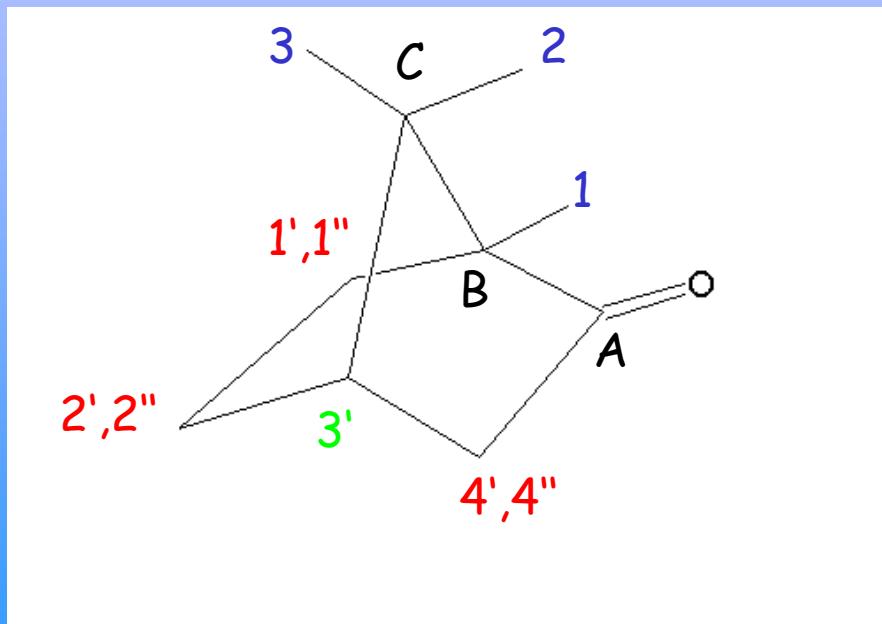


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV

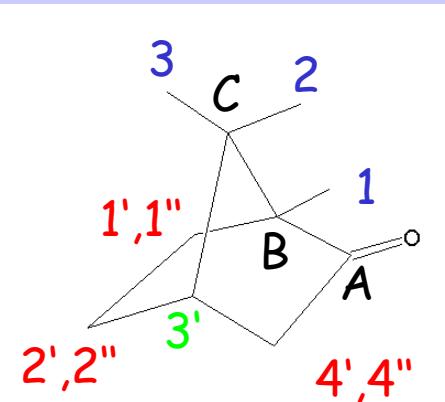
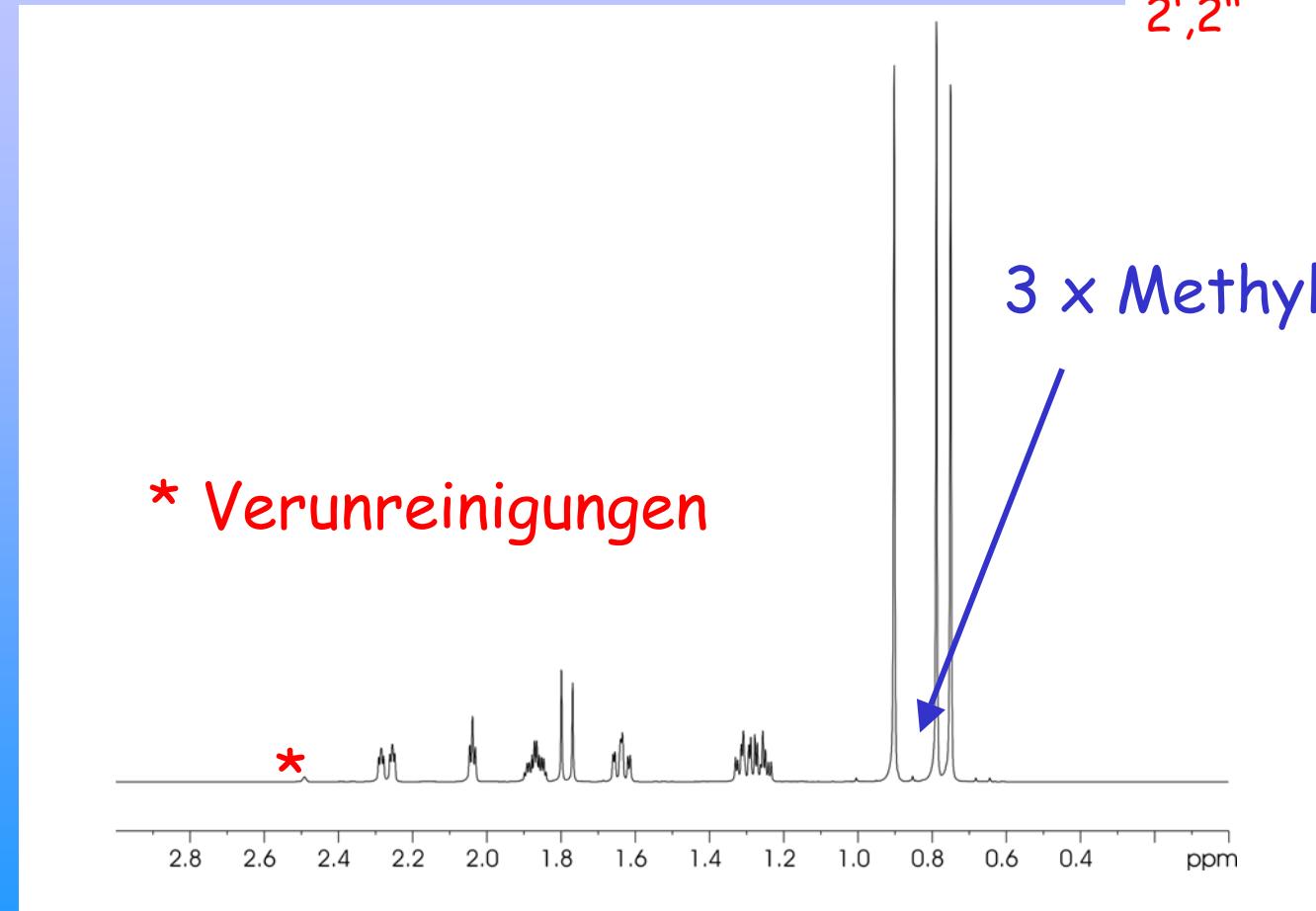
Ordnen Sie die Resonanzen von Campher  
anhand der vorgegebenen Spektren zu



3 x  $\text{CH}_3$   
3 x  $\text{CH}_2$   
(diastereotop !)  
1 x  $\text{CH}$   
3 x quartär

