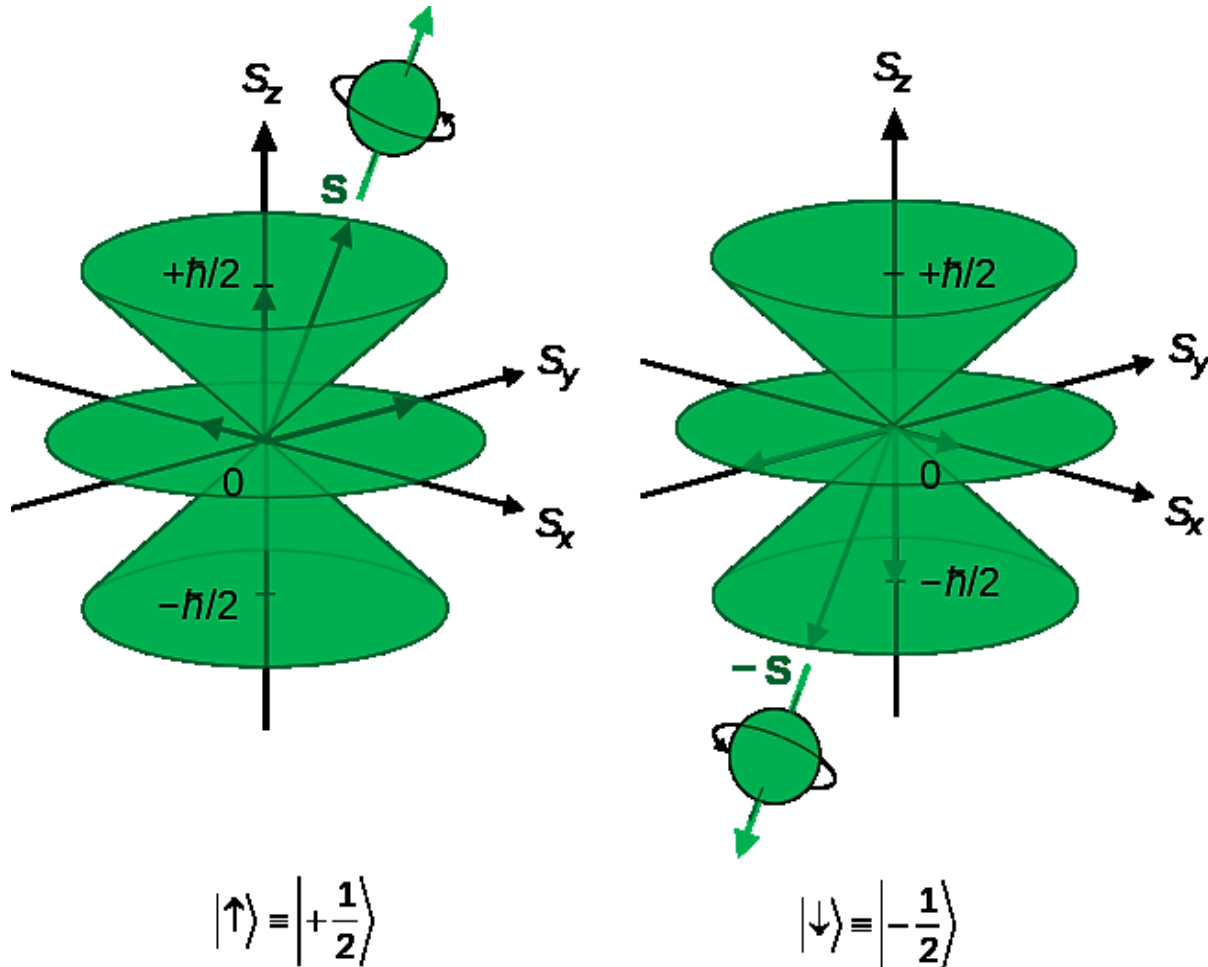


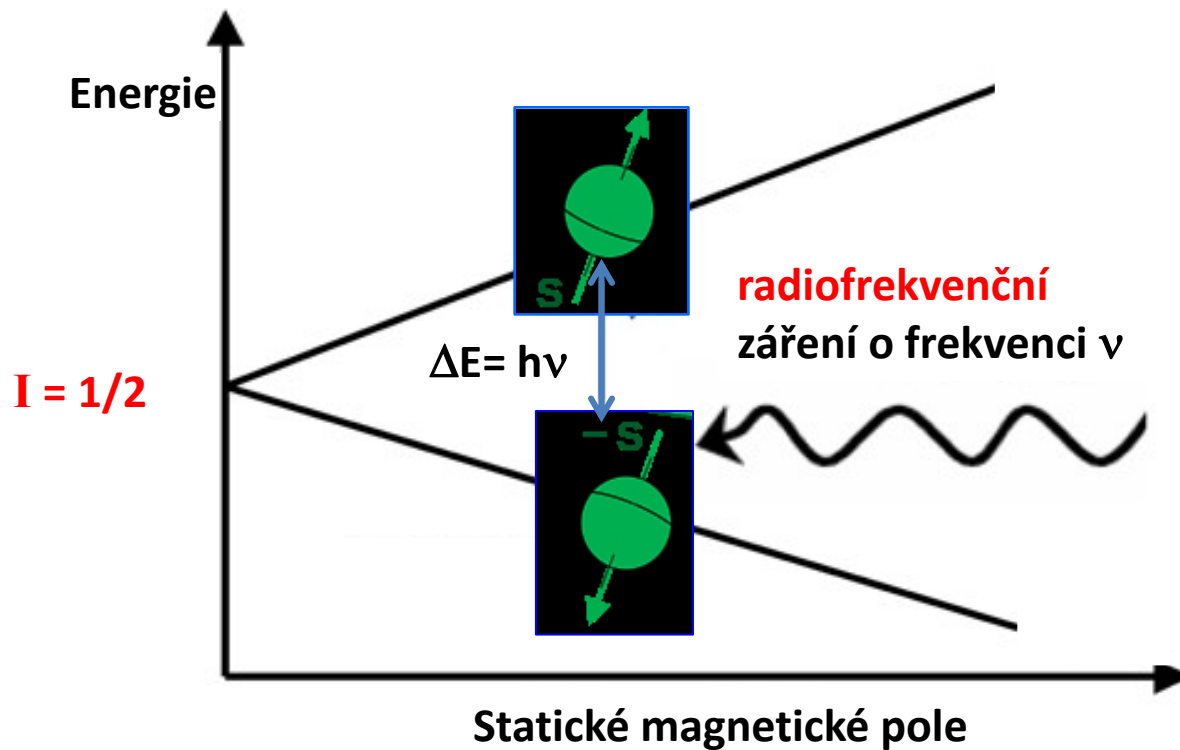
Nukleární magnetická rezonance

Nuclear magnetic resonance

