

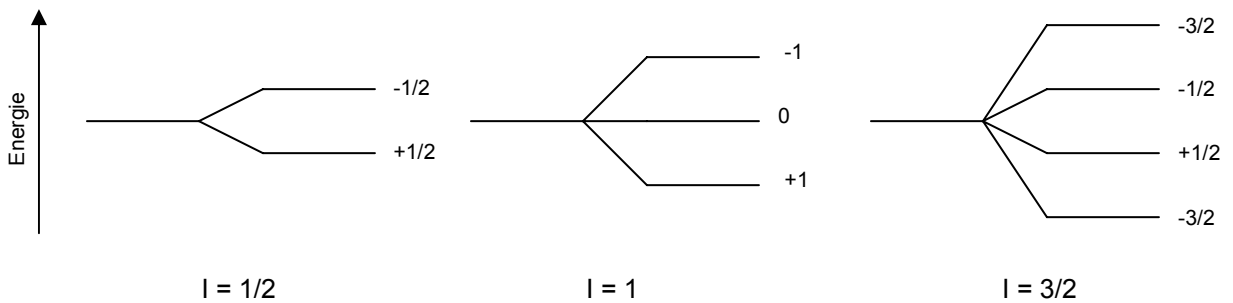
Einführung in die NMR-Spektroskopie

im Rahmen des Praktikums OC-II

Till Opatz

• Kerne im statischen Magnetfeld

Zeeman-Aufspaltung



Insgesamt $2I+1$ mögliche Einstellungen.

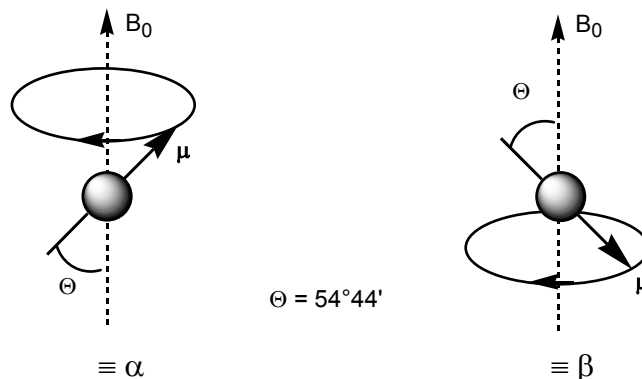
Energiedifferenz zwischen den Niveaus:

$$\Delta E = h\nu = -\hbar \gamma B_0$$

γ = gyromagnetisches Verhältnis

B_0 = Magnetfeldstärke

Erlaubte Einstellungen eines Korns mit $I = 1/2$



Für Kerne mit positivem gyromagnetischen Verhältnis (z. B. ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P) ist Zustand α energieärmer. Die Kerndipole präzedieren um die Richtung des Magnetfeldes (z-Achse) mit der Larmorfrequenz ν_L .

$$\nu_L = \gamma B_0 / 2\pi$$

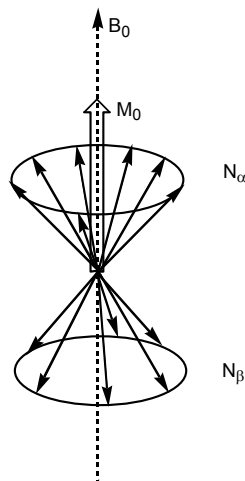
Sie entspricht der Frequenz eines Photons, das für den Übergang vom Zustand β in Zustand α eingestrahlt werden muß, bzw. bei ihm ausgesandt wird. Die Larmorfrequenzen aller Kerne liegen bei üblichen Feldstärken im Bereich der Radiowellen.

• Makroskopische Magnetisierungsvektoren

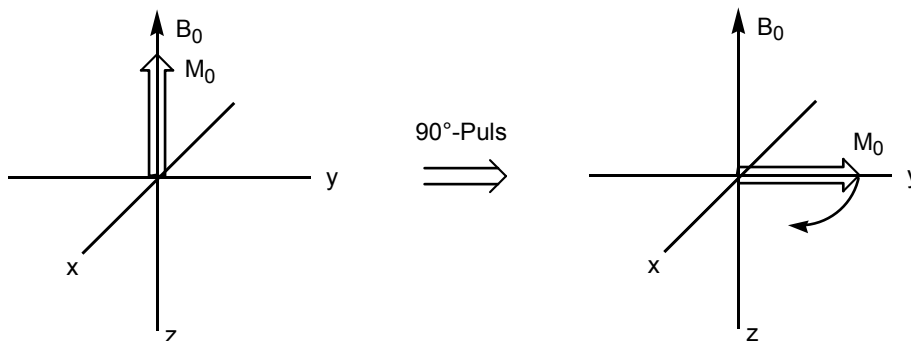
Der Besetzungsunterschied zwischen α - und β -Zustand ist bei Raumtemperatur sehr klein. Nach Boltzmann errechnet sich das Verhältnis von α - zu β -Spins zu:

$$\frac{N_\alpha}{N_\beta} = e^{-\frac{\hbar \gamma B_0}{kT}} \approx 1 - \frac{\hbar \gamma B_0}{kT}$$

Der kleine Überschuß an Spins im α -Zustand kann von außen als makroskopischer Magnetisierungsvektor M_0 beobachtet werden.

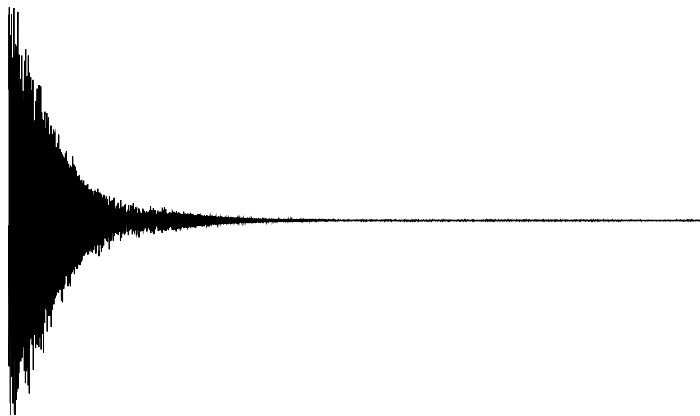


Der makroskopische Magnetisierungsvektor einer beliebigen Kernsorte lässt sich durch kurze Radiofrequenzpulse in nahezu beliebiger Weise manipulieren. Wird er mittels eines sogenannten 90° -Pulses aus der z-Richtung in die x-y-Ebene gekippt, was man sich anschaulich durch teilweise Phasensynchronisation der Kernspins vorstellen kann, so präzediert er mit der Larmorfrequenz ν_L um die z-Achse.

