

# Základy spektroskopie molekul

MC270PP77

(3/1 Z+Zk)

Termín: zimní semestr 2019/2020, úterý 8:10-9:40 v CH3, středa 15:40-17:10 v CH1

## Část NMR spektroskopie

Vyučující: RNDr. Zdeněk Tošner, Ph.D.

Kontakt: Hlavova 8, místnost 035, tel. 22195 1323

e-mail: [tosner@natur.cuni.cz](mailto:tosner@natur.cuni.cz)

web: [www.natur.cuni.cz/nmr/vyuka.html](http://www.natur.cuni.cz/nmr/vyuka.html)

1. Základní principy NMR - jádro, spin, magnetický moment, energie, populace hladin, magnetizace, Larmorova precese, radiofrekvenční pole a rezonanční podmínka, T1 a T2 relaxace, postup měření základních spekter.
2. Spektrální parametry - počet a intenzita signálů, chemický posun, reference, jemná struktura rezonancí.
3. Vztah mezi spektrem a strukturou - ekvivalence, symetrie, chiralita, homotopní, enantiotopní, diastereotopní skupiny.
4. Chemický posun - vliv elektronové hustoty, efekt sousedních skupin, magnetická anizotropie, ring-current efekt, chemické posuny vodíků a uhlíků v organických sloučeninách.
5. Jemné štěpení a J interakce - geminální, vicinální, vlivy, Karplusova křivka, pravidla multiplicity, řád spektra, heteronukleární interakce, long-range, <sup>13</sup>C satelity, využití.
6. Experimentální zařízení - spektrometr, magnety, radiofrekvenční pulsy, relaxace, zpracování signálu, Fourierova transformace.
7. Metody dvojí rezonance - vodíkový (uhlíkový) dekapling, experimenty APT a DEPT, potlačení rozpouštědla.
8. Dvoudimenzionální spektroskopie - princip, experimenty COSY, HSQC, HMBC, příklad použití.
9. Dynamické jevy - chemická výměna, vliv teploty, koalescence, příklady rovnováh.
10. Pokročilejší aplikace – translační difuze, flexibilita molekul, řešení prostorové struktury v roztoku, studium mezimolekulárních interakcí.