Spinové stavy jader – vektorový model

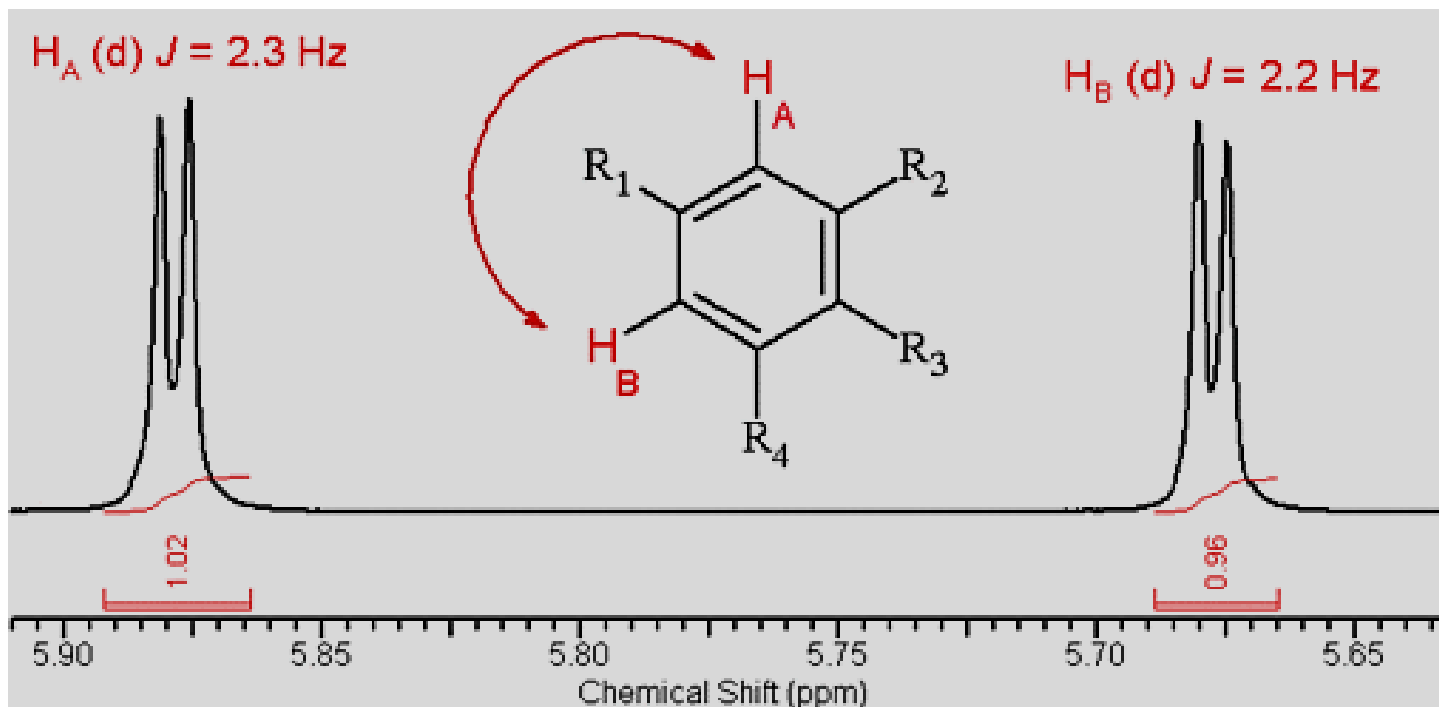


Spiny v magnetickém poli



Chemický posuv

Chemical shift