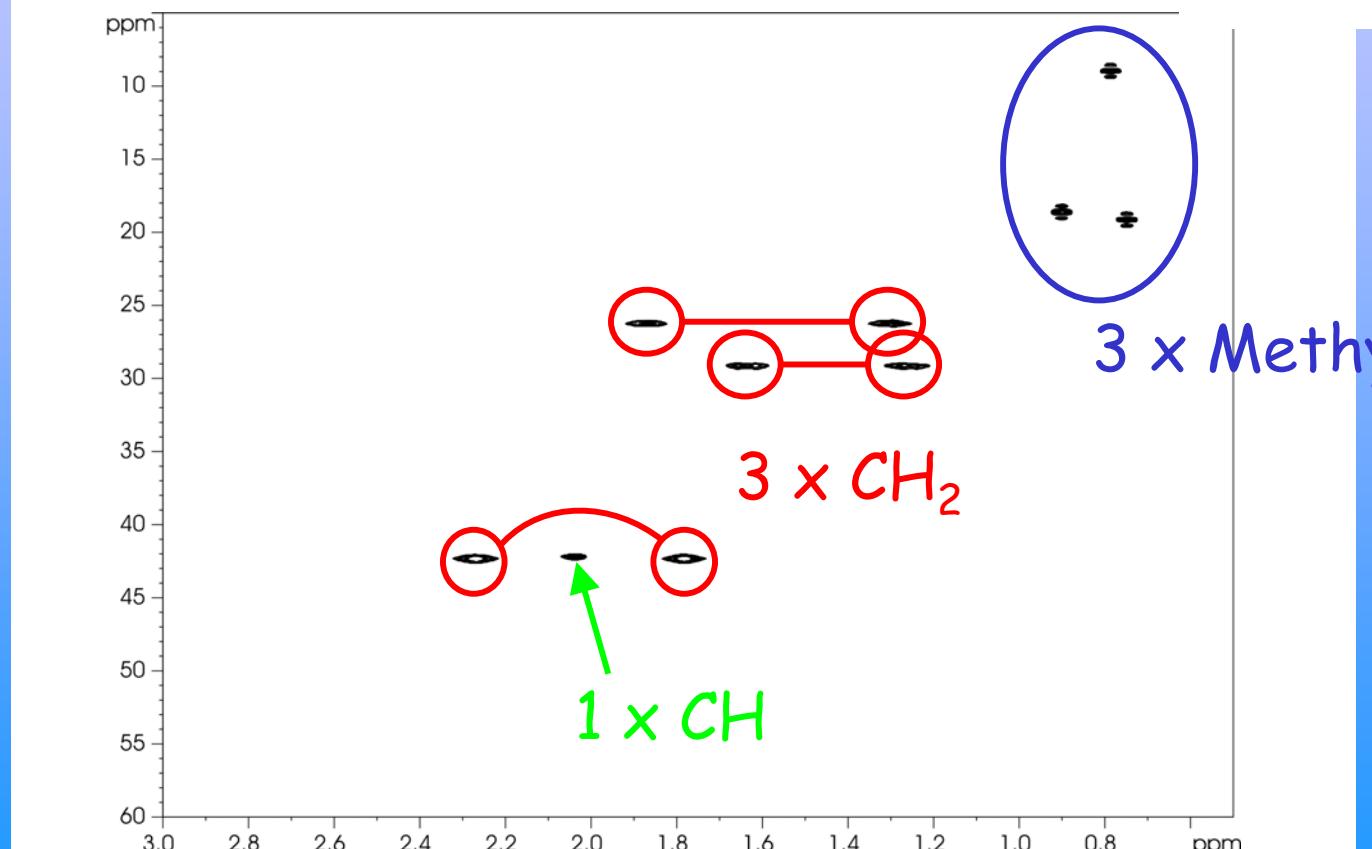
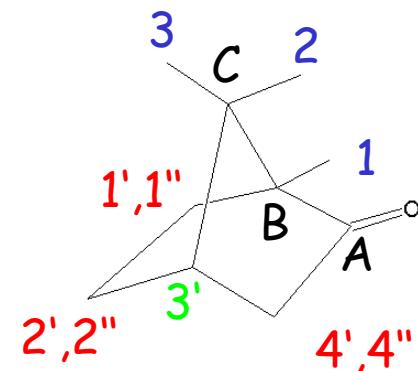
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV

(1)  $^1\text{H}$ -1D

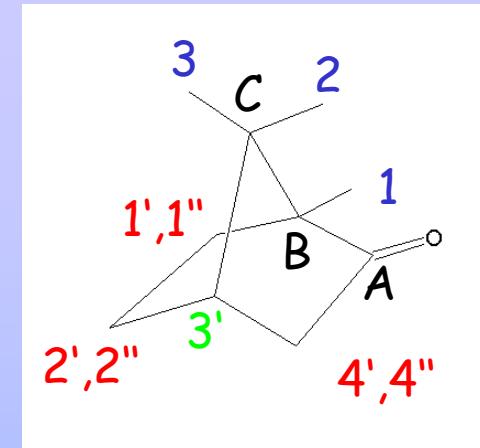
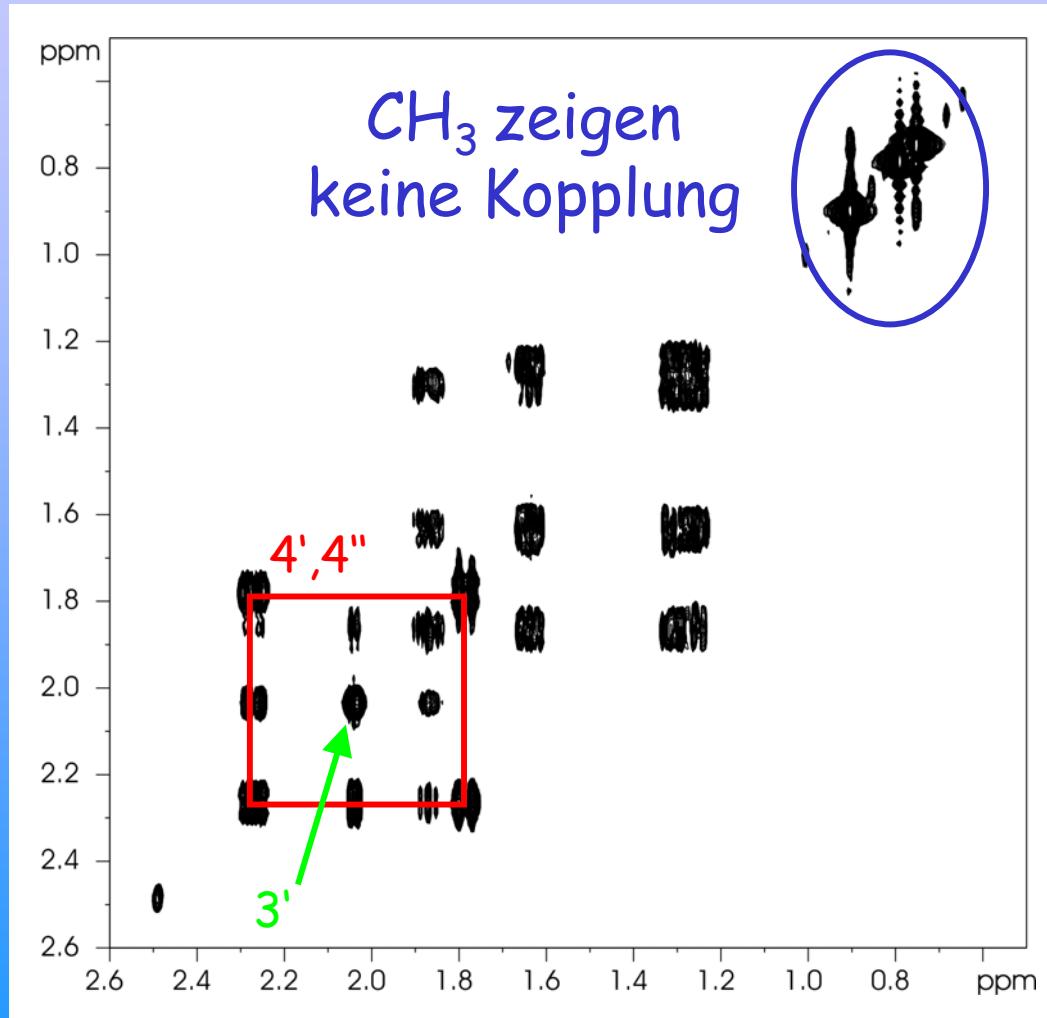


