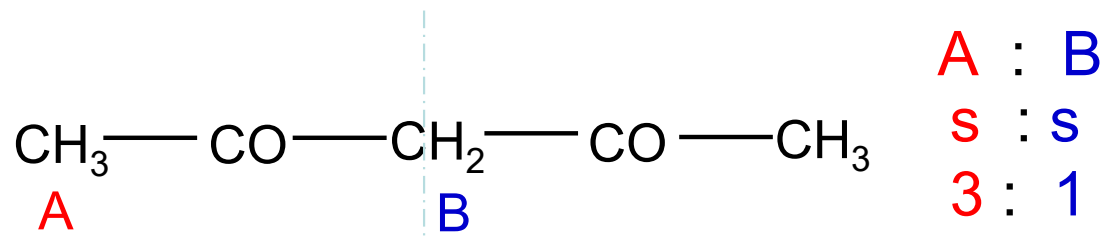
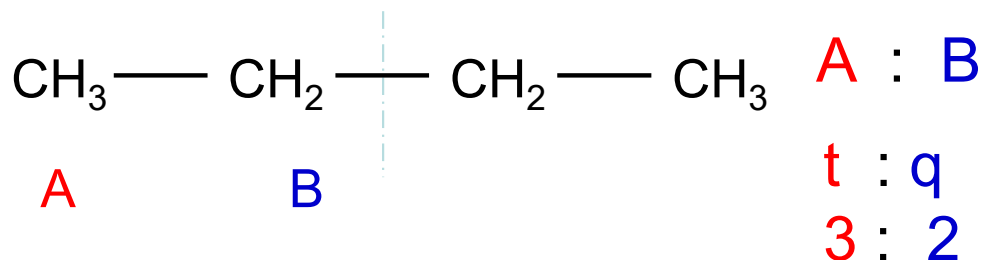
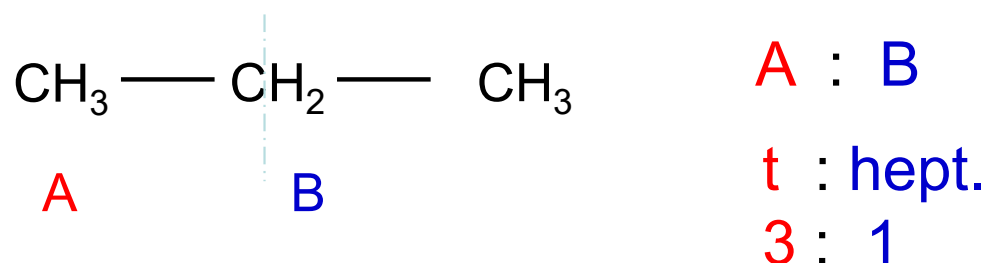
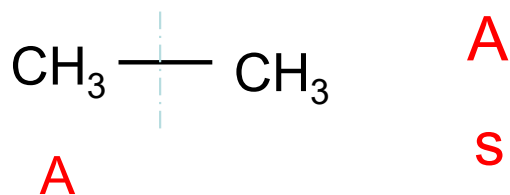
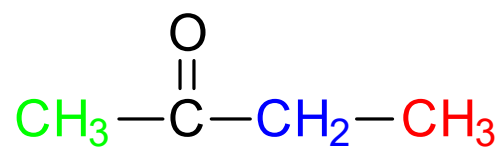


Úvod do interpretace ^1H spekter alifatických sloučenin

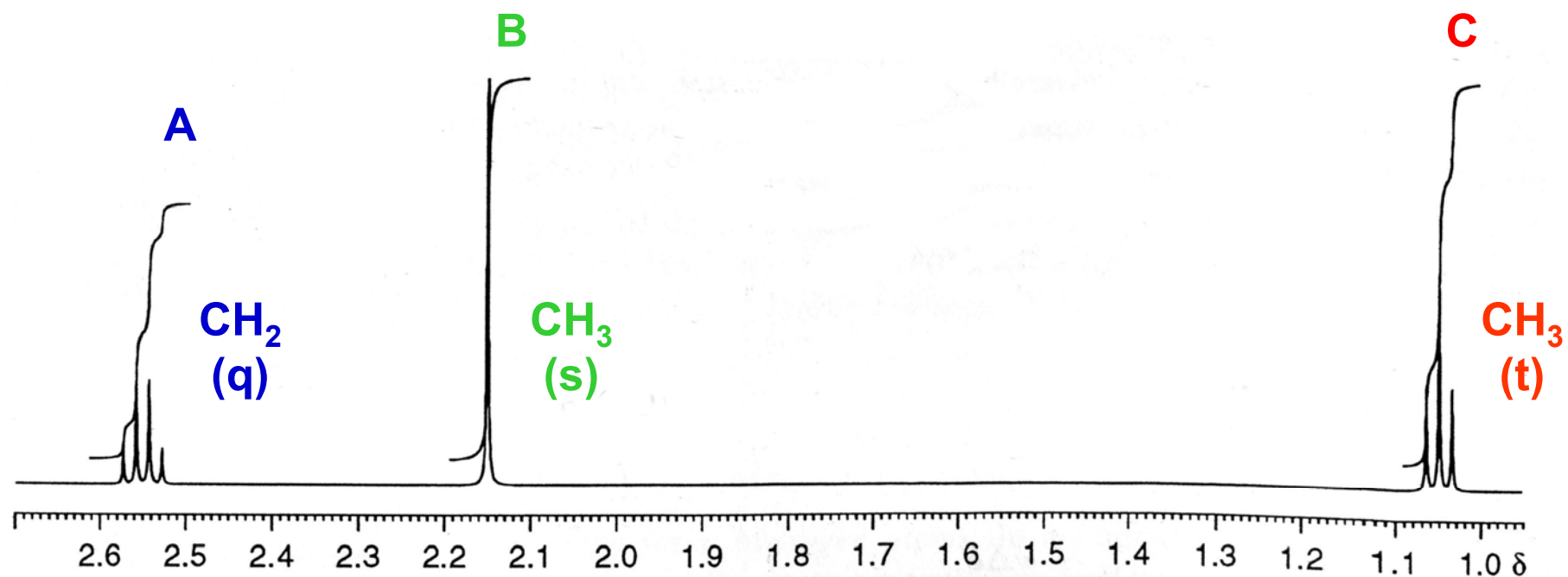
- Kolik signálů budu očekávat ve spektru?
- Kdy bude signál štěpen na singlet (s), dublet (d), triplet (t), kvadruplet (q) nebo multiplet (m)?
- V jakém poměru jsou štěpené signály?
- Co nám říká integrační intenzita (1:1, 2:1, 3:1, 3:2, atd.)?



Příklad 1

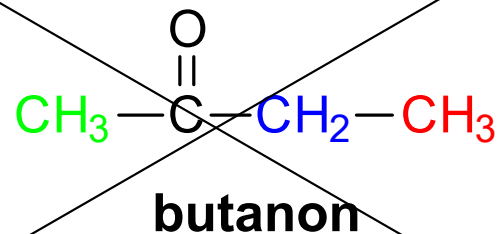


butanon

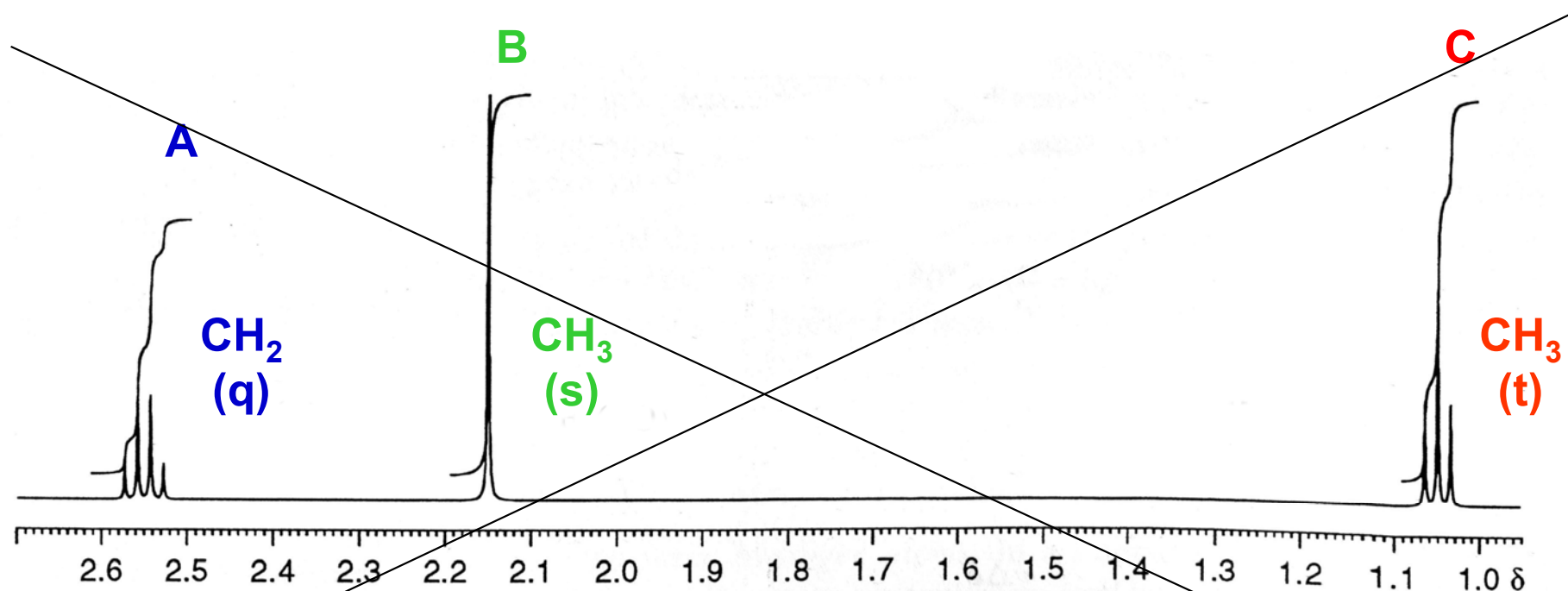


Poměr integrálních intenzit **A : B : C = 2 : 3 : 3**

Příklady 1B, 1C, 1D, 1E (navrhněte ^1H NMR)



- ~~1B → 2-pentanon~~
- ~~1C → 3-pentanon~~
- ~~1D → pentanal~~
- ~~1E → 2,4-pentandion~~

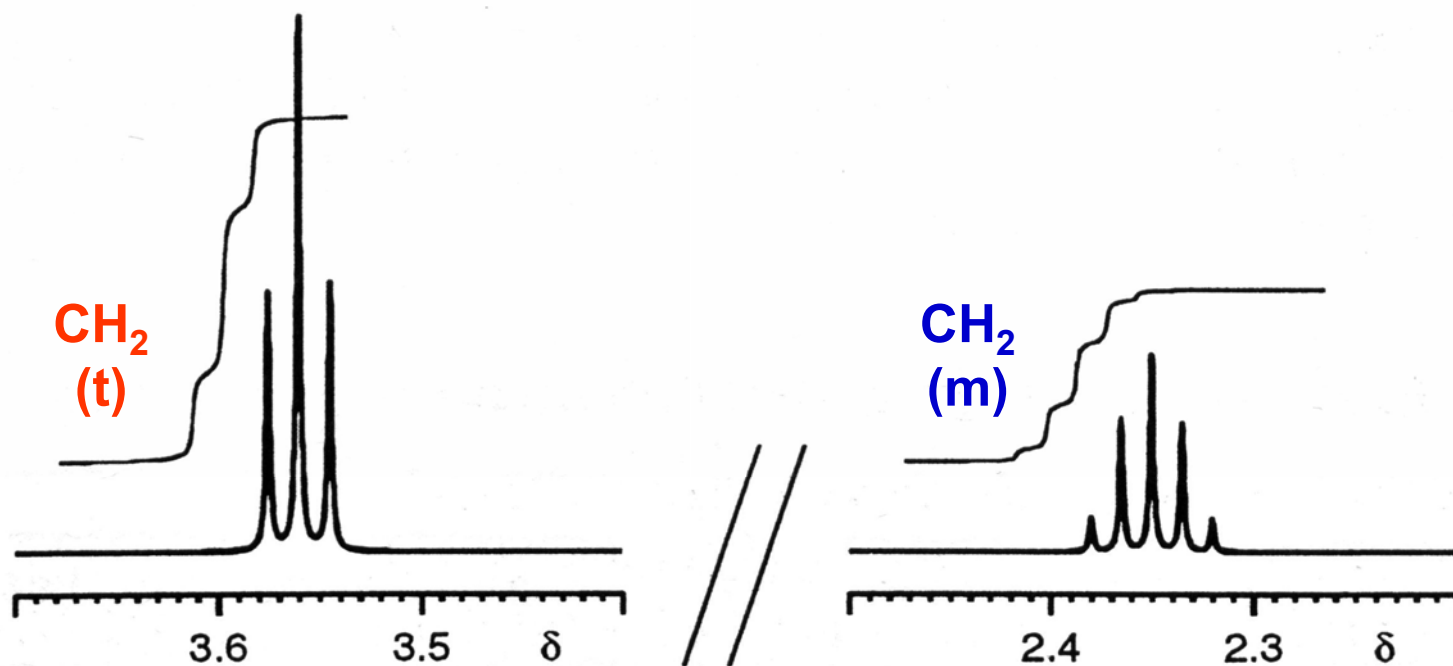


~~Poměr integrálních intenzit A : B : C = 2 : 3 : 3~~

Příklad 2



1,3-dibromopropan



Poměr integrálních intenzit **A** : **B** = **2** : **1**

Příklady 2B, 2C, 2D, 2E, 2F (navrhněte ^1H NMR)



