



# Kernresonanzspektroskopie

## **Zusammenfassung der wichtigsten 2D-NMR-Experimente**



# Kernresonanzspektroskopie

## **Korrelation über die chem. Bindung**

**a) homonuklear: COSY, TOCSY, INADEQUATE**

**b) heteronuklear: HSQC/HMQC, HMBC**

## **Korrelation durch den Raum**



# Kernresonanzspektroskopie

## Korrelation über die chem. Bindung

a) homonuklear: COSY, TOCSY, INADEQUATE

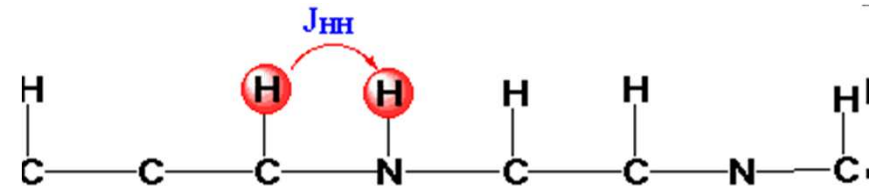
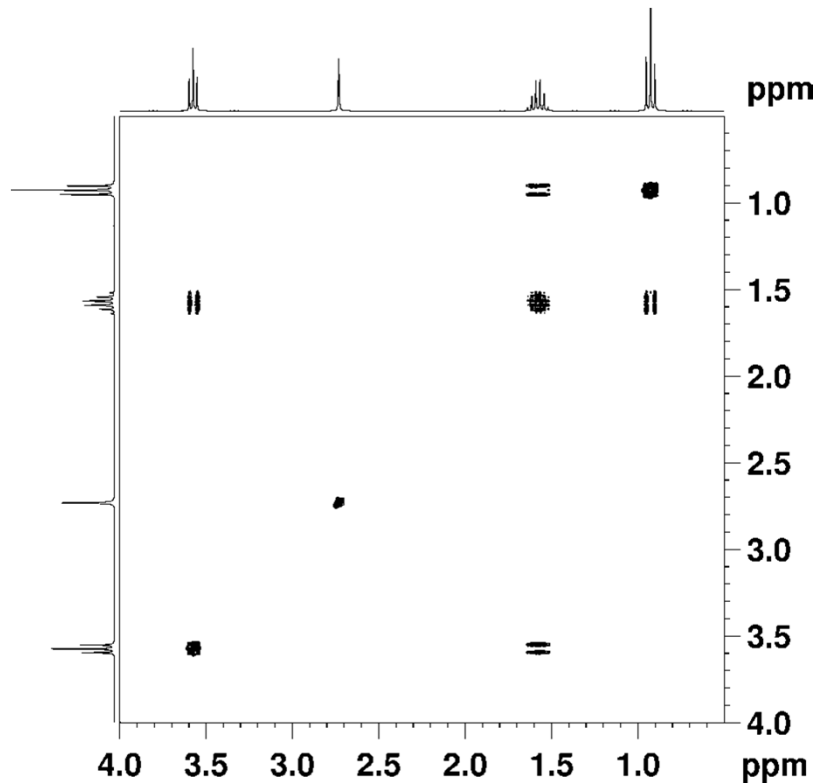
b) heteronuklear: HSQC/HMQC, HMBC

