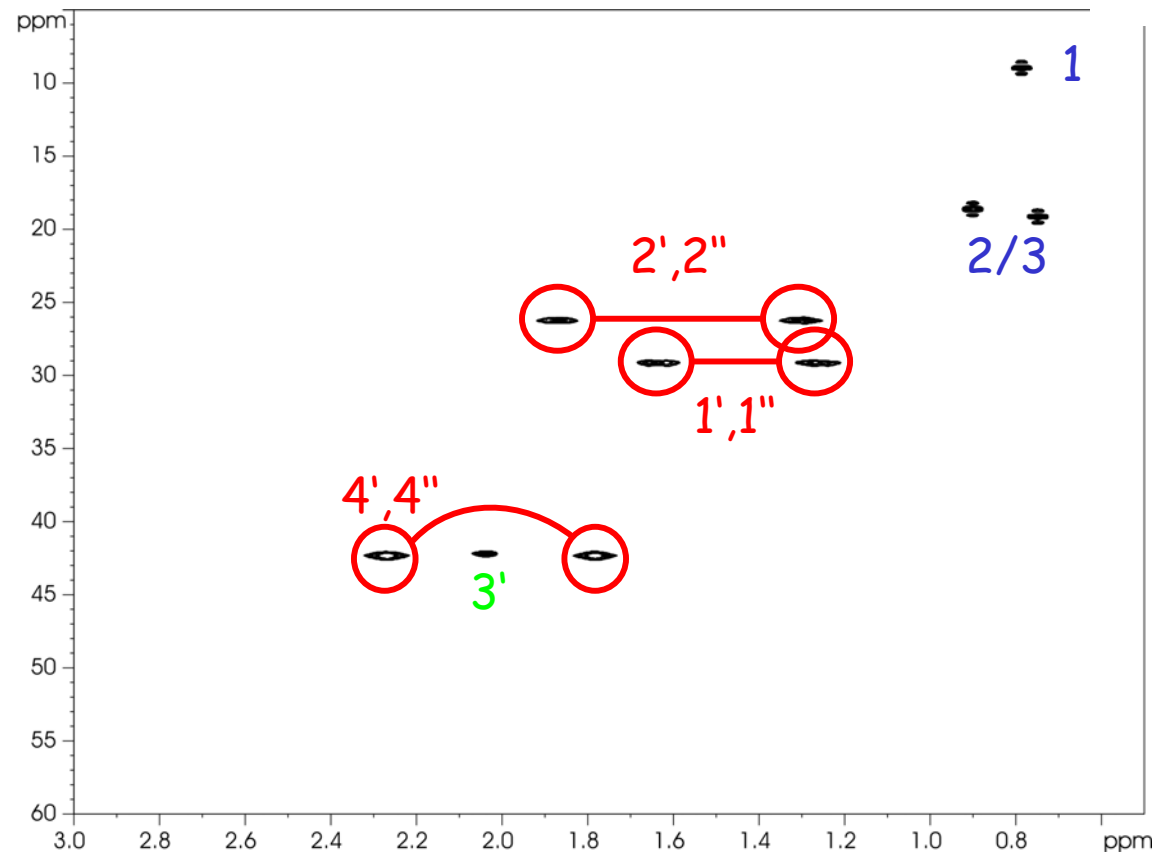
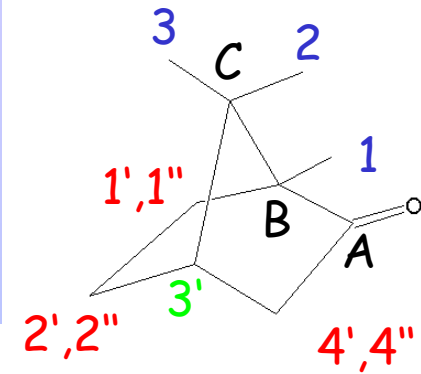


Da ${}^3J > {}^2J$ wird $3'$ eher zu B und $1'$ ein Kopplung zeigen.