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV

(2) HMQC

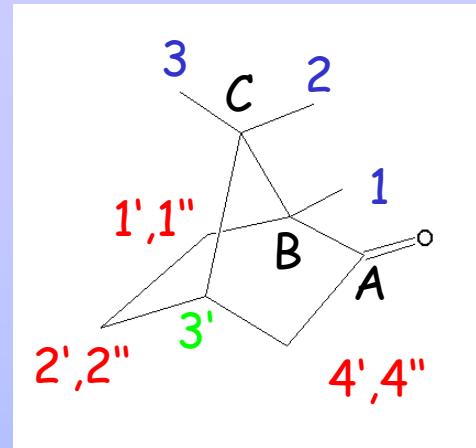
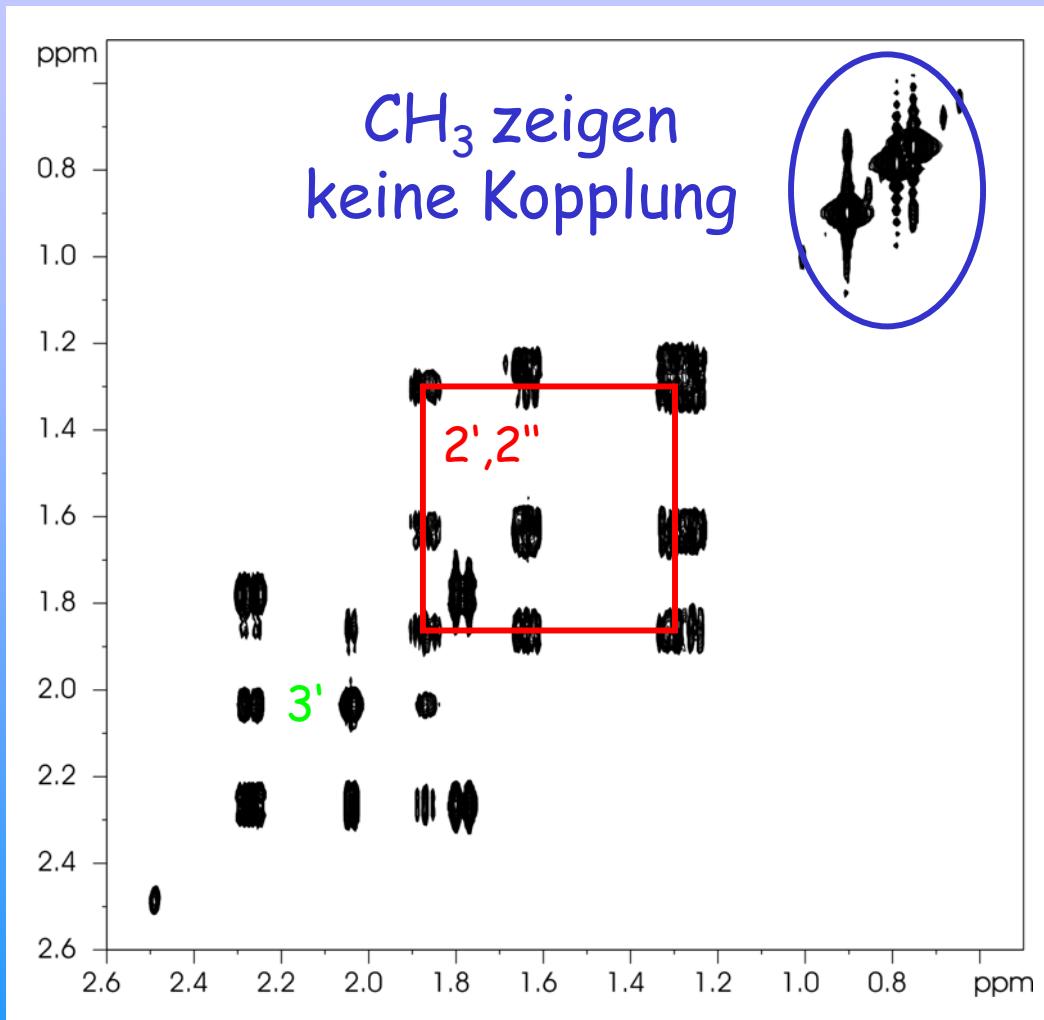