Korrelation durch den Raum



# Kernresonanzspektroskopie

## COSY (Correlation Spectroscopy)



**$^1\text{H}, ^1\text{H}$ -COSY**

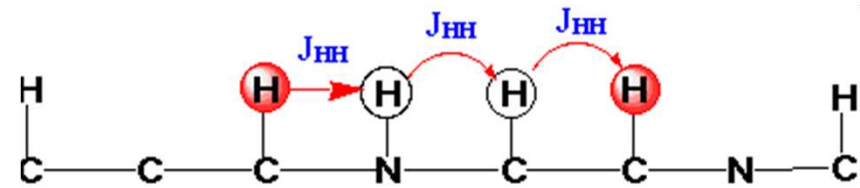
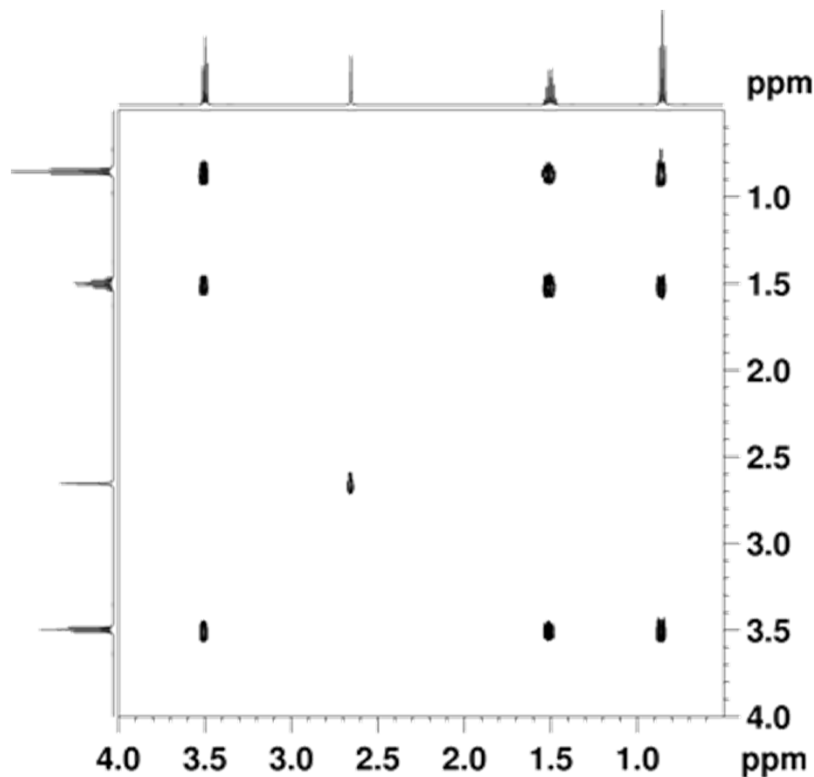
typ. J-Kopplung über 2 oder 3 Bindungen

**X,X-COSY**

bei natürl. Häufigkeit > 20%  
oder Isotopenmarkierung



## TOCSY (Total Correlation Spectroscopy)



### $^1\text{H}, ^1\text{H}$ -TOCSY

Korrelation innerhalb eines Spinsystems

### X,X-TOCSY

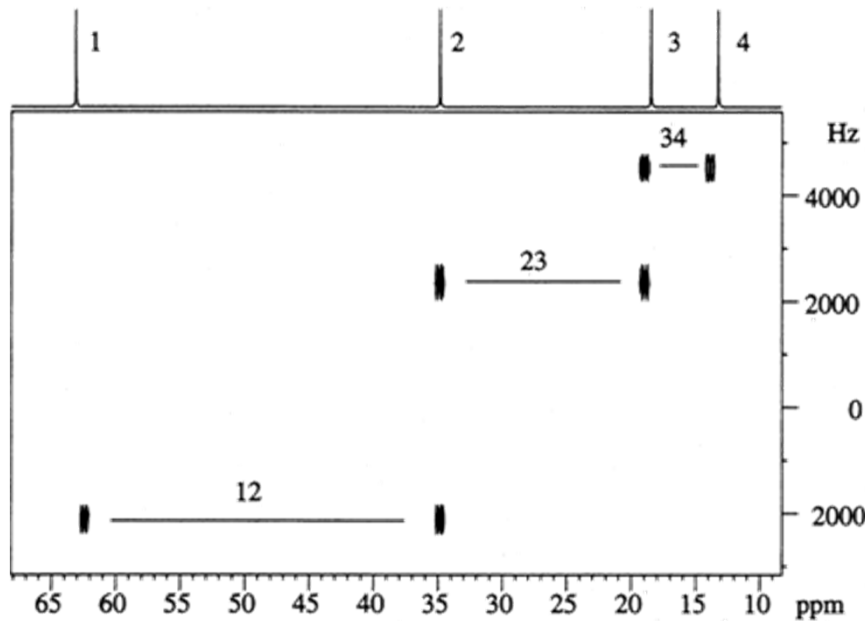
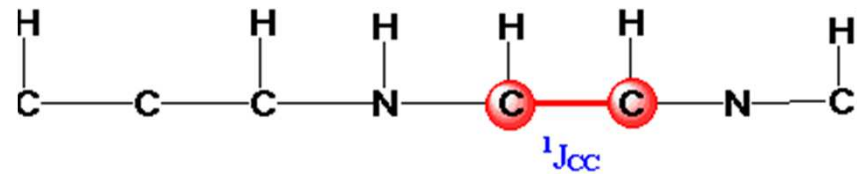
bei natürl. Häufigkeit > 20%  
oder Isotopenmarkierung



