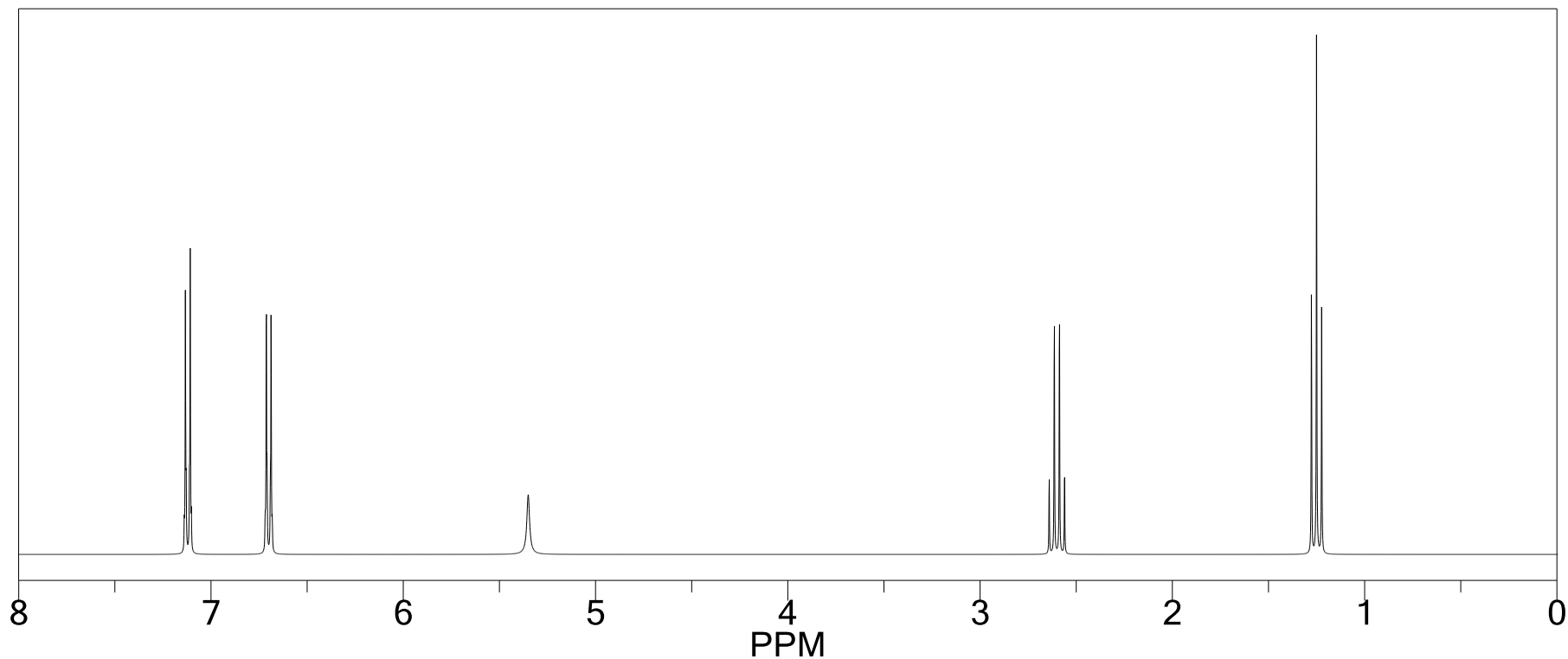
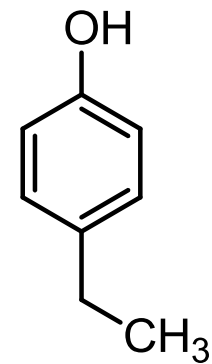