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV



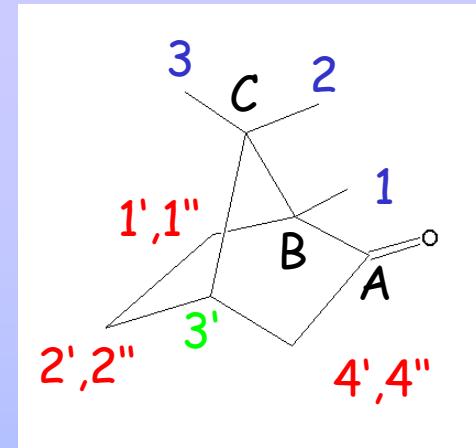
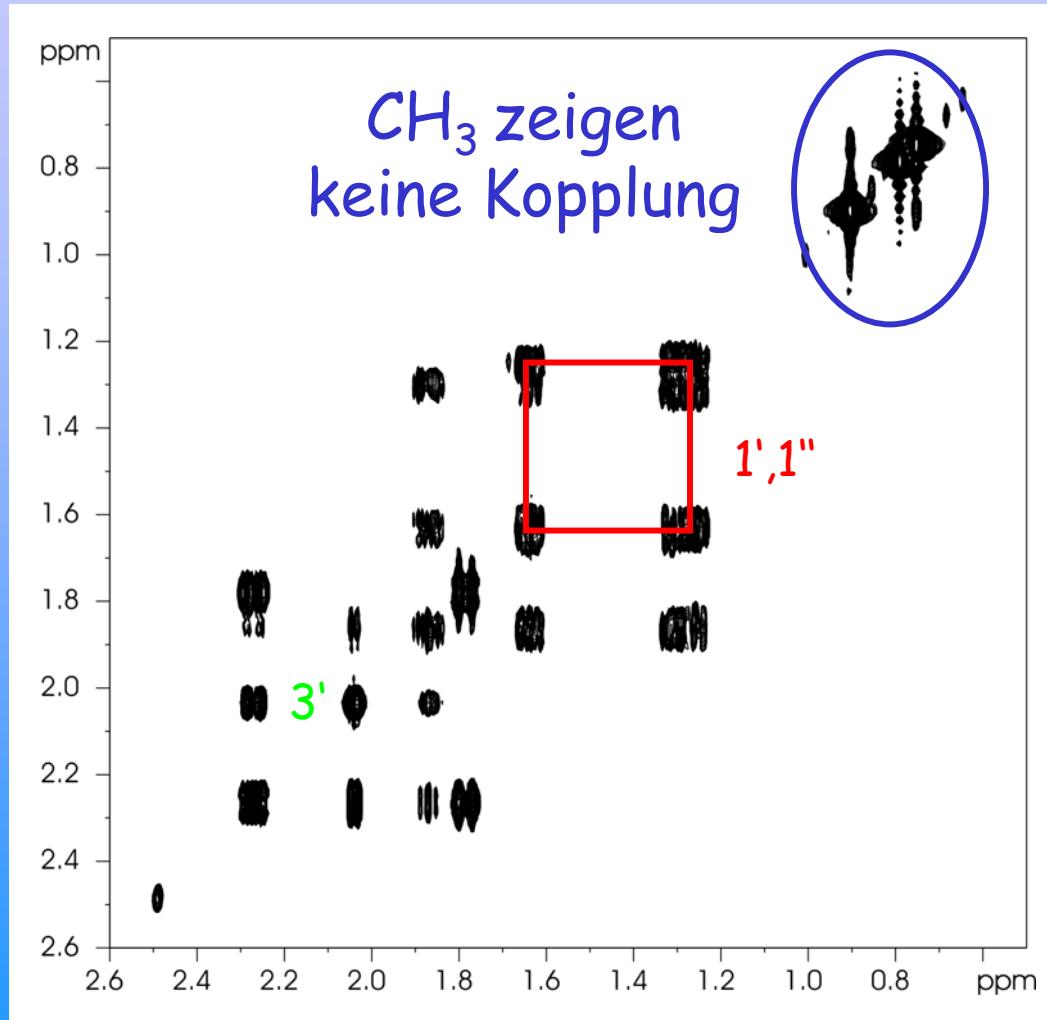
4', 4'' können  
aufgrund der  
chemischen  
Verschiebung und  
der fehlenden  
Kopplung zu  
anderen CH<sub>2</sub> und  
der Kopplung zu 3'  
zugeordnet  
werden

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



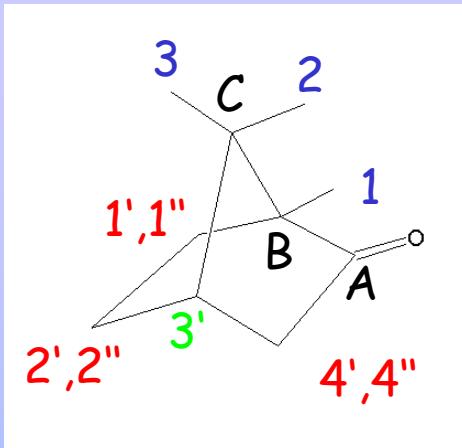
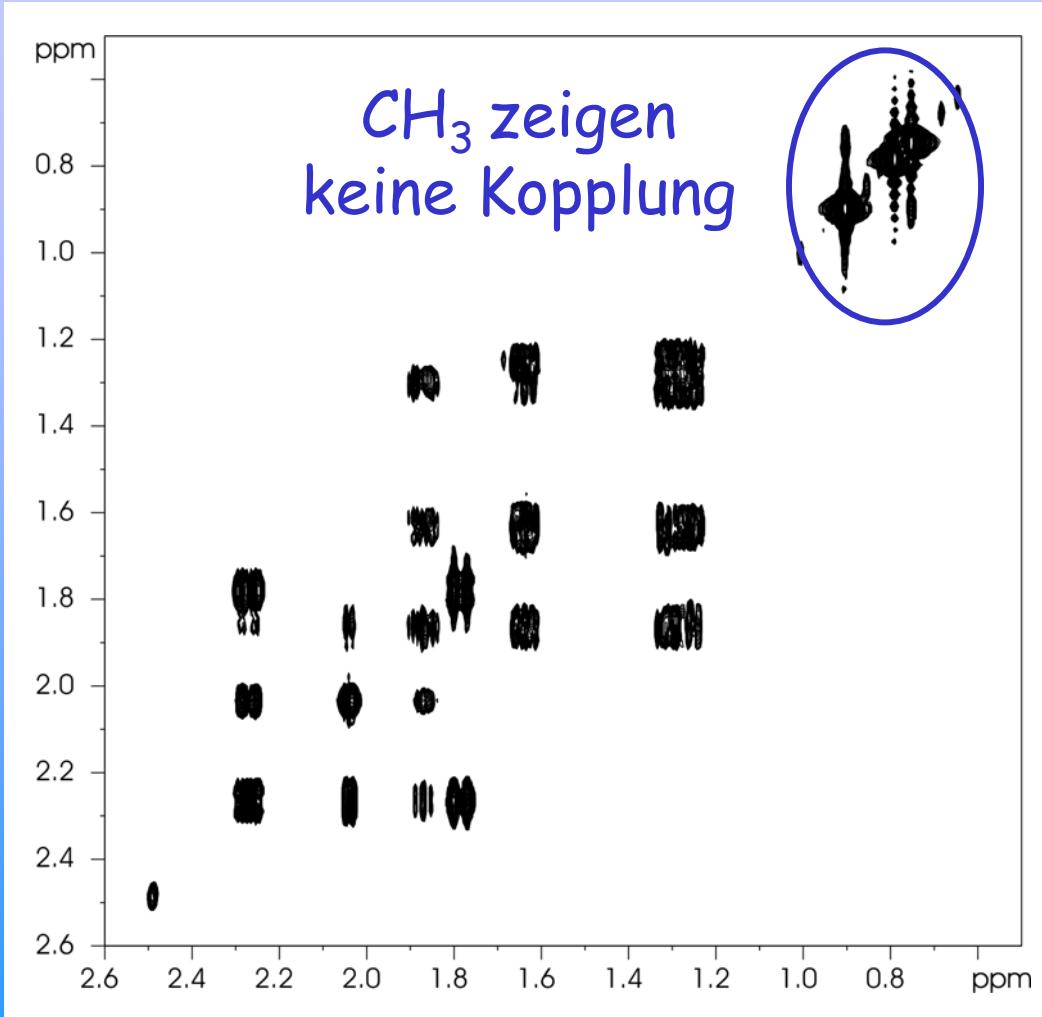
2',2" können aufgrund der chemischen Verschiebung und der Kopplung zu 3' zugeordnet werden