# Kernresonanzspektroskopie

## INADEQUATE

(Incredible Natural Abundance Double Quantum Transfer Experiment)



## X,X-INADEQUATE

Korrelation durch  ${}^1J(X,X)$

bei geringer natürl. Häufigkeit von X sehr viel Substanz nötig



# Kernresonanzspektroskopie

## **Korrelation über die chem. Bindung**

a) homonuklear: COSY, TOCSY, INADEQUATE

b) heteronuklear: HSQC/HMQC, HMBC

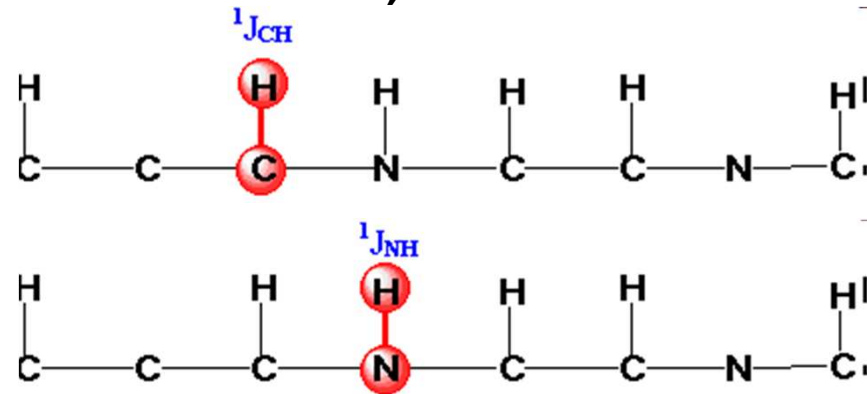
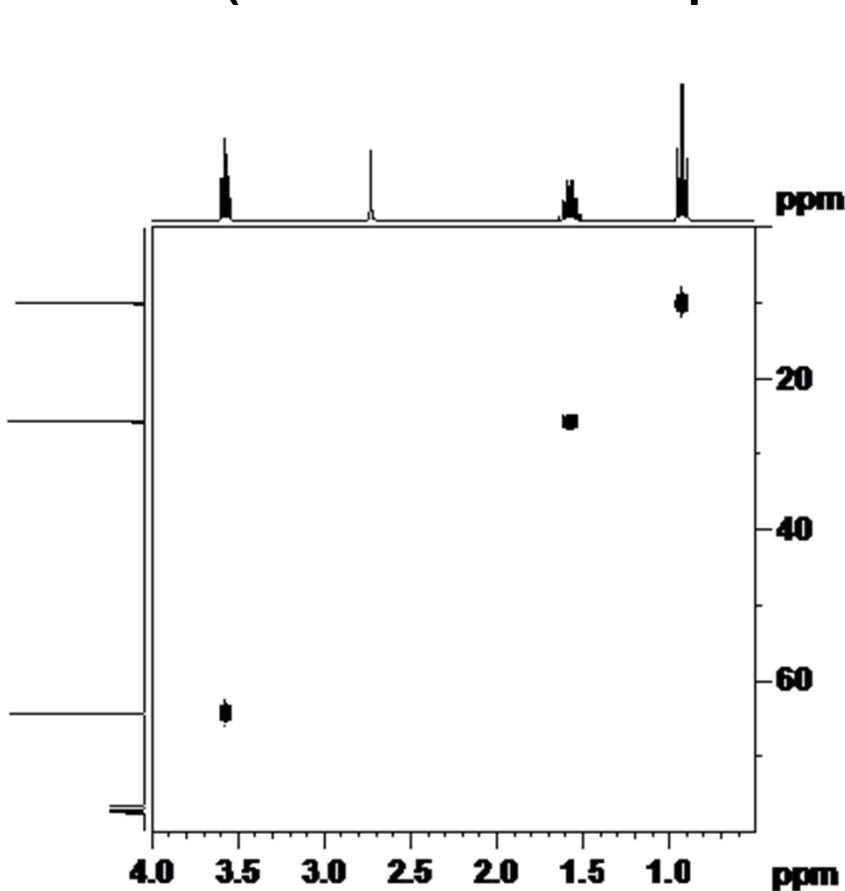
Korrelation durch den Raum