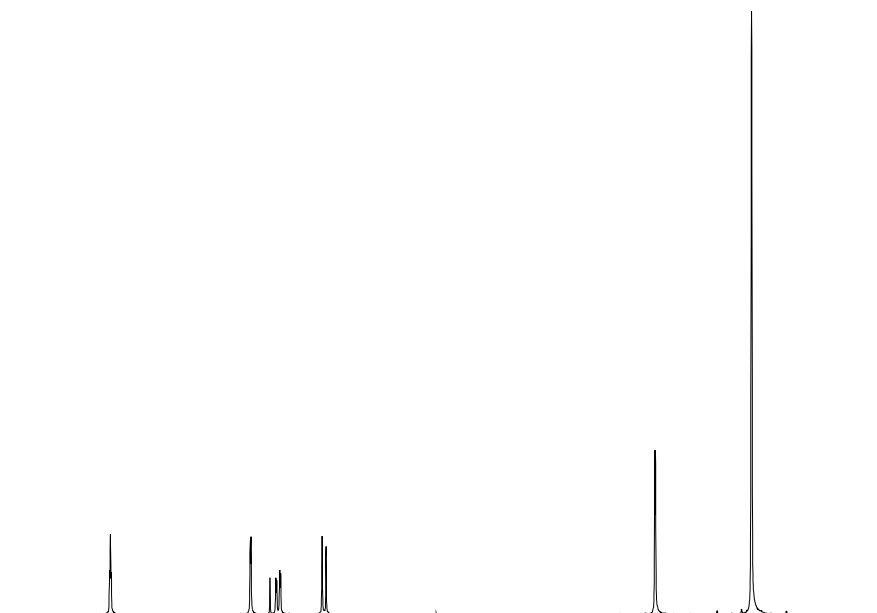


- **Rückkehr in den Gleichgewichtszustand:
Der *Free Induction Decay***

Der in der x-y-Ebene rotierende (transversale) makroskopische Magnetisierungsvektor bewirkt die Abstrahlung von Energie in Form von Radiowellen der Frequenz ν_L , die von Empfängerspulen aufgenommen und detektiert werden können. Aufgrund verschiedener Relaxationsprozesse nimmt die transversale Magnetisierung ab und nach einiger Zeit ist der Ausgangszustand (M_0 entlang B_0 bzw. z) wiederhergestellt. Resultat ist ein vom Zeitpunkt des 90° -Pulses abklingendes Radiowellensignal, das die Frequenzen aller angeregten Kernsorten enthält, der sogenannte *free induction decay* (FID).



Mittels der Fourier-Transformation läßt sich aus dem FID das NMR-Spektrum erhalten.



• Die chemische Verschiebung

Würde die NMR-Spektroskopie nur Informationen über die in einer Probe enthaltenen Kernsorten liefern, wäre sie für den Organischen Chemiker uninteressant.

Zwar haben alle Kerne einer Kernsorte in einem Molekül das gleiche gyromagnetische Verhältnis, aber das äußere Magnetfeld B_0 wird durch die Wirkung der Elektronenhülle geringfügig abgeschirmt. Es gilt folgende Gleichung:

$$B_{eff} = (1-\sigma) B_0$$

Dabei ist σ die sogenannte Abschirmungskonstante. Sie ist zwar sehr klein (ca. 10^{-5}), jedoch unabhängig vom Magnetfeld. Somit hat jeder Kern in einem Molekül eine eigene Larmorfrequenz, die proportional zu B_0 ist:

$$\nu_L = \gamma (1-\sigma) B_0 / 2\pi$$

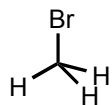
Um die gemessenen Resonanzfrequenzen unabhängig von der Magnetfeldstärke angeben zu können, wurde die sogenannte δ -Skala eingeführt.

$$\delta = \frac{\nu_{Substanz} - \nu_{Referenz}}{\nu_{Referenz}} \cdot 10^6$$

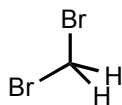
Als Referenzfrequenz wird das Signal einer der Probe zugegebenen Verbindung verwendet (interner Standard). Für ^1H und ^{13}C benutzt man meist Tetramethylsilan (TMS) mit $\delta(\text{TMS}) = 0$. Die chemische Verschiebung δ wird in ppm angegeben ($1 \text{ ppm} = 10^{-6}$).

Für Protonen hängt δ nur von der Elektronendichte am Kernort ab. Elektronegative Substituenten führen zu großen δ -Werten.

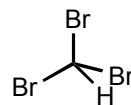
Beispiel:



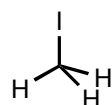
$$\delta = 2.63 \text{ ppm}$$



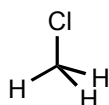
$$\delta = 4.90 \text{ ppm}$$



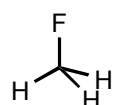
$$\delta = 6.82 \text{ ppm}$$



$$\delta = 2.16 \text{ ppm}$$



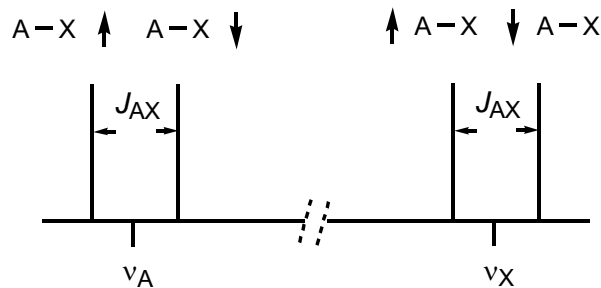
$$\delta = 3.05 \text{ ppm}$$



$$\delta = 4.25 \text{ ppm}$$

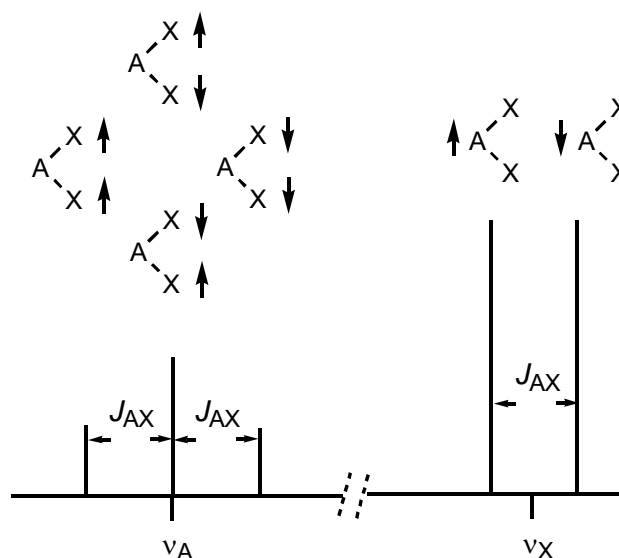
• Kopplung mit Nachbarkernen

Außer über die chemische Umgebung der Kerne in einem Molekül lassen sich über indirekte Spin-Spin-Kopplungen wertvolle Strukturinformationen gewinnen. Betrachtet man ein Paar von Kernen mit $I=1/2$ (A und X), so sind folgende Einstellungen der Kernspins im Magnetfeld denkbar:



Durch den Spin des Nachbarkerns verändert sich das lokale Feld am Kernort um einen festen Betrag, der nicht von der Magnetfeldstärke abhängt. Die daraus resultierende Differenz der Larmorfrequenzen wird als Kopplungskonstante J bezeichnet. Sie hat für die meisten Kernpaare die Größe von einigen Hertz bis zu einigen hundert Hertz. Im Spektrum beobachtet man die symmetrische Aufspaltung der Resonanzlinien zu jeweils zwei Linien halber Intensität und dem Abstand J_{AX} .

Für ein Molekül AX_2 sieht das Spinvektorenschema und das resultierende Spektrum wie folgt aus:



• Die n+1-Regel

Im Falle des AX_2 -Moleküls besteht die Resonanz des X-Kerns wie bei einem AX-Molekül aus zwei Linien gleicher Intensität und dem Abstand J_{AX} . Die Resonanz des A-Kerns hingegen besteht aus drei Linien im Abstand J_{AX} , deren Intensitäten im Verhältnis 1:2:1 stehen (ein sogenanntes Triplet).