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

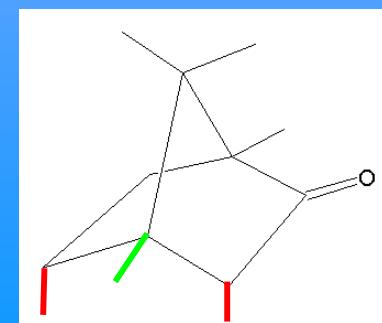


1',1'' bleiben dann  
übrig, die  
Kopplung zu 3'  
fehlt

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

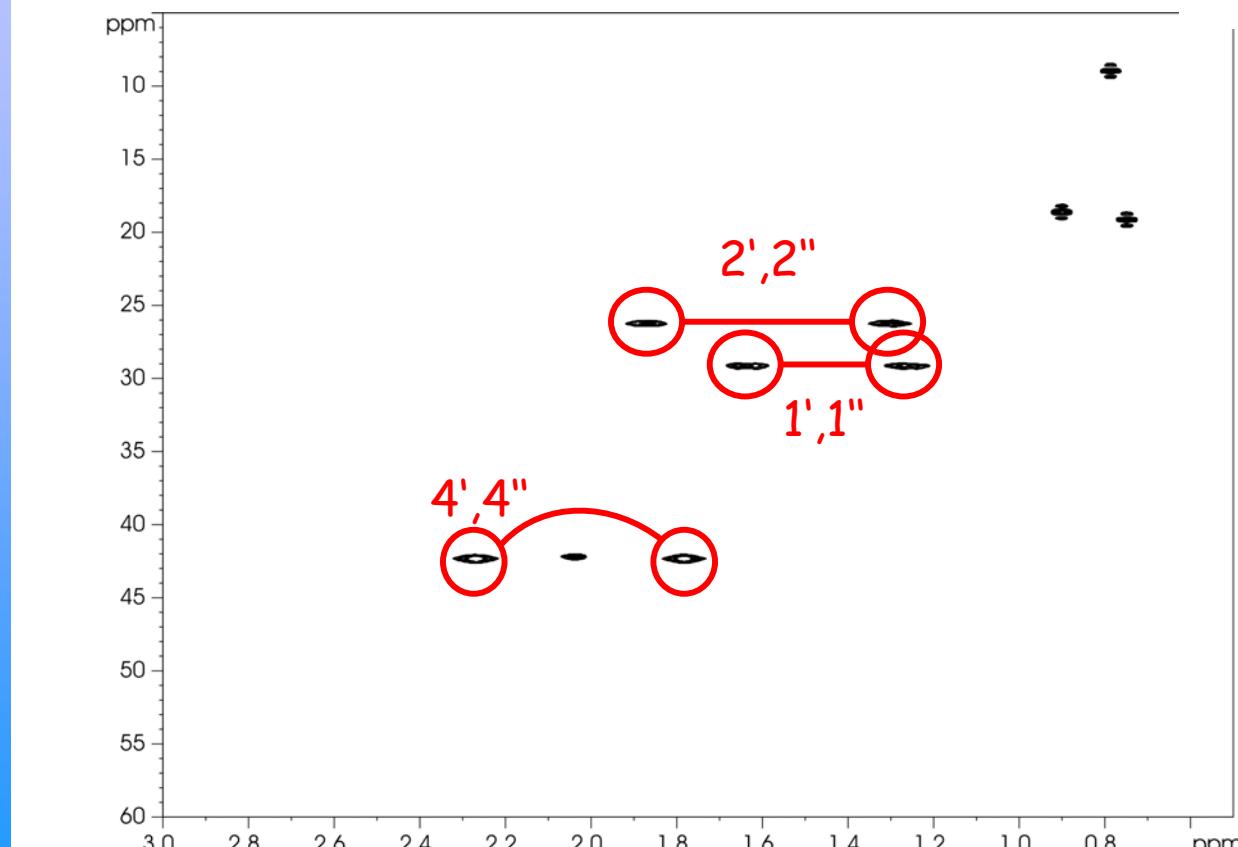
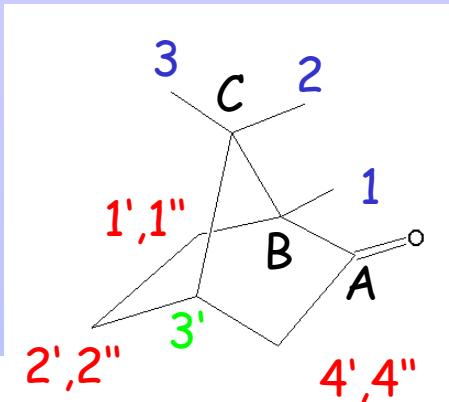


Bei 4',4'' und 2',2'' gibt es jeweils nur eine Korrelation zu 3', aufgrund der Struktur sind zwei Kopplungen sehr klein, man kann diastereotop zuordnen



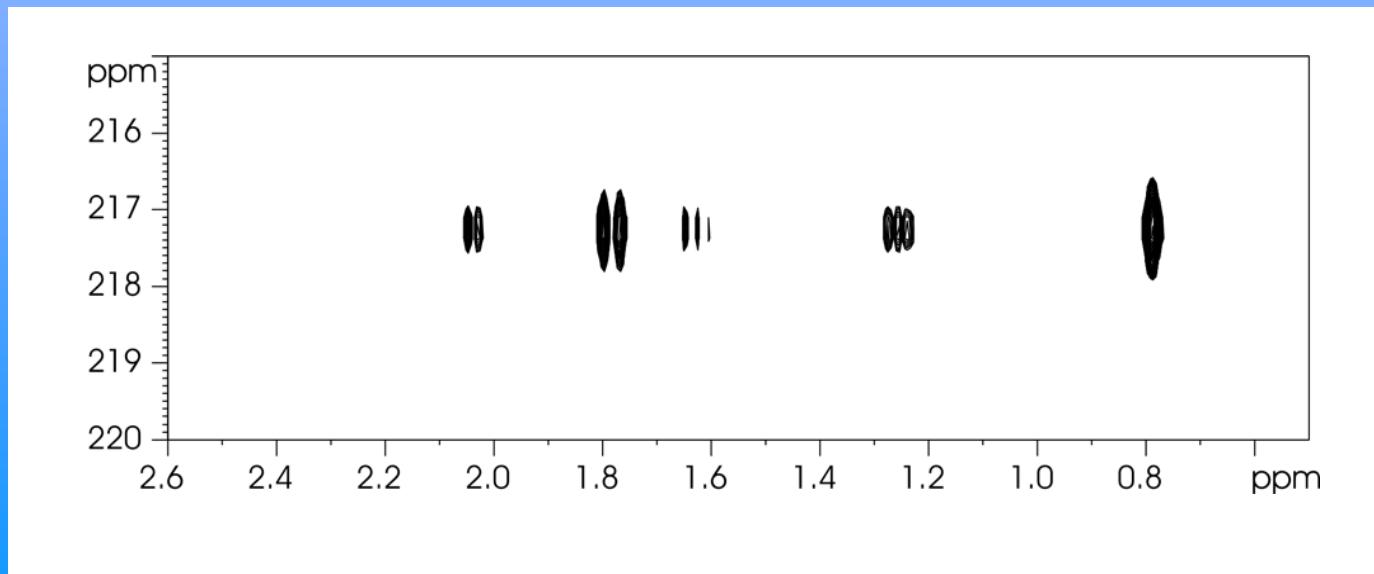
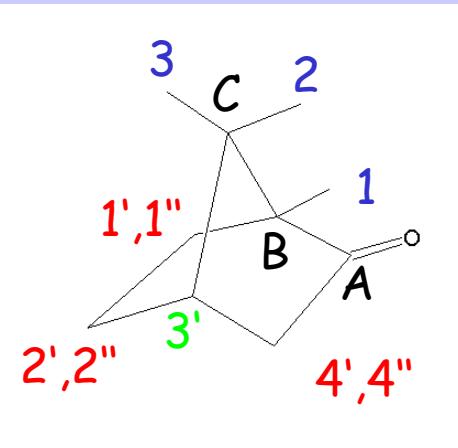
„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV

