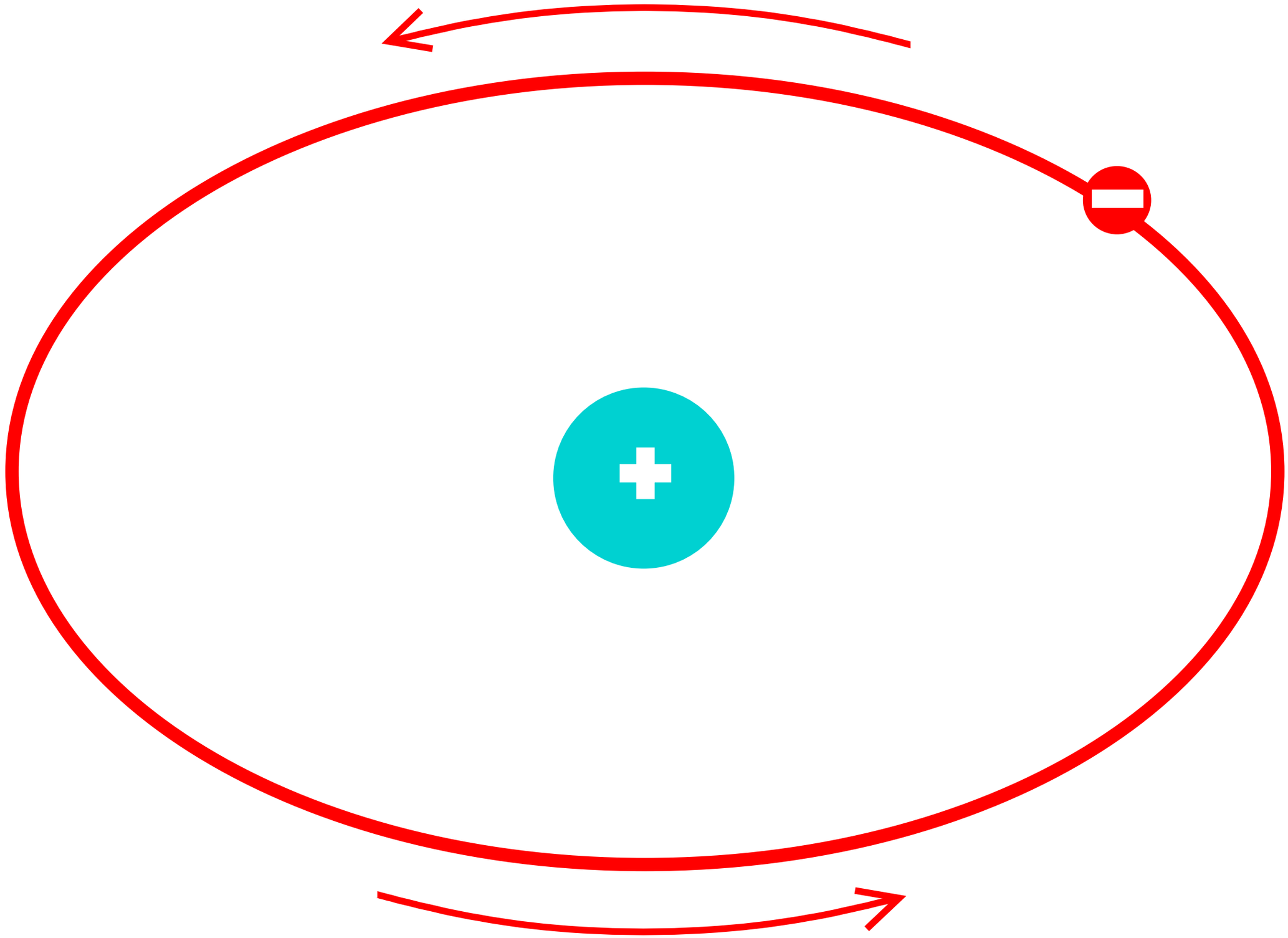
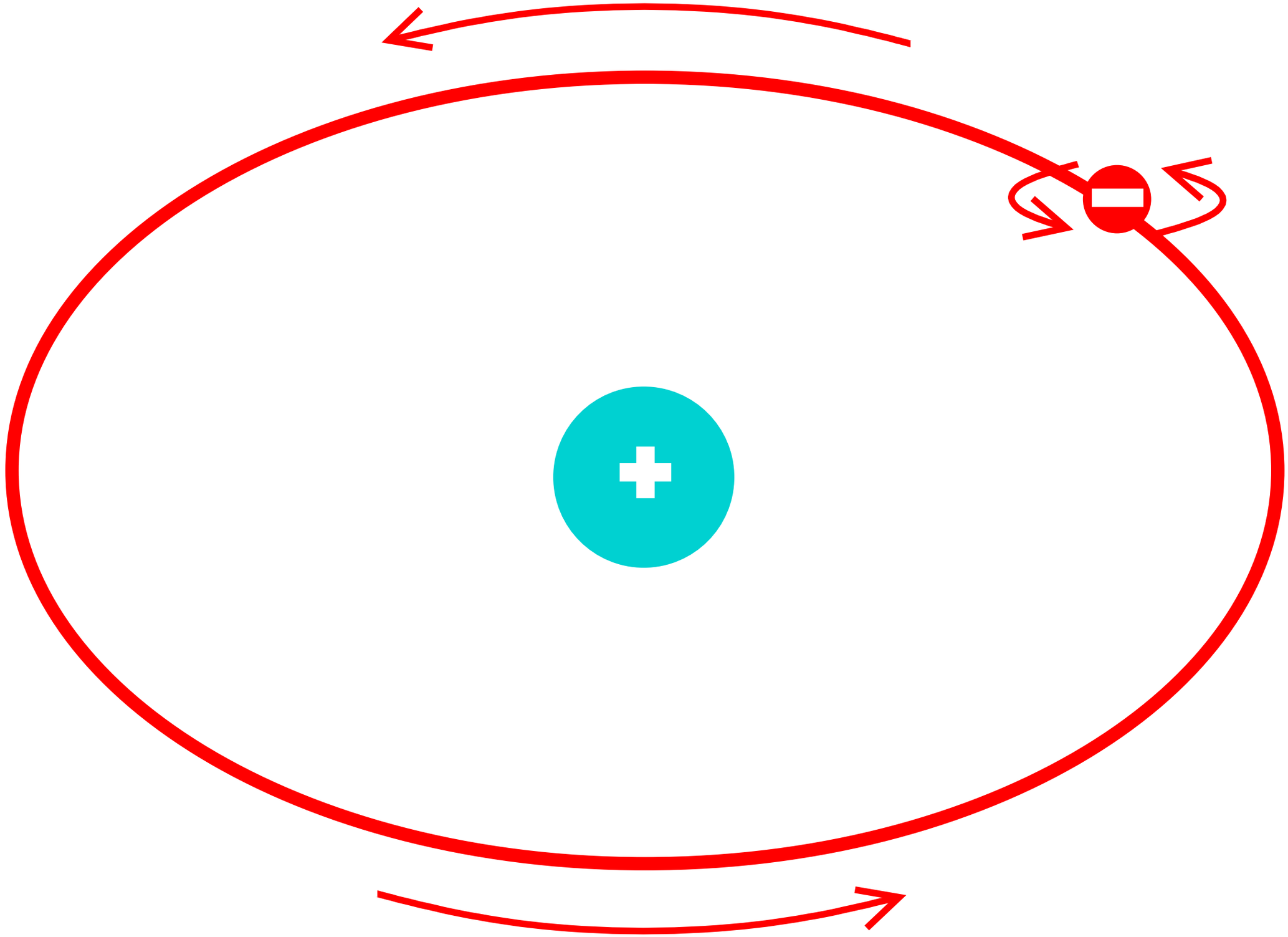
NUKLEARNI MAGNETICKA RESONANCE

