

Inhalt

1.	Einleitung	9
1.1.	Grundlagen der NMR-Spektroskopie	9
1.1.1.	Magnetische Eigenschaften von Atomkernen	9
1.1.2.	Verhalten der Atomkerne im Magnetfeld	10
1.1.3.	Die Resonanzbedingung	13
1.1.4.	Relaxationsvorgänge	14
1.1.5.	Das Meßprinzip	16
1.2.	Besonderheiten der ^{13}C -NMR-Spektroskopie	18
2.	Apparative und methodische Grundlagen der ^{13}C -NMR-Spektroskopie	19
2.1.	Allgemeine Methoden zur Empfindlichkeitssteigerung	19
2.1.1.	Erhöhung der Konzentration der Meßprobe	19
2.1.2.	Isotopenanreicherung	20
2.1.3.	Verwendung supraleitender Magnete	20
2.1.4.	Spektrenakkumulation	21
2.2.	FOURIER-Transform-Spektroskopie	21
2.2.1.	Vergleich von CW-Technik und Puls-FOURIER-Transform-Technik	21
2.2.2.	Klassische Deutung des Absorptionsvorganges	24
2.2.3.	Der Abfall der freien Induktion	27
2.3.	Protonen-Rauschentkopplung und KERN-OVERHAUSER-Effekt	30
2.4.	Signalzuordnungen	33
2.4.1.	„off-resonance“-Entkopplung	33
2.4.2.	Selektive Protonenentkopplung	36
2.4.3.	Signalzuordnungen durch Isotopenmarkierung	37
2.4.4.	Verschiebungsreagenzien	38
2.4.5.	Spin-Gitter-Relaxation	42
3.	Parameter der ^{13}C -NMR-Spektroskopie	45
3.1.	Die ^{13}C -chemische Verschiebung	49

3.1.1.	Theoretische Aspekte der Abschirmung von ^{13}C -Kernen	49
3.1.2.	Halbempirische Zusammenhänge von ^{13}C -chemischer Verschiebung und Molekülstruktur.	54
3.1.2.1.	Einfluß der Hybridisierung	54
3.1.2.2.	Einfluß elektronischer Effekte	55
3.1.2.3.	Einfluß sterischer Effekte	57
3.1.3.	Charakteristische ^{13}C -chemische Verschiebungen in organischen Verbindungen	60
3.1.3.1.	Alkane	60
3.1.3.2.	Cycloalkane und Heteracycloalkane	65
3.1.3.3.	Alkene.	77
3.1.3.4.	Alkine	85
3.1.3.5.	Aromaten und Heteroaromaten	88
3.1.3.6.	Funktionelle Gruppen organischer Verbindungen	113
3.1.3.6.1.	Carbonylgruppen	114
3.1.3.6.2.	Thiocarbonylgruppen	129
3.1.3.6.3.	Nitrile und Isonitrile	131
3.1.3.6.4.	Cyanate, Isocyanate, Thiocyanate und Isothiocyanate	132
3.1.3.7.	Carbonium-Ionen	134
3.1.4.	Lösungsmittelabhängigkeit der ^{13}C -chemischen Verschiebung	137
3.2.	Kopplungen unter Einbeziehung von ^{13}C -Kernen	138
3.2.1.	Direkte ^{13}C -H-Kopplungskonstanten — $^1J_{\text{C,H}}$	139
3.2.2.	^{13}C -H-Kopplungskonstanten über zwei Bindungen — $^2J_{\text{C,H}}$	141
3.2.3.	^{13}C -H-Kopplungskonstanten über drei Bindungen — $^3J_{\text{C,H}}$	144
3.3.	Anwendungsmöglichkeiten von Spin-Gitter-Relaxationszeiten zur Strukturaufklärung	147
3.4.	Anwendung der ^{13}C -NMR-Spektroskopie zur Untersuchung dynamischer Prozesse	151
3.5.	^{13}C -NMR-Spektroskopie an Hochpolymeren	158
4.	Anhang: ^{13}C -chemische Verschiebung δ relativ zu TMS	163
5.	Literatur.	166
6.	Sachregister	173