~~1,3-dibromopropan~~

2B

1,2-dibromopropan

2C

1,1-dibromopropan

2D

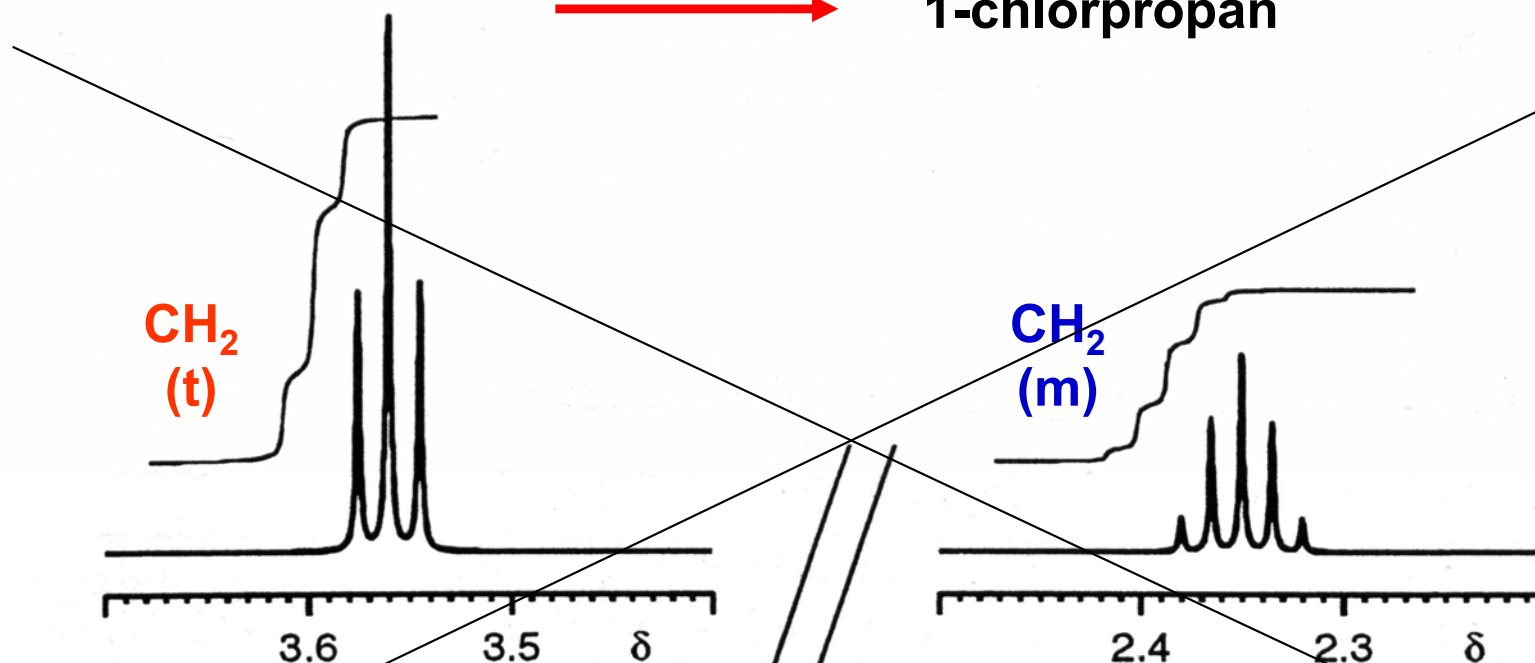
1,3-dibromopropanon

2E

1-bromopropan

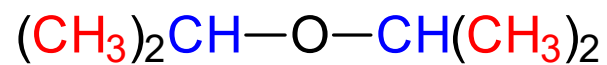
2F

1-chloropropan

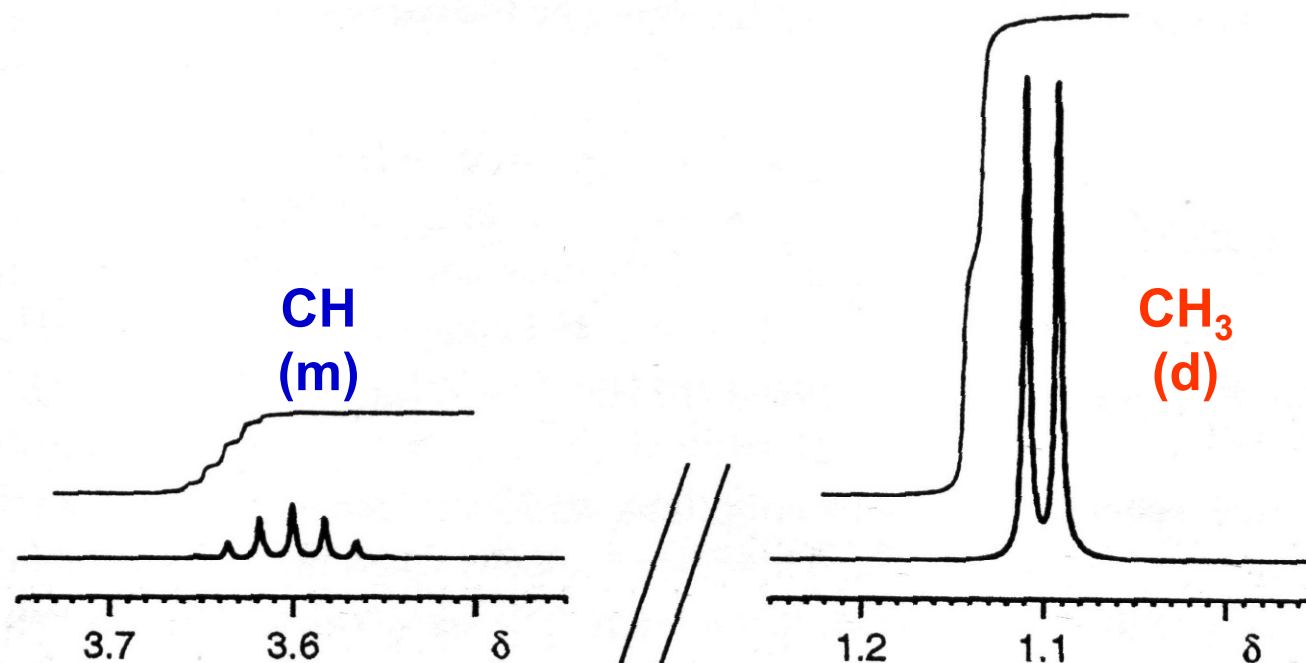


Poměr integrálních intenzit **A** : **B** = **2** : **1**

Příklad 3

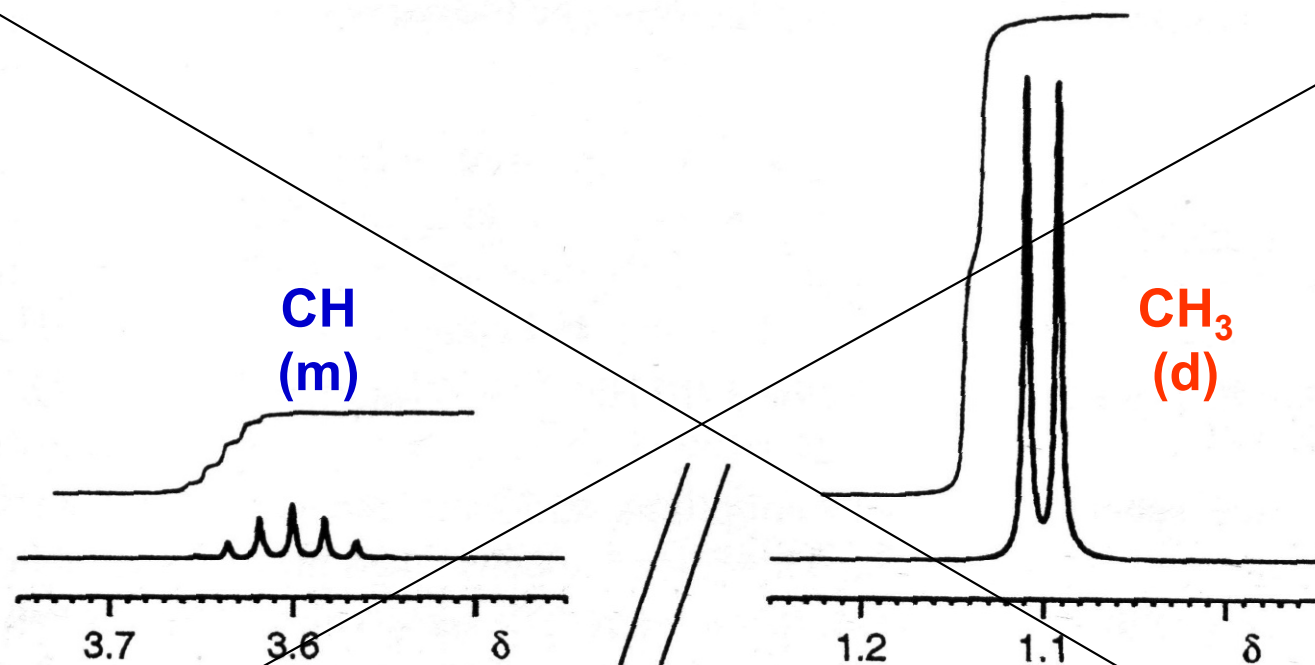
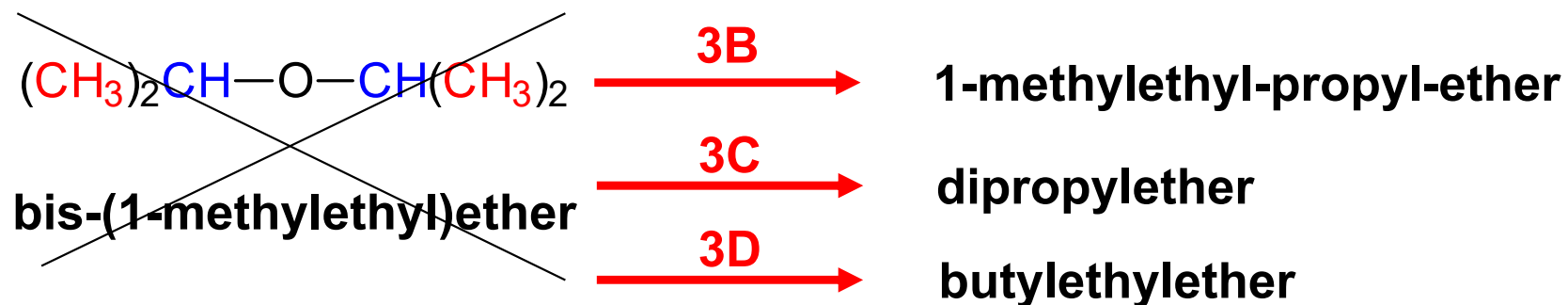


bis-(1-methylethyl)ether



Poměr integrálních intenzit **A** : **B** = **1** : **6**

Příklady 3B, 3C, 3D (navrhněte ^1H NMR)

