

Inhalt

Teil I

1. **Einführung in die physikalischen Grundlagen der Kernresonanzspektroskopie** (*H. Friebolin*)
 - 1.1. Grundlagen 1
 - 1.1.1. Kerndrehimpuls, magnetisches Moment 1
 - 1.1.2. Kerne im Magnetfeld 2
 - 1.1.3. Kernresonanzexperiment 5
 - 1.1.3.1. Resonanzbedingung 5
 - 1.1.3.2. Kernresonanzgeräte 6
 - 1.1.4. Relaxation 8
 - 1.1.4.1. Spin-Gitter-Relaxation 9
 - 1.1.4.2. Spin-Spin-Relaxation 9
 - 1.1.4.3. Sättigung 10
 - 1.2. Chemische Verschiebung 10
 - 1.3. Indirekte Spin-Spin-Kopplung 15
 - 1.4. Intensität der Resonanzsignale 21
 - 1.5. Linienbreite der Resonanzsignale 21
 - 1.6. Aufnahmetechnik 23
 - 1.7. Doppelresonanzexperimente 24
 - 1.7.1. Spin-Entkopplung 24
 - 1.7.2. Kern-Overhauser-Effekt (Nuclear Overhauser Effekt, NOE) 26
 - 1.8. Literatur zu Kapitel 1 28
2. **Chemische Verschiebung in der Protonenresonanz** (*D. Lauer*)
 - 2.1. Bereiche von δ -Werten für einzelne Protonensorten 29
 - 2.2. Ursachen der Chemischen Verschiebung 35
 - 2.3. Nichtäquivalenz und Chiralität 38
 - 2.4. Literatur zu Kapitel 2 40
3. **Kopplungskonstanten und chemische Struktur** (*H. Kessler*)
 - 3.1. Kopplungen von Protonen untereinander 41
 - 3.1.1. Klassifizierung, Strukturabhängigkeit und Vorzeichen der H–H–Kopplungskonstanten 41
 - 3.1.2. Geminale Kopplungen 42
 - 3.1.2.1. Abhängigkeit vom Bindungswinkel 42
 - 3.1.2.2. Abhängigkeit von der Elektronegativität der Substituenten 43
 - 3.1.2.3. Abhängigkeit von benachbarten π -Elektronen 43
 - 3.1.2.4. Abhängigkeit von der Ringgröße 45
 - 3.1.3. Vicinale Kopplungen 45

- 3.1.3.1. Vicinale Kopplungen aliphatischer Protonen 45
- 3.1.3.2. Vicinale Kopplungen olefinischer Protonen 52
- 3.1.4. Kopplungen aromatischer Protonen 52
- 3.1.5. Weitbereichskopplungen (long-range-Kopplungen) 52
- 3.2. Kopplungen von Protonen mit anderen Kernen 56
- 3.3. Literatur zu Kapitel 3 59

- 4. **Auswertung von Protonenresonanzspektren (H. G. Schmid)**
 - 4.1. Einführung 61
 - 4.2. Nomenklatur zur Kennzeichnung der Spektren 63
 - 4.2.1. Definition der chemischen Äquivalenz 63
 - 4.2.2. Definition der magnetischen Äquivalenz 66
 - 4.2.3. Kennzeichnung der Spektren 66
 - 4.3. Das AB-Spin-System 67
 - 4.3.1. Auswertung 68
 - 4.3.2. Beispiel eines AB-Spektrums 69
 - 4.4. Das AB_2 -Spin-System 70
 - 4.4.1. Auswertung 71
 - 4.4.2. Beispiel eines AB_2 -Spektrums 71
 - 4.5. Das ABX-Spin-System 71
 - 4.5.1. Auswertung 73
 - 4.5.1.1. Auswertung des AB-Teiles 73
 - 4.5.2.2. Auswertung des X-Teiles 73
 - 4.6. Das $AA'BB'$ - und A_2B_2 -bzw. A_2X_2 -Spin-System 75
 - 4.6.1. Das A_2B_2 -Spektrum 76
 - 4.6.2. Das $AA'BB'$ -Spektrum 76
 - 4.7. Andere Spektrentypen 78
 - 4.8. Literatur zu Kapitel 4 78

- 5. **Linienverbreiterung und Chemische Kinetik (A. Mannschreck)**
 - 5.1. Ursache der Linienverbreiterung 79
 - 5.2. Reversible Vorgänge 1. Ordnung 81
 - 5.3. Reversible Reaktionen höherer Ordnung 86
 - 5.4. Welche chemischen Vorgänge können Linienverbreiterungen verursachen? 87
 - 5.5. Literatur zu Kapitel 5 89

- 6. **Vereinfachung von Spektren (H. Suhr) 91**
 - 6.1. Änderung der Meßfrequenz 91
 - 6.2. Spin-Entkopplung 93
 - 6.3. Lösungsmittelleffekte 96

- 6.4. Temperatureffekte 97
- 6.5. Chemische Veränderungen der zu untersuchenden Substanz 98
- 6.6. Spezielle Methoden 100
- 6.7. Literatur zu Kapitel 6 104
- 7. **Protonenresonanzspektroskopie an Hochpolymeren (H. Friebolin)**
- 7.1. Bestimmung der Taktizität von Homopolymeren 105
- 7.2. Untersuchungen an Copolymeren 111
- 7.3. Untersuchungen zum Mechanismus der Polymerisation 112
- 7.4. Literatur zu Kapitel 7 114
- 8. **^{13}C -Resonanzspektroskopie (H. Friebolin)** 115
- 8.1. Literatur zu Kapitel 8 117

Bibliographie 119**Teil II****Übungsbeispiele**

Vorbemerkung zur Lösung der Übungsbeispiele 121

Aufgabenstellung und Spektren 134

Lösungen zu den Übungsbeispielen 179

Sachregister 205

Substanzregister 209