

## **C6800 Multinukleární NMR spektroskopie**

### **Prof. RNDr. Jiří Pinkas, Ph.D.**

1. Historický úvod. Základní pojmy: hyperjemná interakce, jaderný spin, magnetický moment, magnetogyrický poměr, isotopické zastoupení, magnetizace, populace, Larmorova frekvence, NMR experiment, Blochovy rovnice.
2. Chemická ekvivalence a symetrie molekul. Prochirální a  $C_2$  skupiny. Homotopická, enantiotopická, diastereotopická a heterotopická jádra.
3. Stínící konstanta, diamagnetické a paramagnetické stínění, Ramseyův vzorec. Lokální a nelokální vlivy. Chemický posun, referenční standardy. Rozsah chemických posunů.
4. Parametry ovlivňující stínící konstantu: oxidační číslo, koordinační číslo, náboj, symetrie, HOMO-LUMO rozštěpení, elektronegativita, normální a inverzní halogenová závislost, nefelauxetická a spektrochemická řada.
5. Korelace chemických posunů s vazebnými délkami, úhly, UV maximy, IR silovými konstantami, Hammettovými sigma konstantami. Vlivy na chemický posun: isotopové efekty, SIIS, magnetická anisotropie chemických skupin, teplota, rozpouštědlo, ASIS.
6. Chirální rozpouštědla, posuvová činidla. Satelitní signály, isotopomery, výpočet isotopického zastoupení.
7. Skalární interakce. Interakční konstanta, Diracův model, Pople-Santryho vzorec, redukovaná interakční konstanta. Vlivy na interakční konstantu: s-charakter, hybridizace, elektronegativita, koordinační číslo, vazebné úhly, dihedrální úhly, Karplusova rovnice.
8. Konstrukce multipletů. Notace spinových systémů. Jednoduché spinové systémy: AB, ABX, AA'X, AA'XX'. Simulace spekter.
9. Relaxace. Relaxační časy  $T_1$  a  $T_2$ . Korelační čas. Extreme narrowing limit. Inversion Recovery a Spin Echo metody.
10. Relaxační mechanismy: dipolární, anisotropie chemického posunu, spinová rotace, skalární relaxace, kvadrupolová, paramagnetická. NOE.
11. Dynamická NMR spektroskopie. Chemická výměna. Ekvivalentní a neekvivalentní systémy. Simulace dynamických NMR spekter.
12. Dipolární interakce. Základy NMR spektroskopie v pevné fázi.

1. Historical background. Basic concepts: hyperfine interactions, nuclear spin, magnetic moment, magnetogyric ratio, natural abundance, magnetization, population, Larmor frequency.
2. Chemical equivalence and molecular symmetry. Prochiral and C2 groups. Homotopic, enantiotopic, diastereotopic, and heterotopic nuclei.
3. Shielding constants, diamagnetic and paramagnetic shielding, Ramsey formula. Local and nonlocal effects. Chemical shifts, referencing. Ranges of chemical shifts.
4. Parameters influencing the magnitude of shielding constant: oxidation state, coordination number, charge, symmetry, HOMO-LUMO gap, electronegativity, normal and inverse halogen series, nephelauxetic and spectrochemical series.
5. Correlation of chemical shifts with bond lengths and angles, UV maxima, IR force constants, Hammett sigma constants. Chemical shift effects: isotope effects, SIIS, magnetic anisotropy of chemical groups, temperature, solvent, ASIS.
6. Chiral solvents, shift reagents. Satellite signals, isotopomers, abundance calculations.
7. Scalar coupling. Coupling constants, Dirac model, Pople-Santry formula, reduced coupling constant. Coupling constant effects: s-character, hybridization, electronegativity, coordination number, bond angles, dihedral angles, Karplus equation.
8. Multiplet construction. Spin system notation. Simple spin systems: AB, ABX, AA'X, AA'XX'. Spectral simulation.
9. Relaxation. Relaxation times T1 and T2. Correlation time. Extreme narrowing limit. Inversion Recovery and Spin Echo methods.
10. Relaxation mechanisms: dipolar, chemical shift anisotropy, spin rotation, scalar, quadrupolar, paramagnetic. NOE.
11. Dynamic NMR spectroscopy. Chemical exchange. Degenerate and nondegenerate systems. Dynamic NMR spectra simulation.
12. Dipolar coupling. Basics of solid state NMR spectroscopy.
- 13.