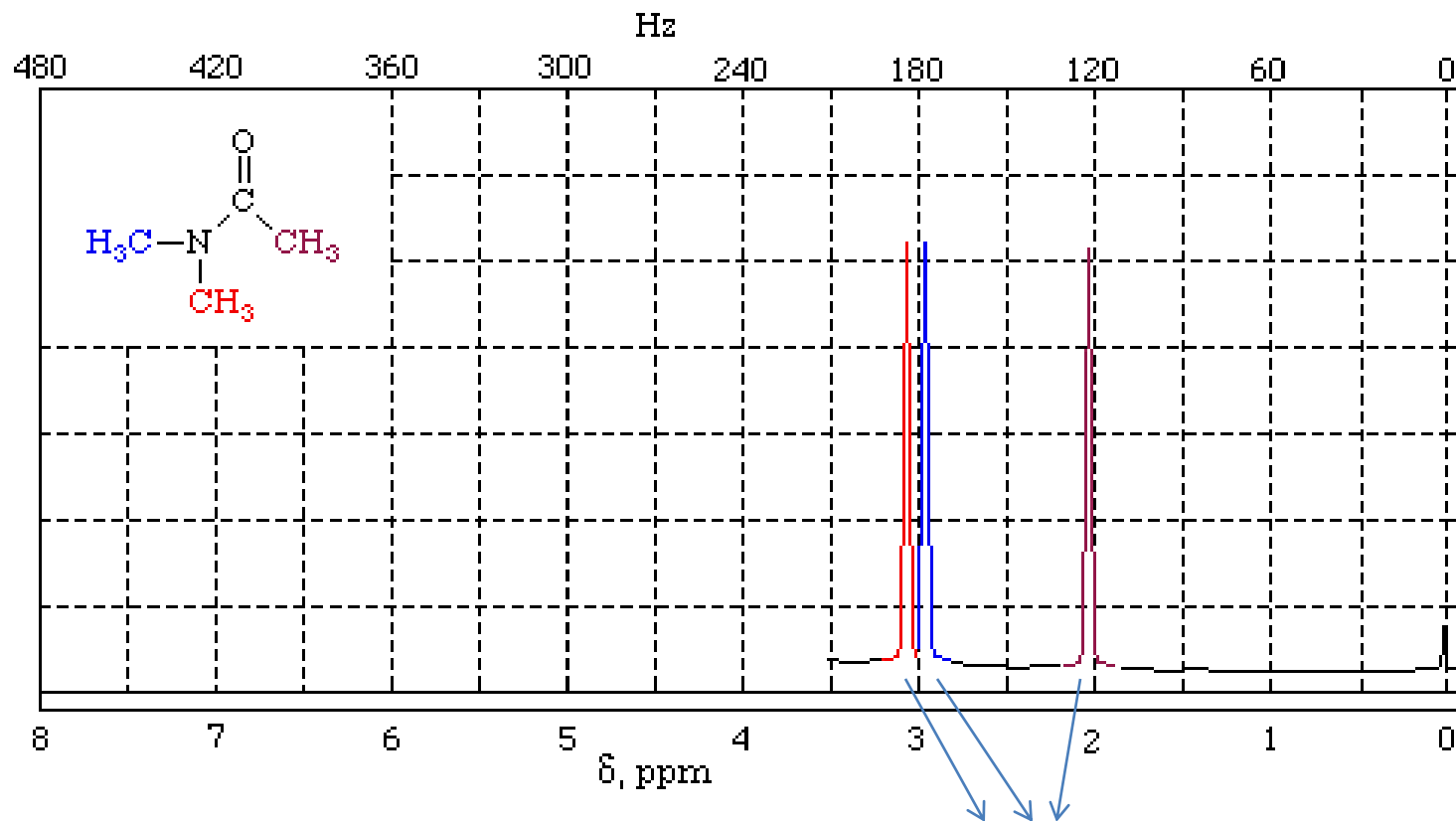


Rezonanční frekvence vzorku

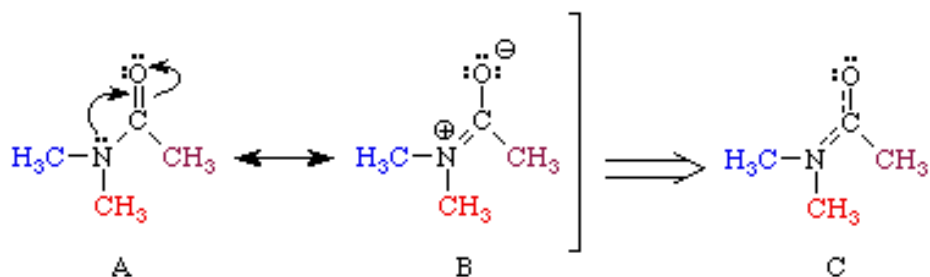
$$\delta_\nu = \frac{\nu_\nu - \nu_s}{\nu_s} \times 10^6$$

