

# Měření a interpretace NMR spekter

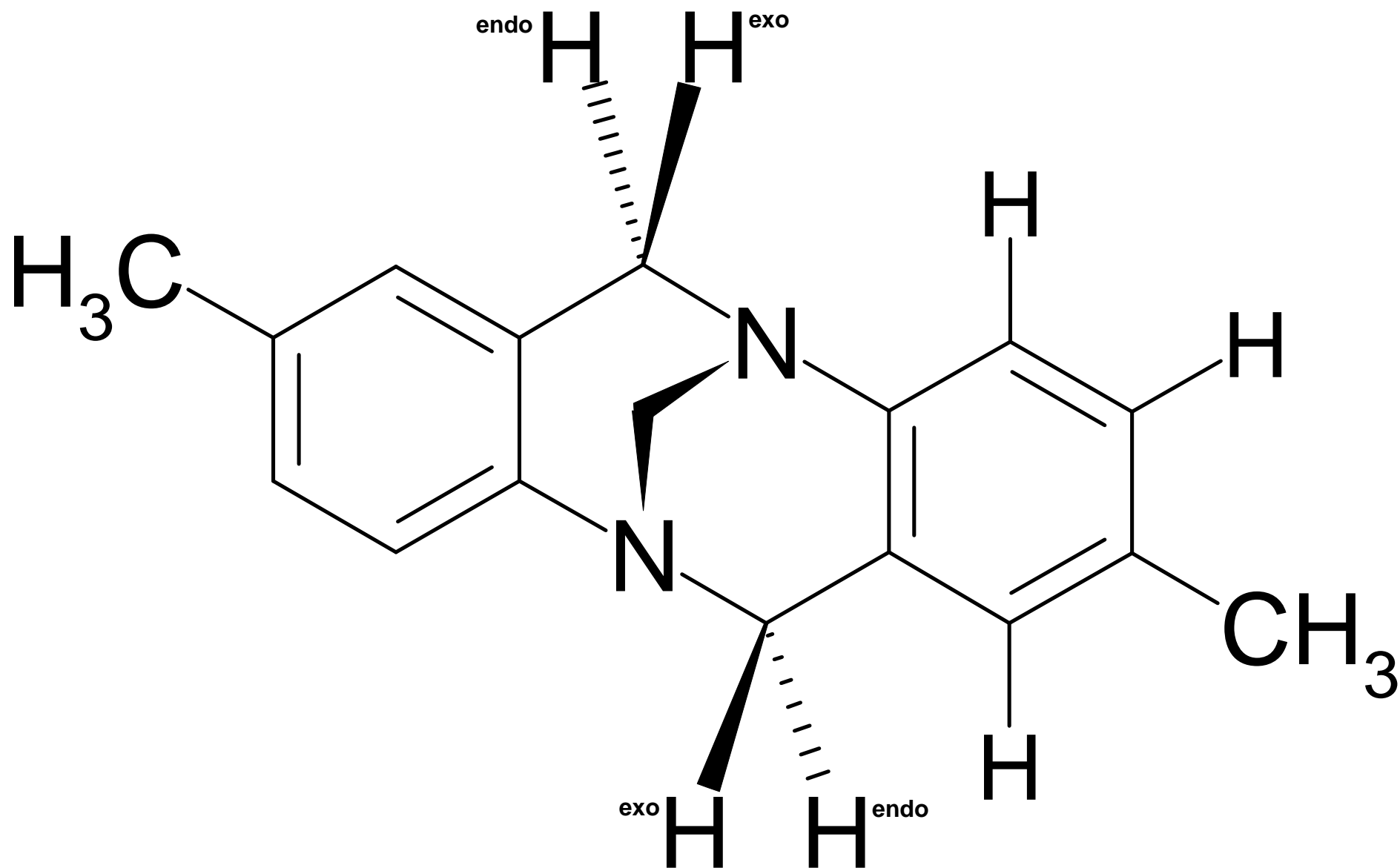
B. Dolenský

E-mail : [dolenskb@vscht.cz](mailto:dolenskb@vscht.cz)