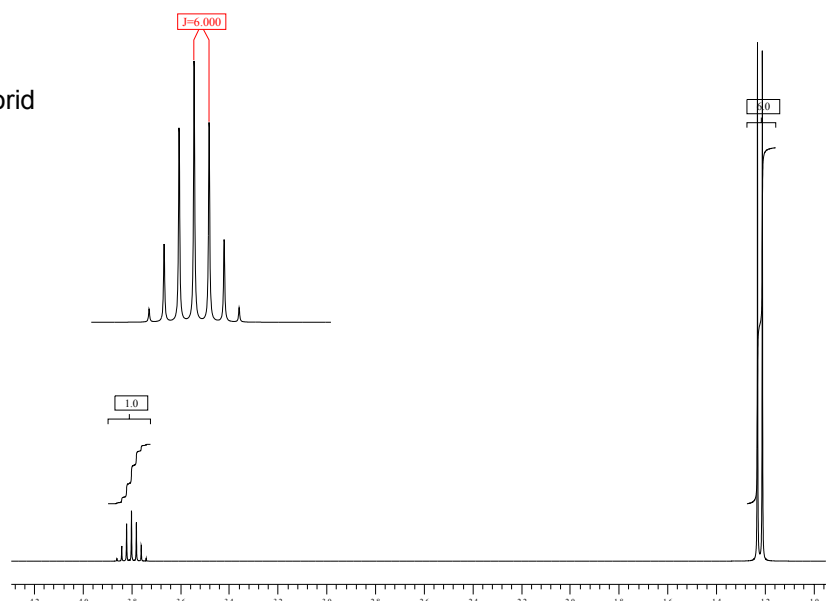
Allgemein lassen sich für Systeme von Kernen mit $I = 1/2$ die Signalintensitäten der Linien in einem Multiplett aus dem Pascalschen Dreieck entnehmen:

Anzahl der gleichartigen Kopplungspartner	Signalintensitäten	
$n = 0$	1	Singulett
$n = 1$	1 : 1	Dublett
$n = 2$	1 : 2 : 1	Triplet
$n = 3$	1 : 3 : 3 : 1	Quartett
$n = 4$	1 : 4 : 6 : 4 : 1	Quintett
$n = 5$	1 : 5 : 10 : 10 : 5 : 1	Sextett
$n = 6$	1 : 6 : 15 : 20 : 15 : 6 : 1	Septett

Man erkennt, daß die Zahl der Linien in einem Multiplett immer um eins größer ist als die Zahl der gleichartigen Kopplungspartner.

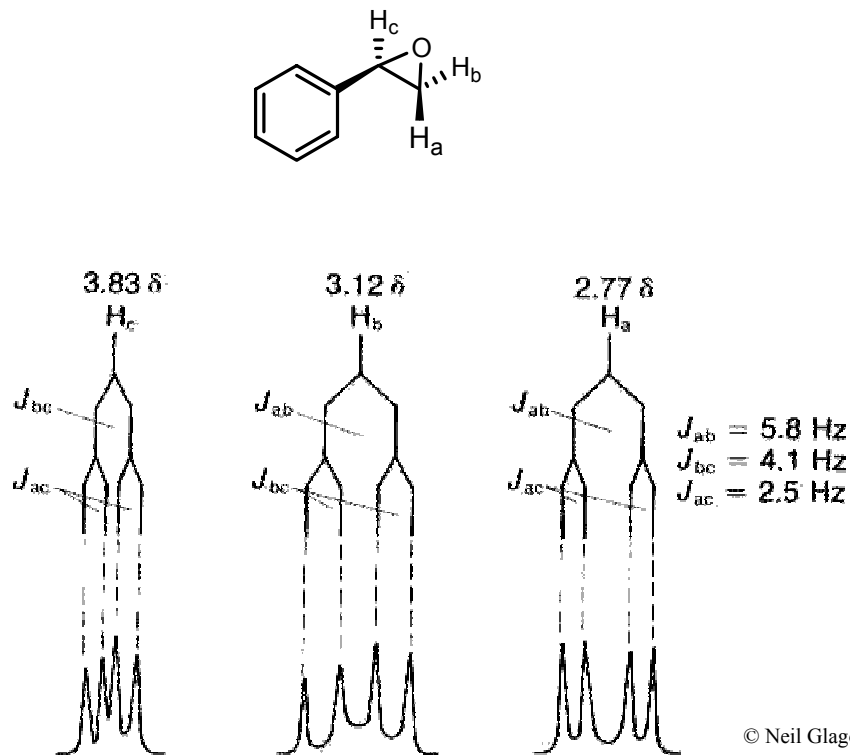
Beispiel:

Spektrum von Isopropylchlorid



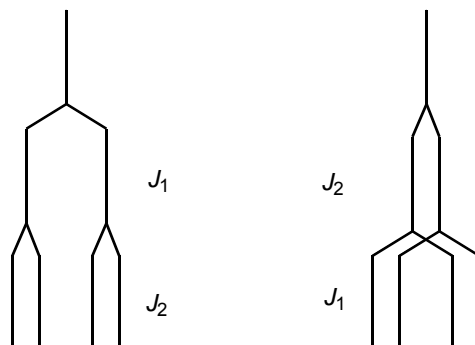
• Kopplung mit ungleichen Partnern

Falls nicht alle Kopplungspartner eines Kerns gleichartig sind, können die Kopplungskonstanten verschieden sein. Dann gilt die n+1-Regel nicht mehr, da Signale nicht mehr zusammenfallen. Ein Beispiel hierfür ist das sogenannte AMX-Spinsystem des Styroloxids:



Das aus der Kopplung mit zwei ungleichen Partnern resultierende Kopplungsmuster nennt man Dublett von Dublett; Abkürzung: dd.

Bei der Erstellung der sogenannten Baumdiagramme ist es übrigens unwichtig, in welcher Reihenfolge man die Kopplungen wirken lässt:



• Wann koppeln Kerne?

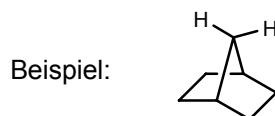
Befinden sich zwei Kerne in nicht zu großem Abstand zueinander (bis ca. 3-4 Bindungen), so ist Kopplung eher die Regel als die Ausnahme. Man kommt also schneller zu einer Antwort, wenn man fragt, wann Kerne nicht miteinander koppeln. Hier eine Liste der möglichen Gründe für das Fehlen von Kopplung:

- Kein magnetischer Kopplungspartner, z. B. ^1H - ^{12}C
- Natürliche Häufigkeit zu niedrig, z. B. ^1H - ^{15}N
- Kopplungskonstante zu klein, z. B. $^5J_{(\text{H},\text{X})}$
- Magnetische Äquivalenz, z. B. $\text{H}_3\text{C-X}$ (siehe übernächstes Kapitel)
- Schneller Austausch, z. B. $\text{H}_3\text{C-OH}$
- Kopplungspartner mit Quadrupolmoment, z. B. ^{14}N , ^{35}Cl , ^{37}Cl , ^{79}Br , ^{81}Br , ^{127}I

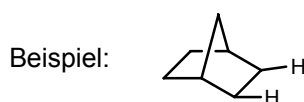
• Symmetriebetrachtungen

Eine wichtige Eigenschaft, die das Vorhandensein von Kopplung zwischen zwei Kernen entscheidend beeinflusst, ist die Symmetrie.

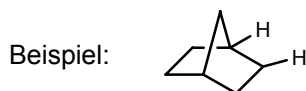
Lassen sich zwei Kerne (gleiche Sorte!) in einem Molekül durch eine Drehung ineinander überführen, so nennt man sie homotop. Diese Kerne müssen dann die gleiche chemische Verschiebung haben; sie sind isochron (→ Kopplung ist nicht zu beobachten).



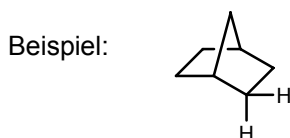
Wenn sich zwei Kerne durch eine Spiegelung ineinander überführen lassen, so sind sie enantiotop. In Abwesenheit chiraler Substanzen sind diese Kerne ebenfalls isochron.



Wenn zwei Kerne sich an verschiedenen Strukturelementen eines Moleküls befinden, so sind sie konstitutionell heterotop. Sie können allerhöchstens zufällig isochron sein, also sollte Kopplung in der Regel zu beobachten sein.