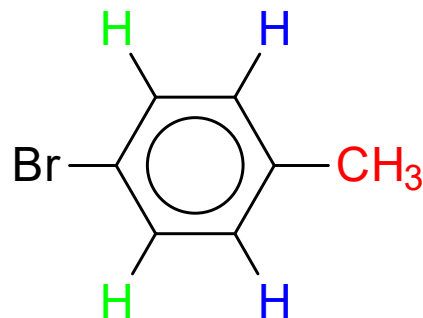


Poměr integrálních intenzit **A** : **B** = **1** : **6**

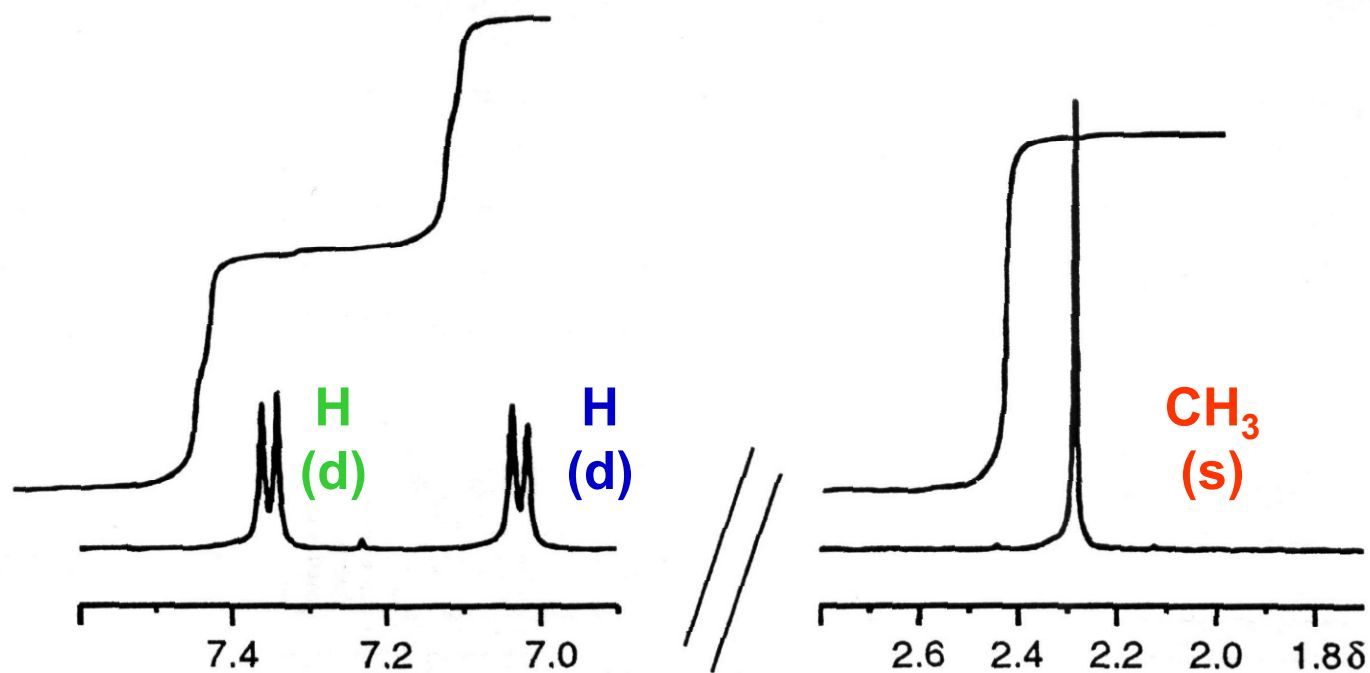
Úvod do interpretace ^1H spekter aromatických sloučenin

- Monosubstituce
- Disubstituce X a Y
- Disubstituce X = X
- Namalovat na tabuli

Příklad 4

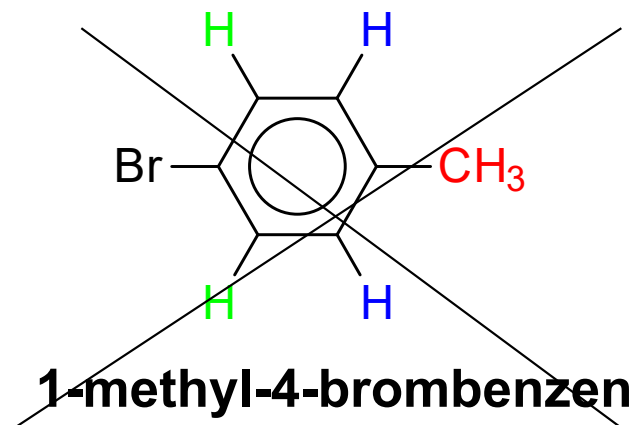


1-methyl-4-brombenzen

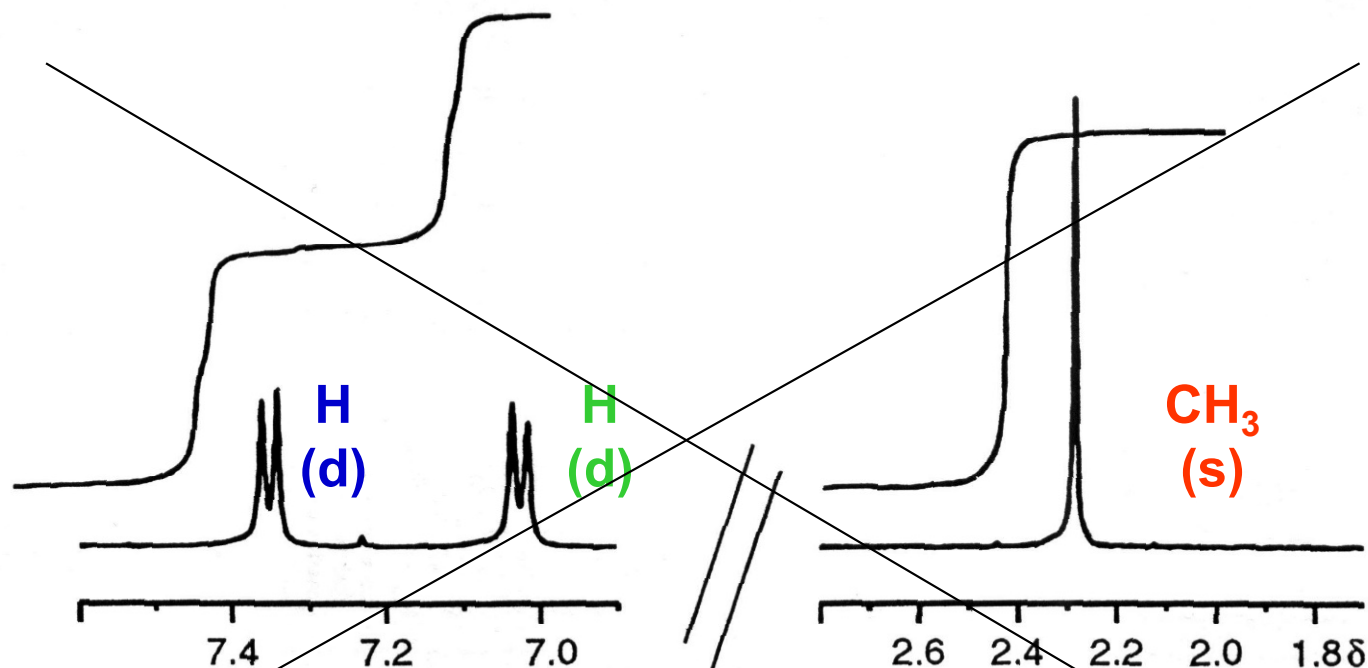


Poměr integrálních intenzit **A** : **B** : **C** = **2** : **2** : **3**

Příklady 4B, 4C, 4D, 4E, 4F (navrhněte ^1H NMR)



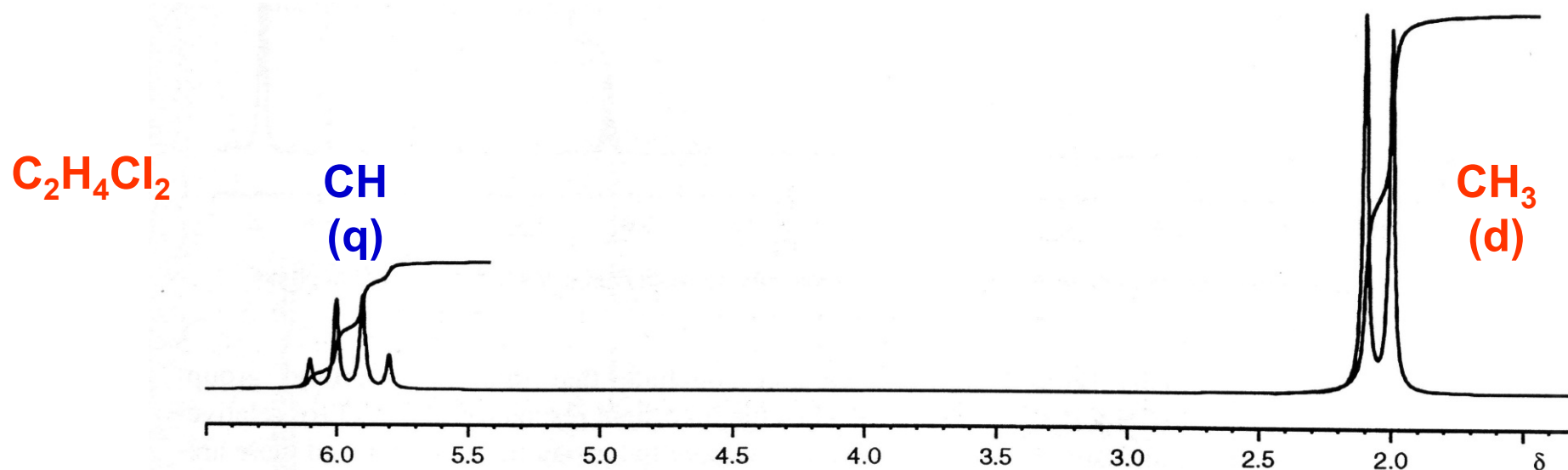
- 4B** → brombenzen
4C → 1,4-dibrombenzen
4D → 1,3-dibrombenzen
4E → 1,2-dibrombenzen
4F → 1,3,5-tribrombenzen