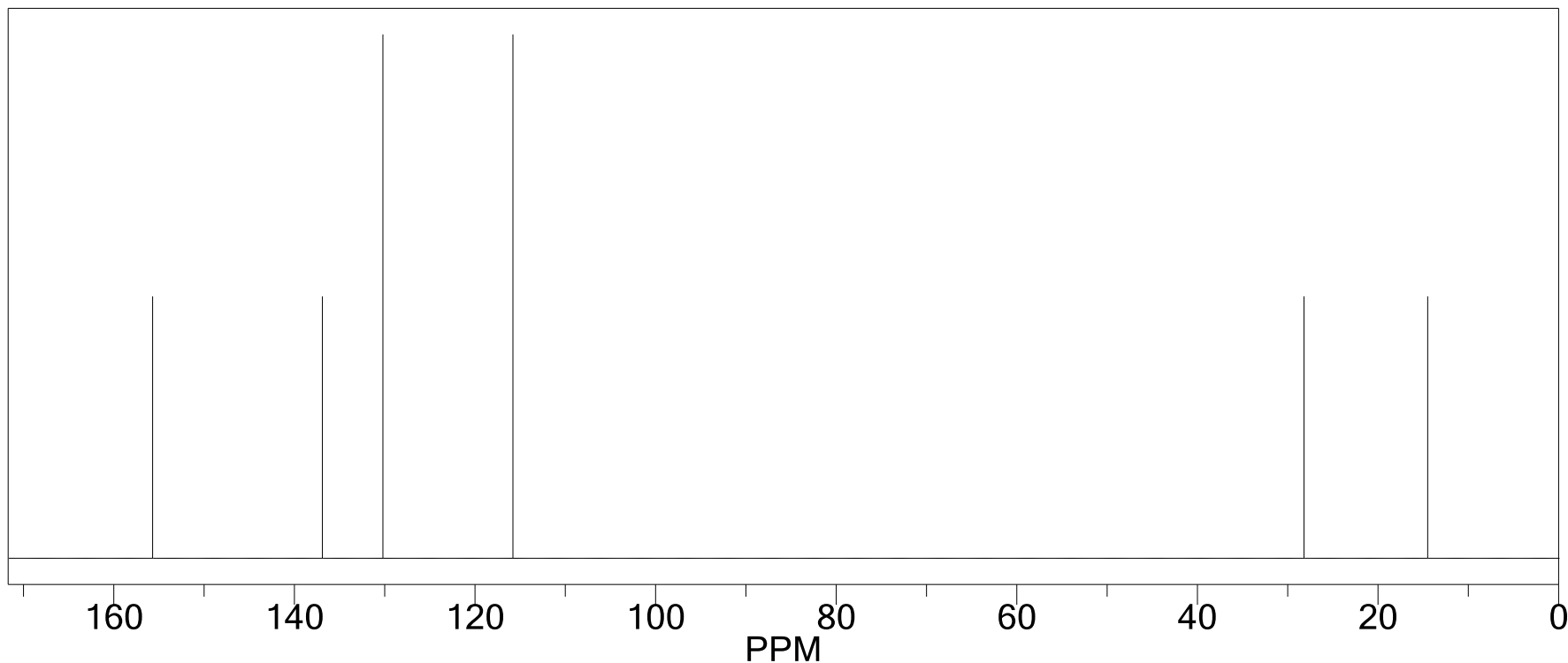
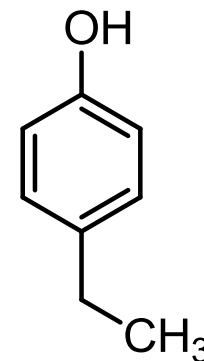
- přiřaďte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^1H spektru
- u každého signálu určete integrální intenzitu



- přiřadte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^{13}C spektru

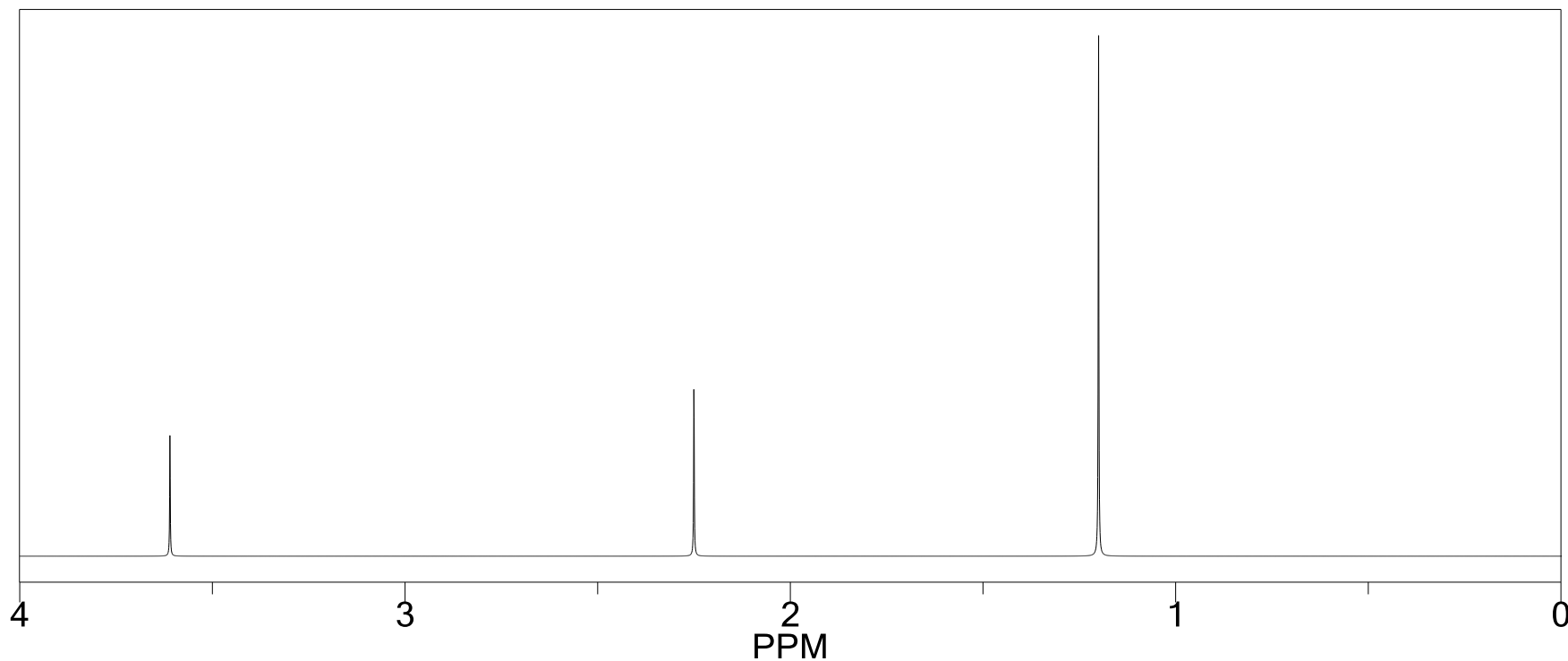
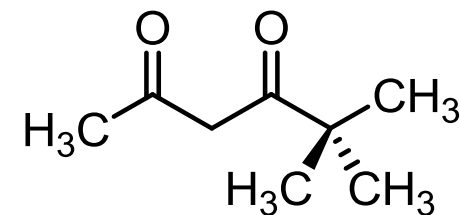
Trendy v chemickém posunu bývají podobné v ^1H i ^{13}C spektroskopii. V protonovém spektru Vám s přiřazením signálů může pomoci štěpení.