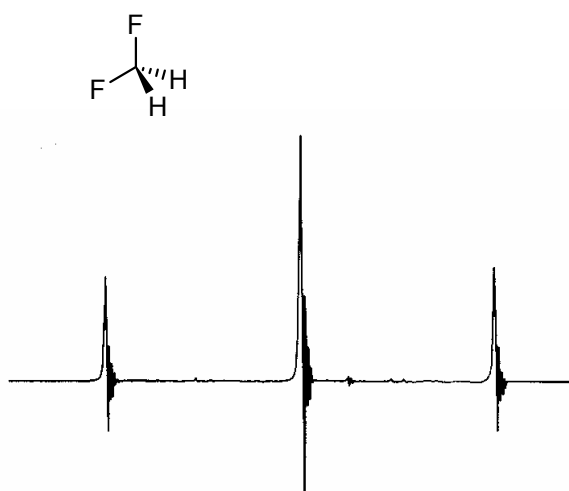


Zwei Kerne sind dann diastereotop, wenn sie aus Gründen der Konfiguration des sie tragenden Moleküls durch keine Symmetrieoperation ineinander überführt werden können. Sie sind in der Regel anisochron, also ist auch hier Kopplung zu erwarten.

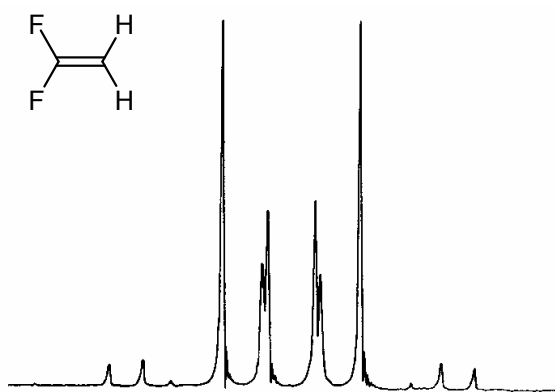


• Chemische und magnetische Äquivalenz

Homotope und enantiotopie Kerne werden wegen der gleichen bzw. spiegelbildlichen chemischen Umgebung auch als chemisch äquivalent bezeichnet. Wenn sie zusätzlich zu allen anderen Kernen mit der gleichen Kopplungskonstante koppeln, sind sie auch magnetisch äquivalent. Das Fehlen magnetischer Äquivalenz kann Spektren kompliziert machen, wie das Beispiel von Difluormethan und 1,1-Difluorethylen zeigt:



Protonen magnetisch äquivalent

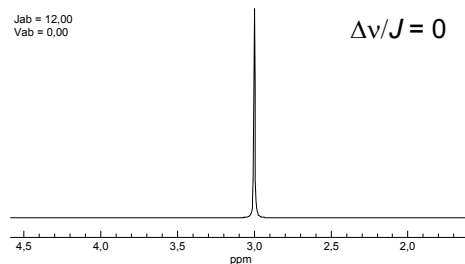
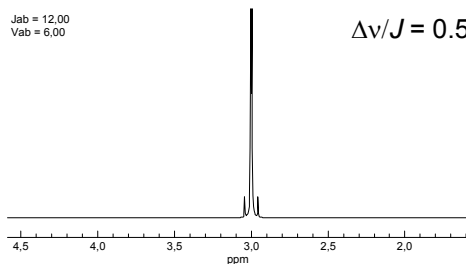
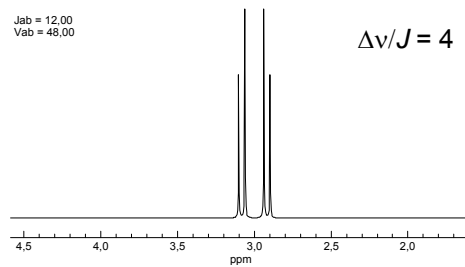
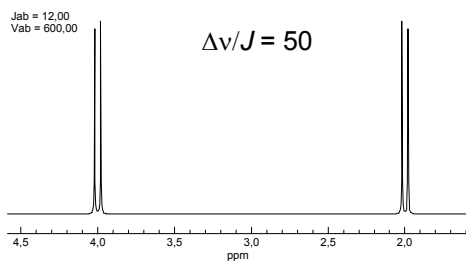


Protonen magnetisch inäquivalent!

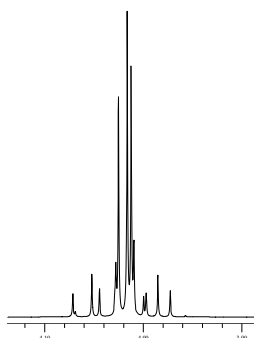
© G. Moyna

• Vorsicht bei Spektren höherer Ordnung!

Spektren sind dann einfach zu interpretieren, wenn die Differenz der Larmorfrequenzen $\Delta\nu$ groß gegenüber der Kopplungskonstante J ist. Für den Fall eines Zweispinsystems ist der Effekt der Verkleinerung des Verhältnisses $\Delta\nu/J$ gezeigt:



Zuerst bemerkt man eine Veränderung der Linienintensitäten, den sogenannten Dacheffekt. Dazu ergeben sich dann aber auch zunehmend Verzerrungen, die die genaue Bestimmung der Larmorfrequenzen (chemische Verschiebung!) und der Kopplungskonstanten ohne mathematische Verfahren nicht mehr zulassen. Eine Erhöhung der Feldstärke kann Abhilfe schaffen (Erhöhung von $\Delta\nu$!), weshalb der Trend zu Spektrometern mit immer höherem Feld geht.



Liegt ein Spektrum höherer Ordnung vor, so sollte die Auswertung auf keinen Fall nach erster Ordnung vorgenommen werden, weil gravierende Fehler drohen. Bei einem so unansehnlichen Signalhaufen wie dem links abgebildeten Spektrum eines stark gekoppelten Systems von nur drei Protonen wird dies aber ohnehin daran scheitern, daß man die einzelnen Linien ohne weiteres gar nicht mehr zuordnen kann.

• Zusammenfassung: Wichtige ^1H -Spektrenparameter

Anzahl der Signale

Gibt Aufschluß über die Zahl der verschiedenartigen Kerne

Intensität/Integral

Zeigt, wieviele Kerne beteiligt sind

Multiplizität

Gibt an, wieviele Kopplungspartner in der nächsten Umgebung (2-4 Bindungen) vorhanden sind