Poměr integrálních intenzit **A** : **B** : **C** = **2** : **2** : **3**

Příklad 5

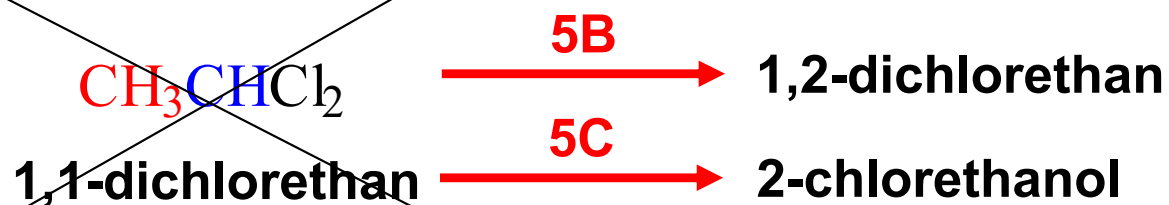
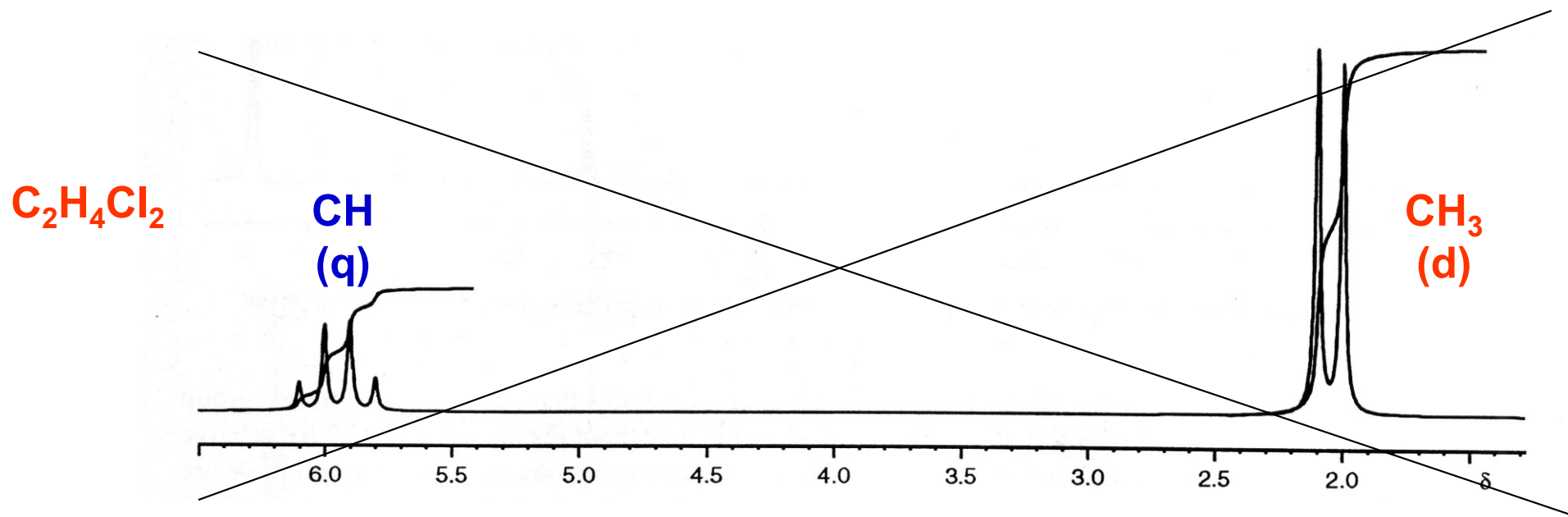
Molekulární ion v EI hmotnostních spektrech je pozorován při m/z 98, intenzita izotopického píku $M+2$ je 67%, $M+4$ má intenzitu 11%.



Poměr integrálních intenzit **A** : **B** = **1** : **3**

Příklady 5B, 5C (navrhněte ^1H NMR)

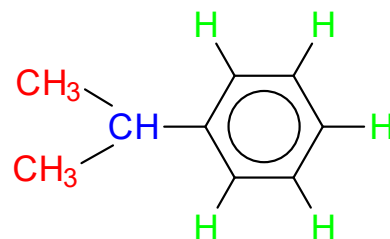
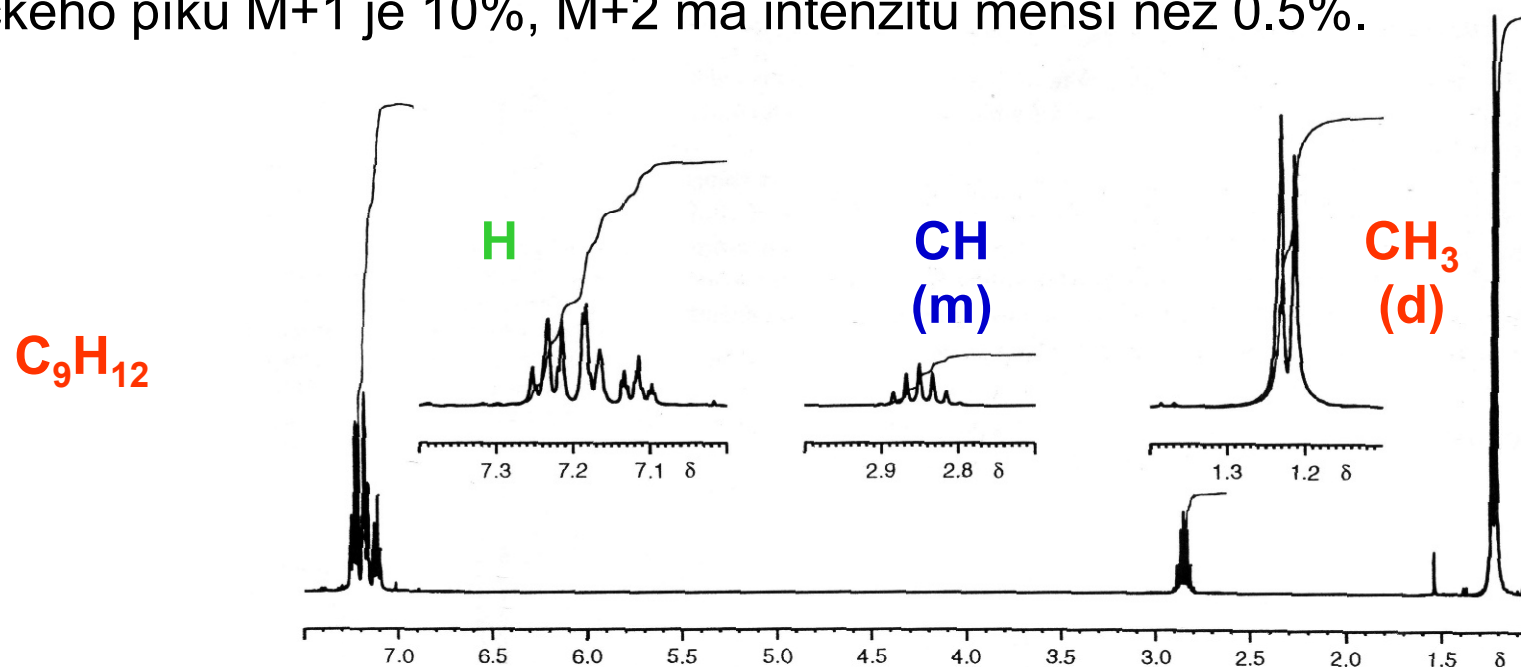
Molekulární ion v EI hmotnostních spektrech je pozorován při m/z 98, intenzita izotopického píku $M+2$ je 67%, $M+4$ má intenzitu 11%.



Poměr integrálních intenzit $\text{A} : \text{B} = 1 : 3$

Příklad 6

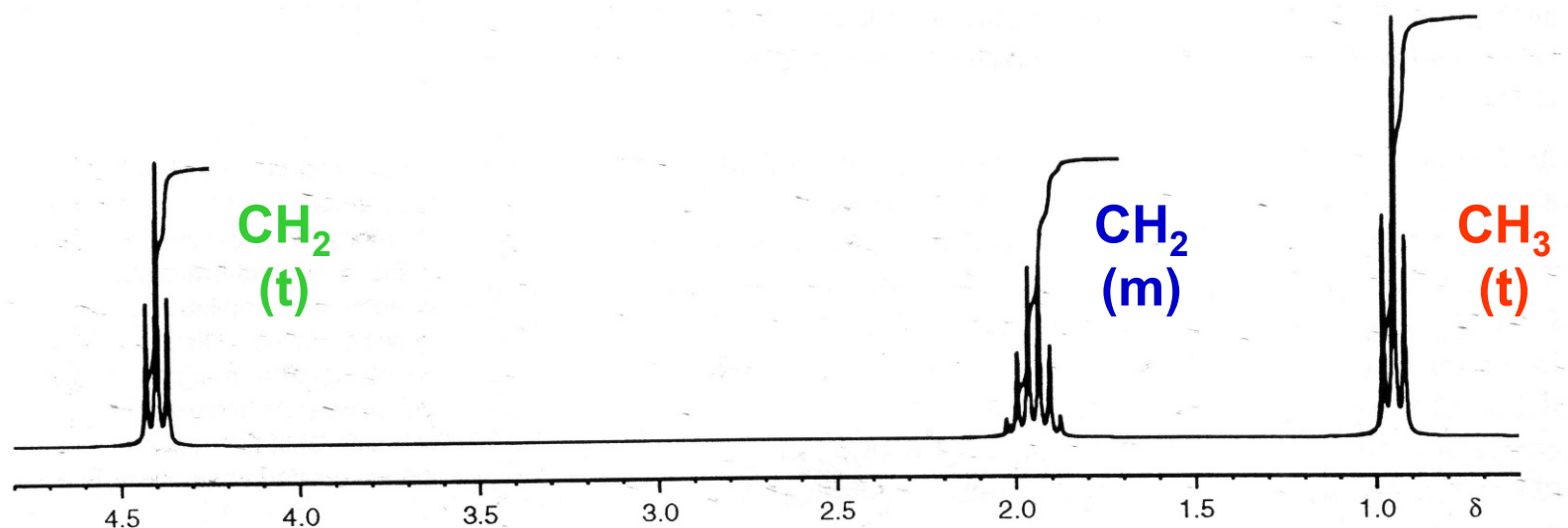
Molekulární ion v EI hmotnostních spektrech je pozorován při m/z 120, intenzita izotopického píku $M+1$ je 10%, $M+2$ má intenzitu menší než 0.5%.