Telefon : (+420) 220 44 4110

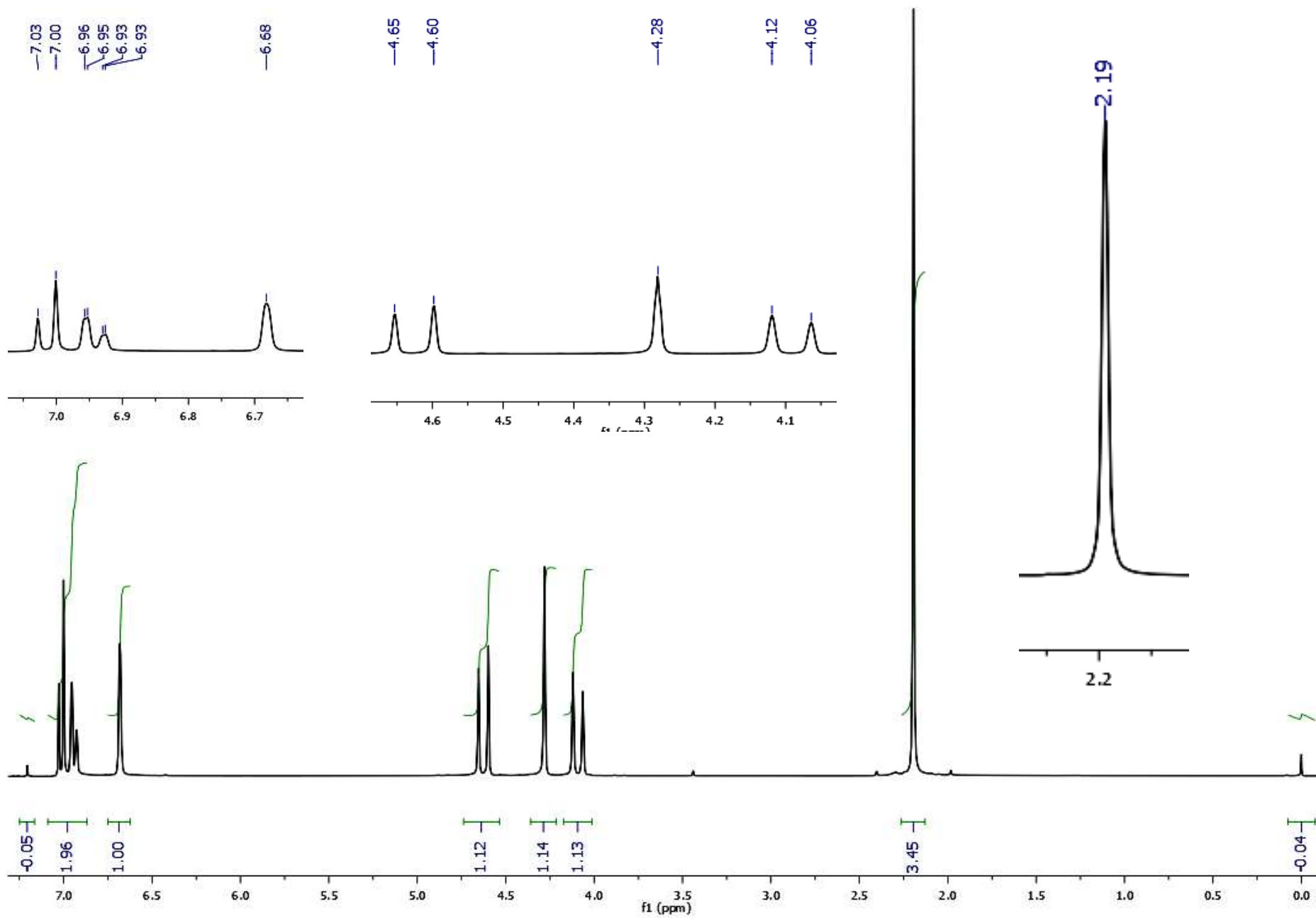
Místnost : budova A, místnost 28

1. Signály  $^1\text{H}$  sepište od největšího chemického posunu po nejmenší do sloupce, očísľujte je H1 až H7, uveďte jejich charakteristiky, tj. chemický posun, integrální intenzitu, multiplicitu, velikost homonukleárních interakčních konstant (tj. s  $^1\text{H}$ ), případně velikost interakční konstanty s  $^{13}\text{C}$  (satelity).
2. Signály  $^{13}\text{C}$  sepište od největšího chemického posunu po nejmenší do sloupce, očísľujte je C1 až C9, uveďte jejich charakteristiky, tj. chemický posun, multiplicitu s  $^1\text{H}$ , velikost interakční konstanty  $^1J_{\text{CH}}$ , uveďte typ uhlíkového atomu, tj. C, CH,  $\text{CH}_2$  nebo  $\text{CH}_3$ .
3. Pomocí g-COSY, g-HSQC, g-HMBC a 1D NOESY přiřaďte signály jednotlivým atomům molekuly, tj. napište k atomům čísla odpovídajících signálů  $^1\text{H}$  či  $^{13}\text{C}$  (vzhledem k symetrii molekuly stačí popsat pouze polovinu molekuly).
4. Pro přiřazení signálů diastereotopních vodíků využijte model molekuly a konfrontujte ho se spektry 1D NOESY (vypovídají o prostorové vzdálenosti atomů), g-COSY (malá interakce odpovídá  $^4J_{\text{HH}}$  interakci s W uspořádáním vazeb mezi dvěma  $^1\text{H}$ ) a g-HMBC (interakce je větší, tj. intenzita krosníku, pokud je dihedrální úhel mezi  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  blízký  $180^\circ$  nebo  $0^\circ$ , a velmi malá při dihedrálním úhlu  $90^\circ$ ).
5. Zaznamenejte do struktury molekuly pomocí čar nebo šipek interakce (plnou čarou silné, tečkovanou čarou slabé) pozorované v g-HMBC.



