Strukturní chemie I – 2011/2012

Okruhy otázek z NMR části

1. Atomové jádro v magnetickém poli, magnetický dipólový moment, energie, makroskopická magnetizace, rezonanční podmínka pro izolované jádro s = ½, Larmorova precesní frekvence pro izolované jádro. Nástroje pro popis spinového systému (vektorový model, operátorový formalismus).
2. Obecný princip NMR experimentu: rovnovážná magnetizace, efekt rf pulzu, detekce, FT. Měření ^{1}H NMR spektra, vektorový popis vývoje pod vlivem chemického posunu.
3. Přehled interakcí jaderného spinu, které dominují v kapalné fázi, jejich projev v 1D NMR spektru, jaderné magnetické stínění, definice chemického posunu, základní trendy, faktory ovlivňující pozici a tvar signálu (intenzita, položířka).
4. Nepřímá spin-spinová interakce (J), vektorový popis vývoje pro spinový pár IS, spinové systémy, notace, projev v jemném štěpení signálů, vztah mezi jadernými spiny vzhledem k symetrii molekuly – topicita (ekvivalence, neekvivalence), Karplusova rovnice.
5. Vektorový model NMR experimentu, vývoj spinového systému IS po aplikaci RF pulzu, princip refokusace signálu – spinové echo.
6. Přímá spin-spinová interakce (D), Hamiltonián pro dipolární interakci, projev ve spektru v roztoku a pevném stavu, využití ve strukturní analýze.
7. Relaxace NMR signálu – příčiny, mechanismy, T_1, T_2, aplikace, spinový pár IS – SQ, ZQ, DQ přechody, dipól-dipólová relaxace, nukleární Overhauserův jev (NOE), NOE a velikost molekuly, NOE a meziatomová vzdálenost.
8. Přenos polarizace – vysvětlení na *J*-interagujícím spinovém páru, selektivní inverze populace, neselektivní přenos – INEPT, přenos polarizace a citlivost NMR experimentu.
9. Obecná struktura 2D NMR experimentu, přímá a nepřímá časová doména, princip vzniku 2D NMR, korelace chemických posunů, COSY.
10. *J*-korelovaná jádra v homonukleárním a heteronukleárním systému, COSY, HSQC. Podstata a struktura HSQC experimentu (INEPT), přenos polarizace, optimalizace, vývojová perioda. NOESY spektrum, korelace na základě DD relaxace, strukturní informace.