isopropylbenzene

Poměr integrálních intenzit **A** : **B** : **C** = **5** : **1** : **6**

Příklad 7



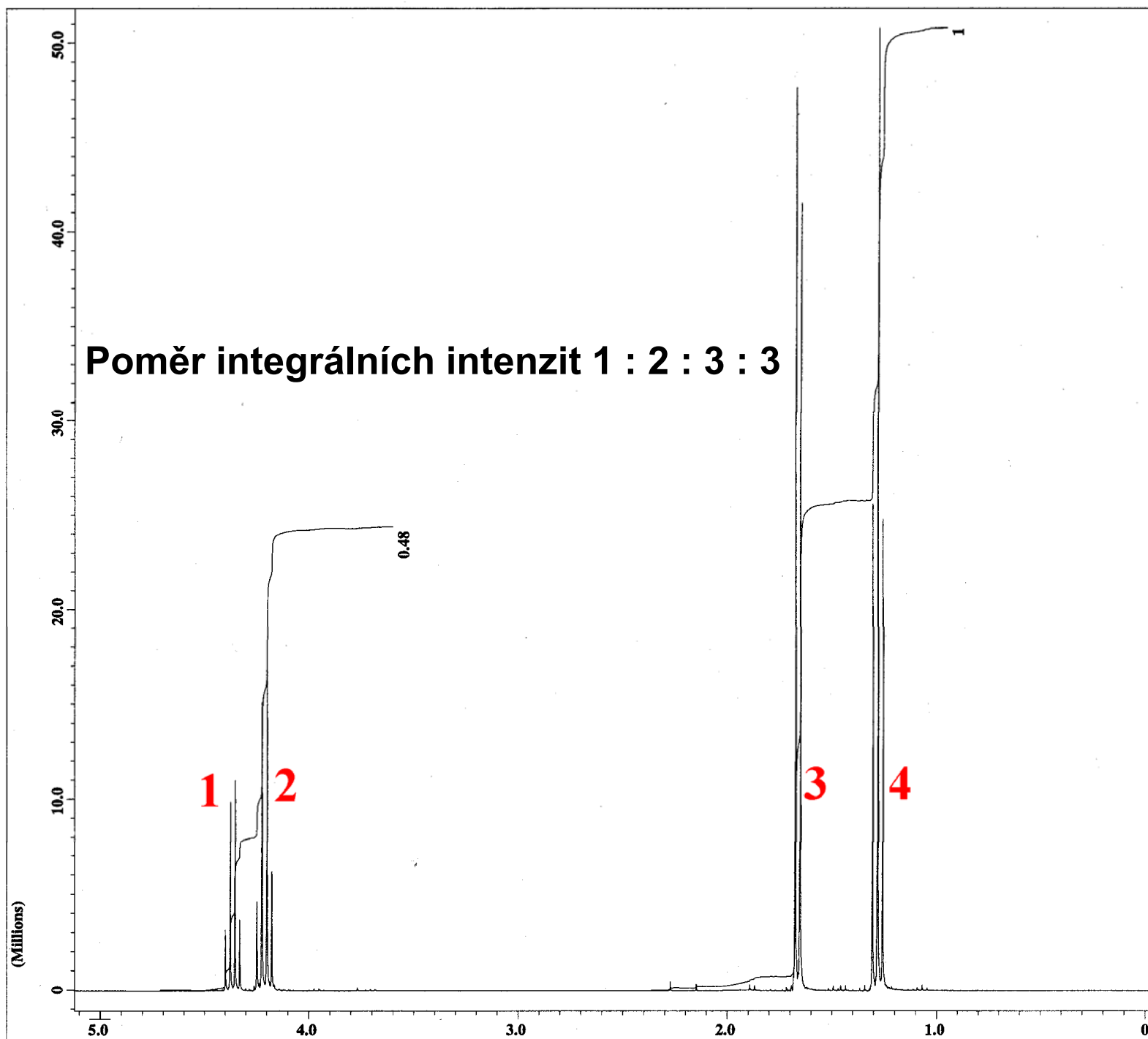
1-nitropropan



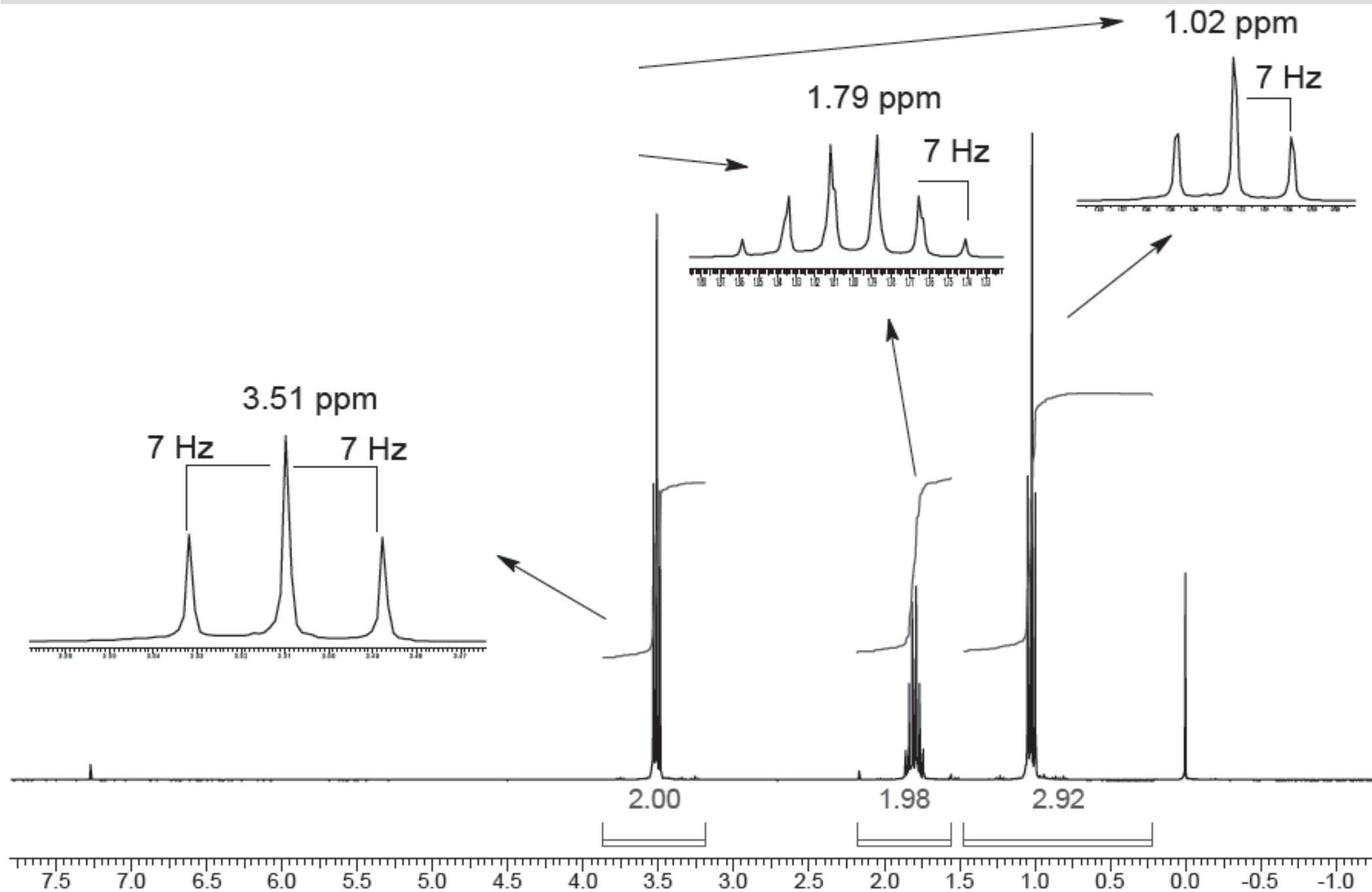
propylnitrit

Poměr integrálních intenzit $\text{A} : \text{B} : \text{C} = 2 : 2 : 3$

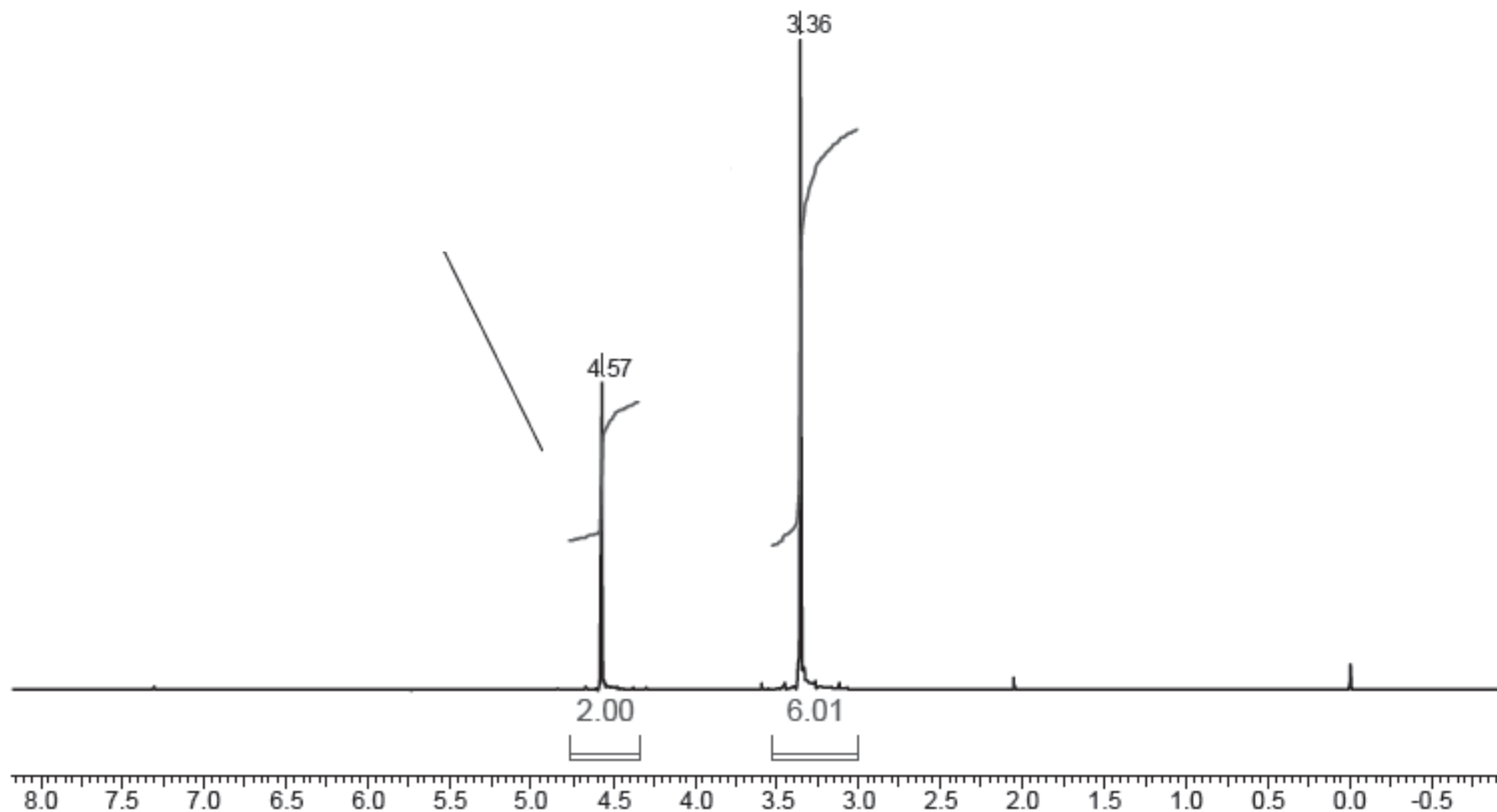
Příklad 8