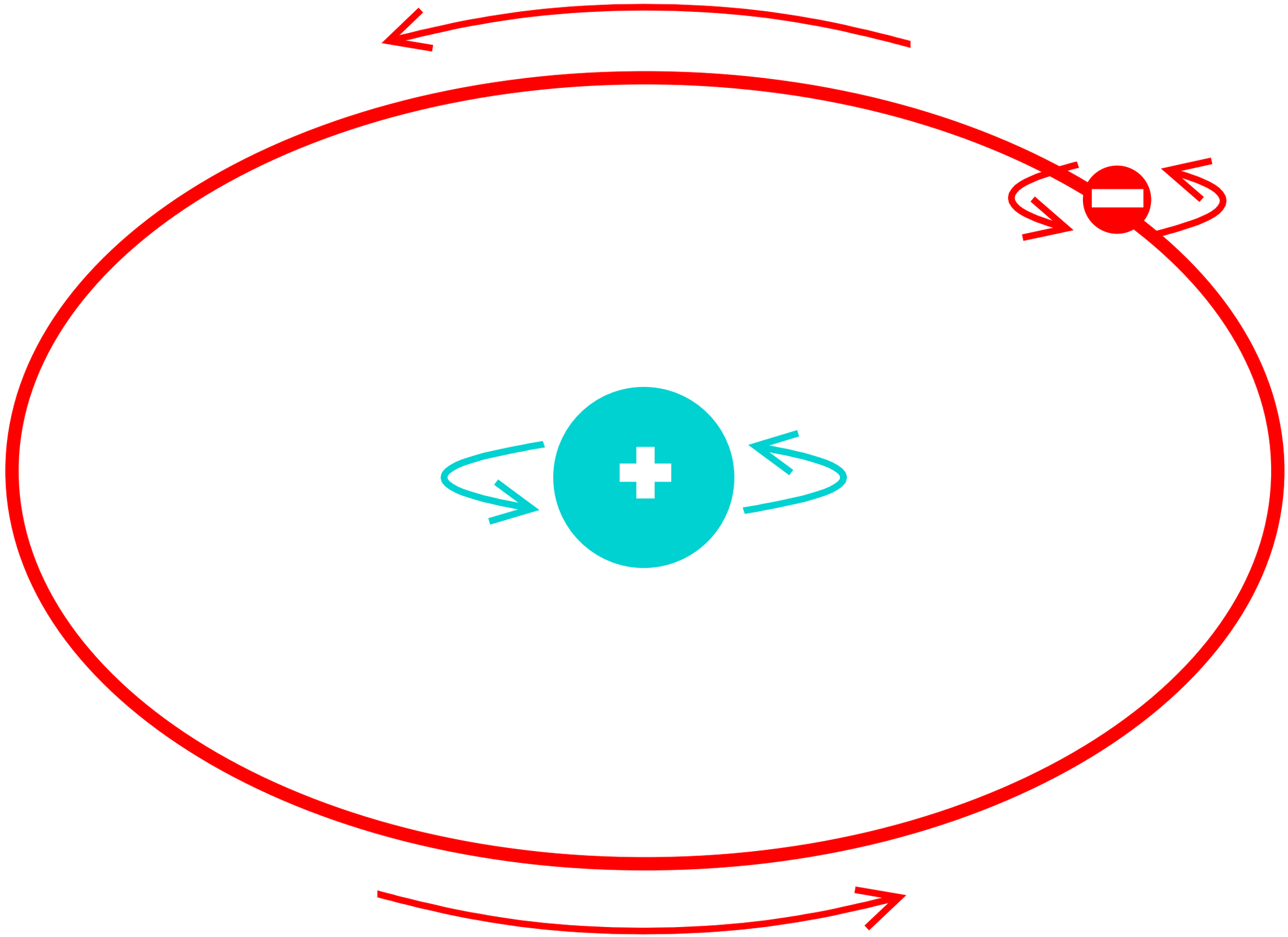
Moment hybnosti (elektron): $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