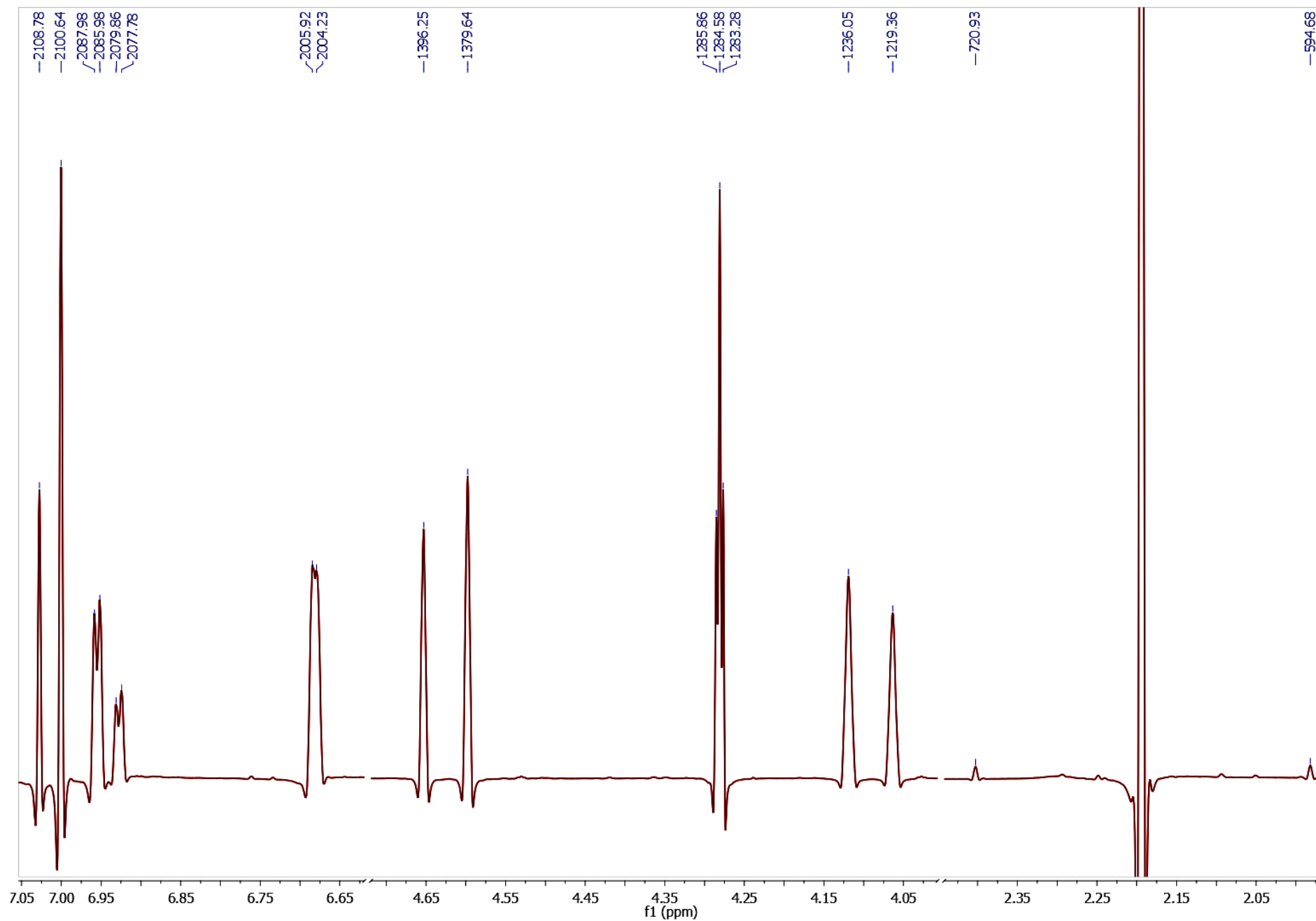
S1

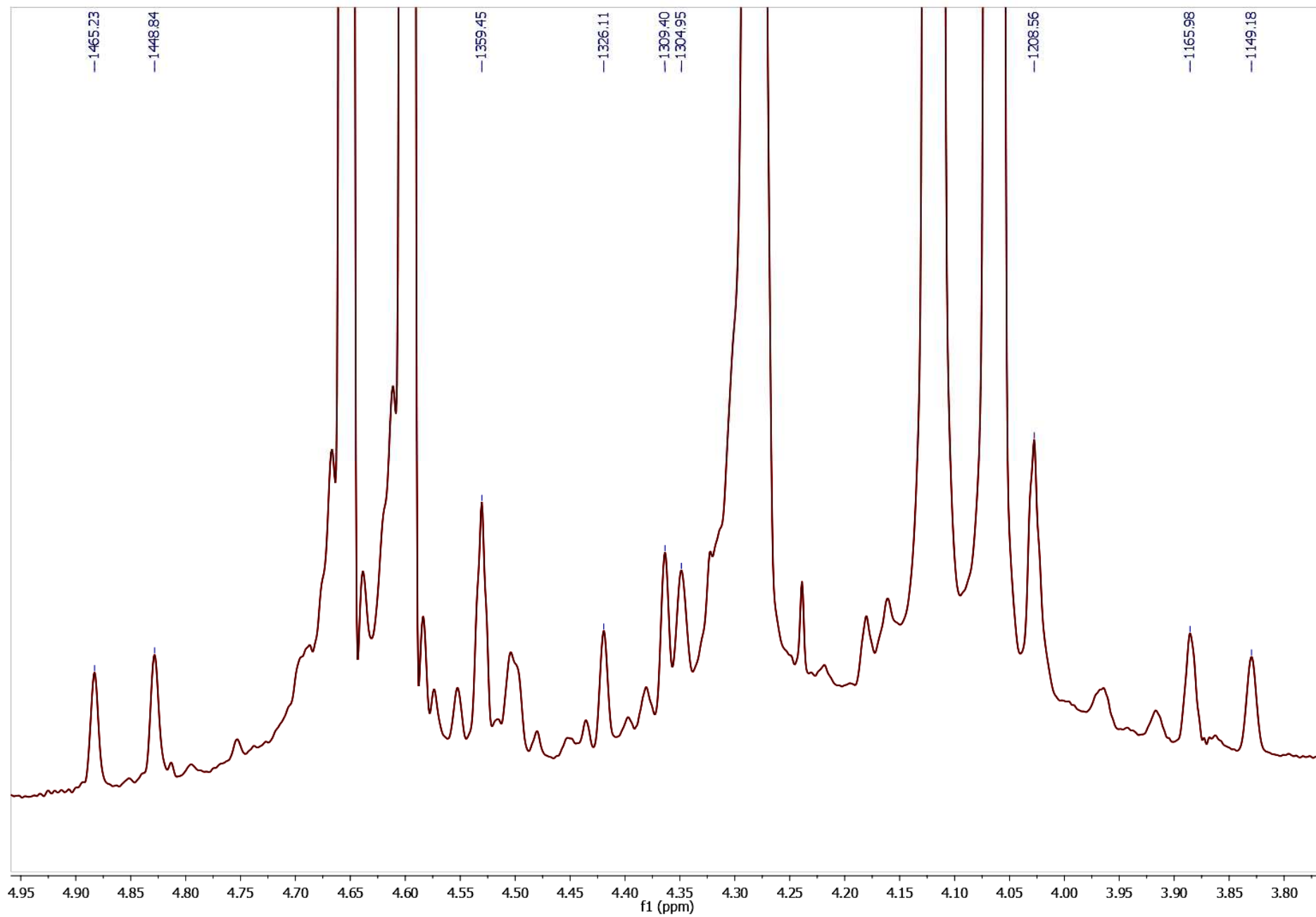
$^1\text{H}$  NMR



**S2** **$^1\text{H}$  NMR**

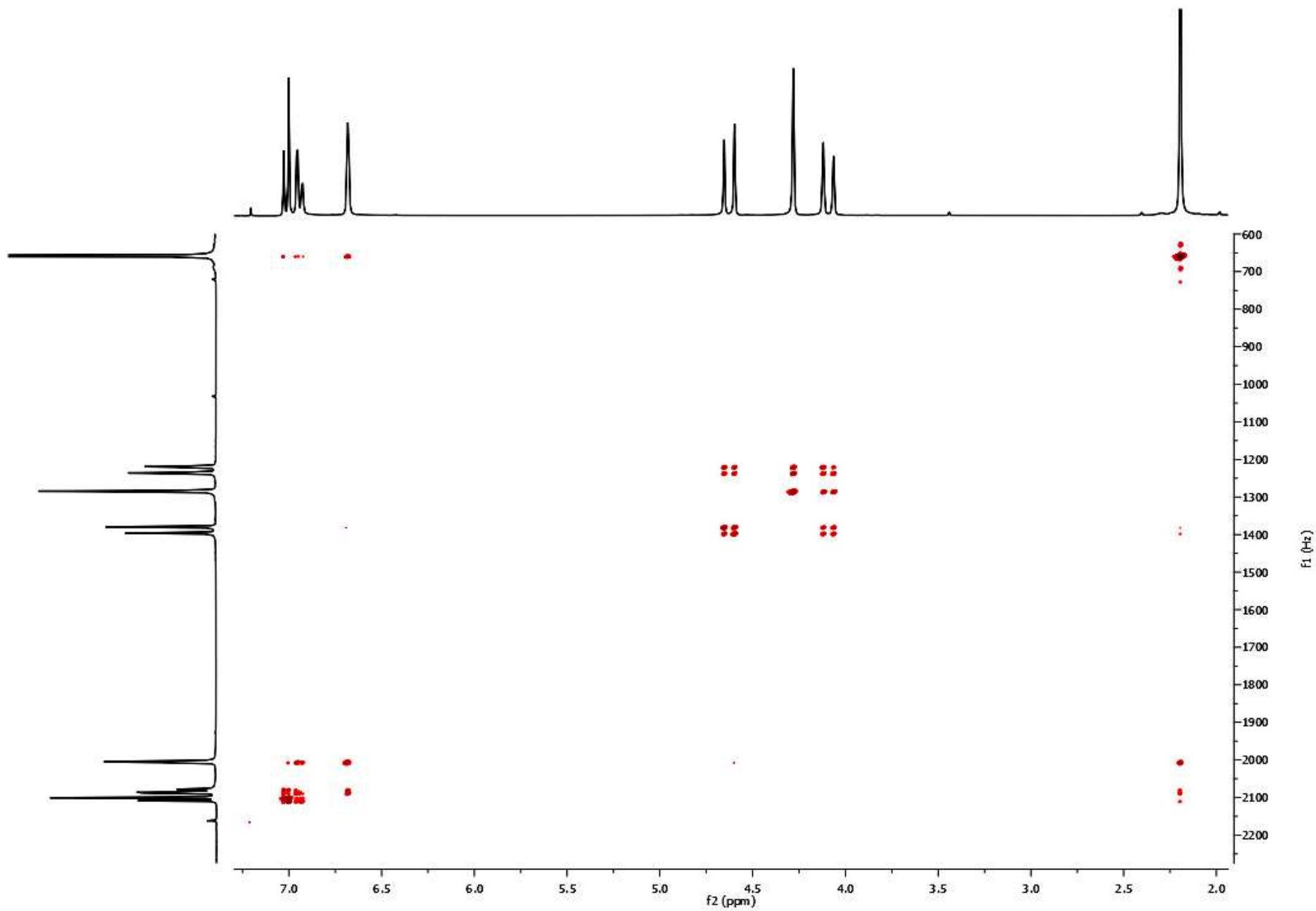
zpracováno s důrazem na rozlišení