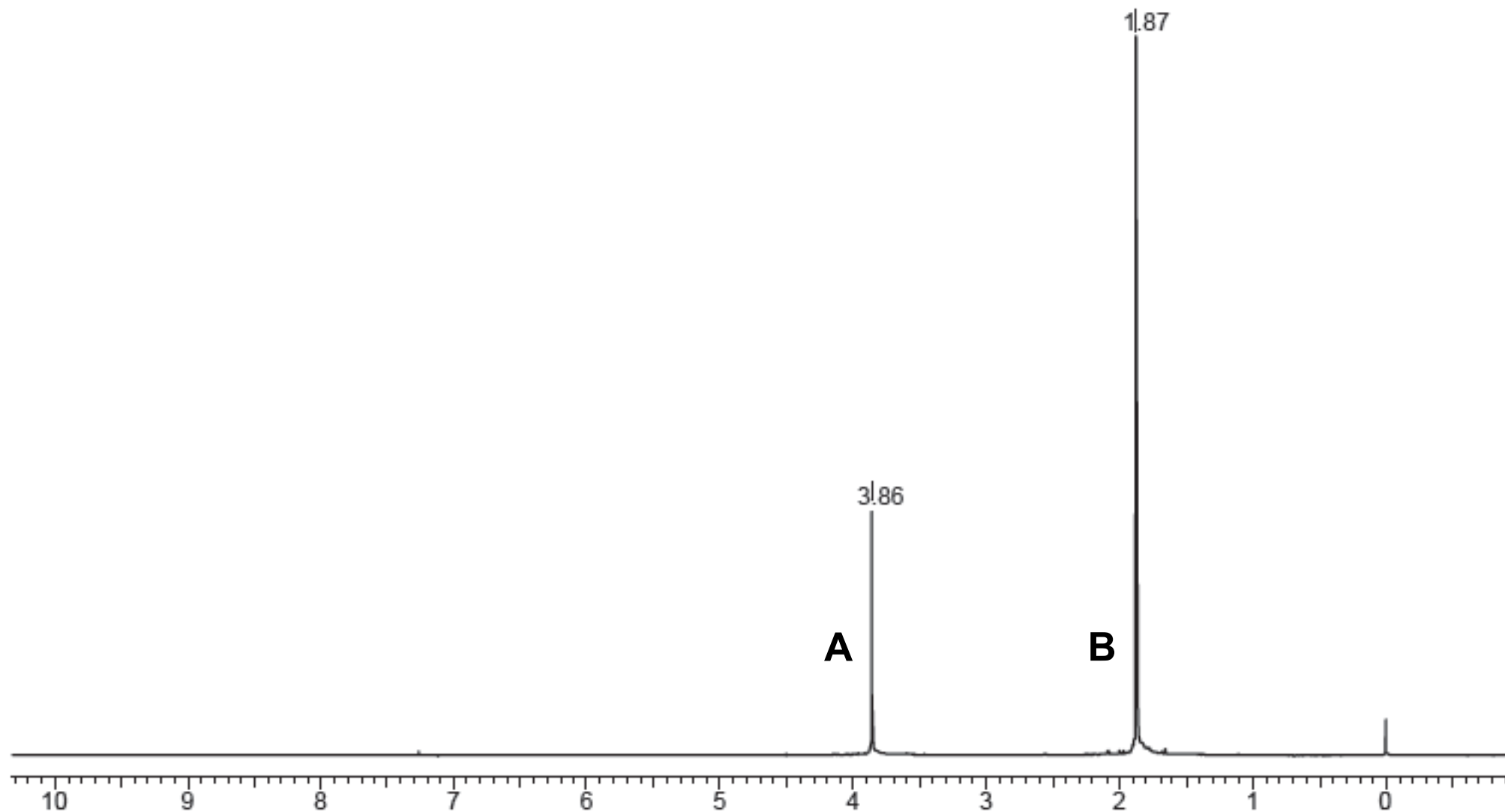
Příklad 9



Příklad 10

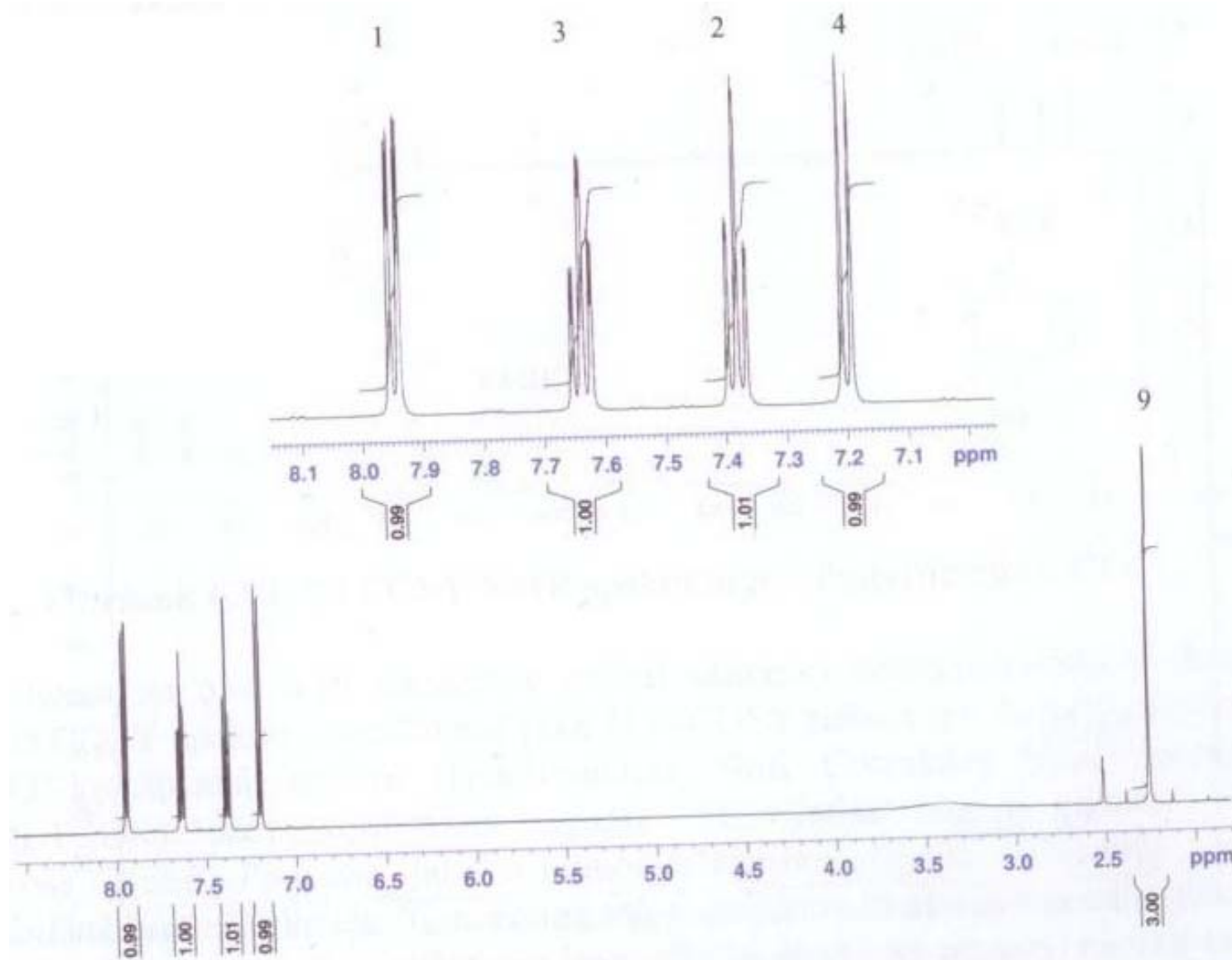


Příklad 11



Poměr integračních intenzit A : B = 1 : 3

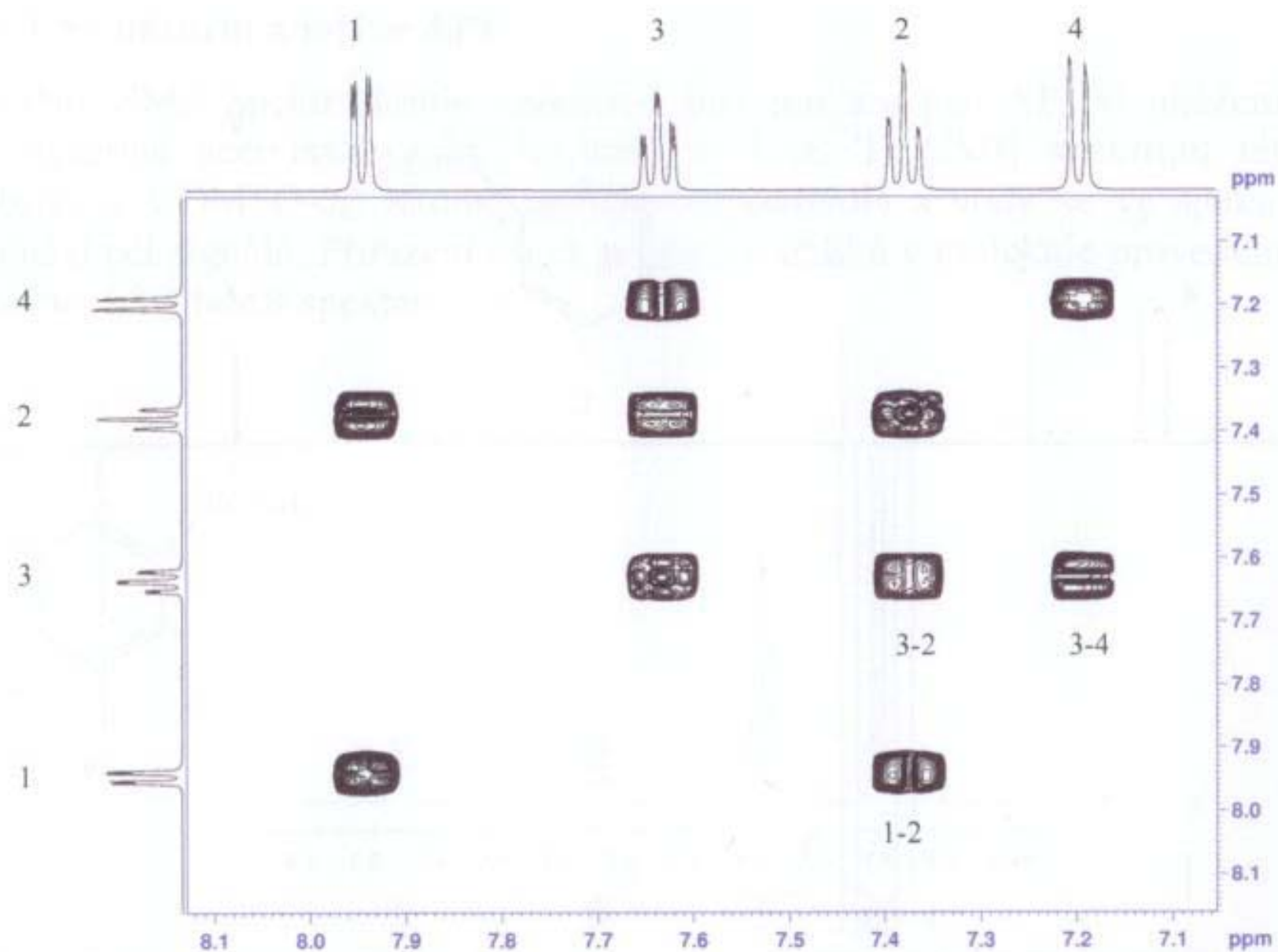
Příklad 12 - ^1H



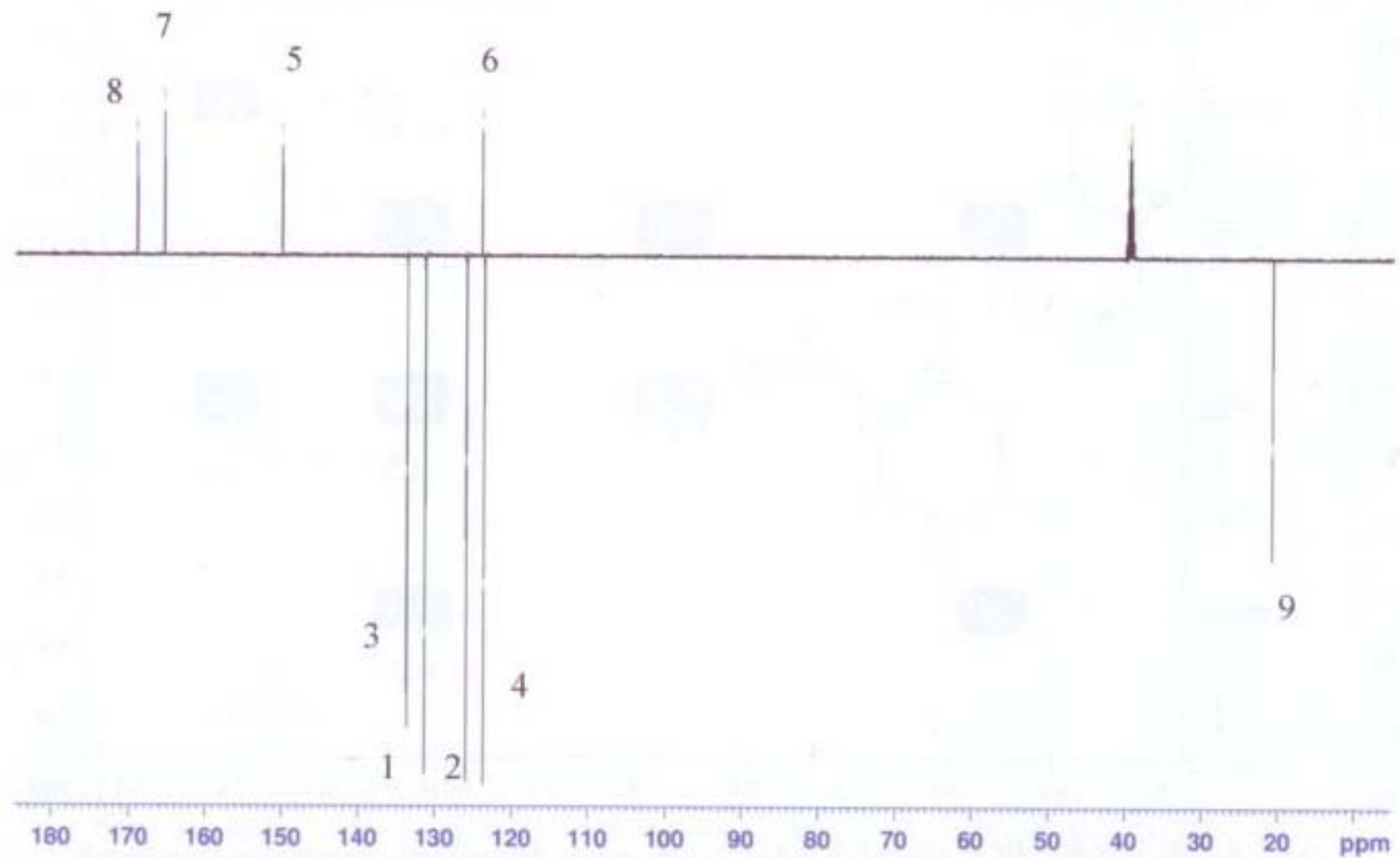
Poměr integrálních intenzit A : B : C : D : E = 1 : 1 : 1 : 1 : 3