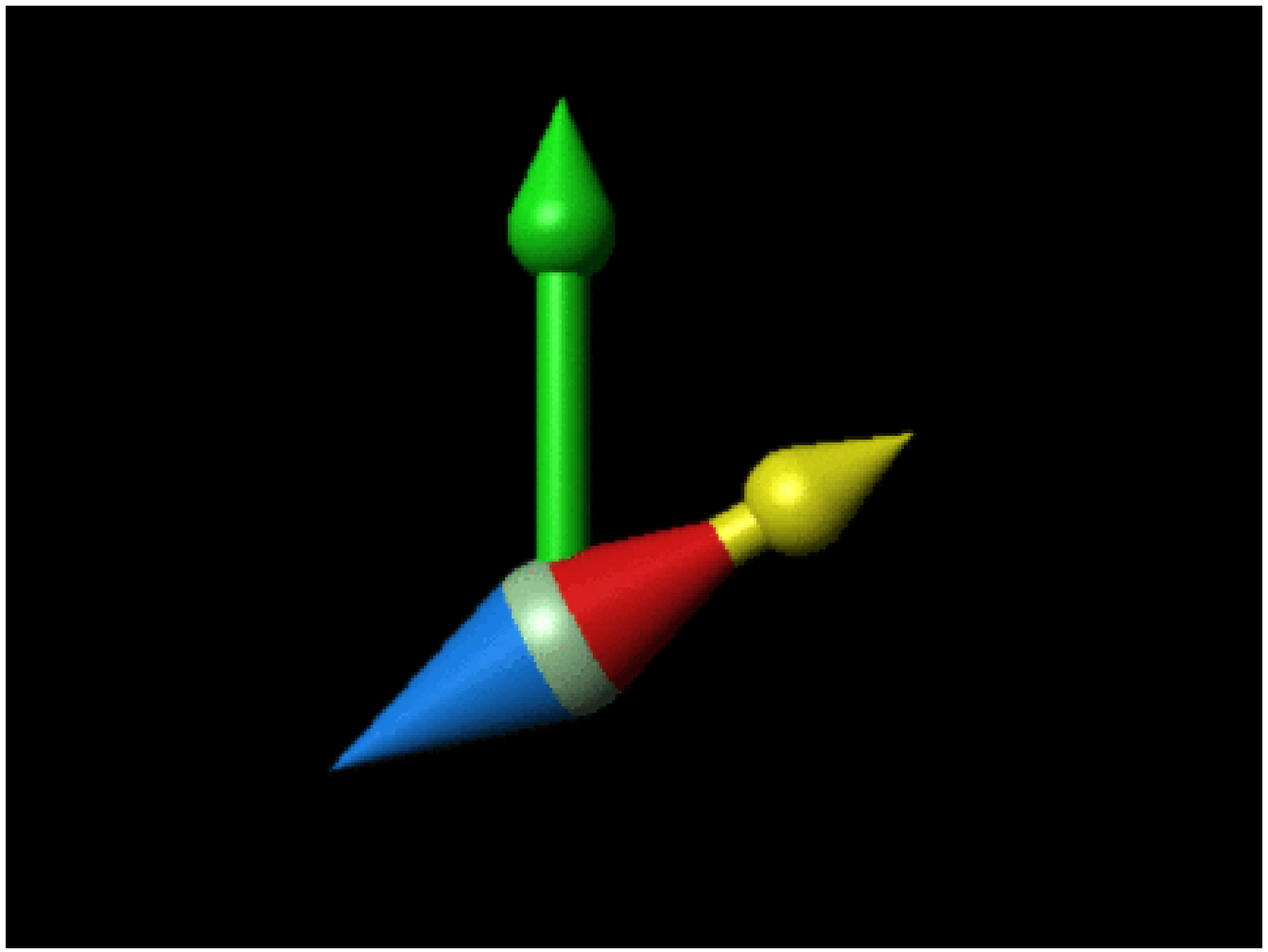


Spin (elektron)