**S3** **$^1\text{H}$  NMR**zesíleno pro identifikaci  $^{13}\text{C}$  satelitů

S4

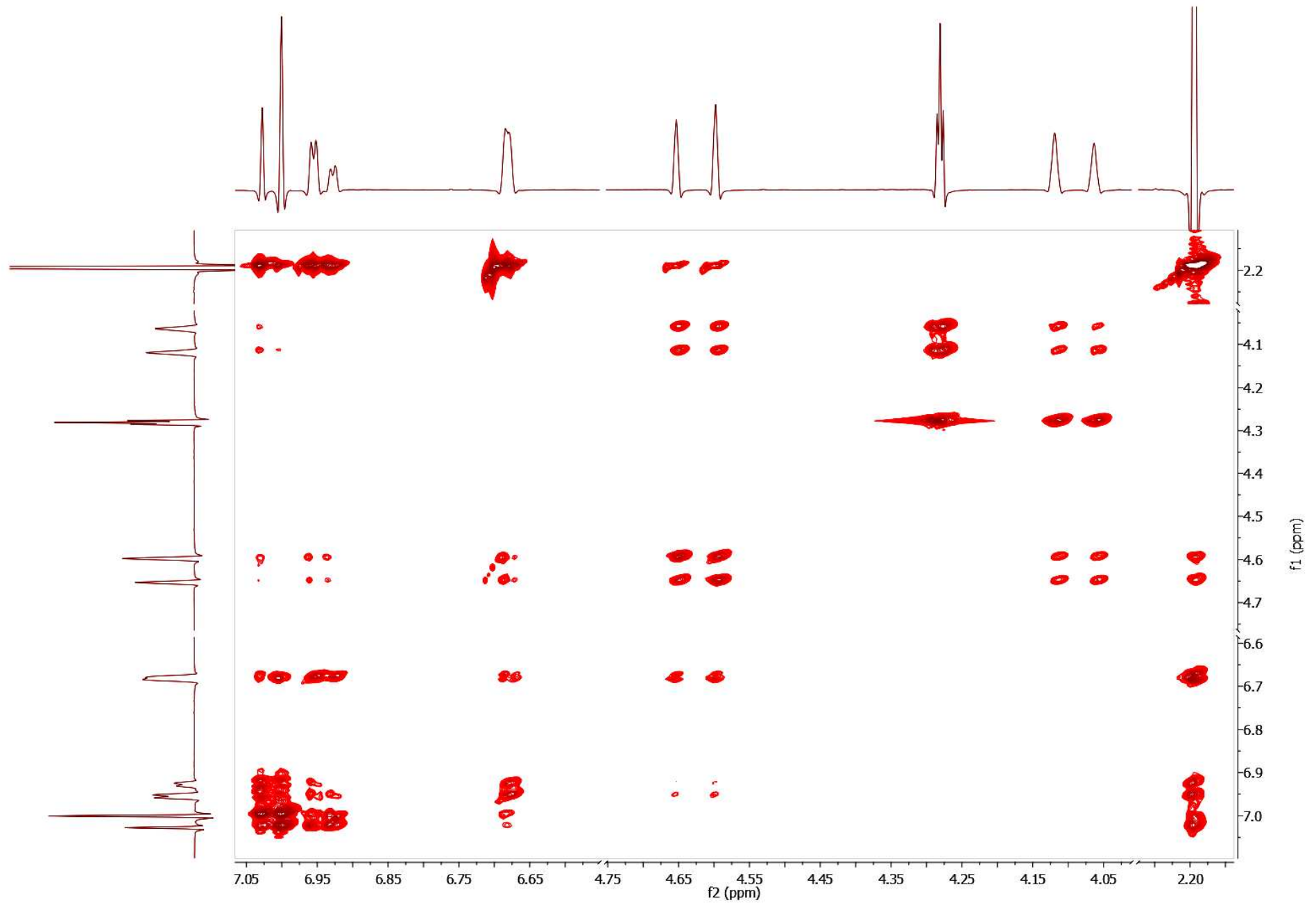
$^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  g-COSY 2D NMR