Rezonanční frekvence standardu (TMS, DSS)

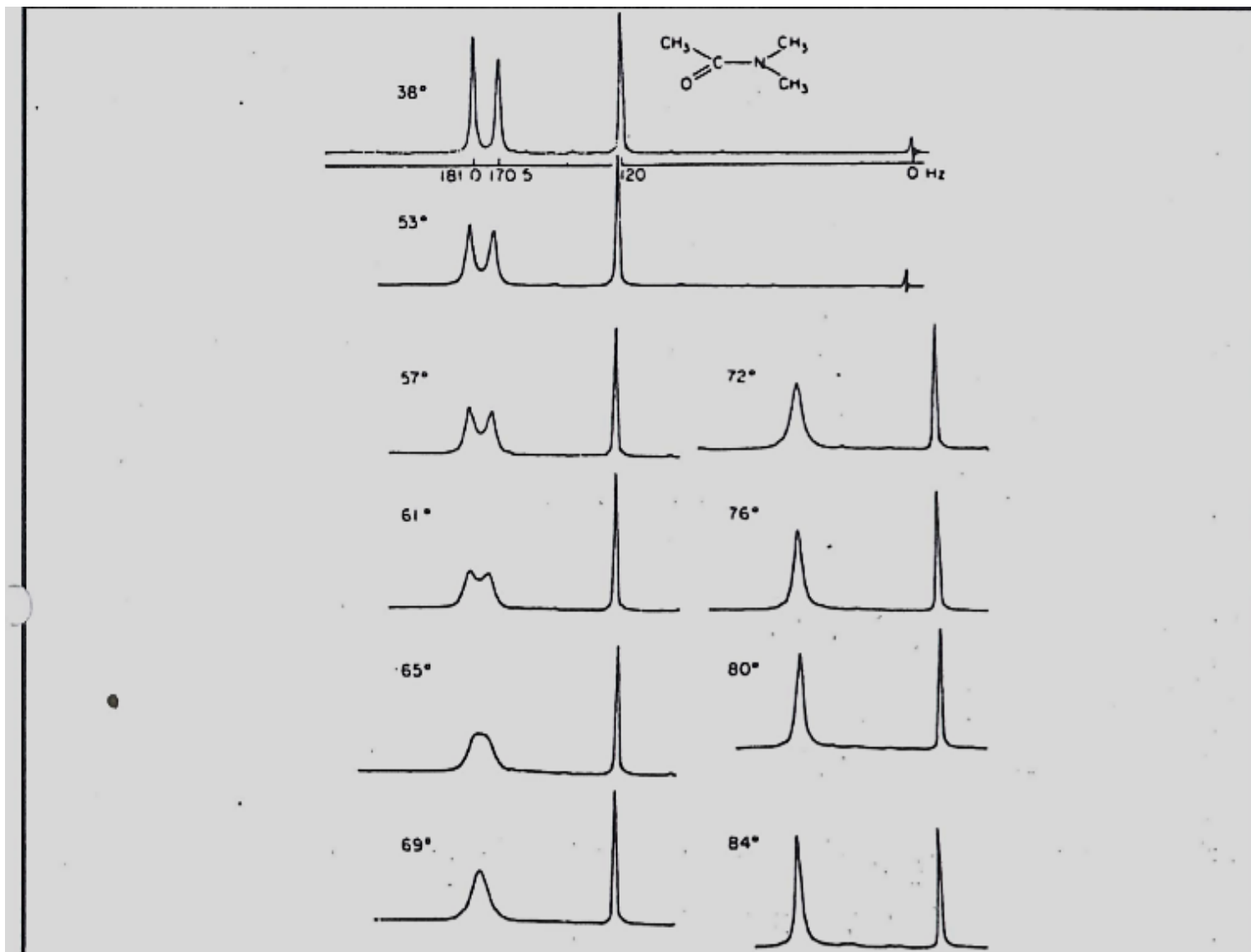
Spektrum N,N acetamidu na škále chemických posuvů, integrované



