

Techniky NMR spektroskopie

MC260P107 3/0 Zk

Zdeněk Tošner

Servisní centrum chemické sekce, NMR laboratoř, Hlavova 8

tel. linka 1323, místnost 20

e-mail tosner@natur.cuni.cz

Sylabus

1. Jev nukleární magnetické rezonance (NMR). Magnetizace a vektorový model, relaxační časy T_1 a T_2 . Blochovy rovnice, radiofrekvenční pulsy. NMR spektrum.
2. Základní NMR parametry (počet, pozice a intenzita signálů). Chemický posuv. J-interakce. Heteronukleární decoupling. Interpretace základních NMR spekter.
3. NMR spektrometr. Praktické záležitosti měření (pulsní excitace, digitální detekce). Zpracování a úpravy signálu.
4. Moderní popis NMR. Produktové operátory a jejich rotace. Jednopulsní experiment, spinové echo (příp. ještě experimenty APT, INEPT, DEPT).
5. Základy dvoudimenzionální (2D) spektroskopie. Experimenty COSY, TOCSY, HSQC, HMQC, HMBC.
6. NMR relaxační parametry T_1 , T_2 a pohyblivost molekul. Nukleární Overhauserův efekt (NOE). Experimenty IR, CPMG, 1D NOE, NOESY, ROESY.
7. Selektivní excitace, gradienty magnetického pole a fázové cykly. Potlačení signálu vody. Selektivní TOCSY.
8. Translační difuze molekul a její měření. Experiment DOSY.
9. Chemická výměna, tvar signálů, stanovení rychlostních konstant. Experimenty typu EXSY.
10. Mezimolekulární interakce a komplexy molekul. Využití NOE, relaxačních a difuzních měření.
11. NMR méně běžných jader. ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N a další.
12. Základy NMR v pevné fázi. Anizotropní povaha NMR interakcí. Přímá dipól-dipólová interakce. Tvar spektra. Rotace pod magickým úhlem. Experiment CP-MAS.