Chemische Verschiebung

Läßt Aussagen über die Hybridisierung und die Substituenten zu

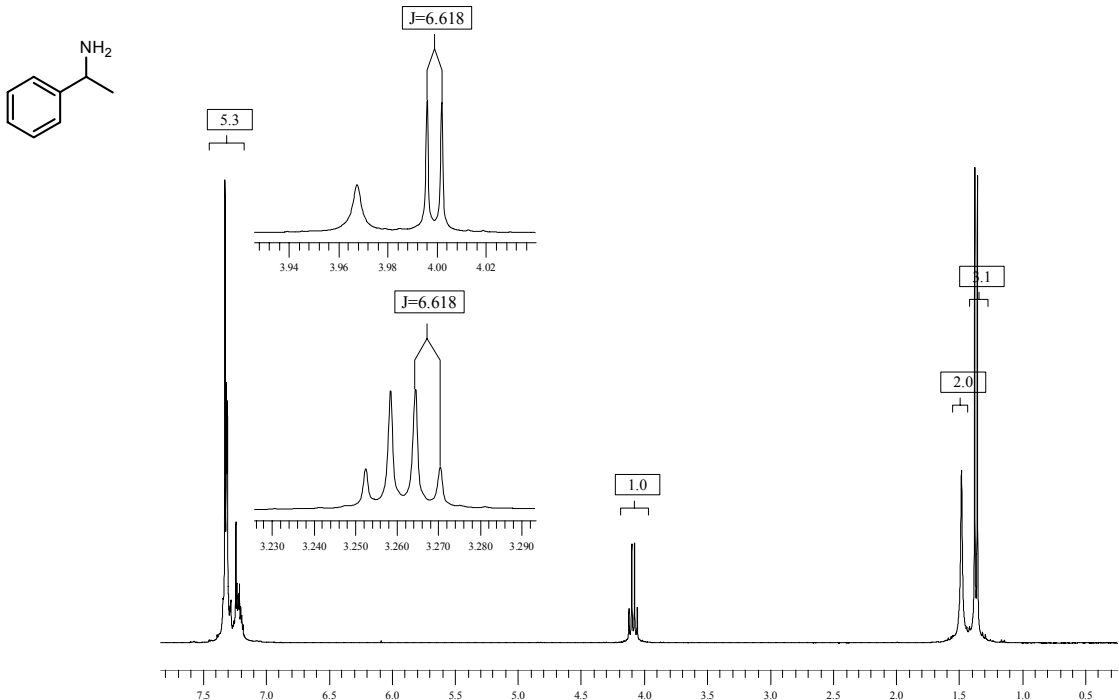
Kopplungskonstanten

Geben Aufschluß über Hybridisierung, Substitution und Bindungswinkel

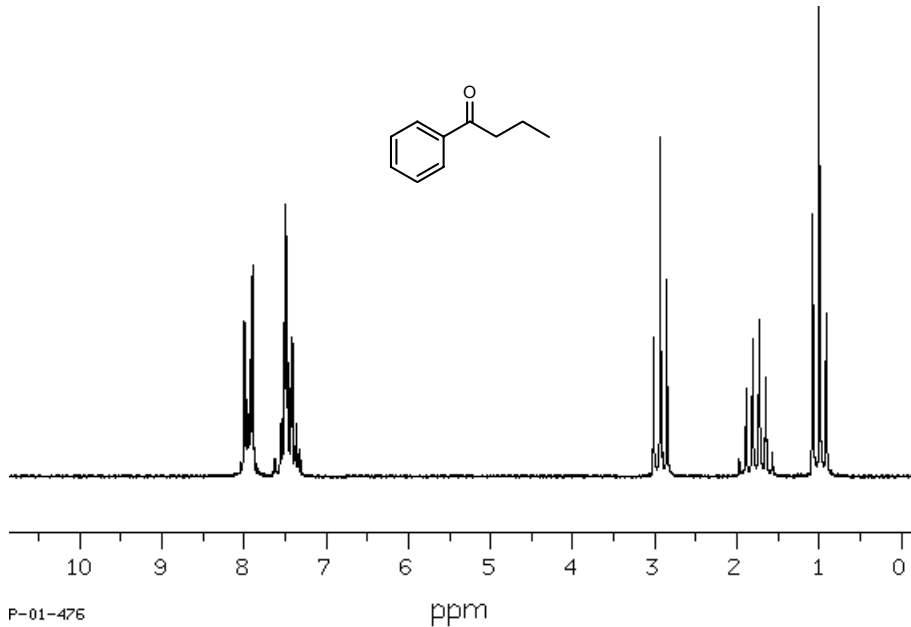
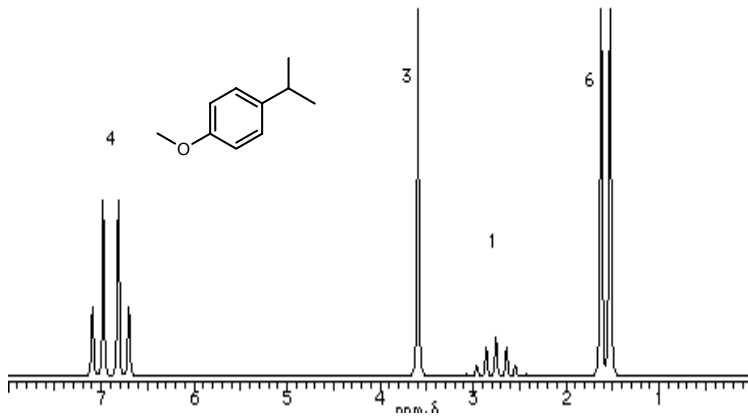
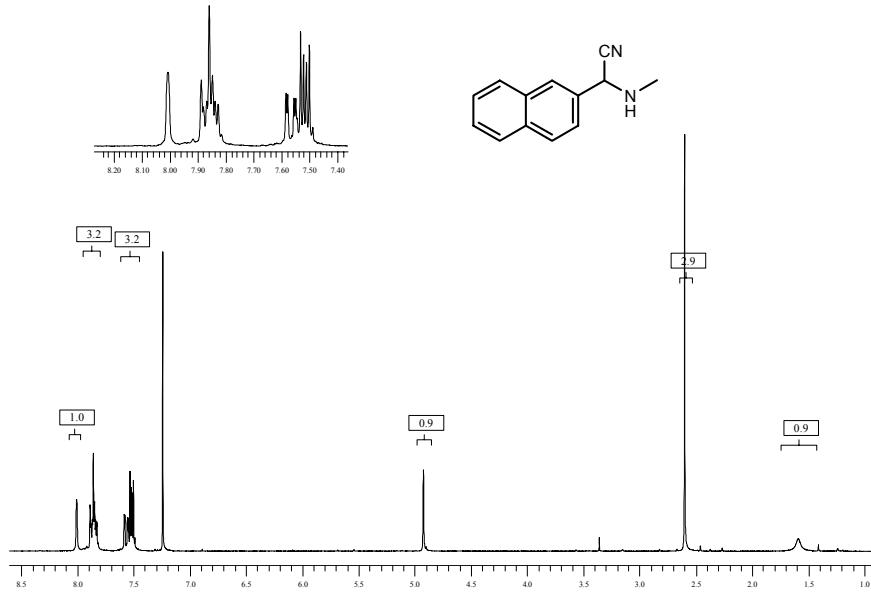
Linienbreite

Zeigt dynamische Prozesse an, z. B. Austausch oder Konformerengleichgewichte

Beispiel: 300 MHz- ^1H -NMR-Spektrum von 1-Phenylethylamin



• Beispiele für ^1H -Spektren



• ^{13}C -NMR-Spektroskopie

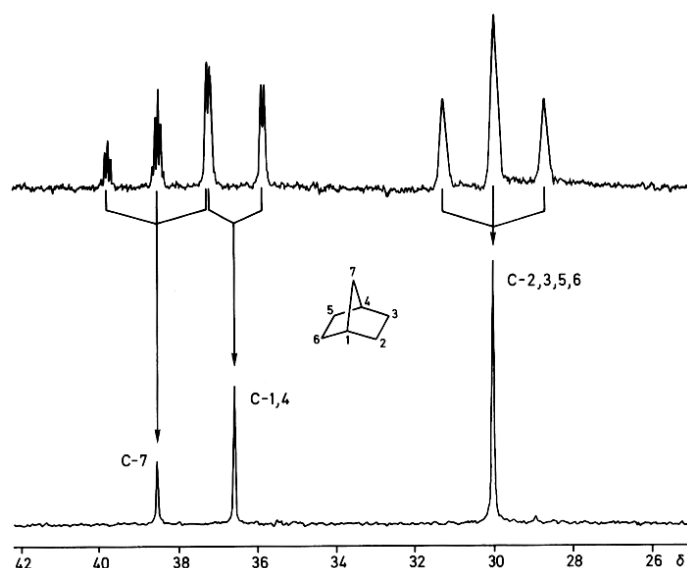
Kohlenstoff besteht aus zwei stabilen Isotopen, von denen das Hauptisotop ^{12}C einen Kernspin von 0 hat und daher mit der NMR-Spektroskopie nicht beobachtet werden kann. Zu 1.1% kommt im Kohlenstoff aber auch das Isotop ^{13}C vor, das einen halbzahligen Spin aufweist. Aufgrund der geringen natürlichen Häufigkeit und des um etwa den Faktor 4 kleineren gyromagnetischen Verhältnisses ist ^{13}C allerdings um fast vier Zehnerpotenzen unempfindlicher als ^1H , so daß Messungen relativ lange Zeit in Anspruch nehmen können und größere Substanzmengen benötigt werden. ^{13}C -Spektren liefern dennoch wertvolle Informationen über das Gerüst eines organischen Moleküls.