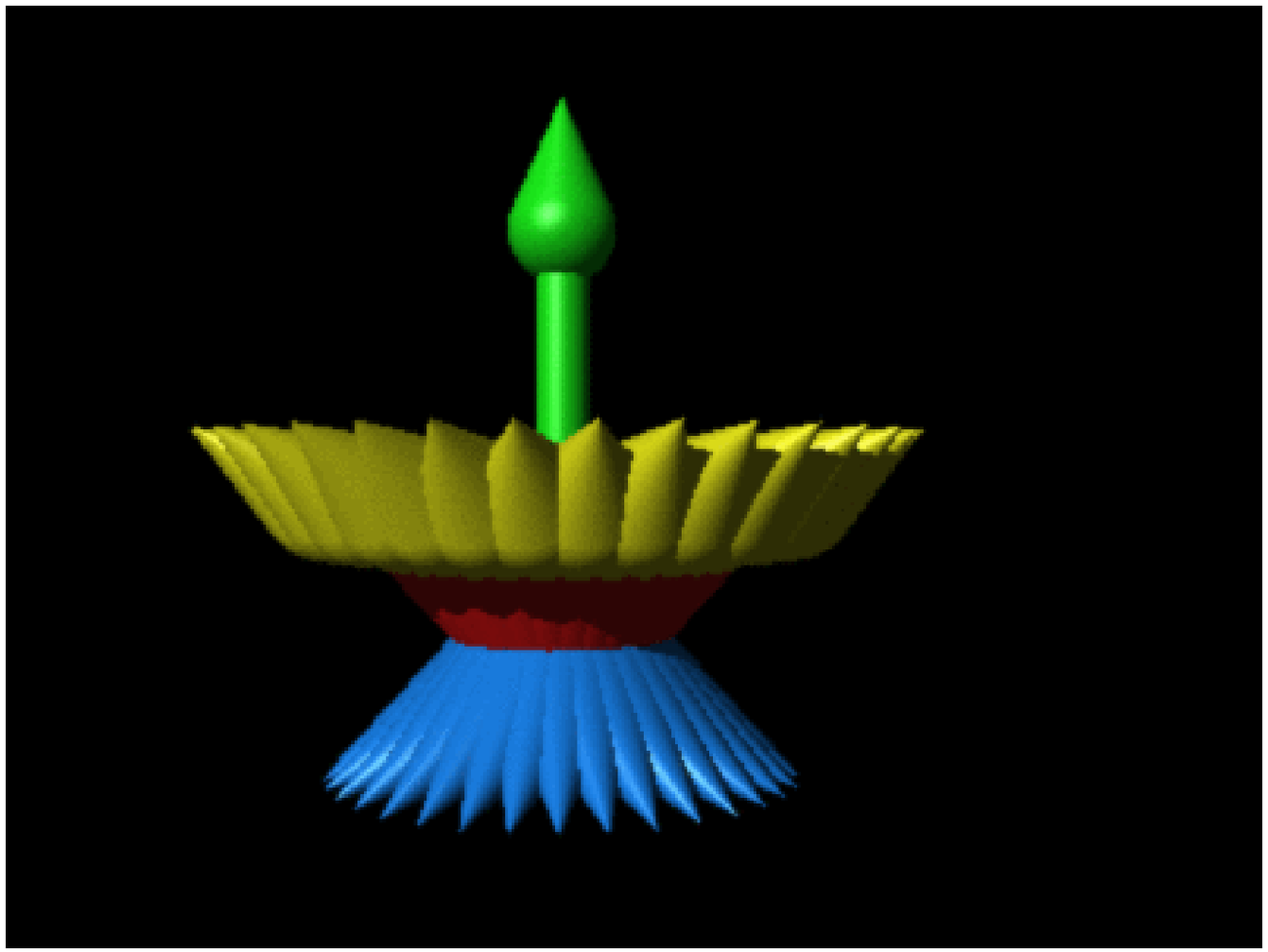


Spin (jádro)