Pokud víte, kterým vodíkům přísluší triplet a kvartet ve výše uvedeném ^1H spektru, neměl by být problém přiřadit signály na 15 a 28 ppm v ^{13}C spektru.

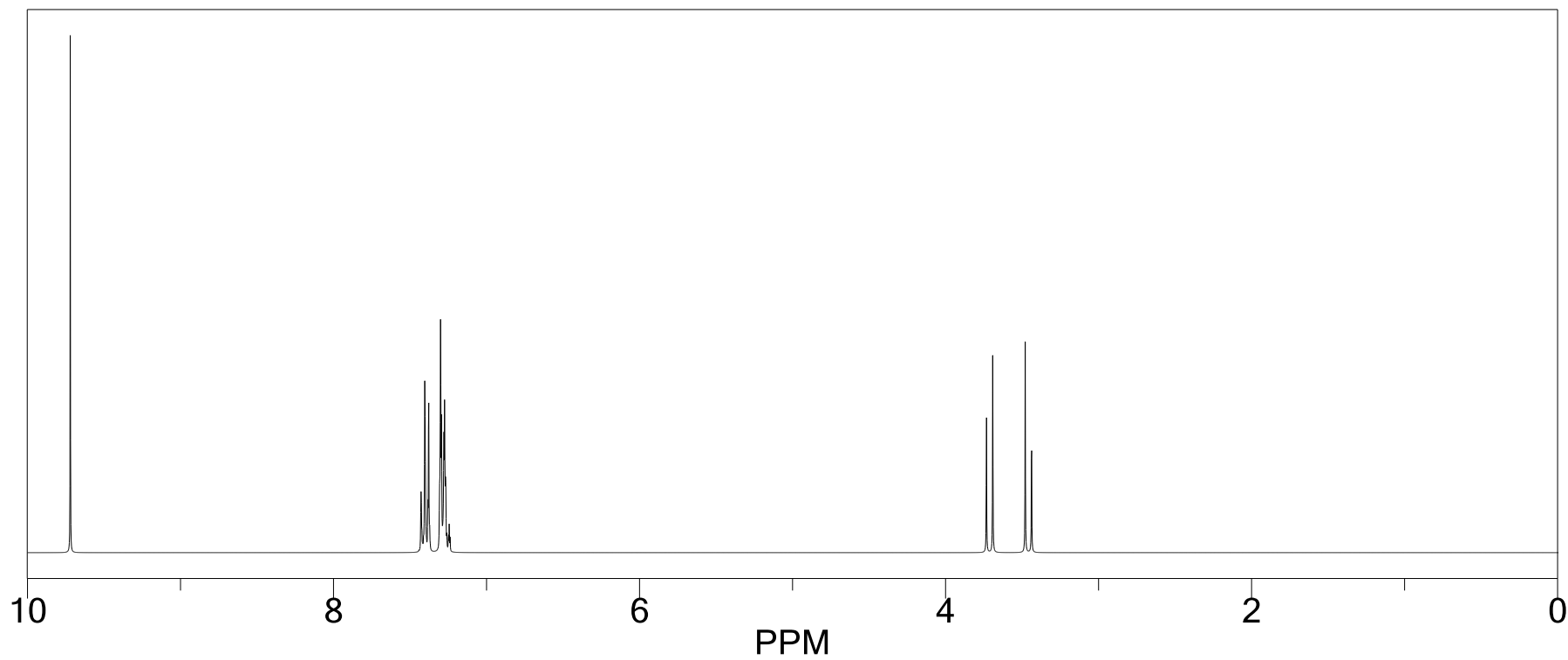
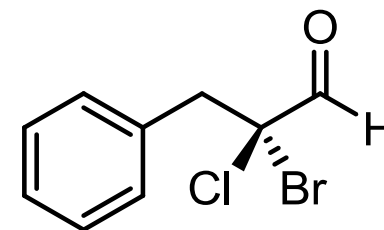