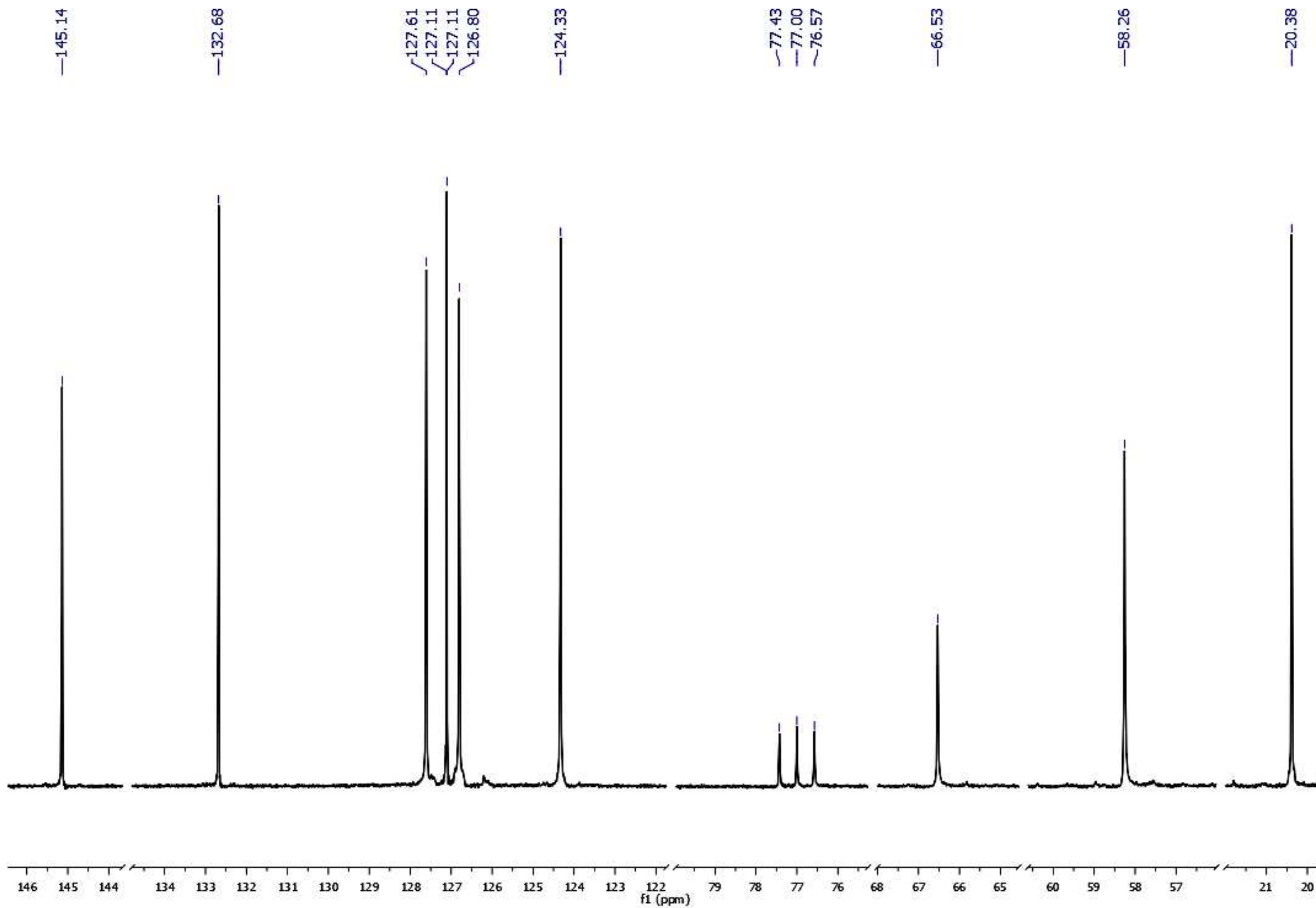
S5

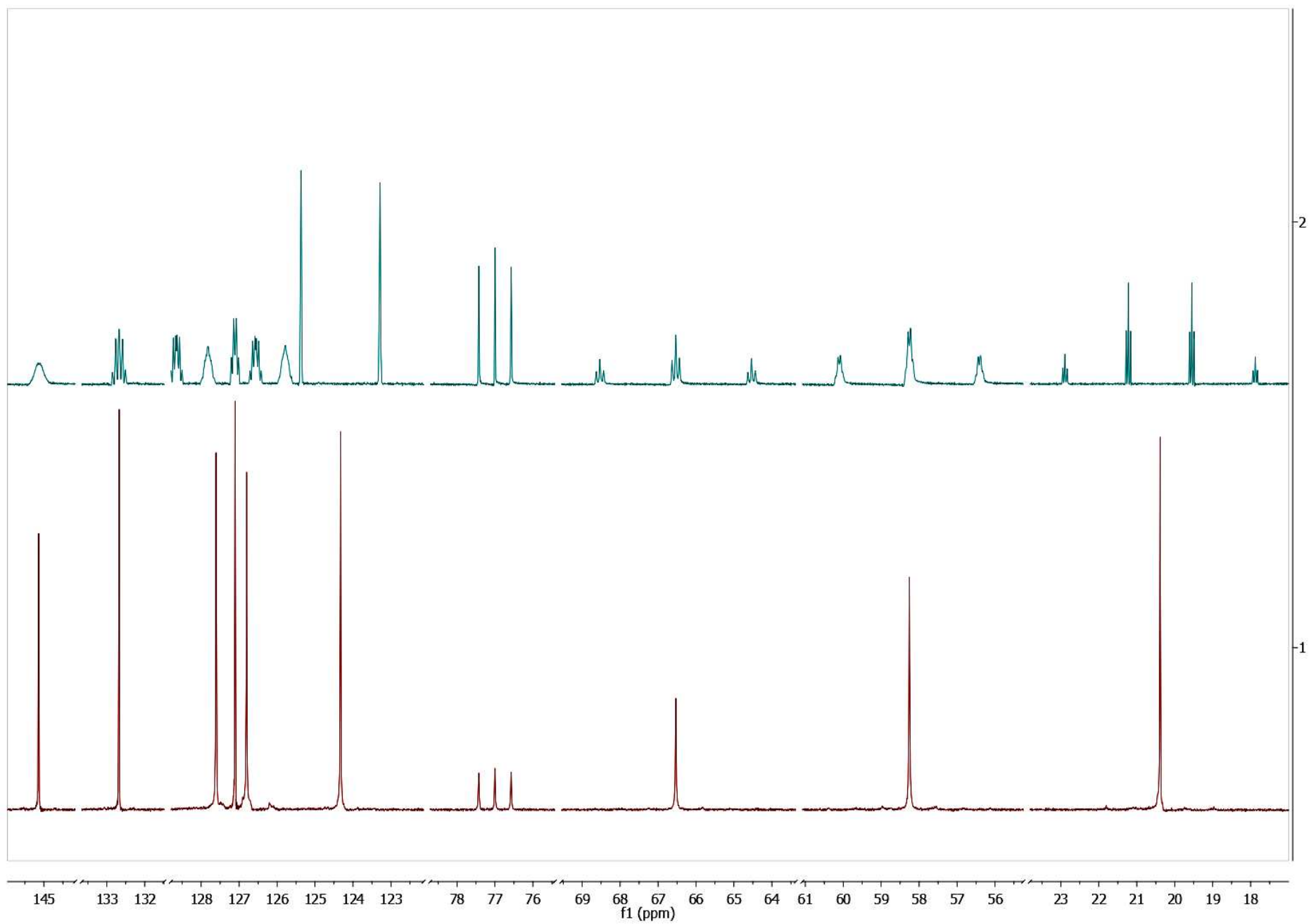
$^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  g-COSY 2D NMR