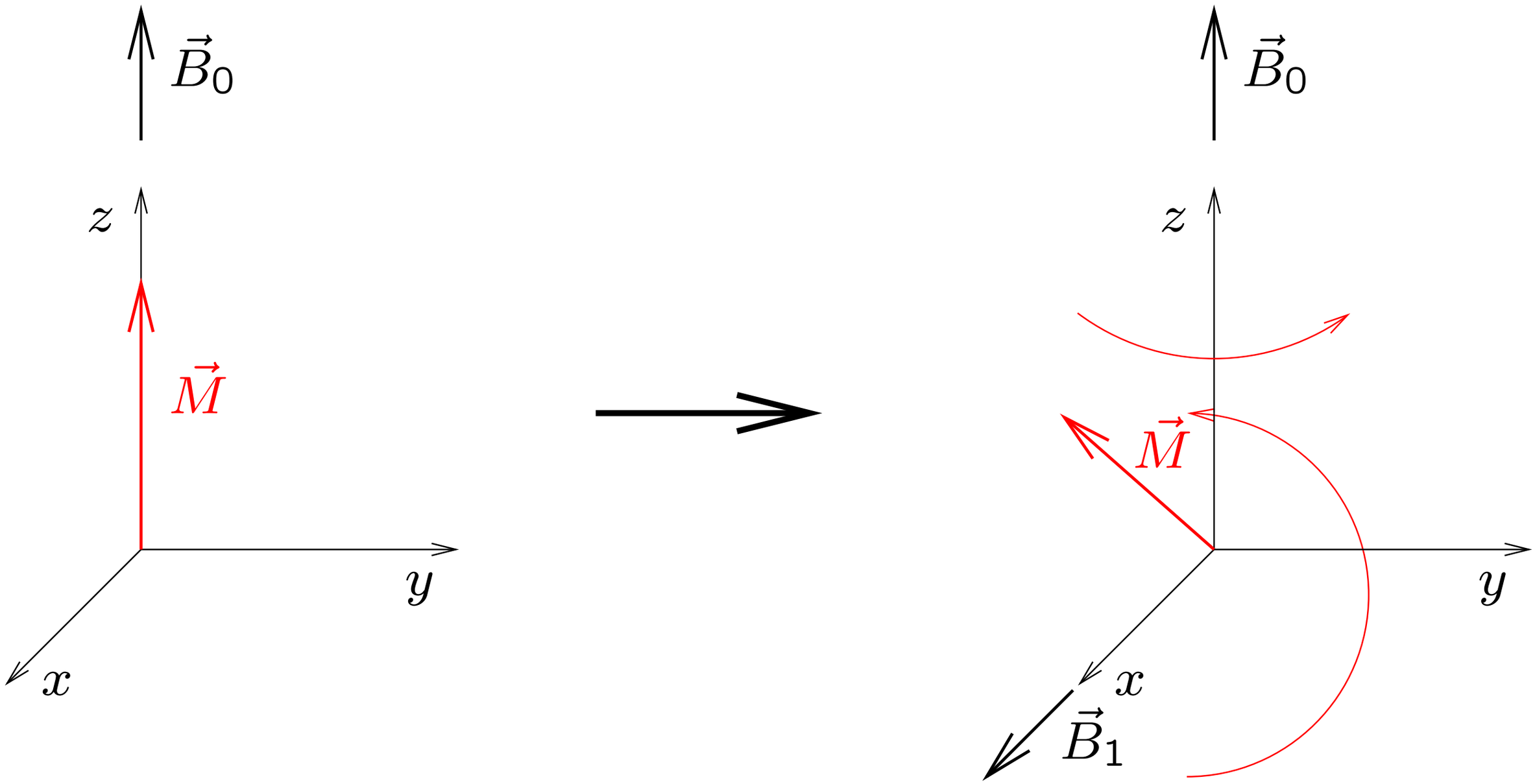


Jedno jádro v magnetickém poli



Pohyb vektoru magnetizace

- další magnetické pole $\vec{B}_1$