- přiřadte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^1H spektru
- u každého signálu určete integrální intenzitu

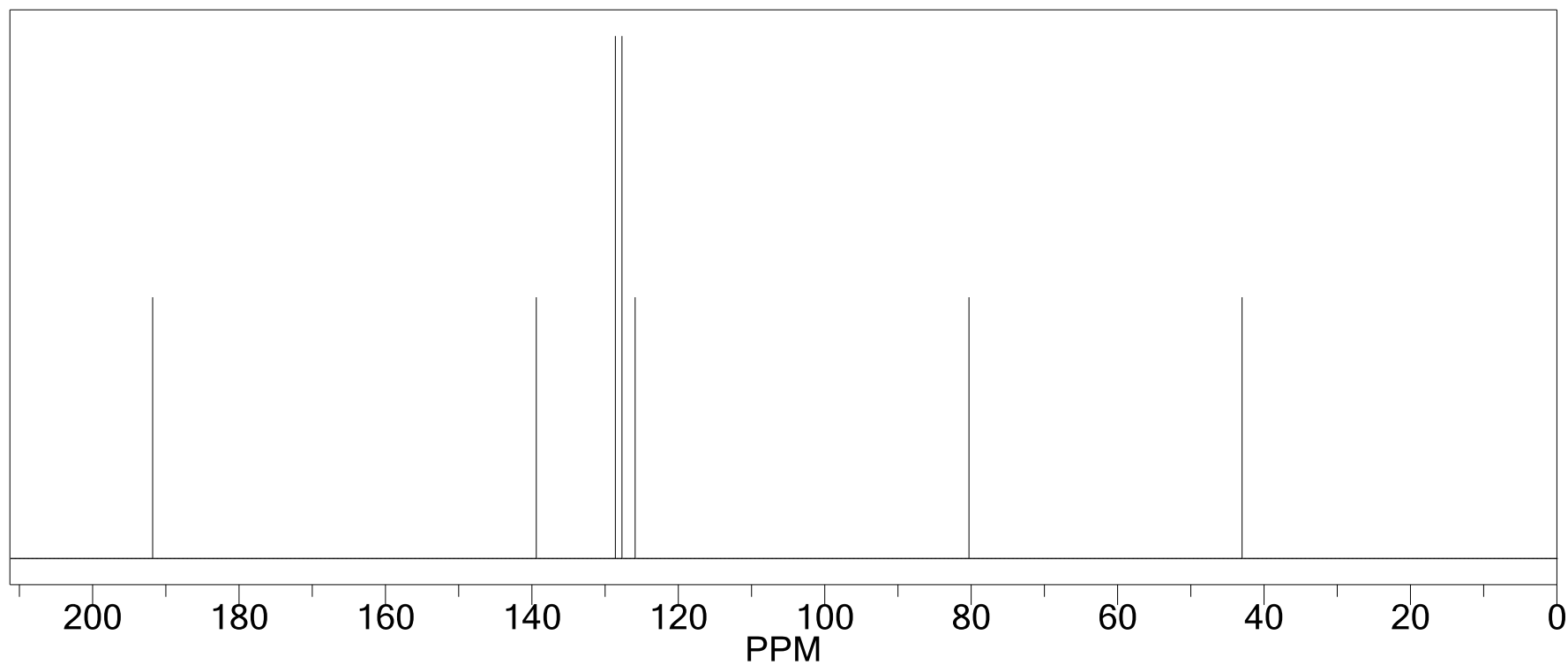
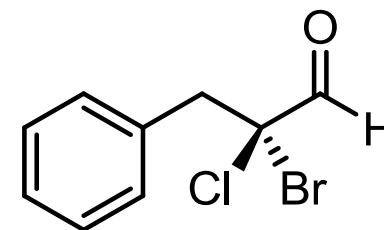
za běžných podmínek je obvykle rotace kolem jednoduché vazby velmi rychlá