Heteronukleare Entkopplung

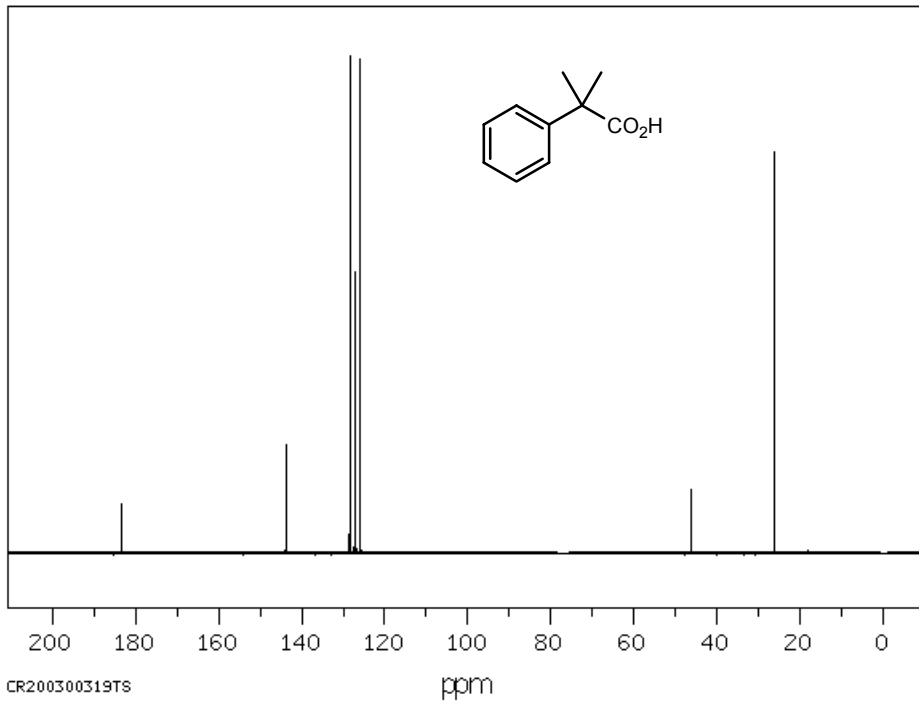
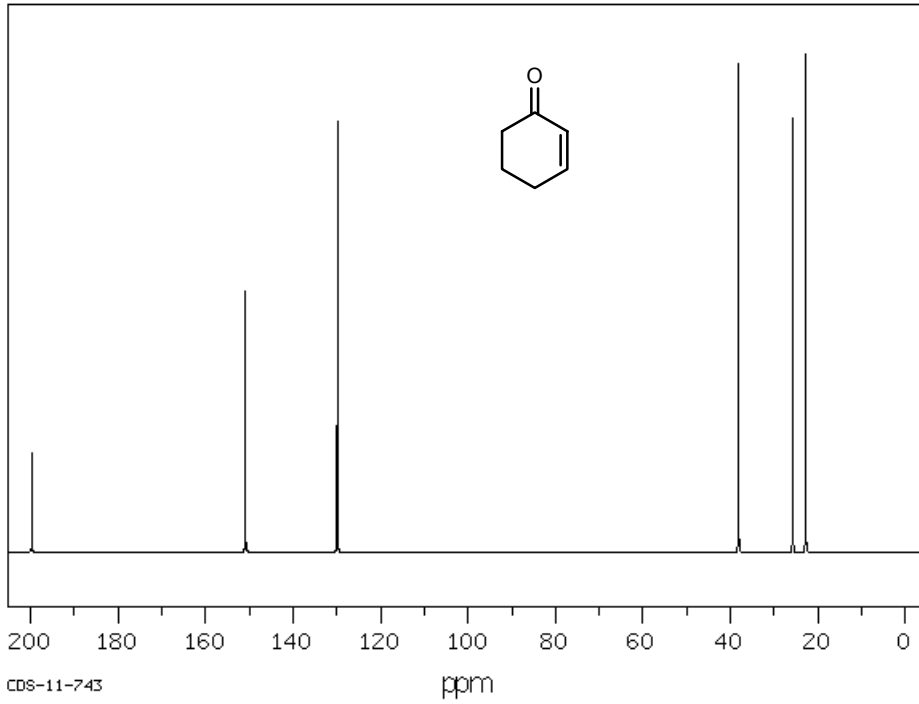
Da nur ein geringer Teil der Protonen in einem Molekül an ^{13}C gebunden ist, hat die Existenz dieses Kerns kaum Auswirkungen auf ^1H -Spektren (^{13}C -Satelliten). Umgekehrt werden jedoch die ^{13}C -Spektren durch die Protonen im Molekül massiv beeinflusst. Resultat ist eine oft unerwünschte Aufspaltung der ^{13}C -Signale, die deren Intensität mindert und deren Lage teils schwer bestimmbar macht.

Zur Lösung dieses Problems dient die sogenannte *1H-Breitbandentkopplung*, bei der auf dem Frequenzband der Protonen Radiowellen eingestrahlt werden, so daß sich die Spinzustände α und β der Protonen so rasch umkehren, daß jeder ^{13}C -Kern nur noch ein gemittelttes Feld „sieht“. Resultat ist ein ^1H -entkoppeltes ^{13}C -Spektrum, das nur noch aus einzelnen Linien besteht. ^{13}C - ^{13}C -Paare sind so selten, daß sie nicht ins Gewicht fallen.

Auswirkung der ^1H -
Breitbandentkopplung auf das
 ^{13}C -Spektrum des Norbornans



- Beispiele für ^{13}C -Spektren



• ^1H -Chemische Verschiebungen in CDCl_3

CH₃-Protonen													
δ relativ zu TMS	5.5	5.0	4.5	4.0	3.5	3.0	2.5	2.0	1.5	1.0	0.5	0	
H ₃ C-Alkyl										■	■		
H ₃ C-C-Hal									■				
H ₃ C-C=C								■	■				
H ₃ C-C \equiv C								■	■				
H ₃ C-CO							■	■					
H ₃ C-S-							■	■					
H ₃ C-NR ₂ , R = H, Alkyl							■	■					
H ₃ C-Aryl,-Heteroaryl						■	■	■					
H ₃ C-SO ₂ -						■							
H ₃ C-NHCO, H ₃ C-N(Aryl) ₂					■	■							
H ₃ C-O-Alkyl					■	■							
H ₃ C-O-Aryl, -O-CO-				■	■								
CH₂-Protonen (sp³)													
δ relativ zu TMS	5.5	5.0	4.5	4.0	3.5	3.0	2.5	2.0	1.5	1.0	0.5	0	
Cyclopropane											■	■	
C-CH ₂ -C									■	■			
C-CH ₂ -C-X								■	■				
C-CH ₂ -C=C, C-CH ₂ -C \equiv C							■	■					
C-CH ₂ -NR ₂ , R = H, Alkyl							■	■					
C-CH ₂ -CO						■	■	■					
C-CH ₂ -S						■	■						
C=C-CH ₂ -C=C						■	■						
C-CH ₂ -N(Aryl) ₂ , C-CH ₂ -NHCO					■	■							
N-CH ₂ -CO-			■	■	■	■							
CO-CH ₂ -CO			■	■	■								
C-CH ₂ -O-			■	■	■								
C-CH ₂ -O-			■	■	■								
C-CH ₂ -NO ₂			■										
-O-CH ₂ -CO-, Aryl-CH ₂ -N		■	■	■									
-O-CH ₂ -O-, -O-CH ₂ -Aryl	■	■	■										