Experiment

- Přijímač vypnut, vysílač zapnut: **Excitace**

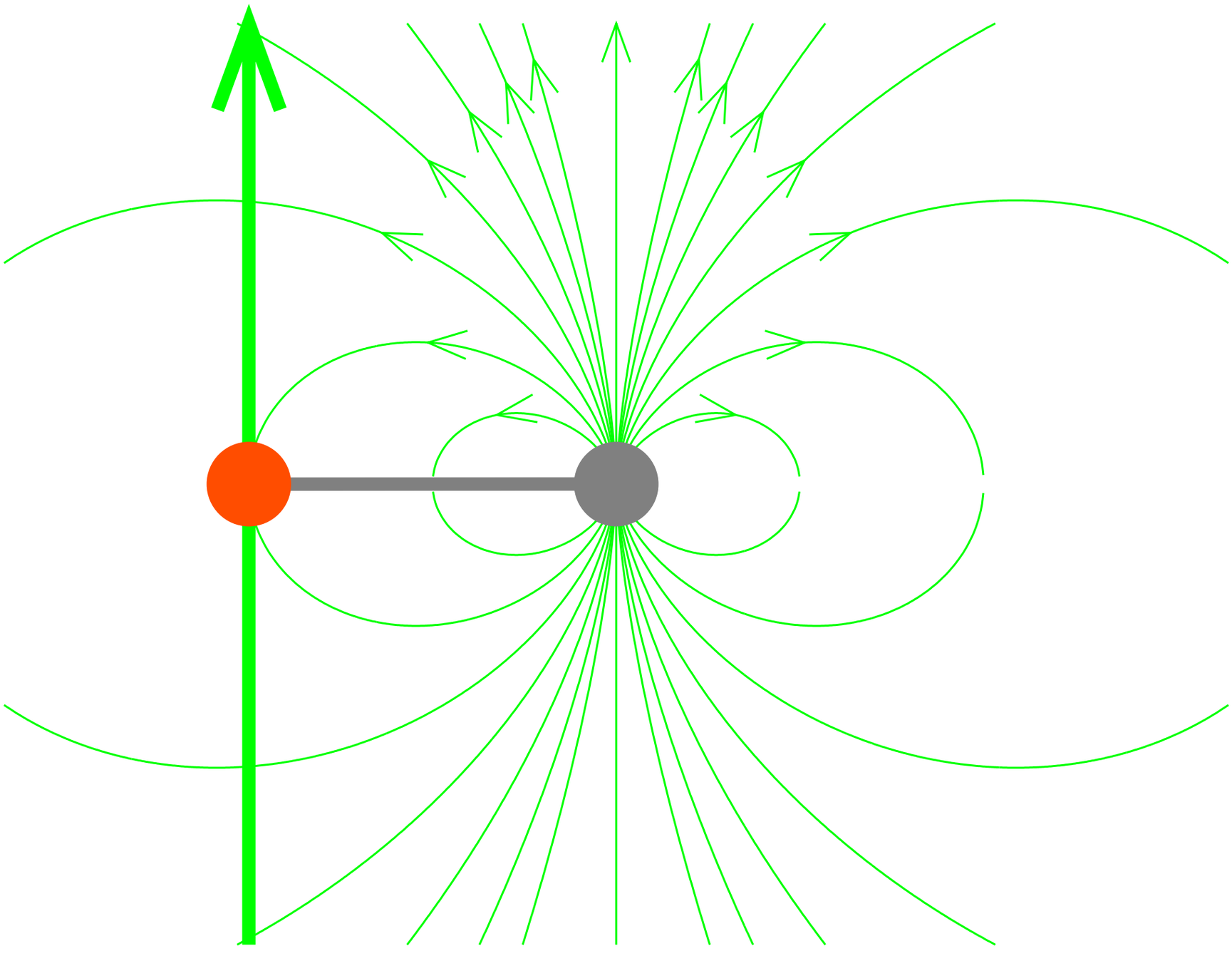
- Přijímač zapnut, vysílač vypnut: **Detekce**

