

¹H NMR

H1: 8.61, 1H, ddd, 4.9, 1.9, 1.0; ¹³C satelit ~178 Hz

H2: 7.72, 1H, dt, 8.0, 1.1; ¹³C satelit ~166 Hz

H3: 7.68, 1H, dd, 7.6, 1.8; ¹³C satelit ~160 Hz

H4: 7.59, 1H, ddd – td, 7.7, 1.9; ¹³C satelit ~162 Hz

H5: 7.28, 1H, ddd, 8.3, 7.4, 1.8

H6: 7.09, 1H, ddd, 7.5, 4.9, 1.3; ¹³C satelit ~165 Hz

H7: 6.99, 1H, ddd – td, 7.5, 1.1; ¹³C satelit ~162 Hz

H8: 6.90, 1H, dd, 8.3, 1.0; ¹³C satelit ~159 Hz

H9: 3.75, 3H, s; ¹³C satelit ~144 Hz

¹³C NMR

C1: 156.80 (posun + apt C); m

C2: 156.01 (posun + apt C); m

C3: 149.29 (posun + apt CH); ddd, 178, 7, 3 Hz

C4: 135.50 (posun + apt CH); dd, 162, 6 Hz

C5: 131.04 (posun + apt CH); ddd, 160, 9, 2 Hz

C6: 129.81 (posun + apt CH); dm, 158 Hz

C7: 129.03 (posun + apt C); m

C8: 125.01 (posun + apt CH); dd, 166, 7 Hz

C9: 121.55 (posun + apt CH); ddd – dt, 163, 7 Hz

C10: 120.92 (posun + apt CH); dm, 160 Hz

C11: 111.25 (posun + apt CH); 158, 8 Hz

C12: 55.48 (posun + apt CH₃); 144 Hz

Přirazení (jeden z možných postupů):

1. CH₃ je jediný signál = H9
2. gHSQC: H9-C12
3. gHMBC: H9-C1 (vysoký posun C1 potvrzuje O)
4. NOESY1D: H9-H8
5. gCOSY: H8-H5-H7-H3
6. gHSQC: H8-C11, H5-C6, H7-C10, H3-C5
7. gHMBC: H3-C6 a H3-C2 (vysoký posun C2 potvrzuje N)
8. gHMBC: C2-H4 (jiná multiplicita než by odpovídala H1)
9. gCOSY: H1-H6-H4-H2
10. gHSQC: H1-C3 (¹J_{CH} = 178 Hz potvrzuje sousedství N), H2-C8, H4-C4, H6-C9
11. zbývá C7, gHMBC: C7-H8, C7-H7, chybí C7-H2