3 chemicky neekvivalentní methyly,
tj. rotace kolem vazby N-C není volná



Teplotně závislé spektrum N,N acetamidu

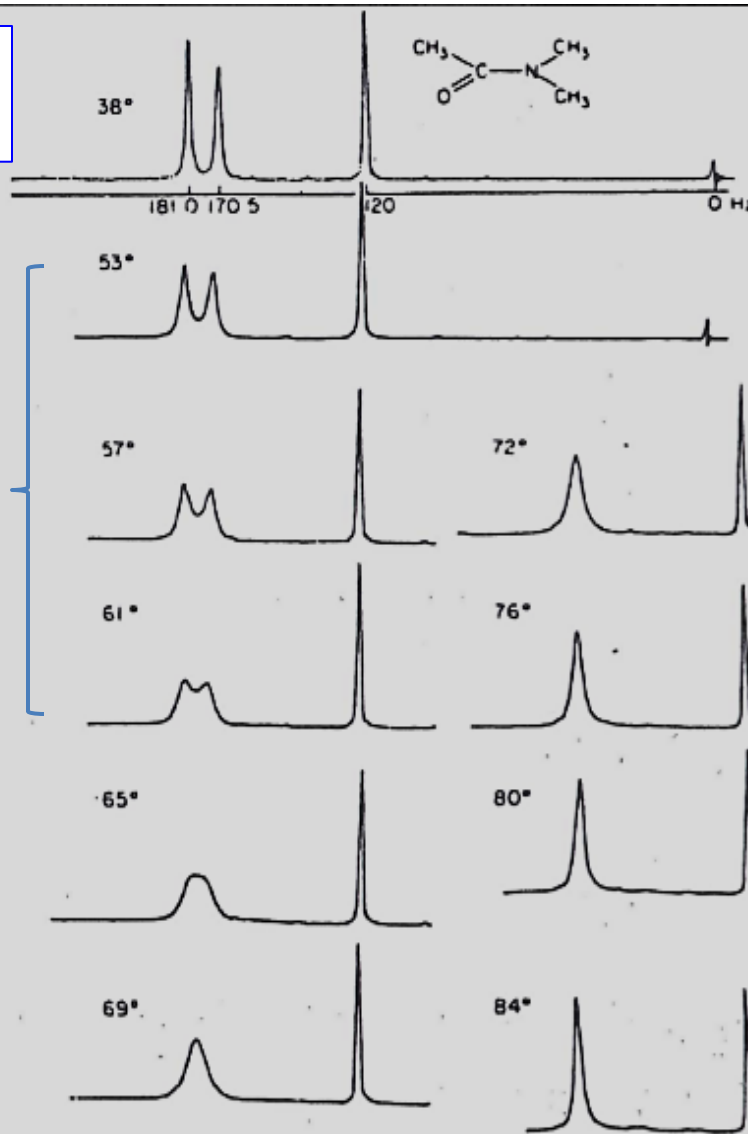


Teplotně závislé spektrum N,N acetamidu