• ^1H -Chemische Verschiebungen in CDCl_3

CH-Protonen (sp^3)													
δ relativ zu TMS	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
												■	■
C-CHX-C X = C=C, Aryl, CO											■	■	
C-CHX-C X = N, O, Hal										■	■		
C-CHX-CO									■	■	■		
C-CHX ₂ , X = N, Aryl, O, Hal							■	■	■	■			
CHX ₃ , X = Aryl, O, Hal							■	■	■	■			
CH-Protonen an ungesättigten Systemen													
δ relativ zu TMS	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
C \equiv CH											■		
CH ₂ =C-X								■	■				
Aryl						■	■	■					
RCH=NR						■	■	■					
C=CH-X					■	■	■	■	■				
Heteroaryl					■	■	■	■					
RCH=O			■	■	■								
OH-, SH- und NH-Protonen													
δ relativ zu TMS	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1
Alkyl-SH												■	■
Alkyl-NH-											■	■	■
Alkyl-OH										■	■	■	■
Ary-SH										■	■		
Aryl-NH-									■	■	■		
Aryl-OH						■	■	■	■	■			
Heteroaryl-NH-						■	■	■	■	■			
RSO ₂ NH-					■	■	■	■	■				
RCONH-					■	■	■	■					
Heteroaryl-OH		■	■	■	■	■	■	■					
RNH ₃ ⁺ , R ₂ NH ₂ ⁺ , R ₃ NH ⁺			■	■	■	■	■						
NH in Heteroaromaten	■	■	■	■	■	■							
RCO ₂ H	■	■	■	■	■								

• ¹³C-Chemische Verschiebungen

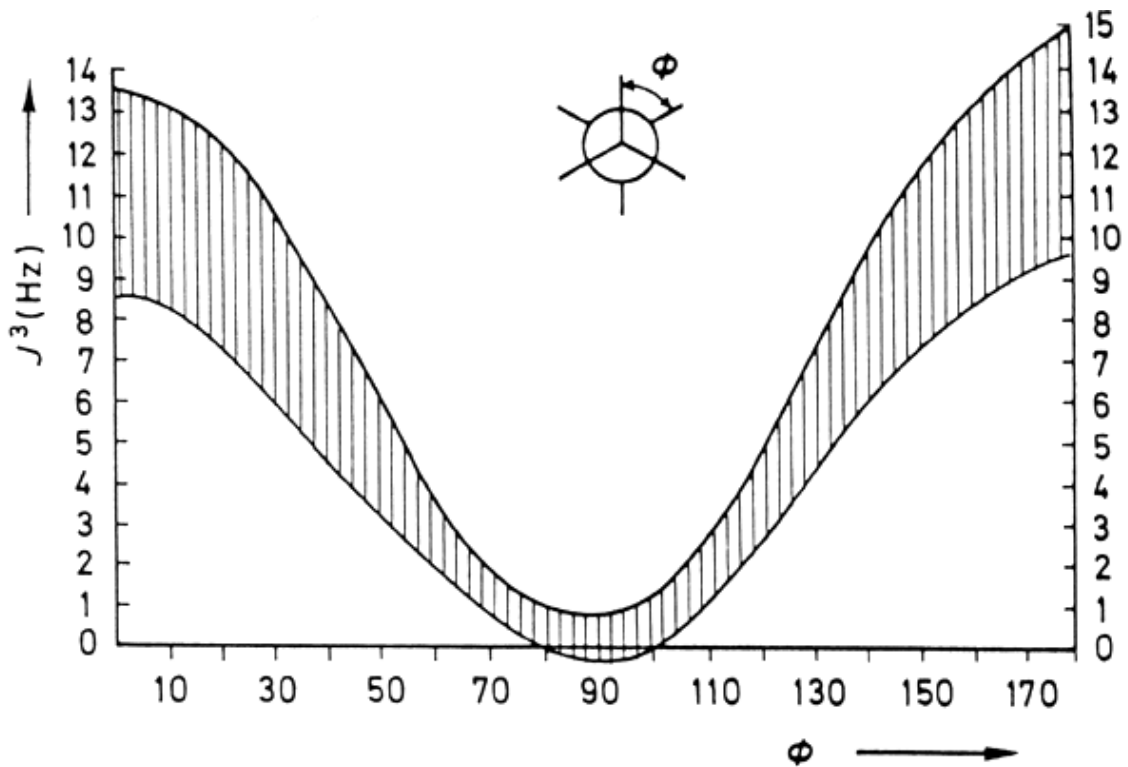
δ relativ zu TMS	220	200	180	160	140	120	100	80	60	40	20	0	-20
H ₃ C-C- primär										■	■		
H ₃ C-S-										■	■		
H ₃ C-N										■			
H ₃ C-O-									■				
-H ₂ C-C sekundär										■			
Cyclopropane											■	■	
-H ₂ C-S-										■			
-H ₂ C-N										■			
-H ₂ C-O-										■			
-H ₂ C-Hal								■	■	■	■	■	
								F	Cl	Br	I		
>CH-C- tertiär										■			
>CH-S-										■			
>CH-N										■			
>CH-Hal										■	■	■	
								F	Cl	Br	I		
C-C quartär										■			
C-S-										■			
C-N										■			
C-O-										■			
C-Hal										■	■	■	
										Cl	Br	I	

δ relativ zu TMS	220	200	180	160	140	120	100	80	60	40	20	0	-20
Alkine								■	■				
C=C=C Allene								■	■				
-CN								■					
C=C Alkene								■	■	■			
Aromaten								■	■	■			
Heteroaromaten								■	■	■			
-N=C=S								■					
-N=C=O								■					
-NC								■	■				
>C=N- Imine								■	■				
(-CO) ₂ O Anhydride								■	■				
-COOR								■	■				
-CONHR								■	■				
-(CO) ₂ NR Imide								■					
-COOH								■	■				
-COCl								■					
-CHO								■	■	■			
>C=O								■	■				
C=C=C Allene								■	■				
δ relativ zu TMS	220	200	180	160	140	120	100	80	60	40	20	0	-20

• ${}^n J_{H,H}$ -Kopplungskonstanten

Strukturelement	J (Hz)	Strukturelement	J (Hz)
	10-18		0-14 (Karplus-Kurve)
	8-12		7-8
	5.5-7.0		ax-ax 10-13 ax-eq 2-5 eq-eq 2-5
	0-3		7-12
	13-18		4-10
	0.5-2.5		0
	9-13		2-3
	1-3		2-4
	o: 6-9 m: 1-3 p: 0-1		2-3: 1.6-2.0 2-4: 0.6-1.0 2-5: 1.3-1.8 3-4: 3.2-3.8
	2-3: 2.0-2.6 2-4: 1.5-2.2 2-5: 1.8-2.3 3-4: 2.8-4.0		2-3: 4.6-5.8 2-4: 1.0-1.8 2-5: 2.1-3.3 3-4: 3.0-4.2
	2-3: 4.9-5.7 2-4: 1.6-2.6 2-5: 0.7-1.1 2-6: 0.2-0.5 3-4: 7.2-8.5 3-5: 1.4-1.9		X = O: 4-5 NR: 5-6 NCOR: 7

- Die Karplus-Kurve



$${}^3J = \begin{cases} 8,5 \cos^2 \phi - 0,28 & \text{for } 0 \leq \phi \leq 90^\circ \\ 9,5 \cos^2 \phi - 0,28 & \text{for } 90^\circ \leq \phi \leq 180^\circ \end{cases}$$

Die Karplus-Kurve gibt die Abhängigkeit der Kopplungskonstante vom Torsionswinkel wieder. Sie gilt in der hier dargestellten Form nur für Alkane.