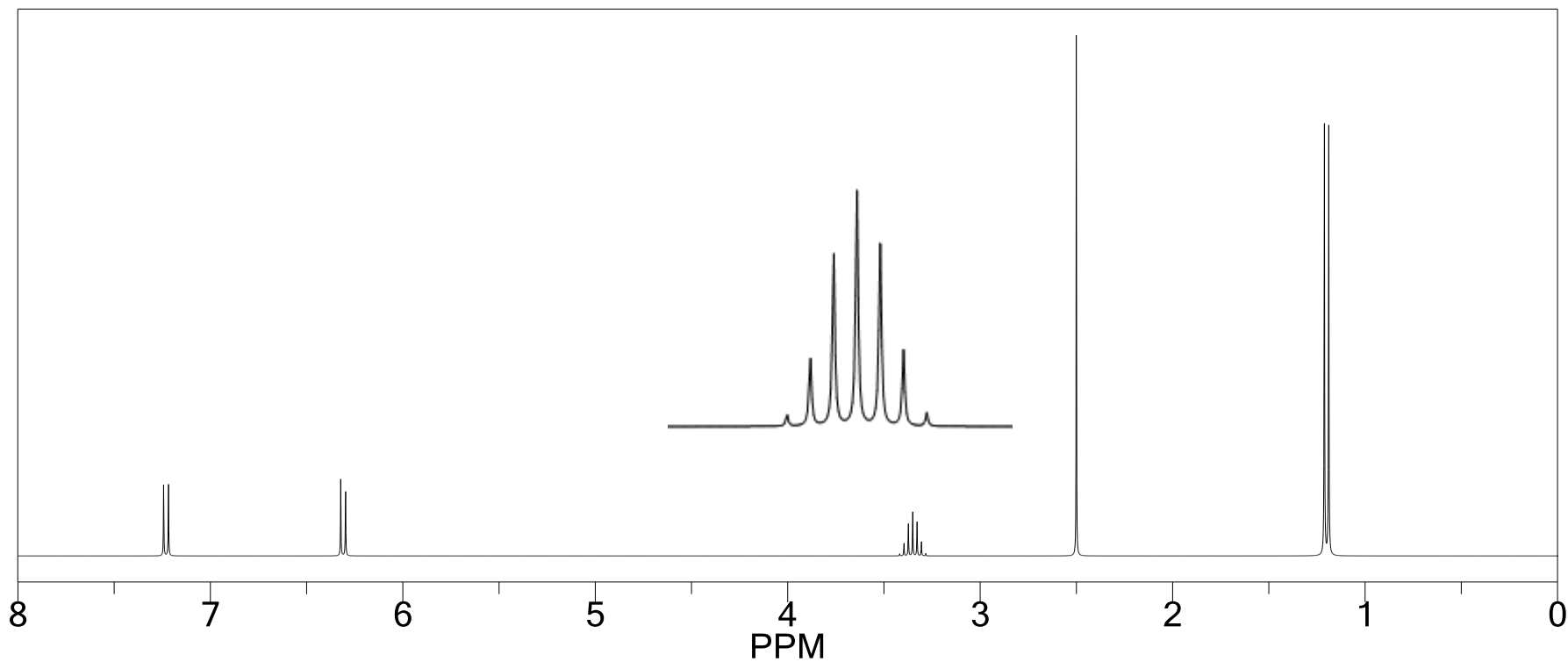
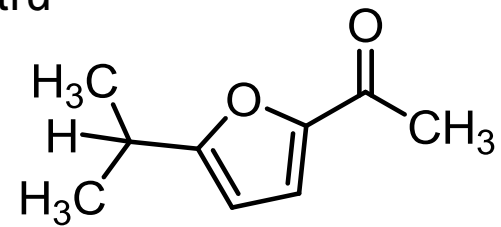
- přiřaďte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^1H spektru
- u každého signálu určete integrální intenzitu



