

## Postup pro zpracování NMR spekter v MNOVA

1. Spektra zpracujte v programu MNOVA. Nejsnadněji přetažením souboru s NMR daty nad okno aplikace.
2. Zpracujte  $^1\text{H}$  NMR spektrum (fázování, referencování). Využijte „Zero filling“ a „Appodization“ tak, aby jste dosáhli lepšího rozlišení nebo citlivosti. Označte jednotlivé signály, proveďte integraci. Popište jednotlivé signály chemickým posunem (integrální hodnotou, multiplicitou, velikostí interakčních konstant). Simulujte spektrum a vložte „overlay“ s experimentálním spektrem.
3. Zpracujte  $^{13}\text{C}$  NMR spektrum s dekaplingem, bez dekaplingu, a  $^{13}\text{C}$  APT NMR spektrum (fázování, referencování). Odečtěte a запиšte chemické posuny, a přiřaďte počet vodíků, které jsou k jednotlivých uhlíkům vázány. V případě dobrá čitelnosti (využijte „Zero filling“ a „Appodization“) uveďte též interakční konstanty s  $^1\text{H}$ . Vložte „overlay“ všech tří spekter.
4. Zpracujte gHSQC spektrum: fázování, vložení  $^1\text{H}$  a APT spekter, referencování. Zapište přiřazení jednotlivých vodíky konkrétním uhlíkům. Vložte spektrum.
5. Zpracujte gCOSY spektrum: fázování, vložení  $^1\text{H}$  spekter, referencování. Uveďte vyhovující strukturní fragmenty.
6. Zpracujte gHMBC spektrum: fázování, vložení  $^1\text{H}$  a APT spekter, referencování. Vložte spektrum.
7. Zpracujte NOESY1D spektra: fázování, vložení  $^1\text{H}$  spektra, referencování.
8. Vyhodnocením spekter odvoďte strukturu látky. Porovnejte experimentální  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  NMR spektra s predikovanými. Vložte „overlay“ spekter.