# Kernresonanzspektroskopie

**HSQC (Heteronuclear Single Quantum Correlation)**

**HMQC (Heteronuclear Multiple Quantum Correlation)**



**$^1H,X$ -HSQC/HMQC**

Korrelation durch  $^1J(H,X)$  mit Protonen-  
detektion

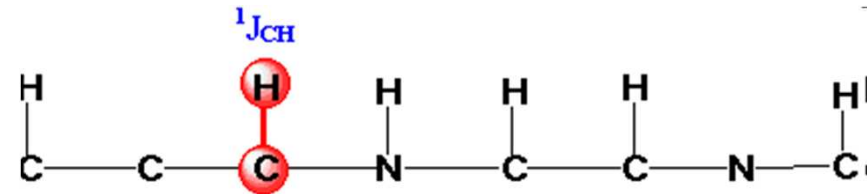
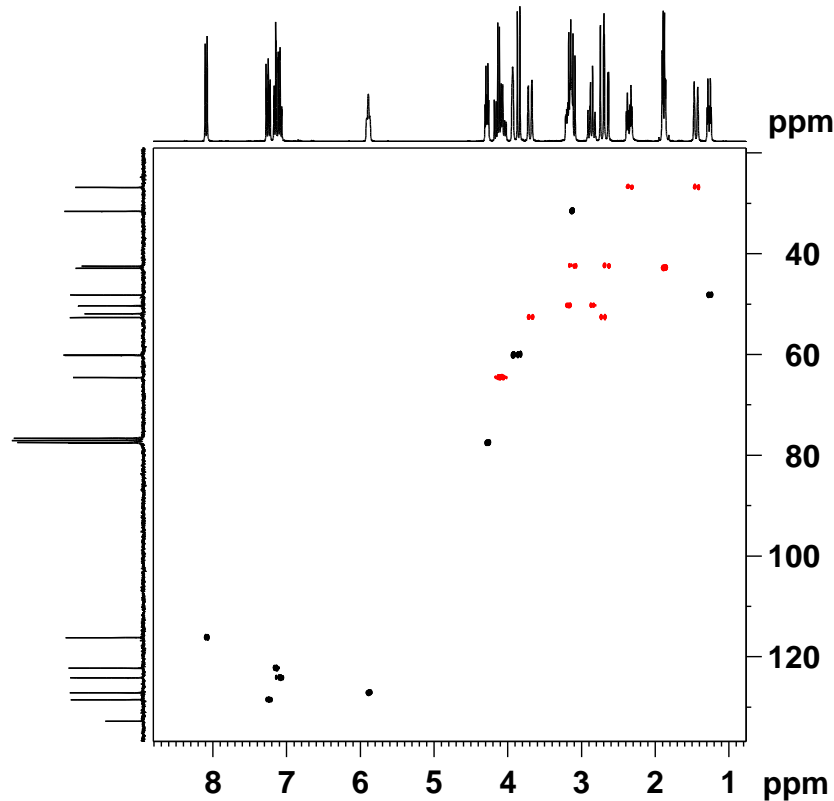
**$Y,X$ -HSQC/HMQC**