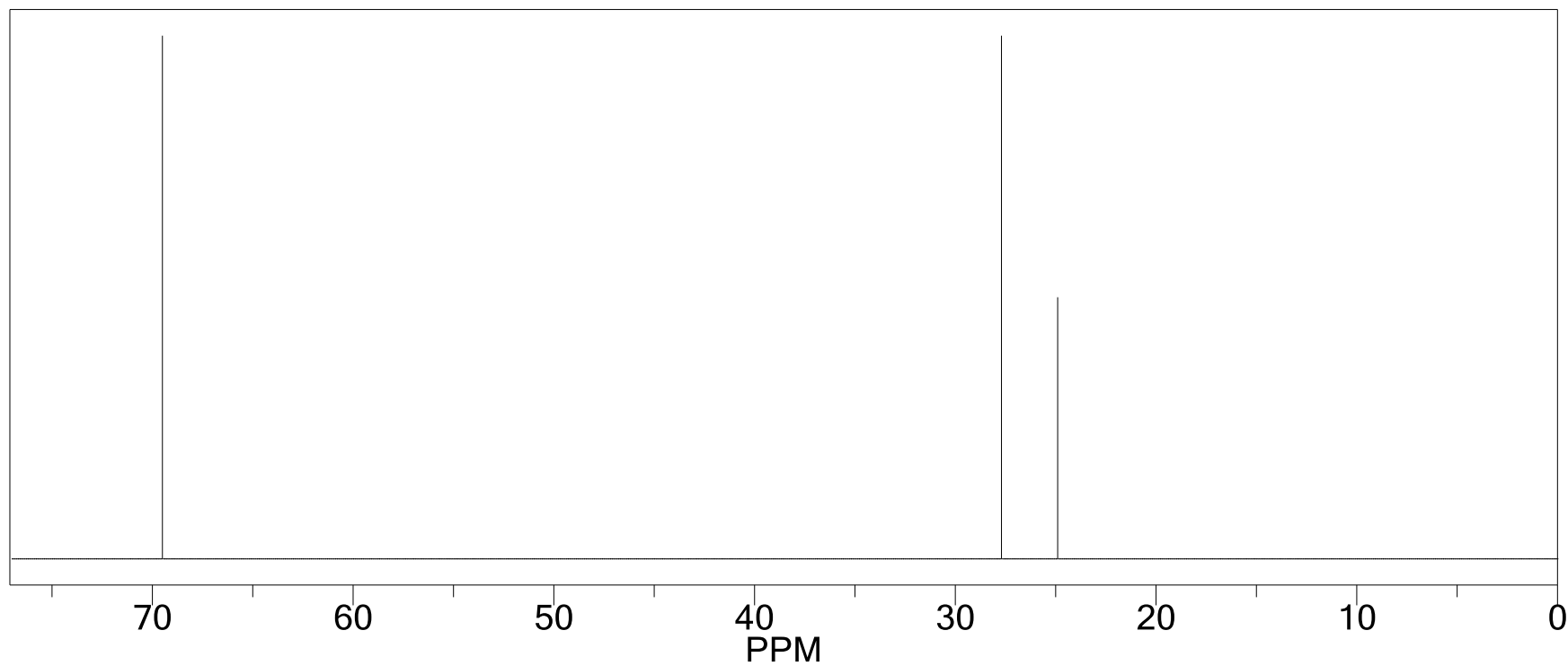
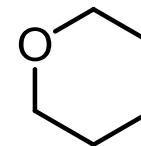
- přiřaďte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^{13}C spektru



- přiřadte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^1H spektru
- u každého signálu určete integrální intenzitu