- *Příklad č. 8 převzat z Moderní přístupy k farmaceutické analýze (eds. J. Dohnal, J. Jampílek, V. Král, A. Řezáčová), VUT Brno, 2010*

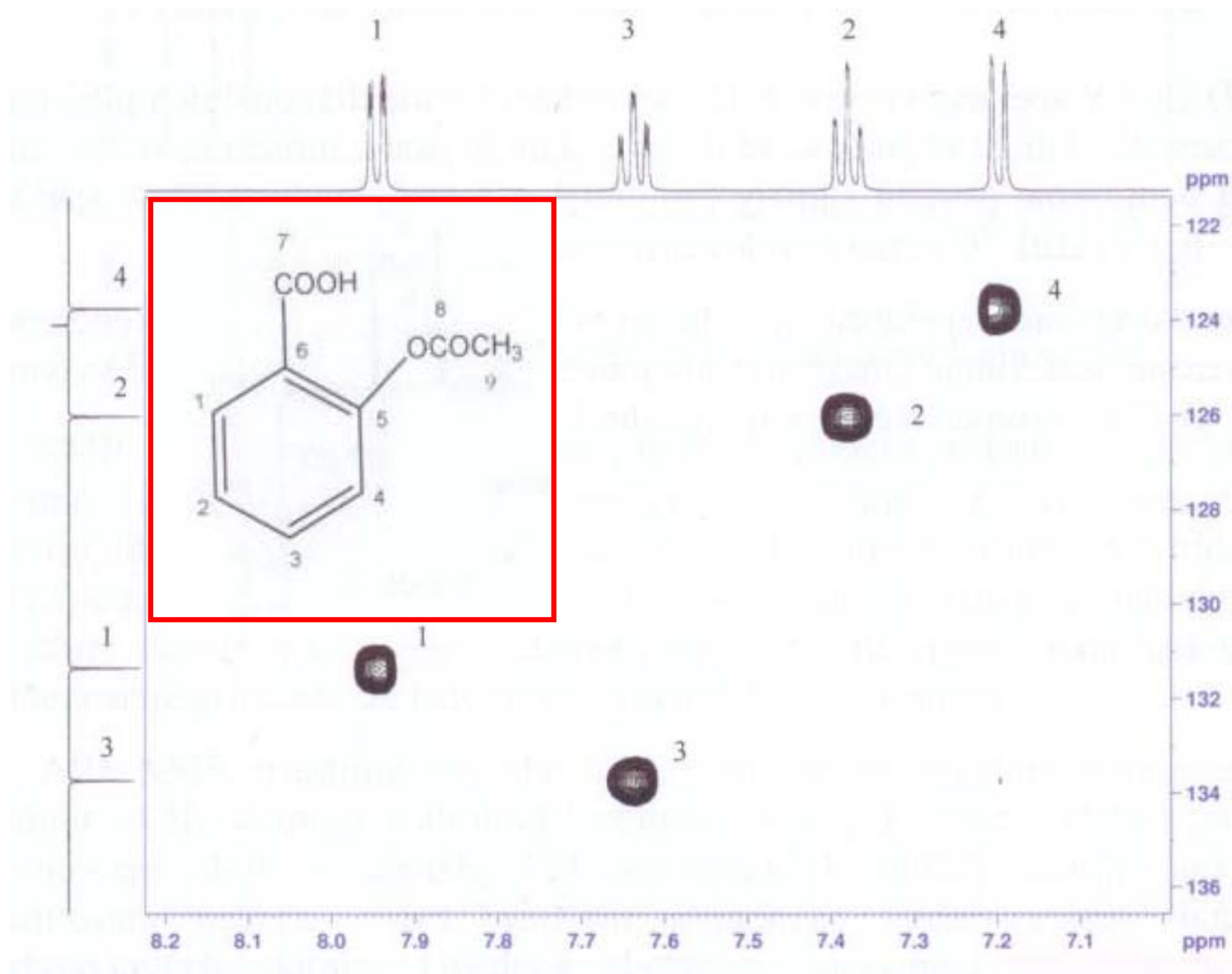
Příklad 12 – 2D COSY ^1H



Příklad 12 – ^{13}C

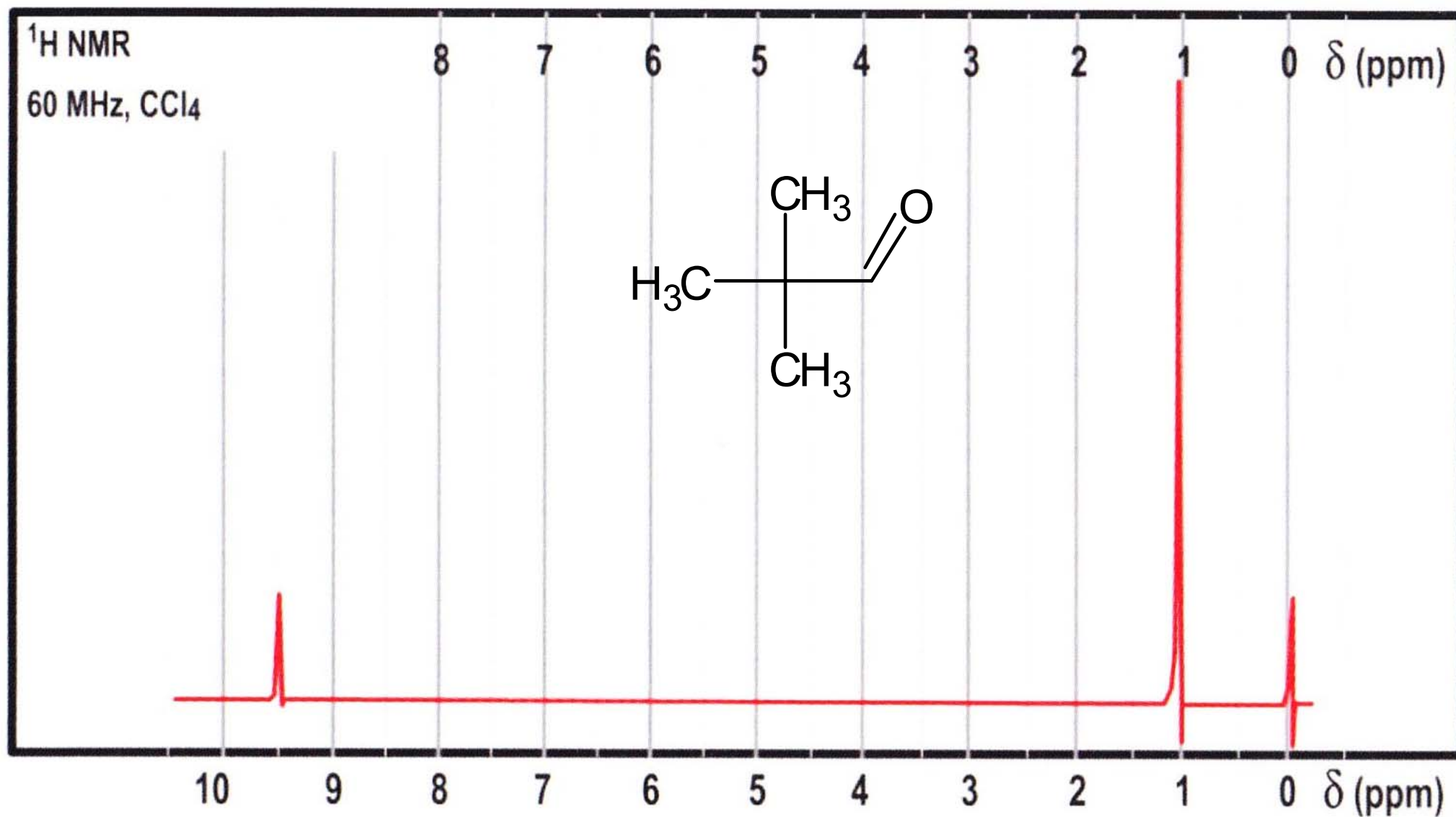


Příklad 12 – 2D NMR ^1H vs. ^{13}C (HSQC)



- HSQC = Heteronuclear Single Quantum Coherence

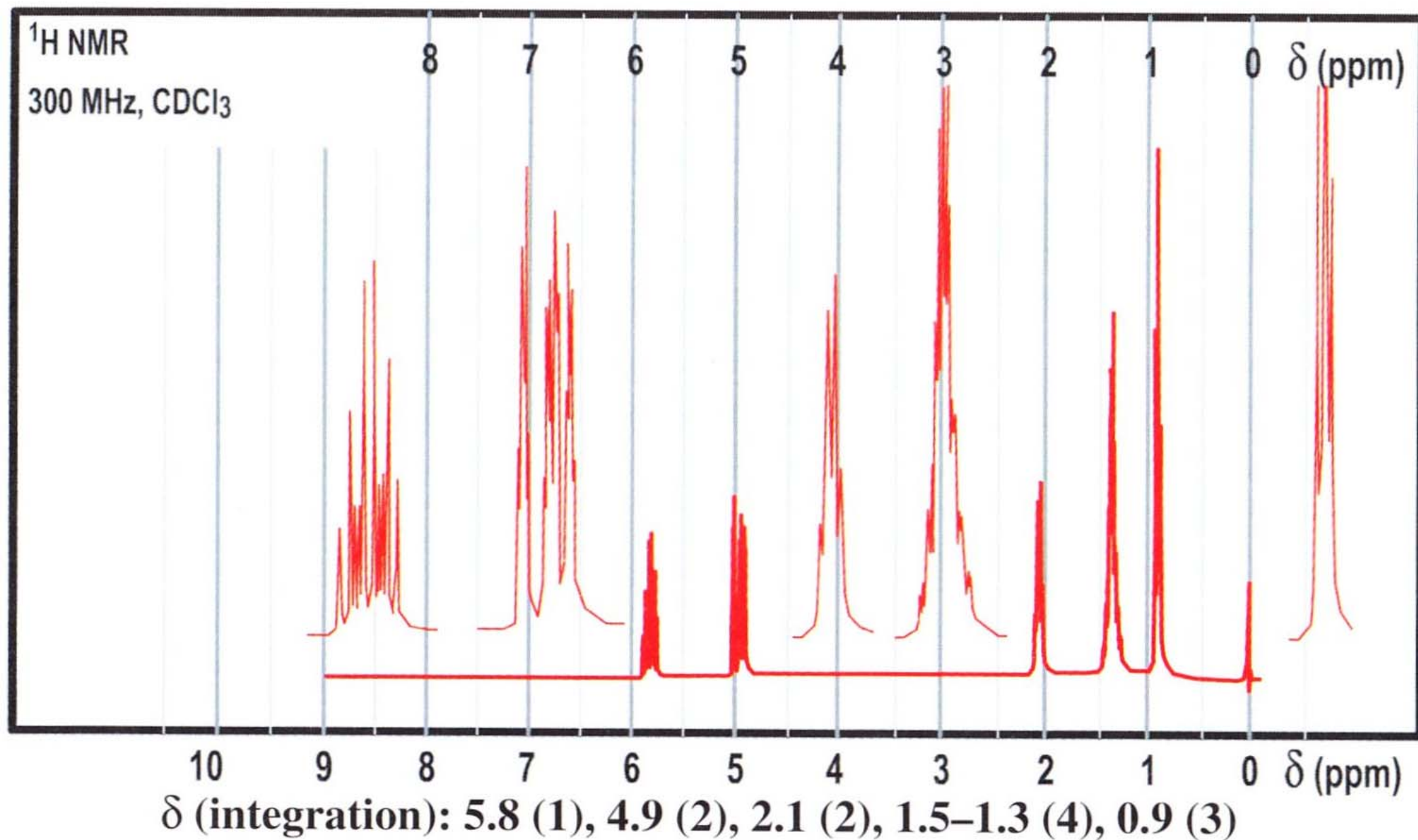
Příklad 13



δ (integration): 9.48 (1), 1.08 (9)