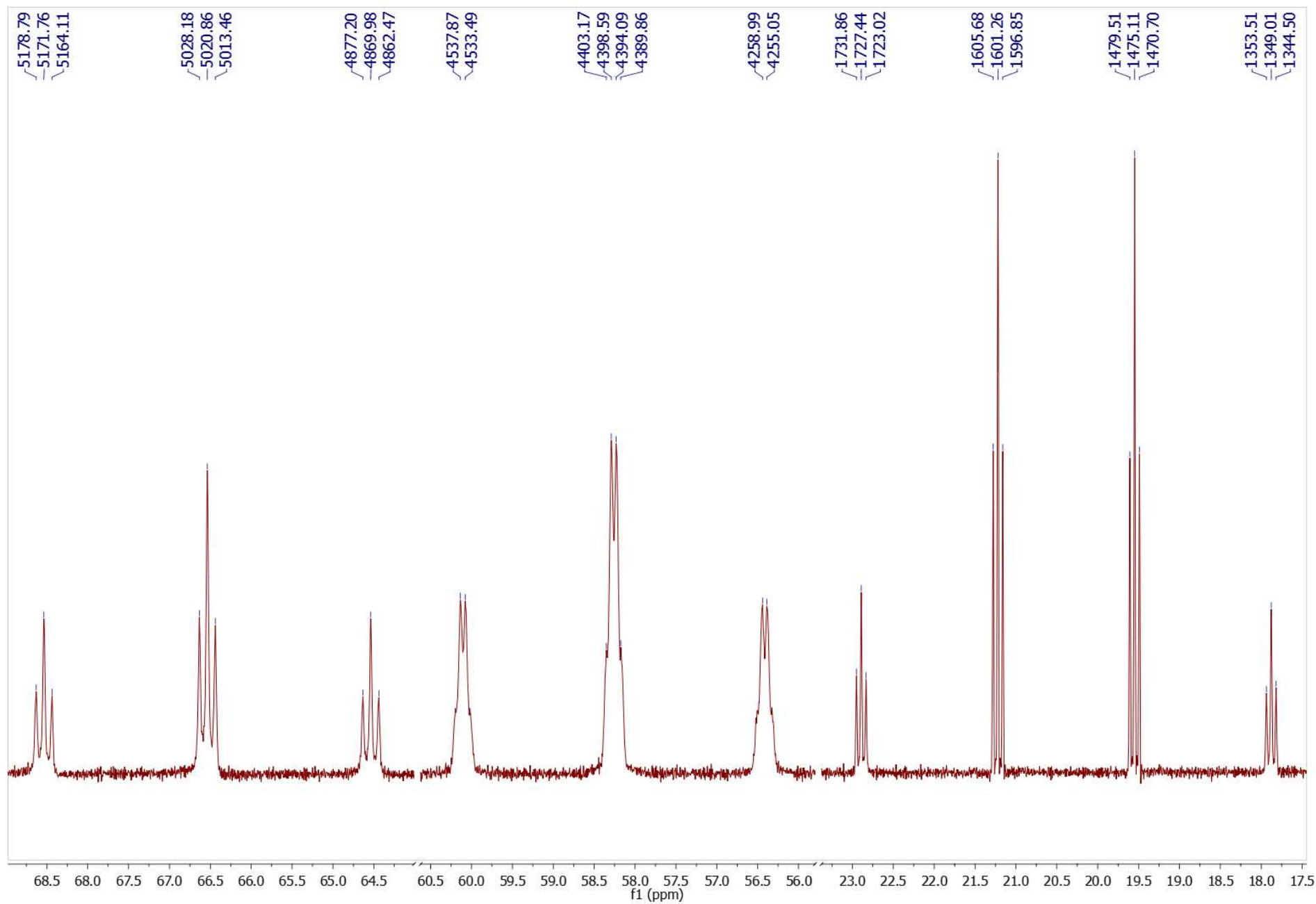
výřez oblastí krosníků

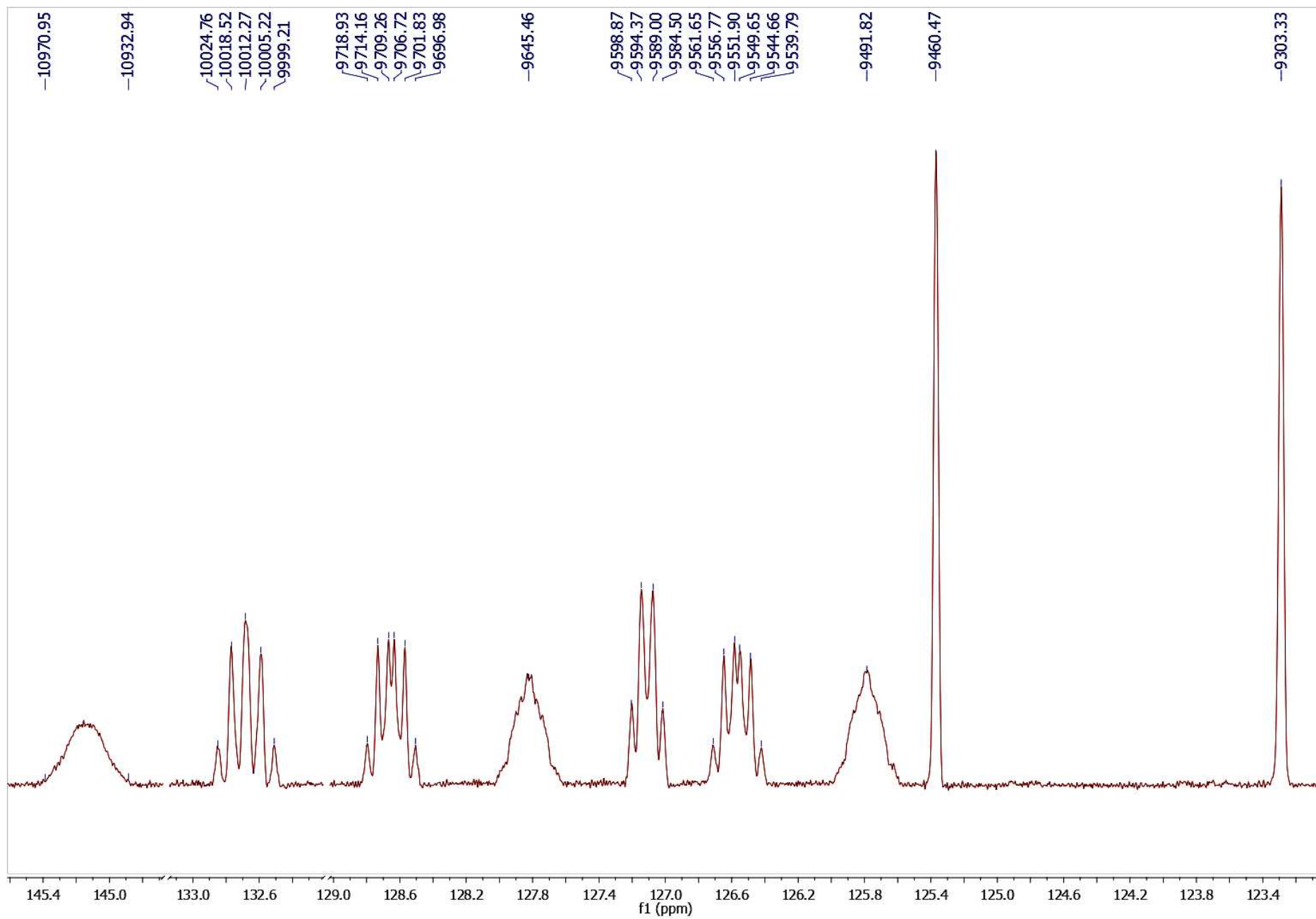




**S6** **$^{13}\text{C}$  NMR s šumovým dekaplingem  $^1\text{H}$** 

**S7** **$^{13}\text{C}$  NMR bez / s šumovým