

## *Fyzikálně-chemické základy NMR*

Středa, 11.00 - 12.40, posluchárna CH-2, 27.9. - 17.12.2004

**Vladimír Sklenář** (podzimní semestr 2004/2005, 2 hod./týden)

*Katedra teoretické a fyzikální chemie a Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova univerzita v Brně.*

bud. č. 7/místnost 108, tel. 549 497 022

e-mail: sklenar@chemi.muni.cz

<http://www.ncbr.chemi.muni.cz/>

<http://www.chemi.muni.cz/nmr/vs.html>

1. **Úvod:** Historie NMR spektroskopie a současné trendy - využití NMR to ke studiu molekulární struktury v kapalně a pevné fázi, NMR tomografie a NMR zobrazování, pohledy do budoucna, prohlídka NMR laboratoře PřF MU.
2. **Základní principy:** magnetický dipól, rezonanční podmínka, NMR spektrometr, Fourierova spektroskopie, 'klasický popis' - Blochovy rovnice, relaxační procesy – spin-mřížková a spin-spinová relaxace, Fourierova transformace, citlivost měření.
3. **Dynamika spinových systémů:** základní vlastnosti nukleárního spinového systému, teorie matic hustoty, maticové reprezentace, operátory, spinový Hamiltonián v Hilbertově reprezentaci, teorie průměrného Hamiltoniánu.
4. **Součinový operátorový formalismus:** základní principy, názvosloví, vývoj součinových operátorů, Hamiltonián v součinové bázi, složené rotace, pozorovatelné veličiny.
5. **1D Fourierova spektroskopie:** excitační sekvence, principy spinového echa, měření relaxačních časů, přenos polarizace – metody INEPT a DEPT, složené pulzy, homo- a hetero-nukleární decoupling, pulzní gradienty
6. **2D Fourierova spektroskopie:** základní principy a formální teorie detekce NMR ve dvou frekvenčních dimenzích, koherenční stezky.
7. **Základní metody 2D spektroskopie:** korelace chemických posunů - COSY, J-rozlišená spektroskopie – měření spin-spinových skalárních interakcí, korelace dipól-dipólových interakcí – NOESY, fázové cykly, varianty pro měření homo- a hetero-nukleárních spinových systémů, editace spekter.
8. **Aplikace NMR ve strukturní analýze biomolekul:** proteiny a peptidy, nukleové kyseliny, získávání strukturních parametrů: měření vzdáleností vodíkových atomů, určování dihedrálních úhlů, matematická rekonstrukce prostorové struktury makromolekul.

### **Studijní materiál:**

**Understanding NMR Spectroscopy**, James Keeler, University of Cambridge, 2002, přístupný na:

[http://www.spectroscopynow.com/Spy/basehtml/SpyH/1,1181,5-1-2-0-0-news\\_detail-0-2482,00.html](http://www.spectroscopynow.com/Spy/basehtml/SpyH/1,1181,5-1-2-0-0-news_detail-0-2482,00.html)

Další literatura:

1. R.R.Ernst, G. Bodenhausen and A.Wokaun: **Principles of NMR in One and Two Dimensions**, Clarendon Press, Oxford, 1987.
2. N.Chandrakumar, S.Subramanian: **Modern Techniques in High Resolution FT NMR**, Springer Verlag, New York 1986.
3. A.E.Derome: **Modern NMR Techniques for Chemistry Research**, Pergamon Press, Oxford, 1987.
4. A. Bax: **Two-dimensional NMR in Liquids**, Delft University Press, Dodrecht, 1982.
5. **Methods in Enzymology**, vol. 176, 177 and 239: NMR, Eds. N.J.Oppenheimer, T.L. James, Academic Press, San Diego, 1987, 1994.
6. Frank J.M. van de Ven: **Multidimensional NMR in Liquids**, VCH Publishers, Inc., New York 1995.
7. D. Canet: **Nuclear Magnetic Resonance – Concepts and Methods.**, J.Wiley & Sons, Chichester, 1996.
8. R. Freeman: **Spin Choreography – Basic Steps in High Resolution NMR**, Spektrum Academic Publishers, Oxford 1997.
9. I.Goljer, T.Liptaj: **Nové metódy FT NMR spektroskopie kvapalin**, Veda, Bratislava, 1986.
10. J.Schraml: **Dvourozměrná NMR spektroskopie**, Academia Praha, 1987.
11. **Magnetická rezonančná spektroskopia**, SVŠT Bratislava 1988, CHTF, učebné texty k PGS.
12. Francois Sauriol: **Animated NMR Course**  
(electronic version available at  
<http://www.chem.queensu.ca/facilities/NMR/nmr/webcourse/index1.htm>
13. Další kurzy on line: [http://www.spectroscopynow.com/Spy/basehtml/SpyH/1,1181,5-14-0-0-0-education\\_new-0-0,00.html](http://www.spectroscopynow.com/Spy/basehtml/SpyH/1,1181,5-14-0-0-0-education_new-0-0,00.html)

## Navazující kursy:

- ▶ PřF: **C5320 Fyzikálně chemické základy NMR** (podzim 2004)  
prof. RNDr. Vladimír Sklenář, DrSc.  
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C5860 Aplikovaná NMR spektroskopie** (podzim 2004)  
Prof. RNDr. Miroslav Holík, CSc.  
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules** (jaro 2005)  
RNDr. Radovan Fiala, CSc., Mgr. Jaromír Toušek, Dr., Mgr. Lukáš Žídek, Ph.D.  
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C6800 Multinukleární NMR spektroskopie** (jaro 2005)  
doc. RNDr. Jiří Pinkas, Ph.D.  
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C7995 Advanced Methods of Biomolecular NMR** (podzim 2004)  
RNDr. Radovan Fiala, CSc., Mgr. Lukáš Žídek, Ph.D.  
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy** (podzim 2004)  
RNDr. Dalibor Dastych, Dr., doc. RNDr. Radek Marek, Ph.D., doc. RNDr. Jiří Pinkas, Ph.D.  
2 kr. Doporučované ukončení: kolokvium. Jiná možná ukončení: zkouška. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C8950 NMR - Strukturní analýza** (jaro 2005)  
doc. RNDr. Radek Marek, Ph.D.  
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)