(2) HMQC

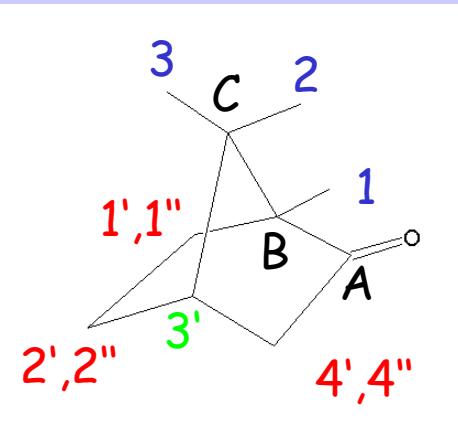
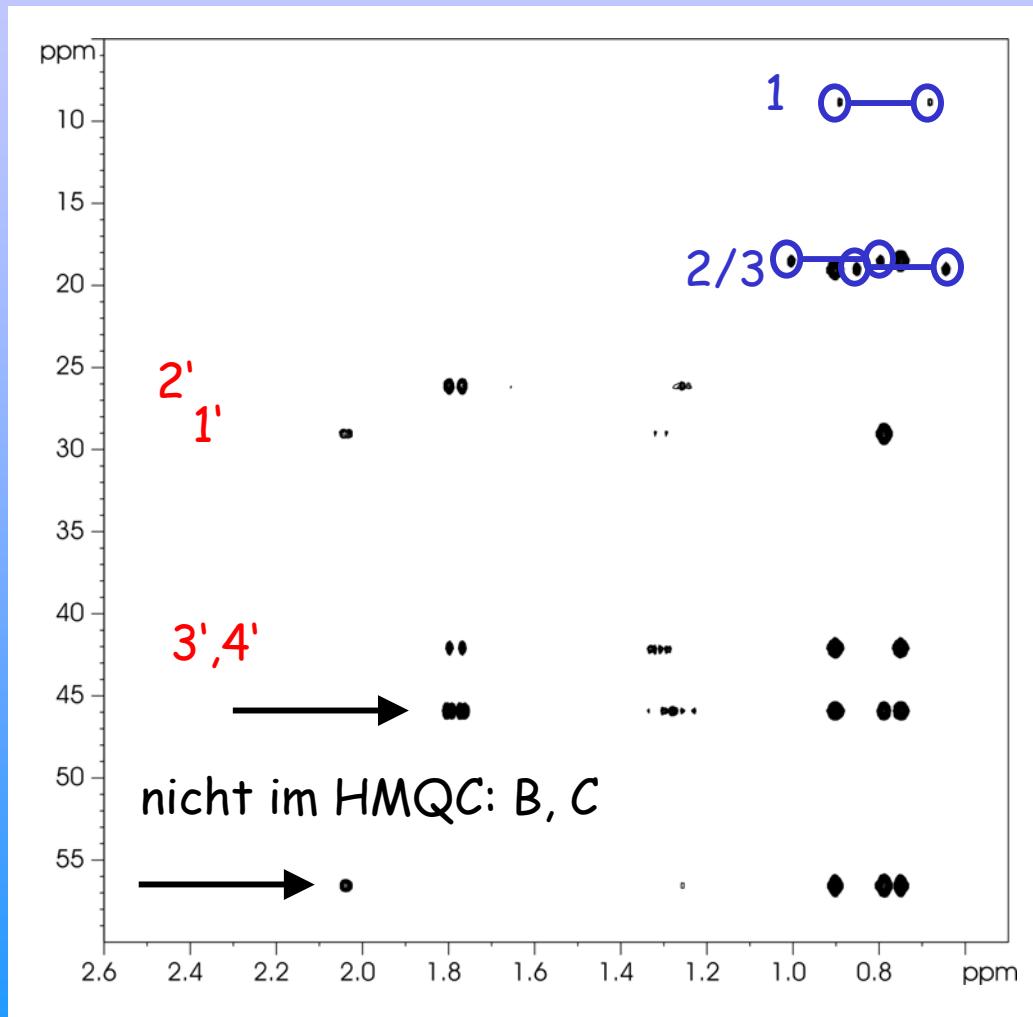


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV

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

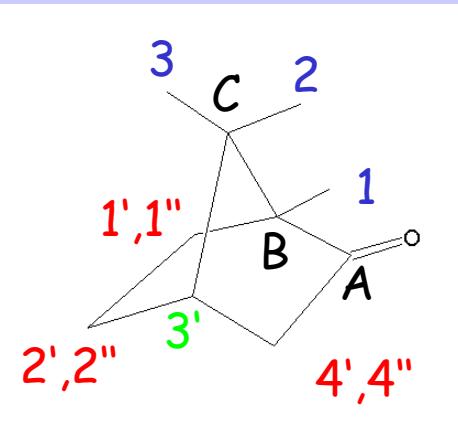
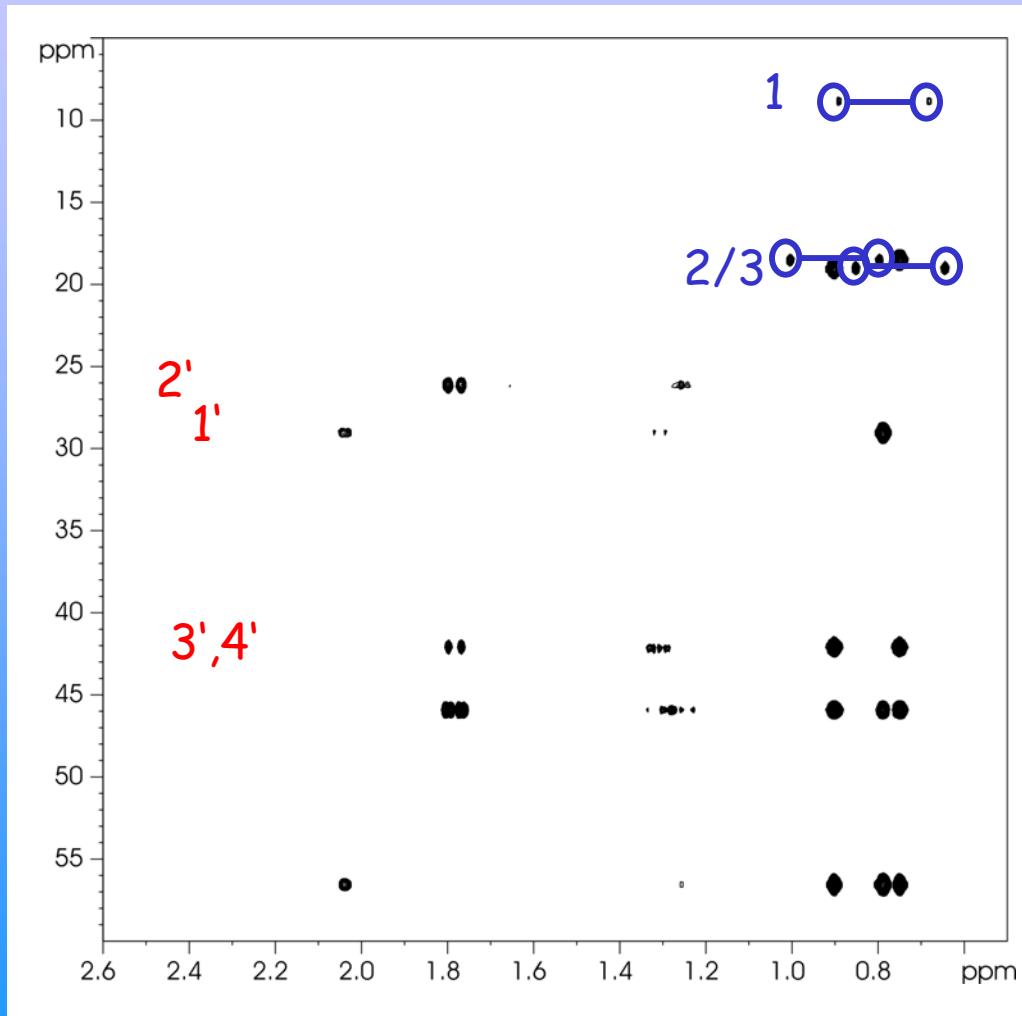