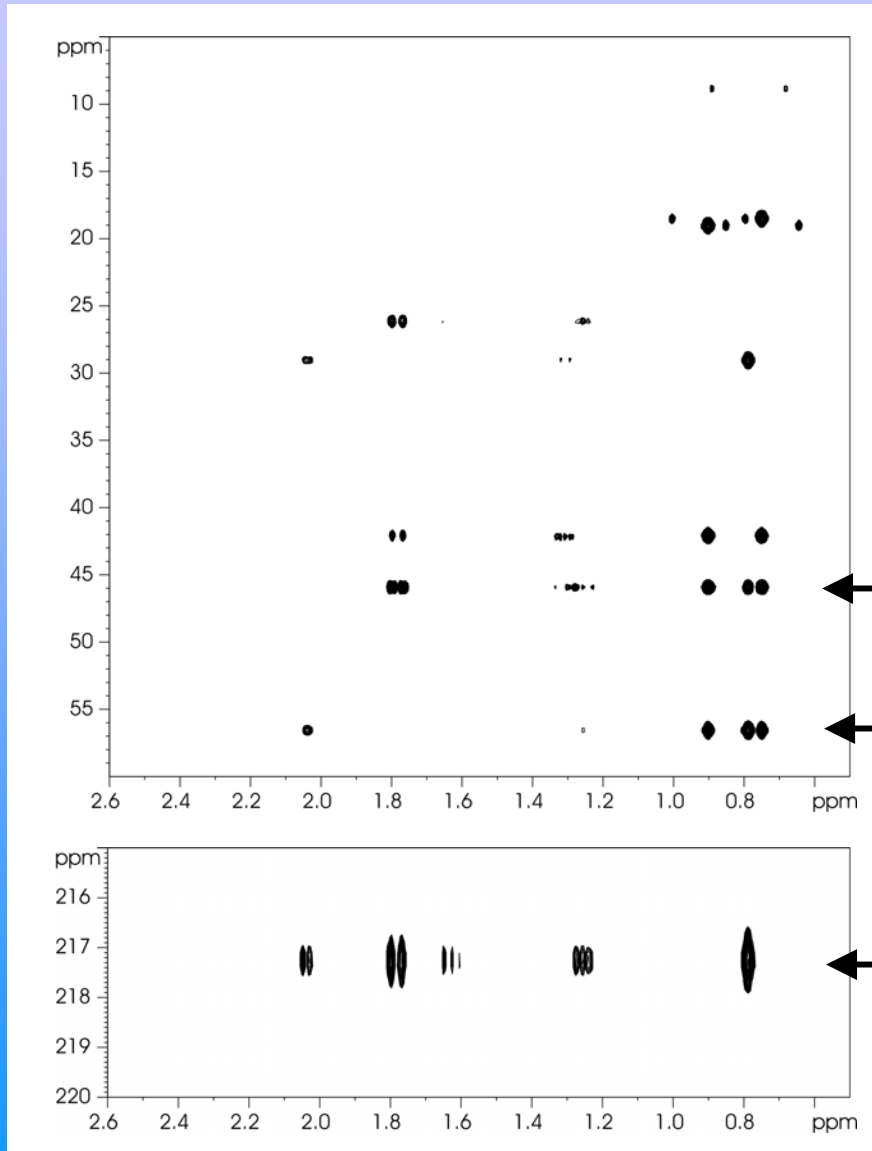
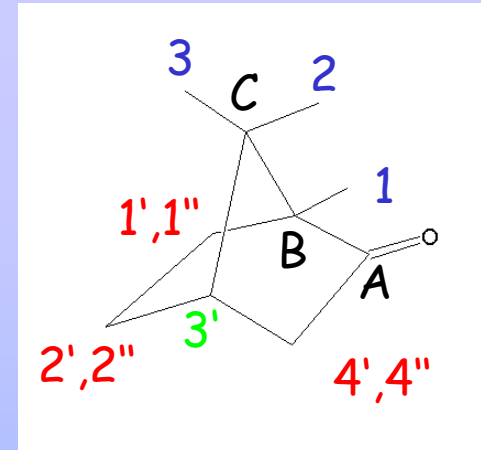
Das Proton von $4'/4''$ das keine Kopplung zu $3'$ zeigt zeigt dann wohl eine zu C und $2'$

„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV

Am Ende ergibt sich



„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“
Lösungen zu Übung IV



für die quartären
ergibt sich diese
Zuordnung