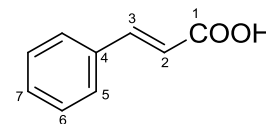


Instrukcja przygotowania opisu spektroskopowego preparatu:

kw酸 3-fenyloprop-2-enowy



$^1\text{H NMR}$ (500 MHz, CDCl_3) δ ppm: 7,81 (d, $J=16,0$ Hz, 1H, H-3); 7,58-7,55 (m, 2H, H-5); 7,43-7,41 (m, 3H, H-6, H-7); 6,47 (d, $J=15,5$ Hz, 1H, H-2).

Schematyczny opis widma protonowego powinien zwracać uwagę na częstość rezonansową spektrometru użytego do pomiaru oraz rozpuszczalnik użyty do rejestracji widma. Następnie sygnały powinny zostać wymienione wg malejącego (lub (rzadziej) rosnącego) przesunięcia chemicznego. Należy wskazać na ich multipletowość, odczytaną wartość stałej sprzężenia, intensywność sygnału oraz powinno nastąpić przypisanie sygnału do odpowiedniego protonu w związku (tak dokładnie, jak jest to możliwe z wykorzystaniem wiedzy spektroskopowej i organicznej). Pomocne jest przy tym posłużenie się rysunkiem z pomocniczą numeracją związku. **Przesunięcie chemiczne** powinno być podane z **dokładnością do setnych części ppm, stała sprzężenia do dziesiątych części Hz** (drobne różnice w wartości tej samej stałej sprzężenia mogą się pojawić pomiędzy sygnałami i najczęściej wynikają z ograniczonej rozdzielczości spektralnej spektrometru). W przypadku multipletów, wskazujemy na zakres sygnału, nie podajemy wartości stałej sprzężenia.

$^{13}\text{C NMR}$ (50 MHz, CDCl_3) δ ppm: 172,7 (C=O); 147,0 (C-3); 134,0 (C-4); 130,7 (C-7); 128,9 (C-5 lub C-6); 128,3 (C-5 lub C-6); 117,3 (C-2).

Schemat opisu widma węglowego wygląda podobnie do widma protonowego. Należy zwrócić uwagę na poprawną częstość rezonansową w widmie ^{13}C , która jest różna niż w widmie ^1H . **Przesunięcie chemiczne** podajemy z **dokładnością do dziesiątych części ppm**, a sygnały przypisujemy tak dokładnie, jak jest to możliwe (zachowujemy przy tym zdrową racjonalność). W przypisaniu sygnałów pomocne mogą być dodatkowe informacje z widma (np. intensywność sygnałów) lub w pewnym stopniu tabele inkrementów poszczególnych podstawników. Zalecane jest zachowanie numeracji atomów tożsame z widmem protonowym.

IR (KBr): 3016-2592 (O-H); 3016 ($\text{C-H}_{\text{rozc. sp}^2}$); 1680 (C=O_{rozc}); 1630, 1448, 1424 (może też 1496 $\text{C=C}_{\text{szkieł}}$); 1312 (lub 1288 C-O_{rozc}); 768, 712 (monopodstawiony pierścień $\text{C-H}_{\text{defor}}$) cm^{-1} .

Opis widma IR powinien zwracać uwagę na formę pomiaru próbki (KBr, nujol, film, etc.) oraz wskazywać na pasma potwierdzające obecność kluczowych grup funkcyjnych związku. Nie zawsze jest możliwe odnalezienie wszystkich pasm, nie zawsze wszystkie pasma można poddać jednoznacznej interpretacji, należy zachować zdrowy rozsądek w tej analizie, ale powinno się podjąć próbę odnalezienia kluczowych informacji w oparciu o racjonalne kryteria spektroskopowe. Podaje się wyłącznie maksimum absorpcji danego pasma, jedynie drgania rozciągające O-H w kwasach karboksylowych podaje się jako zakres pasma, ze względu na szeroki zakres tych drgań.

dr inż. Maciej Malinowski