„Mehrdimensionale NMR-Spektroskopie-  
Grundlagen und Anwendungen in der Strukturaufklärung“  
Lösungen zu Übung IV



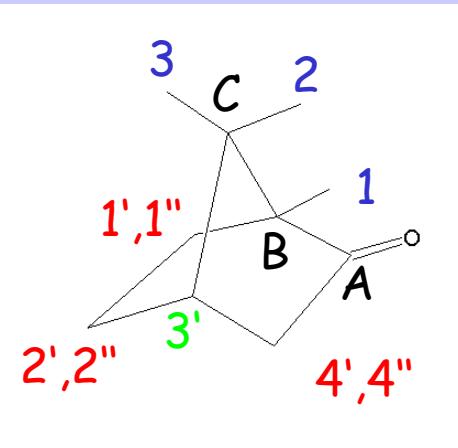
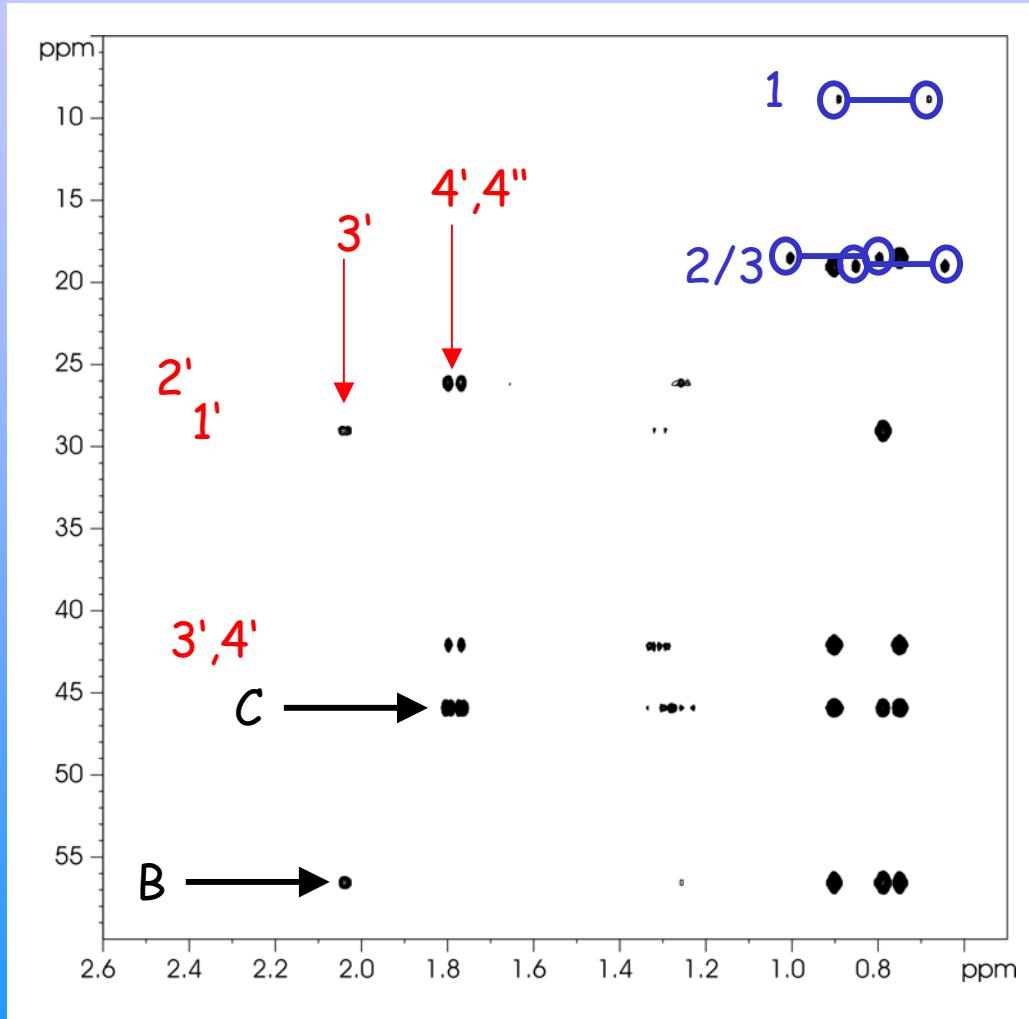
Die 3  $\text{CH}_3$  zeigen Restsignale im HMBC  
2/3 und 1 lassen sich aufgrund der Korrelationen untereinander unterscheiden  
Man wird 2/3 nicht diastereotop zuordnen können

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



B und C werden sich aufgrund der Korrelationen der  $\text{CH}_3$  nicht unterscheiden lassen und das ist auch nicht einfach