wenn Y relativ empfindlich ist, z.B.  $^{31}P$





## multizipplitäten-editiertes HSQC



### $^1\text{H}, ^{13}\text{C}$ -HSQC

Korrelation durch  $^1J(\text{H},\text{C})$  mit Protonendetektion und einfacher Ablesung der Kohlenstoff-Multizipplität anhand des Vorzeichens der Signale

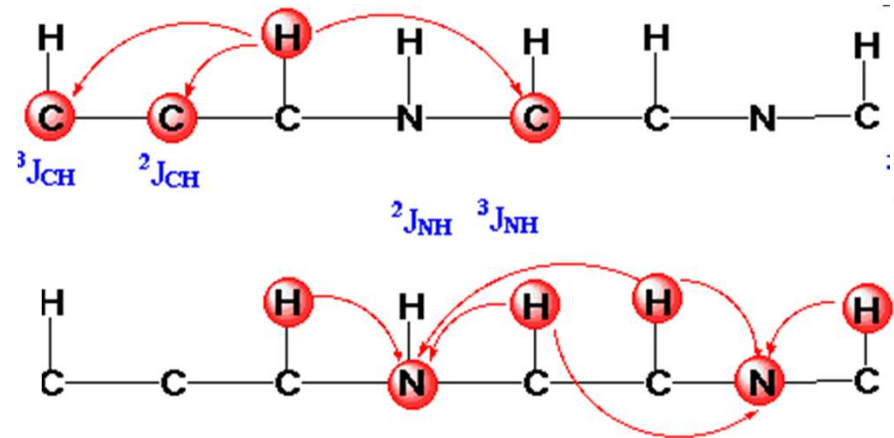
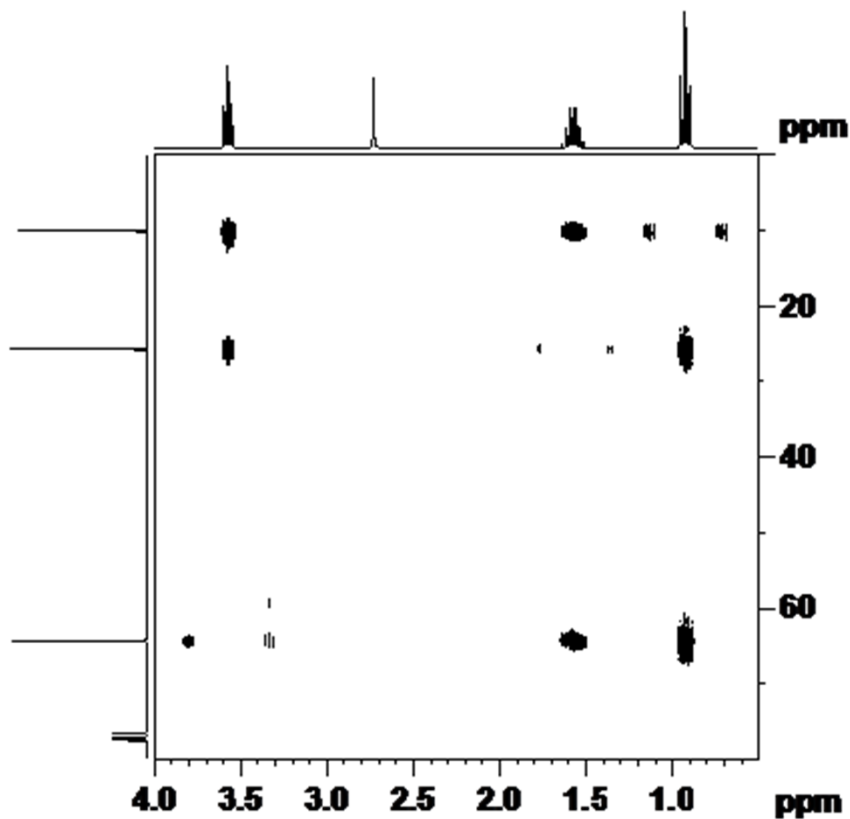
$\text{CH}, \text{CH}_3 +$