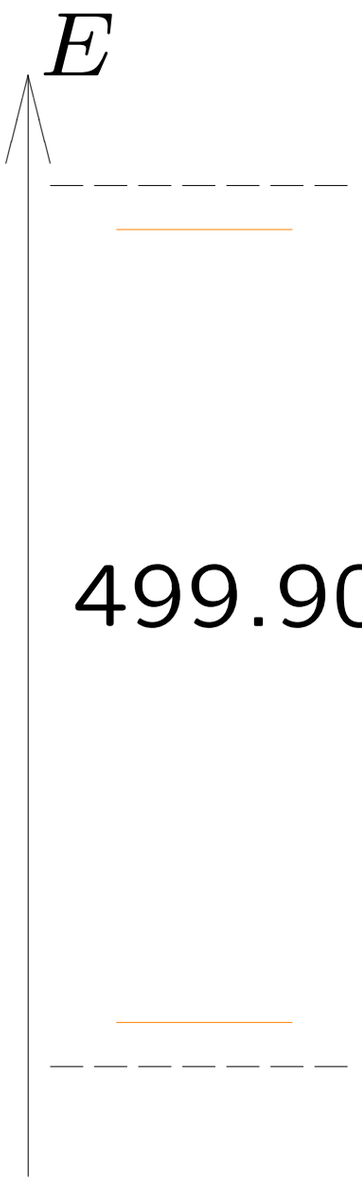
- Přijímač vypnut, vysílač vypnut: **Relaxace**

Magnetická pole v molekule:

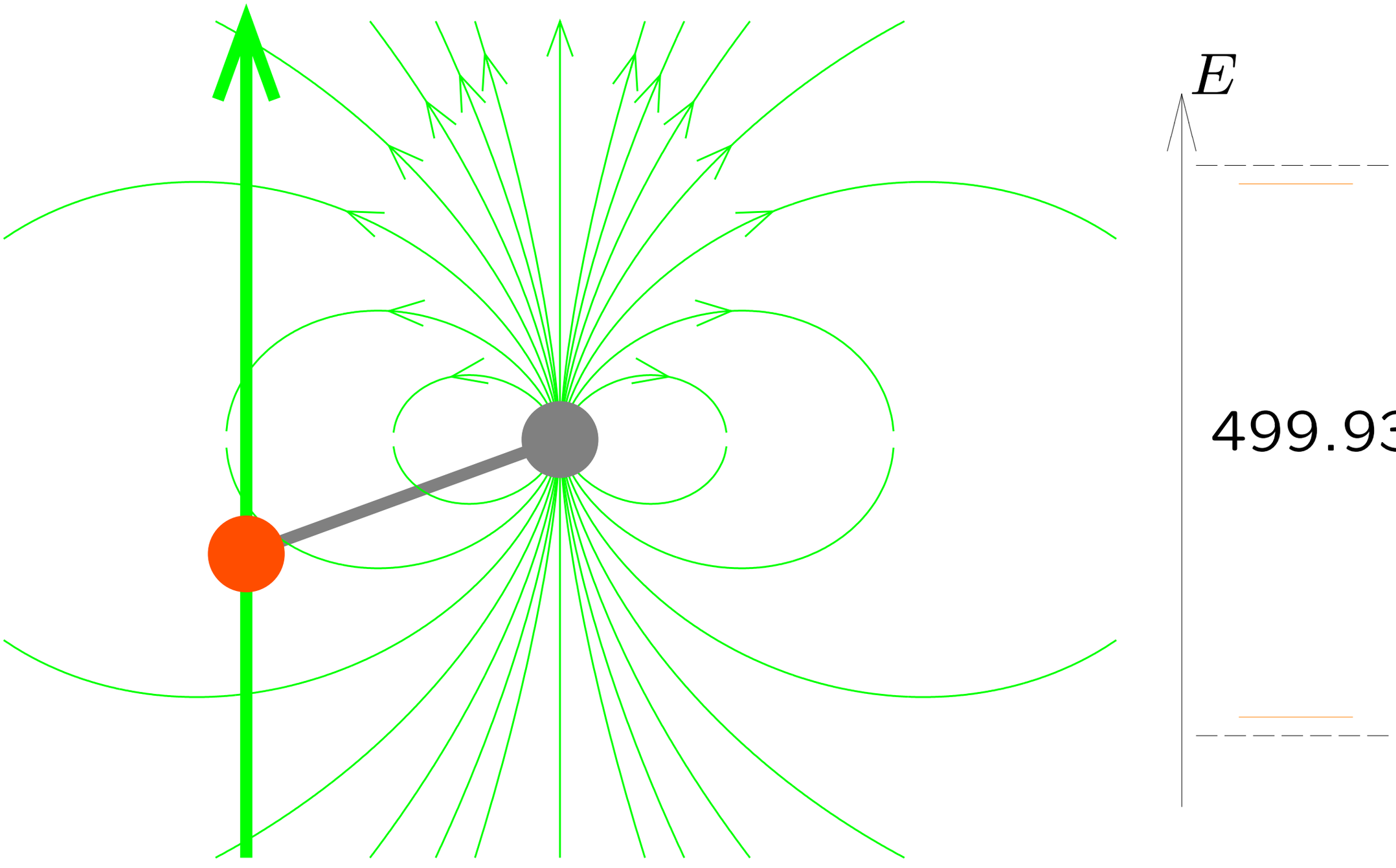
- Přímá interakce s ostatními jádry
- Interakce s elektrony
- Interakce s jádry zprostředkovaná elektrony