Tři ostré píky: nedochází k rotaci kolem vazby C-N

Rozšiřování píků: zrychlující se rotace kolem vazby C-N

Objevuje se již pouze 1 pík

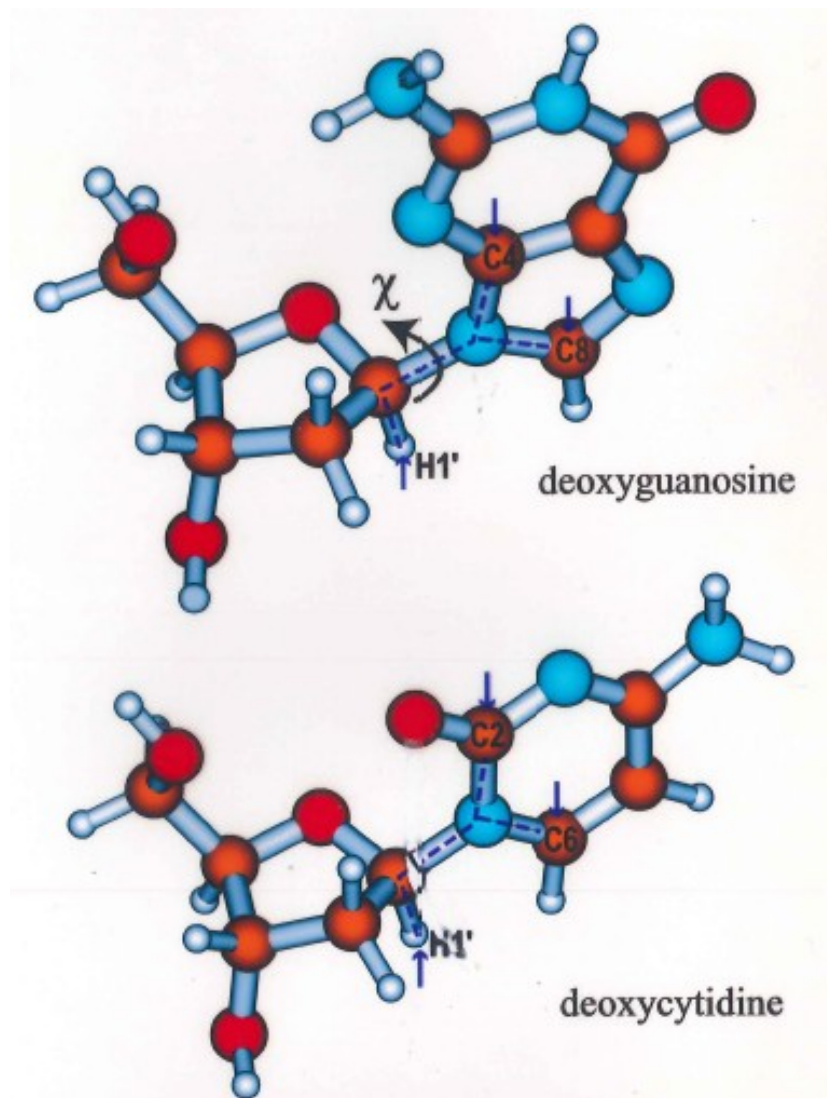
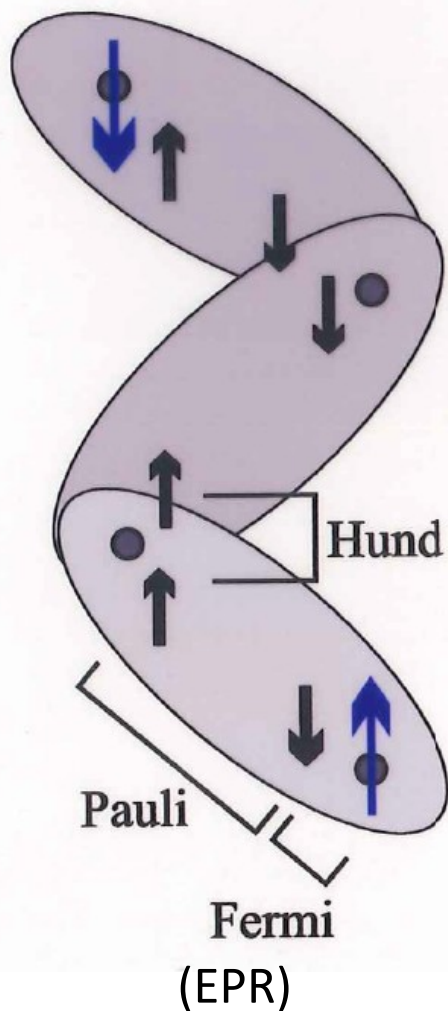