$\text{CH}_2 -$



# Kernresonanzspektroskopie

## HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation)



### $^1\text{H},\text{X}$ -HMBC

Korrelation durch  $^2\text{J}(\text{H},\text{X})$  und  $^3\text{J}(\text{H},\text{X})$  mit Protonendetektion

### $\text{Y},\text{X}$ -HMBC

wenn Y relativ empfindlich ist, z.B.  $^{31}\text{P}$



# Kernresonanzspektroskopie

## Korrelation über die chem. Bindung

a) homonuklear: COSY, TOCSY, INADEQUATE

b) heteronuklear: HSQC/HMQC, HMBC

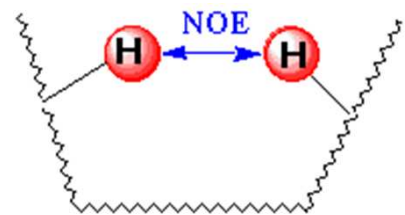
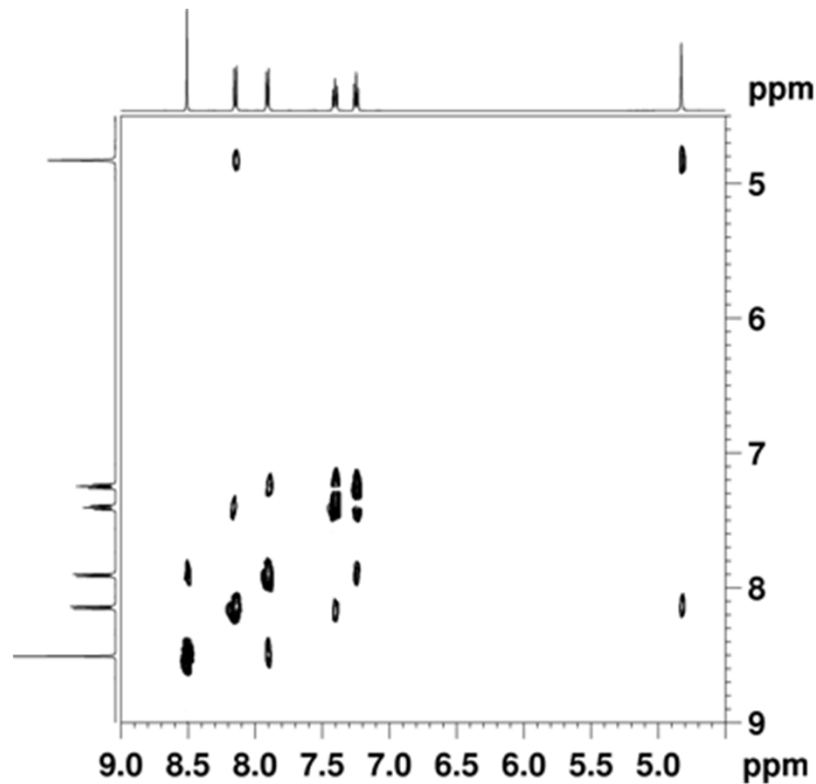
## Korrelation durch den Raum



# Kernresonanzspektroskopie

**NOESY** (Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy)

**ROESY** (Rotational Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy)



**$^1\text{H}, ^1\text{H}$ -NOESY/ROESY**

Korrelation durch den Raum

Abstand  $< 5 \text{ \AA}$

chemischer Austausch

**$^1\text{H}, \text{X}$ -HOESY**

**Heteronukleares NOESY**