dekaplingem  $^1\text{H}$** 

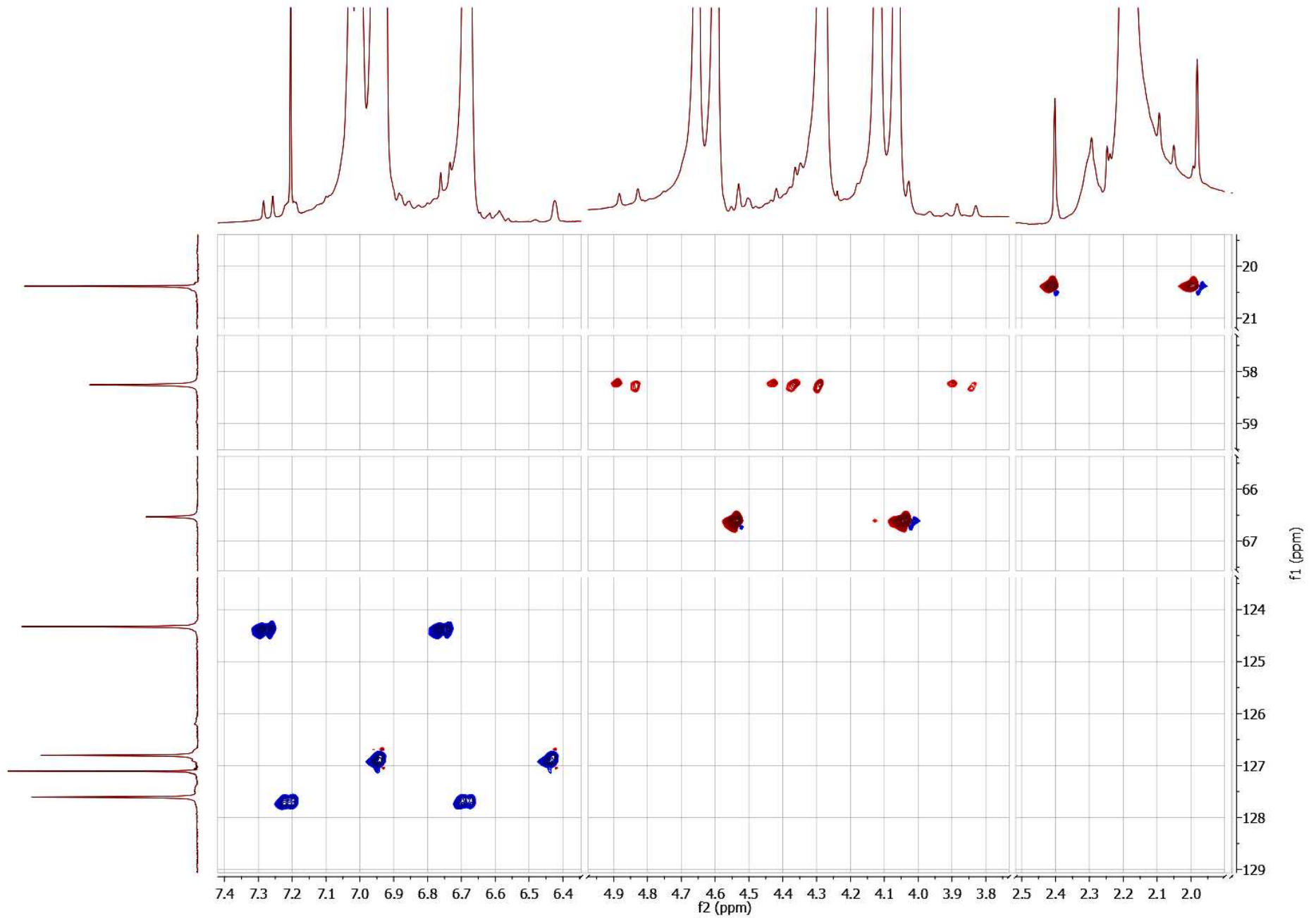
**S8** **$^{13}\text{C}$  NMR bez dekaplingu  $^1\text{H}$** 

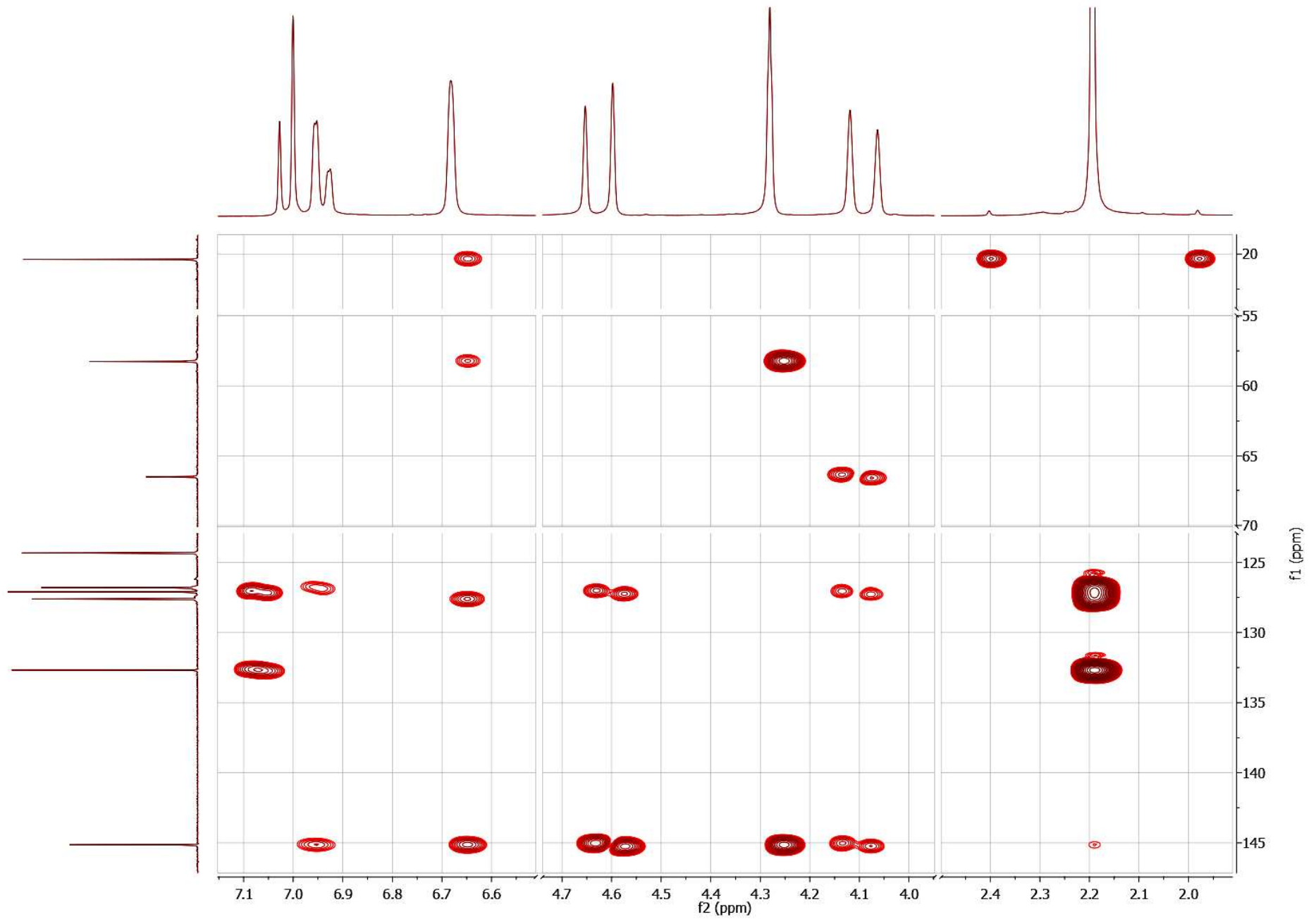
**S9** **$^{13}\text{C}$  NMR bez dekaplingu  $^1\text{H}$** 