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

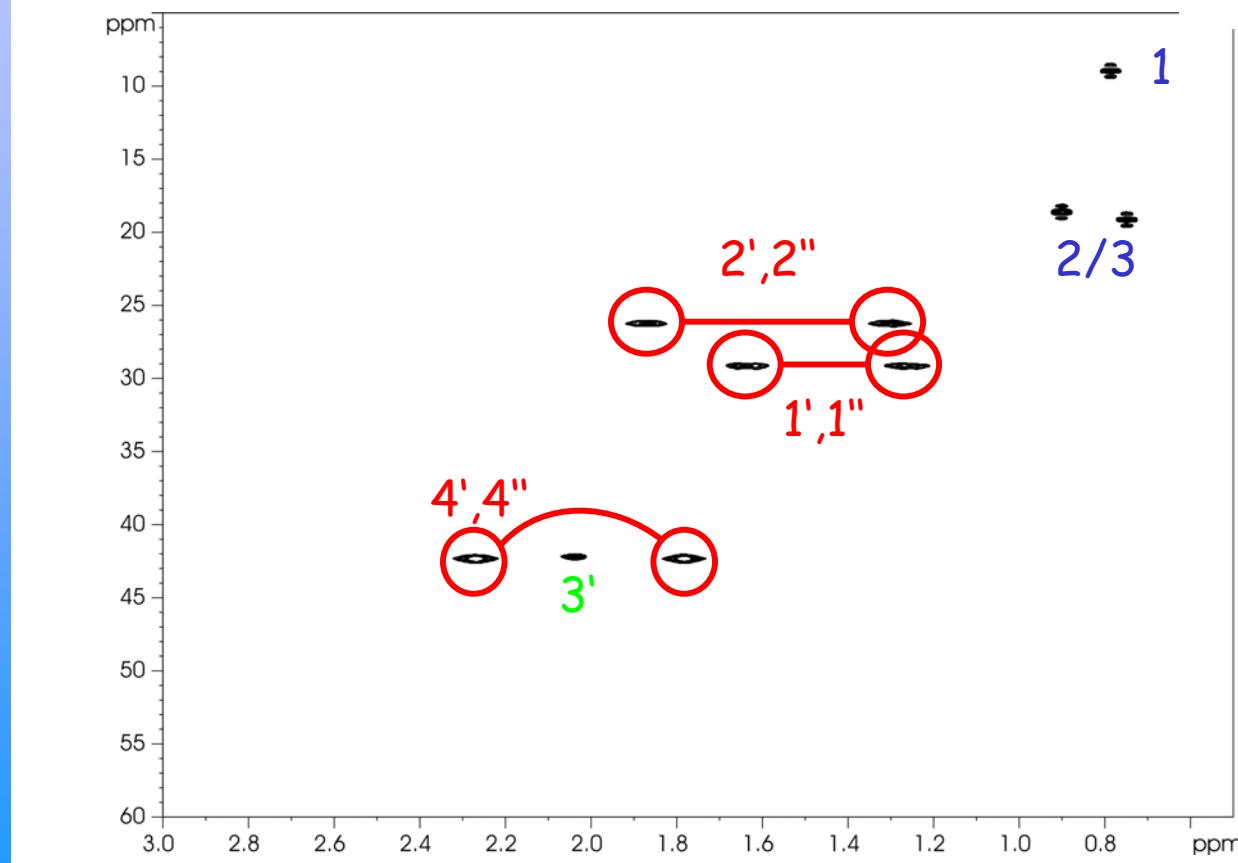
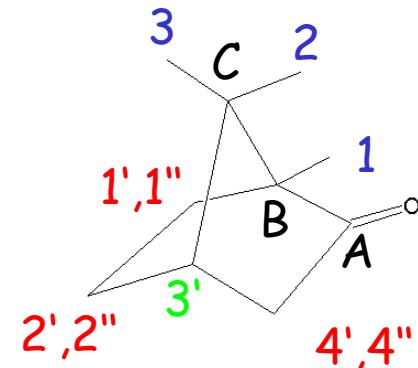


Da  ${}^3J > {}^2J$  wird  $3'$  eher zu B und  $1'$  ein Kopplung zeigen.

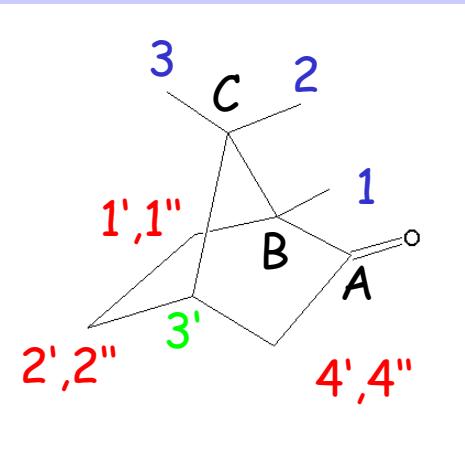
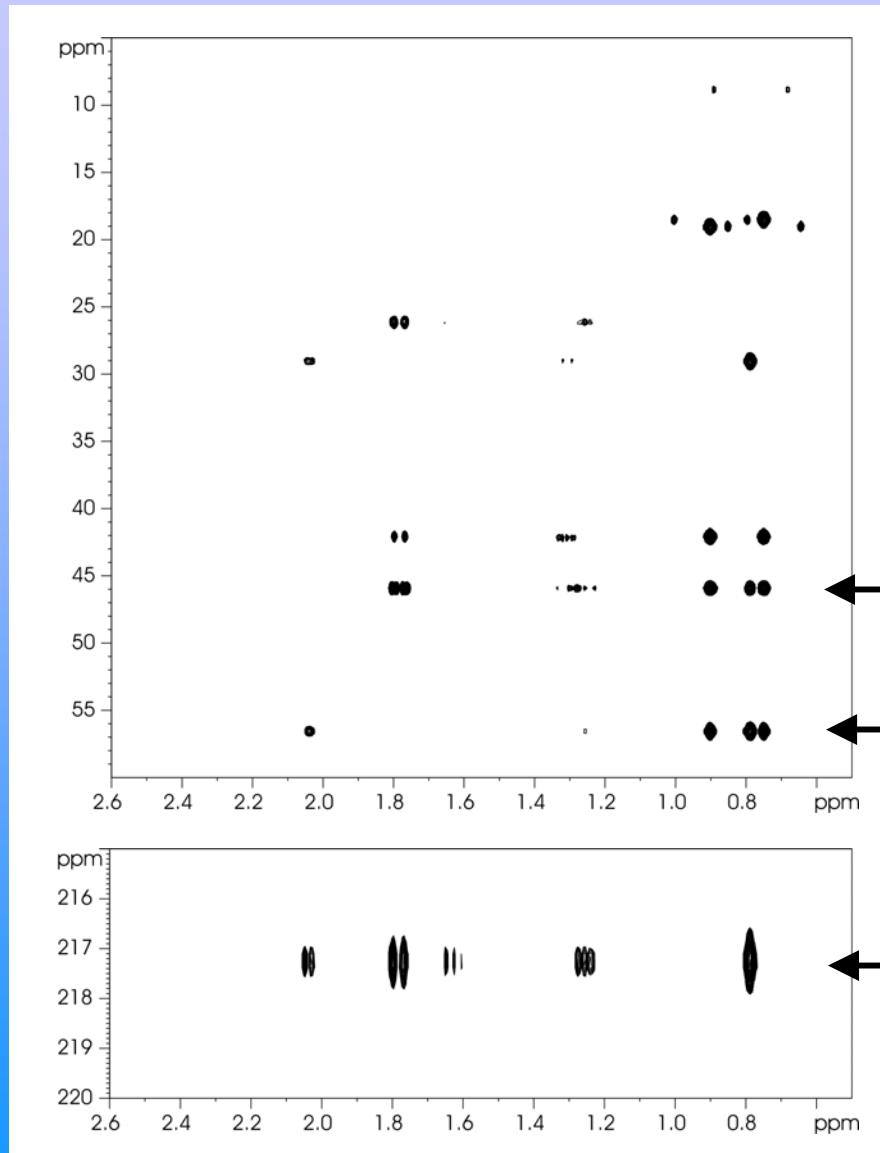
Das Proton von  $4'/4''$  das keine Kopplung zu  $3'$  zeigt zeigt dann wohl eine zu C und  $2'$

# „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