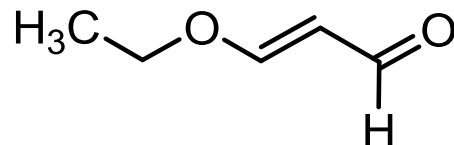


- přiřaďte signály (popřípadě skupiny signálů) v ^{13}C spektru



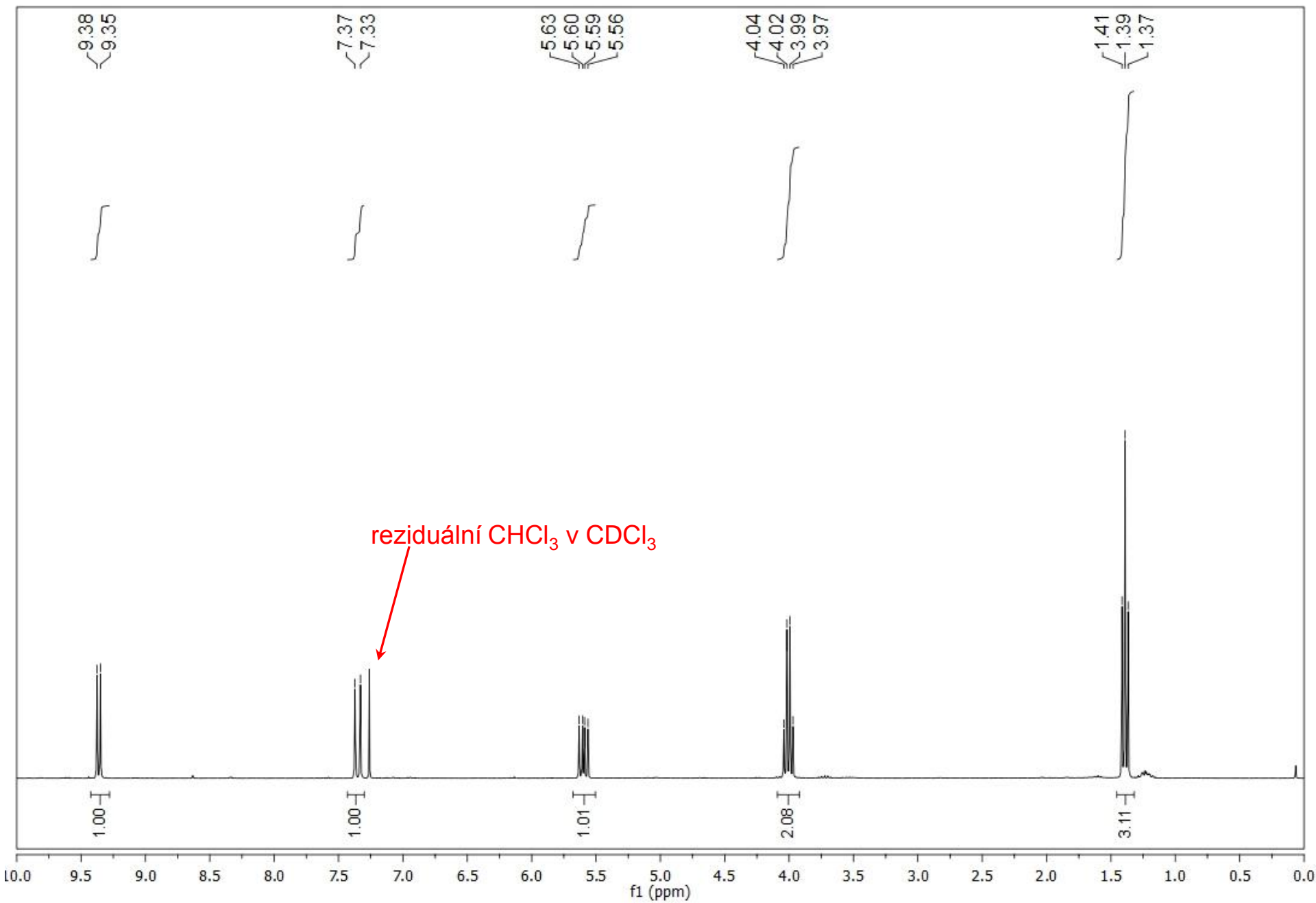
NMR spektra, která jsem Vám doposud ukazoval, vypadala vždy pěkně: multiplety byly hezky rozlišené, ve spektru nebyly signály nečistot,... To proto, že to nebyla reálná spektra. Byla vygenerovaná počítačovým programem. Ne snad, že by to vadilo. K ukázce toho, jak spektra vypadají, jaké jsou trendy ve štěpení a v chemickém posunu, to více než stačilo.

Ovšem stojí za to vidět i realitu. Jedno relativně dobře vypadající spektrum vidíte na další stránce. Patří této molekule:

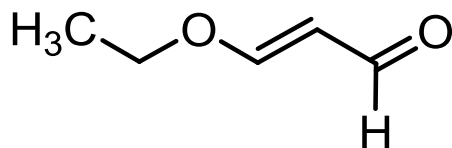


Můžete se pokusit přiřadit signály (či skupiny signálů). Číslo pod signály udává integrální intenzitu.