Für andere Verbindungsklassen gibt es analoge Beziehungen.

Links zum Thema:

<http://www.intermnet.ua.es/inteRMNet/calculadores/karpluscalculatorv3.htm>

<http://www.casper.org.au/se/ke3690/karplus.html>

• Wichtige Daten

Z	N	Symbol	Spin	Häufigkeit	Frequenz (MHz)	γ ($10^7 \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1}$)	Quadrupolmoment (10^{-28} m^2)	Rezeptivität (relativ zu H)
1	1	H	1/2	99,99%	100,000	267,520		1,00
1	2	D	1	0,02%	15,351	41,066	0,00273	1,44E-06
3	6	Li	1	7,42%	17,716	3,937	-0,0008	6,31E-04
3	7	Li	3/2	92,58%	38,836	10,398	-0,04	0,272
5	10	B	3	19,58%	10,746	2,875	0,085	3,93E-03
5	11	B	3/2	80,42%	32,089	8,584	0,041	0,133
6	13	C	1/2	1,11%	25,147	67,283		1,75E-04
7	14	N	1	99,63%	7,226	19,338	0,016	9,98E-04
7	15	N	1/2	0,37%	10,137	-2,712		3,84E-06
8	17	O	5/2	0,04%	12,557	-36,279	-0,026	1,07E-05
9	19	F	1/2	100,00%	94,086	25,181		0,8298
14	29	Si	1/2	4,70%	19,867	-53,188		3,67E-04
15	31	P	1/2	100,00%	40,481	10,841		6,61E-02
16	33	S	3/2	0,76%	7,676	2,055	-0,055	1,71E-05
17	35	Cl	3/2	75,53%	9,798	26,240	-0,08	3,54E-03
17	37	Cl	3/2	24,47%	8,156	21,842	-0,0632	6,61E-04
26	57	Fe	1/2	2,19%	3,238	0,866		7,37E-07
34	77	Se	1/2	7,58%	19,071	5,120		5,23E-04
35	79	Br	3/2	50,54%	25,054	67,228	0,33	3,96E-02
35	81	Br	3/2	49,46%	27,007	72,468	0,28	4,86E-02
45	103	Rh	1/2	100,00%	3,160	-0,846		3,11E-05
46	105	Pd	5/2	22,23%	4,576	-1,230	0,8	2,47E-04
47	107	Ag	1/2	51,82%	4,048	-1,087		3,42E-05
47	109	Ag	1/2	48,18%	4,653	-1,250		4,84E-05
50	115	Sn	1/2	0,35%	32,699	-8,792		1,24E-04
50	117	Sn	1/2	7,60%	35,632	-9,578		3,43E-03
50	119	Sn	1/2	8,60%	37,291	-10,021		4,42E-03
53	127	I	5/2	100,00%	20,009	53,817	-0,79	9,30E-02
78	195	Pt	1/2	33,80%	21,499	5,768		3,35E-03
80	199	Hg	1/2	16,84%	17,911	48,154		9,51E-04
80	201	Hg	3/2	13,22%	6,600	-17,776	0,45	1,89E-04
81	203	Tl	1/2	29,50%	57,224	15,436		5,07E-02
81	205	Tl	1/2	70,50%	57,786	15,589		0,1349
82	207	Pb	1/2	22,60%	20,858	5,540		2,07E-03

Lösungsmittel	Summenformel	Preis in DM/ml	mp [°C]	kp [°C]	Delta- ¹ H [ppm] (Mult.)	Wasserpeak- ¹ H [ppm]	Delta- ¹³ C [ppm] (Mult.)
Aceton-d ₆	C ₃ D ₆ O	1.41	-94	57	2.04 (5)	2.84, 2.81 (HDO)	29.8 (7), 206.0 (13)
Acetonitril-d ₃	C ₂ D ₃ N	2.52	-45	82	1.93 (5)	2.12	1.3 (7), 118.2 (br)
Benzol-d ₆	C ₆ D ₆	2.38	5	80	7.15 (br)	0.4	128.0 (3)
Chloroform-d ₁	CDCl ₃	0.23	-64	62	7.26 (1)	1.55	77.0 (3)
Cyclohexan-d ₁₂	C ₆ D ₁₂ O	38.10	6	81	1.38 (m)	0.80 (HDO)	26.4 (5)
Wasser-d ₂	D ₂ O	0.61	3.8	101.4	4.67 (1)	-	-
Diethylether-d ₁₀	C ₄ D ₁₀ O	ca. 70.00	-116	35	3.34 (3), 1.07 (5)	?	65.3 (5), 14.5 (7)
Dimethylformamid-d ₇	C ₃ D ₇ NO	34.65	-61	153	2.74 (5), 2.91 (5), 8.01 (br)	3.45	30.1 (7), 35.2 (7), 162.7 (3)
Dimethylsulfoxid-d ₆	C ₂ D ₆ OS	1.43	18	189	2.49 (5)	3.30	39.5 (7)
Dioxan-d ₈	C ₄ D ₈ O ₂	46.90	12	101	3.53 (m)	2.4 (HDO)	66.5 (5)
Essigsäure-d ₄	C ₂ D ₄ O ₂	6.21	17	118	2.03 (5), 11.53 (1)	-	20.1 (7), 178.4 (br)
Ethanol-d ₆	C ₂ D ₆ O	59.40	<-130	79	1.11 (m), 3.55 (1), 5.19 (1)	5.19	17.2 (7), 56.8 (5)
Methanol-d ₄	CD ₃ O	4.18	-98	65	3.30 (5), 4.78 (1)	4.85	49.0 (7)
Methylenchlorid-d ₂	CD ₂ Cl ₂	12.96	-95	40	5.32 (3)	1.52	53.8 (5)
Nitrobenzol-d ₅	C ₆ D ₅ NO ₂	9.57	6	211	7.50 (br), 7.61 (br), 8.11 (br)	2.42	123.5 (3), 129.5 (3), 134.8 (3), 148.6 (1)
Nitromethan-d ₃	CD ₃ NO ₂	5.71	-29	101	4.33 (5)	2.20	62.8 (7)
Pyridin-d ₅	C ₅ D ₅ N	8.09	-42	116	7.19 (br), 7.55 (br), 8.71 (br)	4.95	123.5 (3), 135.5 (3), 149.9 (3)
Tetrachlorethan-d ₂	C ₂ D ₂ Cl ₄	14.35	-45	145	5.91 (s)	1.5	74.2 (3)
Tetrahydrofuran-d ₈	C ₄ D ₈ O	24.80	-109	66	1.73 (br), 3.58 (br)	2.45	25.2 (5), 67.4 (5)
Toluol-d ₈	C ₇ D ₈	4.23	-95	111	2.03 (5), 6.98 (m), 7.00 (br), 7.09 (m)	0.5	20.4 (7), 125.2 (3), 128.0 (3), 128.9 (3), 137.5 (1)
Trifluoressigsäure-d ₁	C ₂ DF ₃ O ₂	2.10	-15	72	ca. 12 (s)	-	116.5 (4), 164.4 (4)