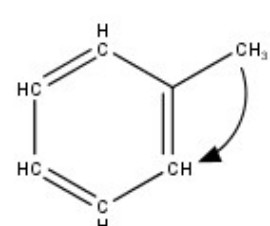
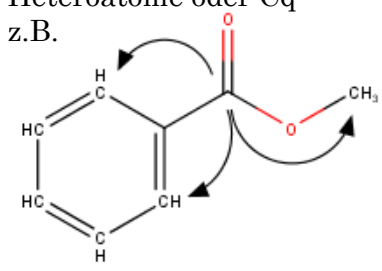


# Wichtige 2D-Experimente

## Ihre Informationen und Probleme

Experiment	qualitative Information	verarbeitete Information
HH-COSY (g-COSY, DQF-COSY)	scalare HH-Kopplungen, wer koppelt mit wem?	Molekülaufbau bei XH-XH (Kopplungsnetzwerk) mit X= C, O, N....
HH-NOESY	dipolare Kopplungen, wer ist mit wem räumlich benachbart?	zeigt räumliche Nachbarschaften von 2 bis ca. 4Å z.B. 
HSQC	$^1J_{CH}$ - Korrelationen, welcher Wasserstoff ist an welchem C (N) <u>direkt</u> gebunden?	Zusammen mit den Integralen aus dem $^1H$ -Spektrum: Multiplizitäten $CH_n$  Keine Signale und damit Identifizierung für $^1H$ , die nicht an C (N) gebunden sind!  Information $^1H$ <u>und</u> $^{13}C$ - Verschiebung ergibt Klarheit z.B. ob $CH_2$ an O, N, Cl oder Br gebunden ist
HMBC	$^nJ_{XH}$ - Korrelationen, welcher C ist über $^nJ$ (n=2,3) an H gebunden?	Zuordnung quartärer Kohlenstoffe  bei n=3 „Sprung“ über Heteroatome oder $C_q$ z.B.  Probleme: - Zweideutigkeiten ob n=2 oder 3 ?! - Artefakte durch $^1J_{CH}$ - gebundene Wasserstoffe

## Strategie bei der Zuordnung

- starten Sie mit dem  $^1\text{H}$ - und dem HSQC-Spektrum und ordnen Sie „eindeutige“ Signale in den Spektren den Strukturfragmenten im Molekül zu.  
In manchen Fällen gilt das auch für  $^{13}\text{C}$ -Signale (z.B. Carbonyle oder  $\text{O-CH}_n$  bzw.  $\text{N-CH}_n$ ).  
Nutzen Sie Ihre Vorkenntnisse (Chem. Verschiebungen, Integrale, Multiplizitäten).
- Übertragen sie alle gewonnenen Erkenntnisse anschließend immer auf alle Spektren.
- Finden Sie mit Hilfe des COSY HH-Kopplungsnetzwerke.
- Mit Hilfe des HSQC finden Sie die dann auch entsprechenden Kohlenstoffe.
- Ordnen Sie die quartären Kohlenstoffe mit Hilfe des HMBC zu.  
Das HMBC liefert mit dem COSY durchaus auch kongruente Informationen.  
Bei Überlagerungen im COSY hilf dann das HMBC weiter.