S10

$^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  g-HSQC 2D NMR

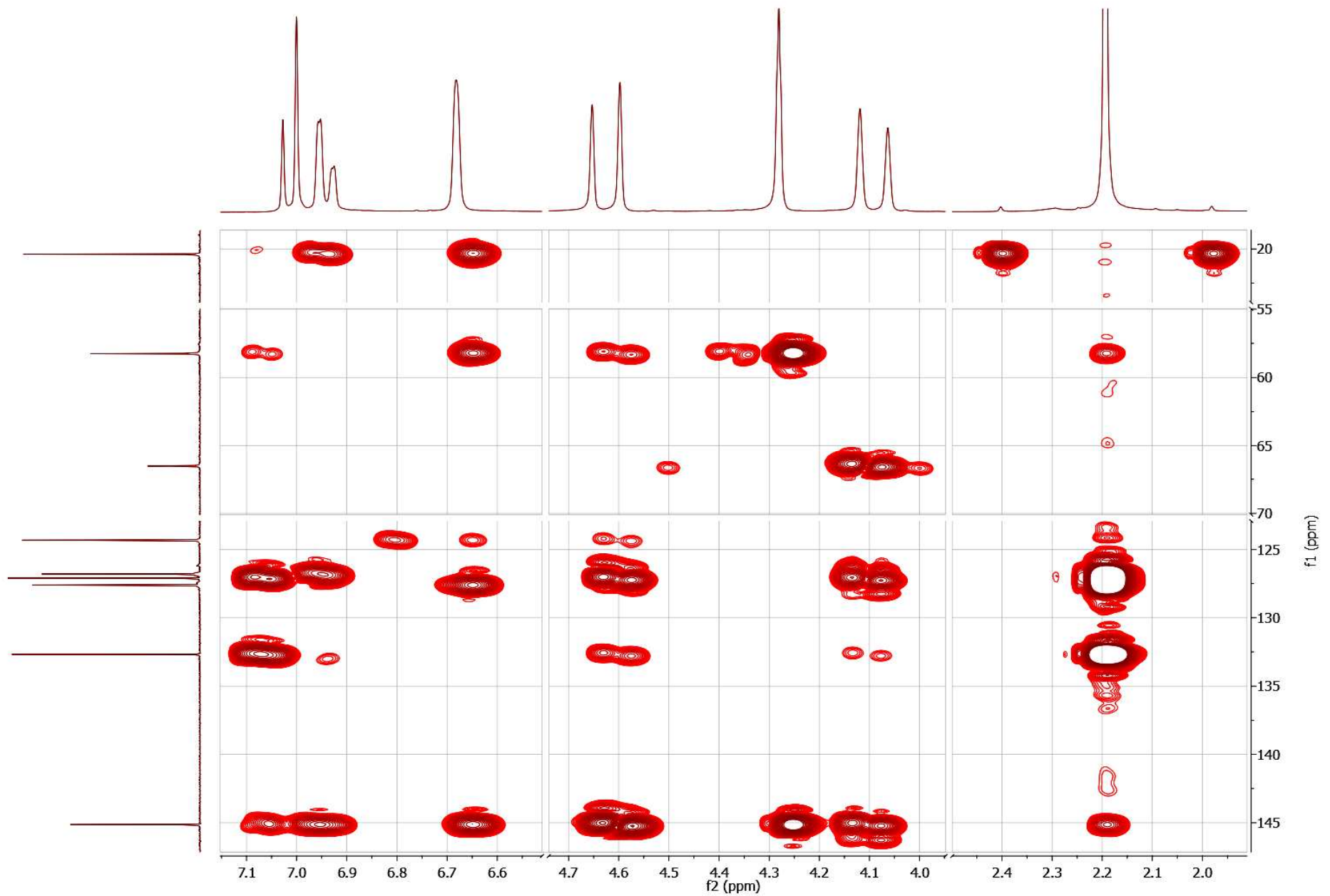
bez dekaplingu  $^{13}\text{C}$



**S11** **$^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  g-HMBC 2D NMR**

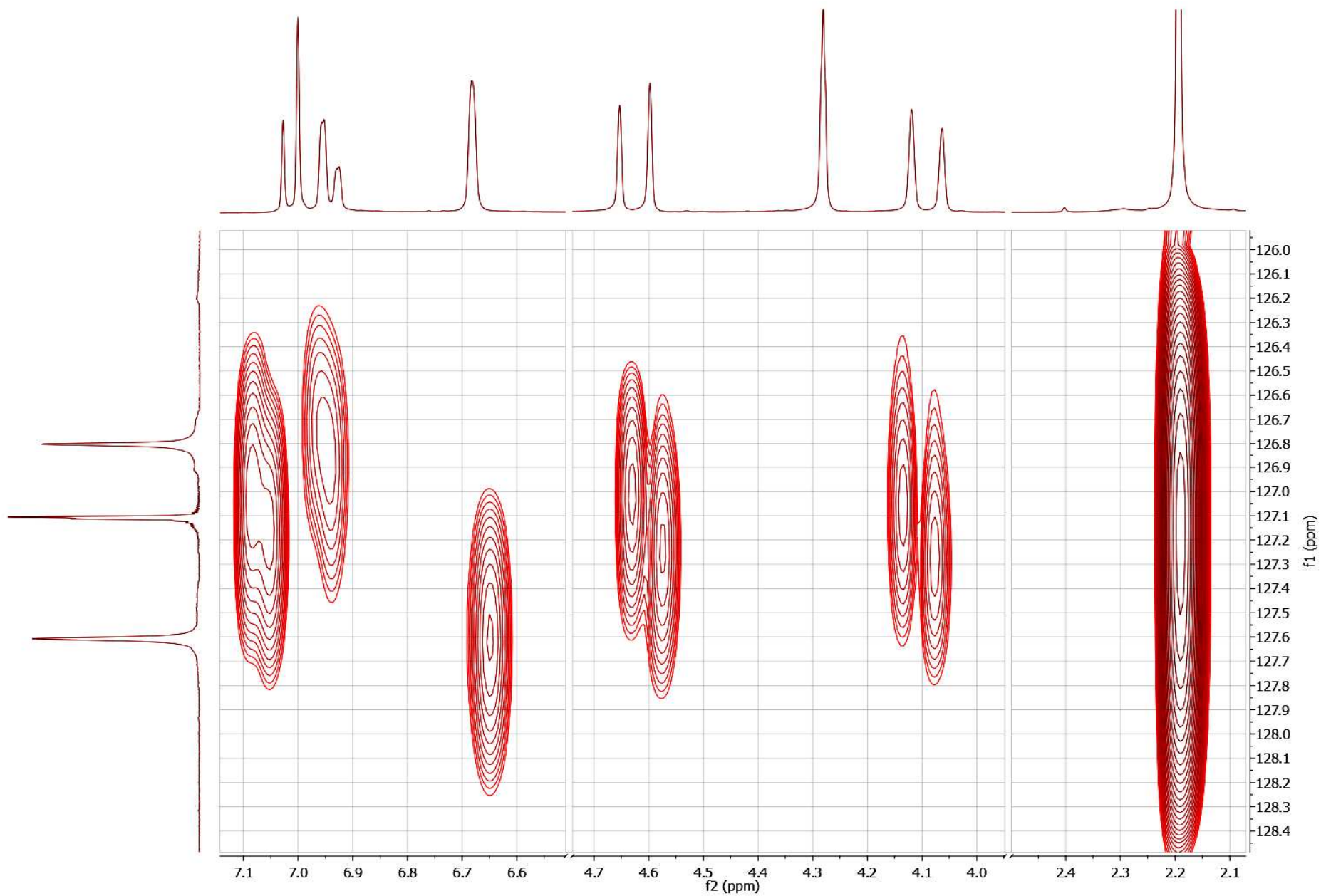
**S12** **$^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  g-HMBC 2D NMR**

zvýšená intenzita



S13

$^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  g-HMBC 2D NMR





S14

$^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  NOESY1D NMR