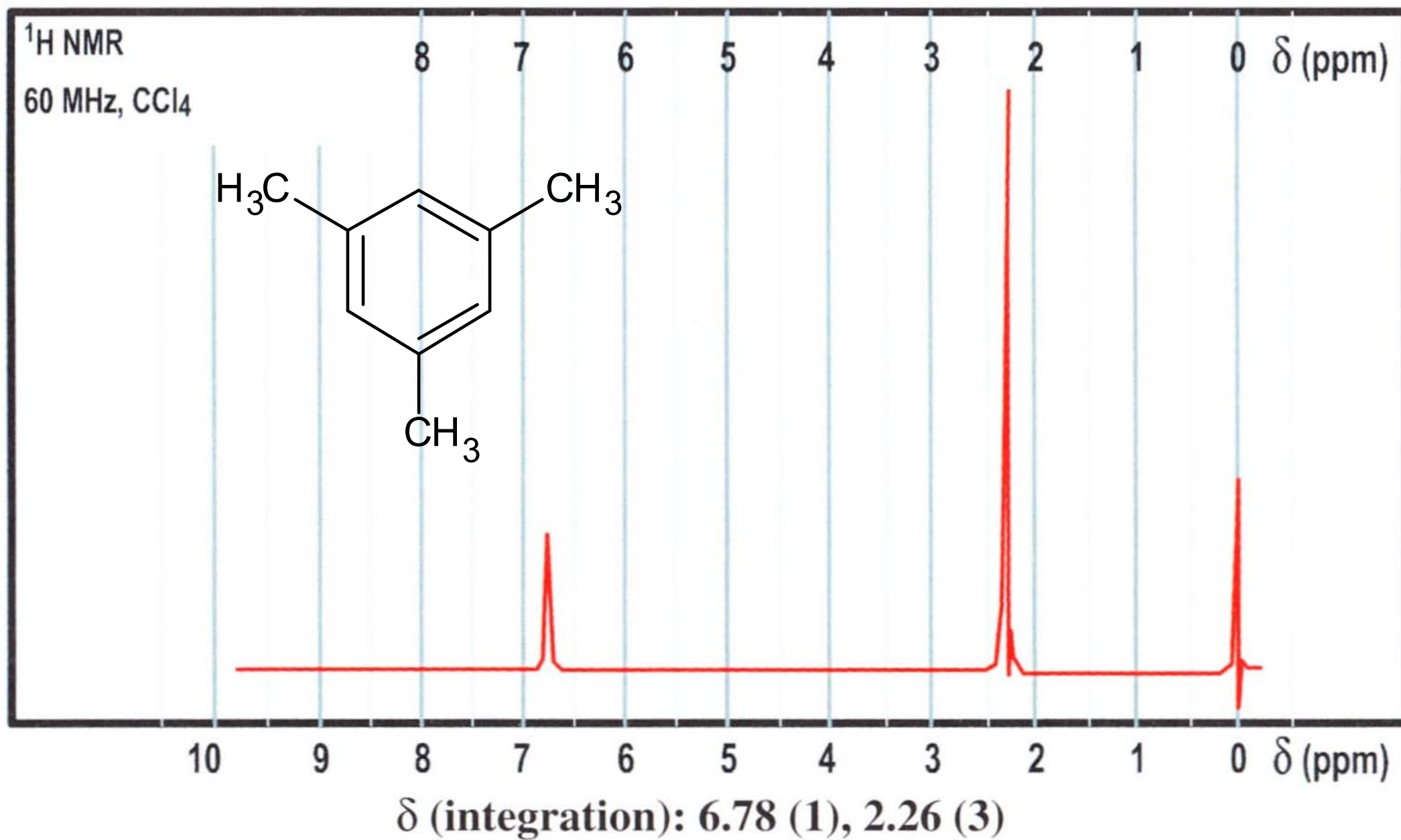
Trimethylacetaldehyd

Příklad 14



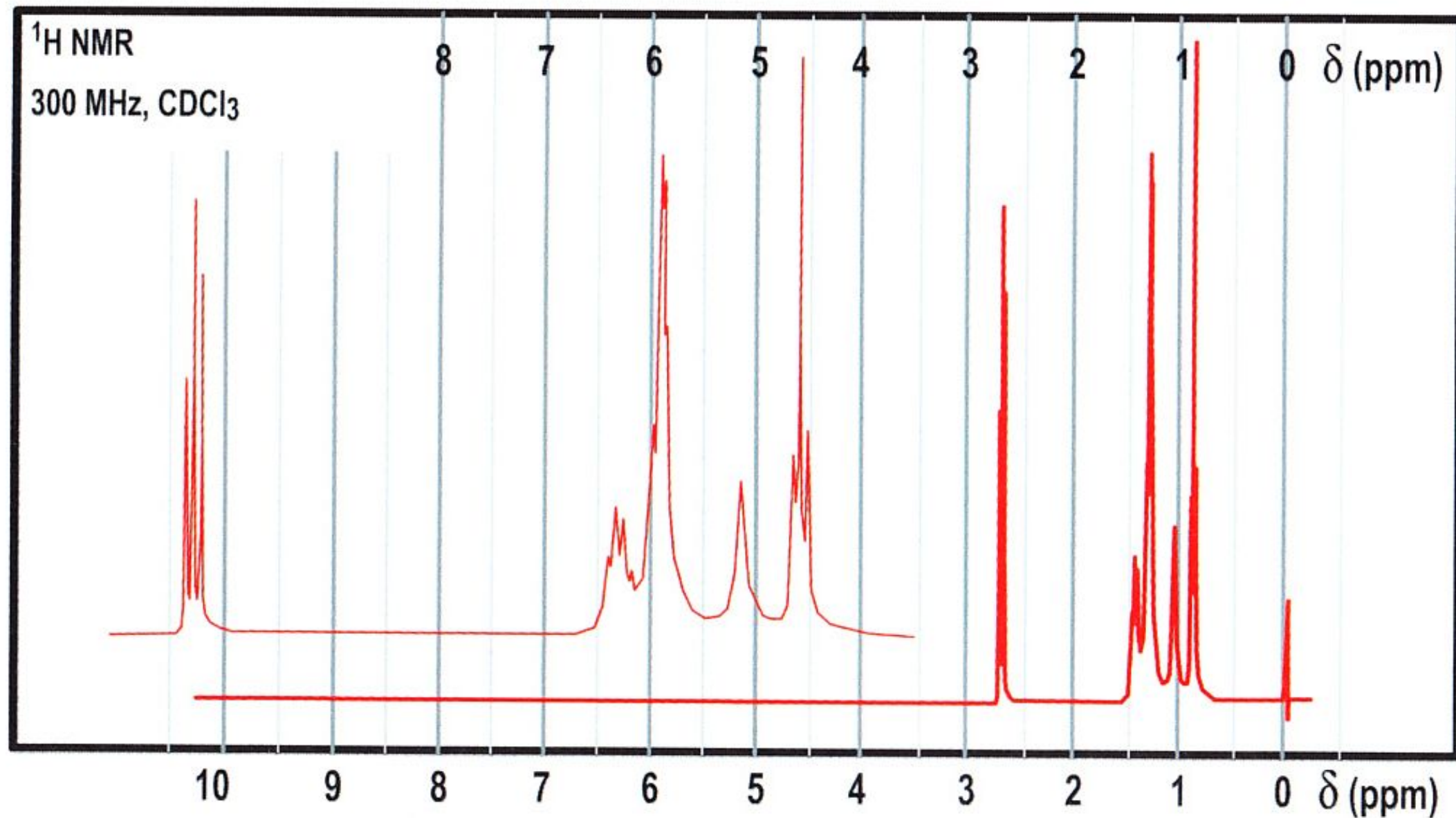
1-hexen

Příklad 15



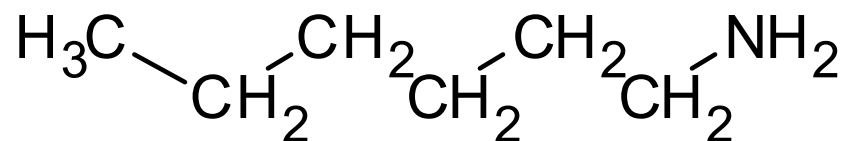
1,3,5-trimethylbenzen

Příklad 16

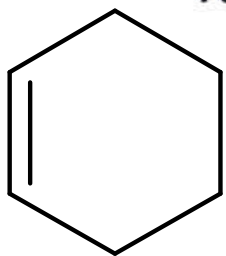
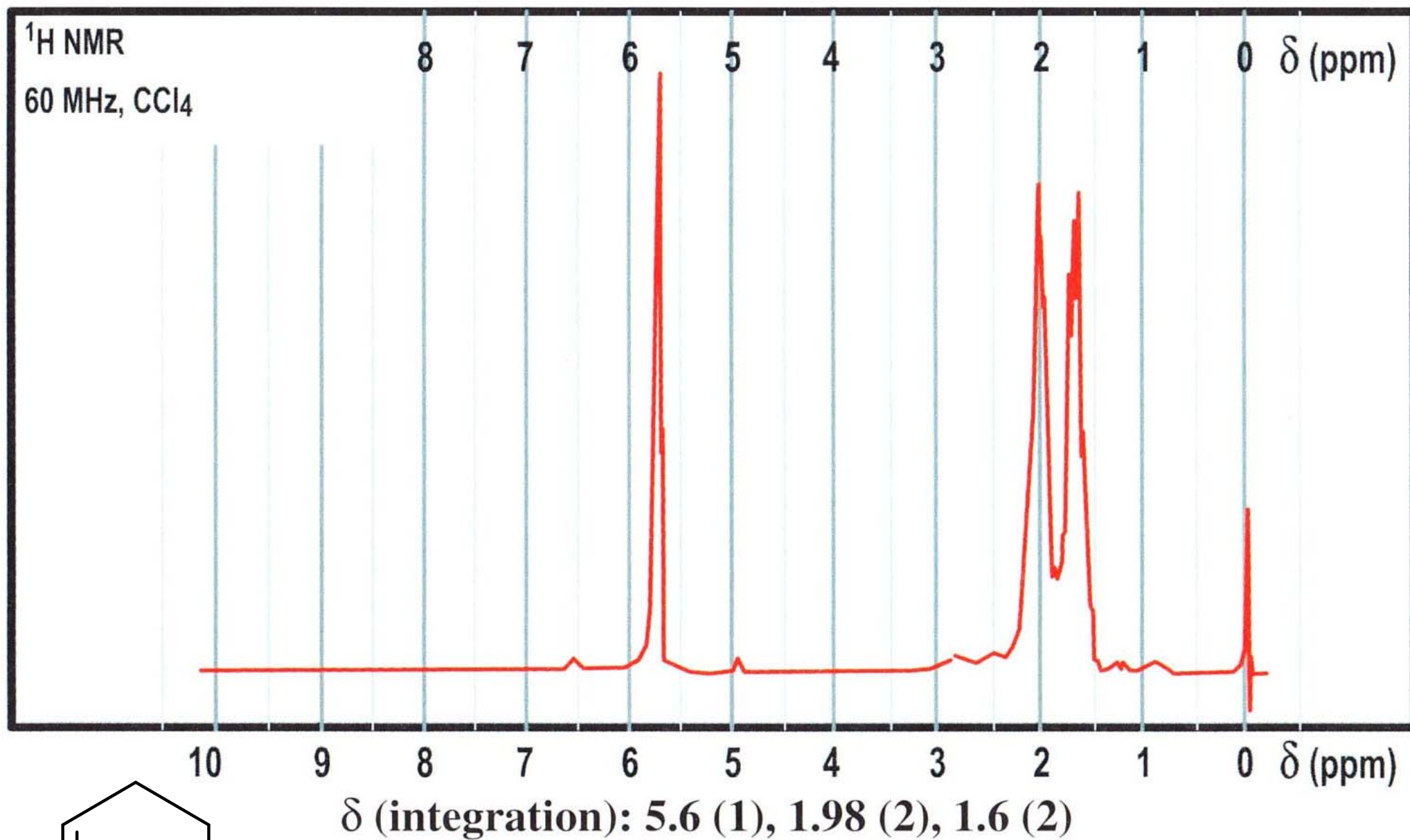


δ (integration): 2.7 (2), 1.1–1.4 (8), 1.2 (2), 0.9 (3)

1-aminohexan



Příklad 17



Cyklohexen

^1H NMR spektrum acetaldehydu