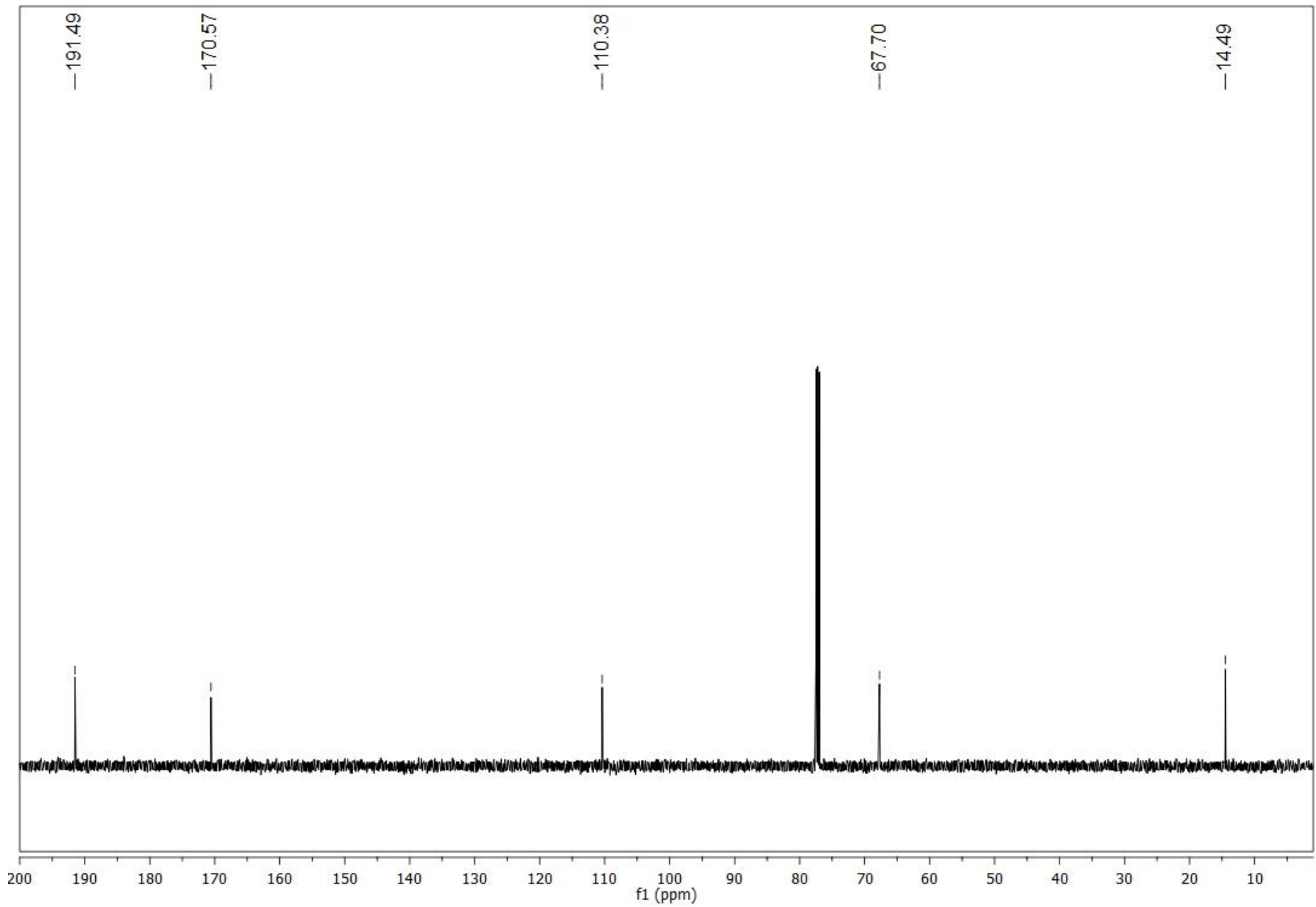
Za povšimnutí stojí **singlet** na **7.26 ppm** – je vyznačen šipkou. Ten nepatří žádnému vodíku z naší molekuly. NMR spektra se měří v roztoku (v tuhé fázi to lze taky, ale je to komplikovanější). Jenže většina běžných rozpouštědel obsahuje též vodík. To je problém, rozpouštědlo je v obrovském přebytku, jeho signály by tak mohly zcela překrýt signály naší molekuly. To má elegantní řešení. Používáme rozpouštědla, kde jsou vodíky nahrazeny deuteriem. Dnes je komerčně dostupné obrovské množství deuterovaných rozpouštědel (D_2O , $CDCl_3$, $DMSO-d_6$, CD_3OD ,...). Podíl deuteria v rozpouštědlech se blíží 100 %. Malé procento molekul rozpouštědla však obsahuje běžný vodík. To je singlet na 7.26 ppm a patří chloroformu. Nevadí nám tam – naopak, dá se využít ke **kalibraci chemického posunu**.



Na následující stránce je další reálné spektrum, patří té samé molekule, tj. této:



Tentokrát je to však ^{13}C spektrum. Opět vidíme reziduální signál chloroformu: vyčnívá kolem cca **77 ppm**. Povšimněte si **šumu základní linie** (oproti například ^1H spektrům), je to dáno malým zastoupením uhlíku ^{13}C . Abychom získali uhlíkové spektrum se zcela rovnou základní linií (často se používá anglický výraz *baseline*), museli bychom použít velmi koncentrovaný vzorek a experiment provádět dlouhou dobu. To obvykle není nutné (i s šumem v základní linii rozeznáme signály naší molekuly) ani žádoucí (jakmile má spektrum dostačující kvalitu, není potřeba dále měřit – vzhledem k výsadnímu postavení NMR mezi analytickými metodami, jistě vždy čeká někdo další, kdo bude chtít měřit svůj vzorek).



kolik signálů v ^1H a ^{13}C spektru budou mít tyto molekuly?