Zužování píku: dále se zrychlující se rotace kolem vazby C-N

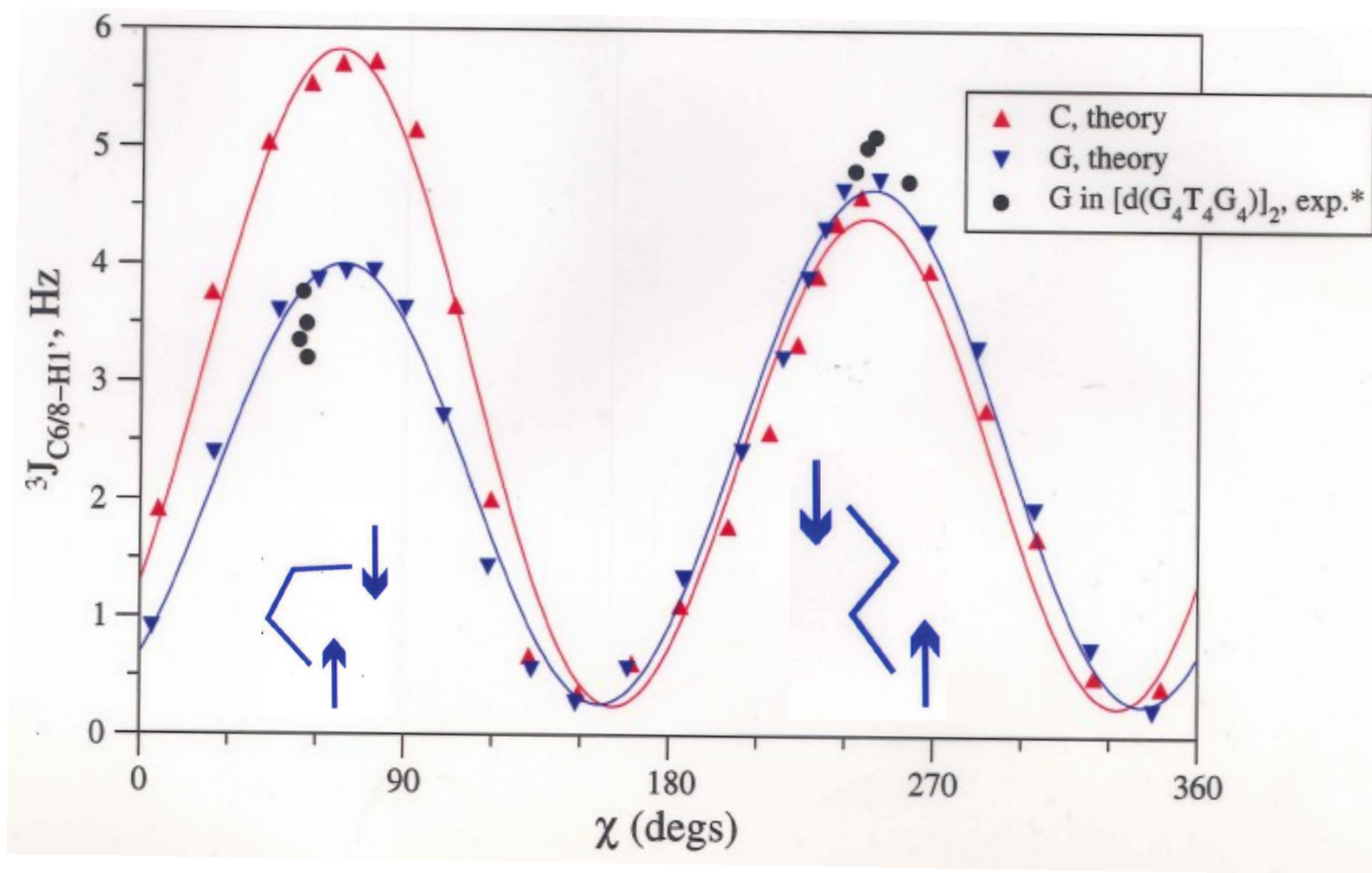
60 MHz spektrum N,N acetamidu na škále rezonančních frekvencí

