

Fyzikálně-chemické základy NMR

C5320

Kamenice, pavilon A4, místnost 2.11, 16.9. – 20.12.2013

Úterý 13.00 – 14.50 přednáška

Úterý 15.00 – 15.50 cvičení

Vladimír Sklenář (podzimní semestr 2013/2014, 2 + 1 hod./týden)

Radovan Fiala

Pavel Srb (cvičení)

Národní centrum pro výzkum biomolekul a Ústav chemie, Masarykova univerzita v Brně.

Kampus Bohunice, pavilon A4, místnost 1.22, tel. 549 497 022

e-mail: valdimir.sklenar@ceitec.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.
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. **Součinnový operátorový formalismus:** základní principy, názvosloví, vývoj součinnových operátorů, Hamiltonián v součinnové 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, ISBN: 0470017872

Publisher: John Wiley & Sons, Published: 1. 11. 2005.

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. S. Braun, H.-O.Kalinowski, S. Berger: 100 and More Basic NMR Experiments. VCH, 1996.
10. J.Schraml: **Dvourozměrná NMR spektroskopie**, Academia Praha, 1987.
11. Malcolm H. Levitt: **Spin Dynamics. Basics of NMR.** John Wiley&Sons, Chichester, 2001.
12. Francois Sauriol: **Animated NMR Course**
(electronic version available at
<http://www.chem.queensu.ca/facilities/NMR/nmr/webcourse/index1.htm>)

Navazující kurzy na PŘF MU:

- [C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules](#)
- [C7995 Advanced Methods of Biomolecular NMR](#)
- [C8950 NMR - Strukturní analýza](#)