NMR Spin-spinová interakce

NMR Spin-Spin Coupling



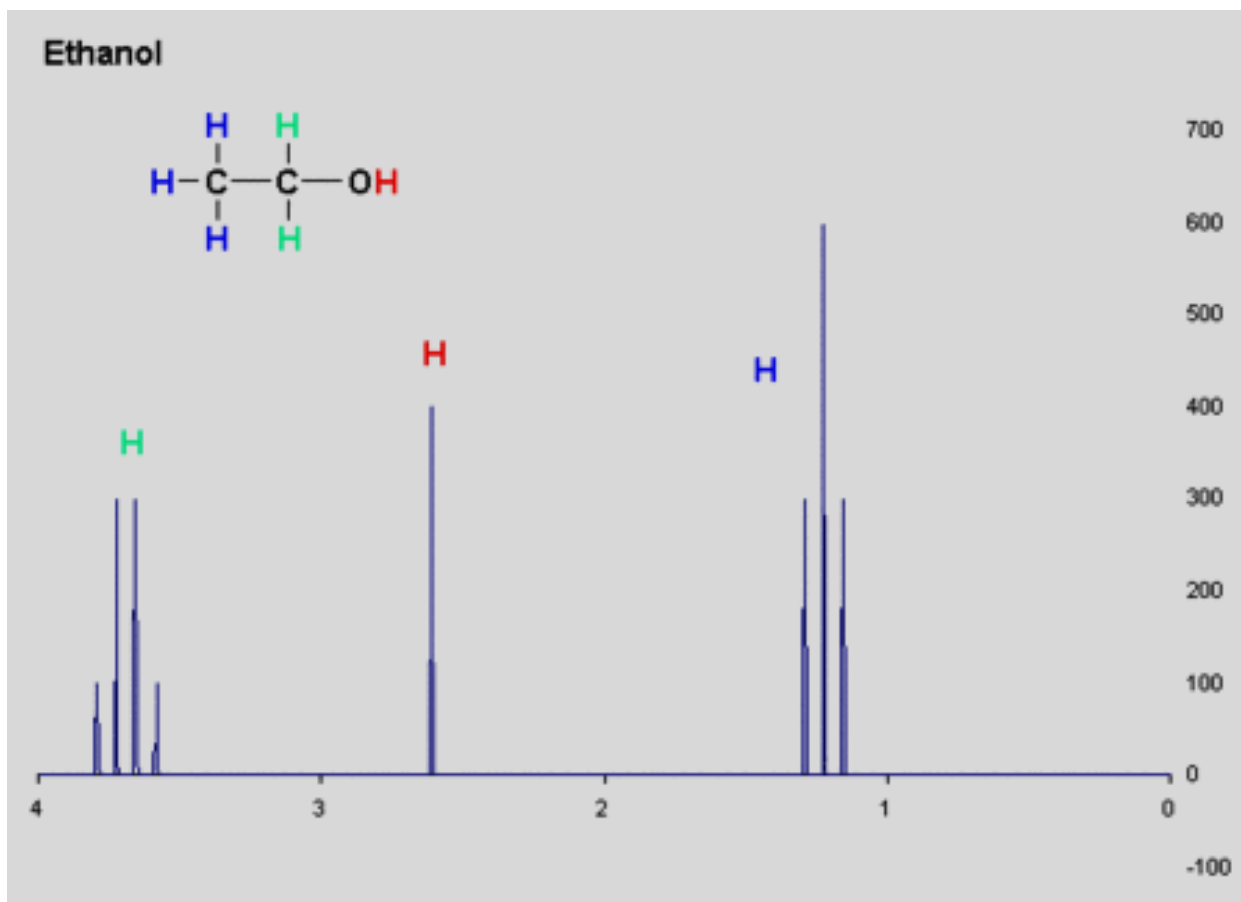
Karplusovy křivky: Trívazebná spin-spinová interakce jako funkce torzního úhlu
Karplus curves: Three-bond spin-spin interaction as a function of torsion angle



Exp: Trantírek, Štefl, Feigon, Sklenář, *J. Biol. NMR* **2002**, 23, 1.

Theory: Munzarová and Sklenář, *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, 124, 10666; *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, 125, 3649.

^1H spektrum ethanolu / ^1H NMR spectrum of ethanol



Vodík OH skupiny neinteraguje s dalšími H a je vidět jako singlet. Vodíky CH₃- a -CH₂- interagují takto: 2 vodíky v CH₂ štěpí signál methylových H na triplet, 3 vodíky v CH₃ štěpí signál methylenových H na kvartet.

The hydrogen (H) on the -OH group is not coupling with the other H atoms and appears as a singlet, but the CH₃- and the -CH₂- hydrogens are coupling with each other, resulting in a triplet and quartet respectively.