Přímá interakce s jiným jádrem:

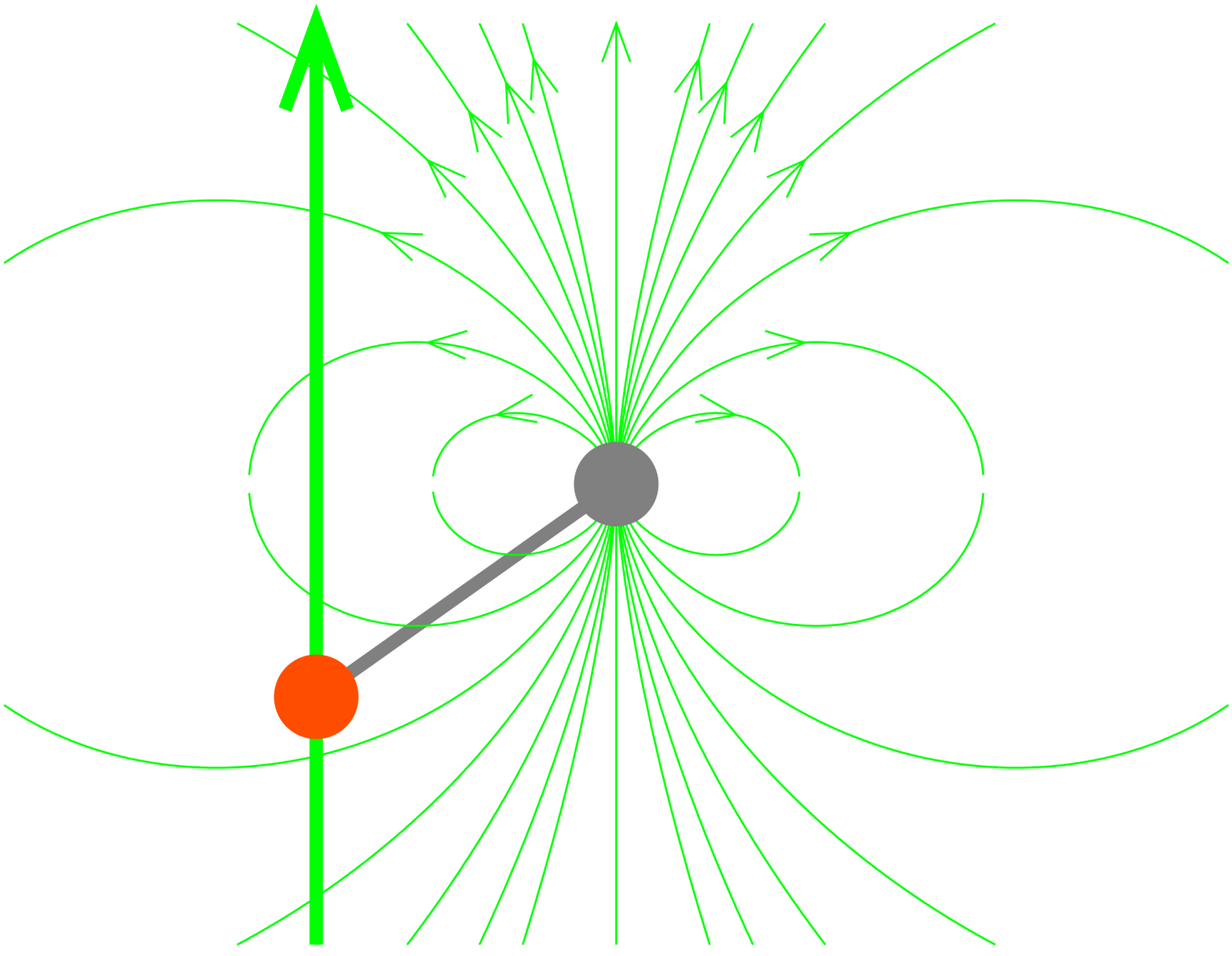




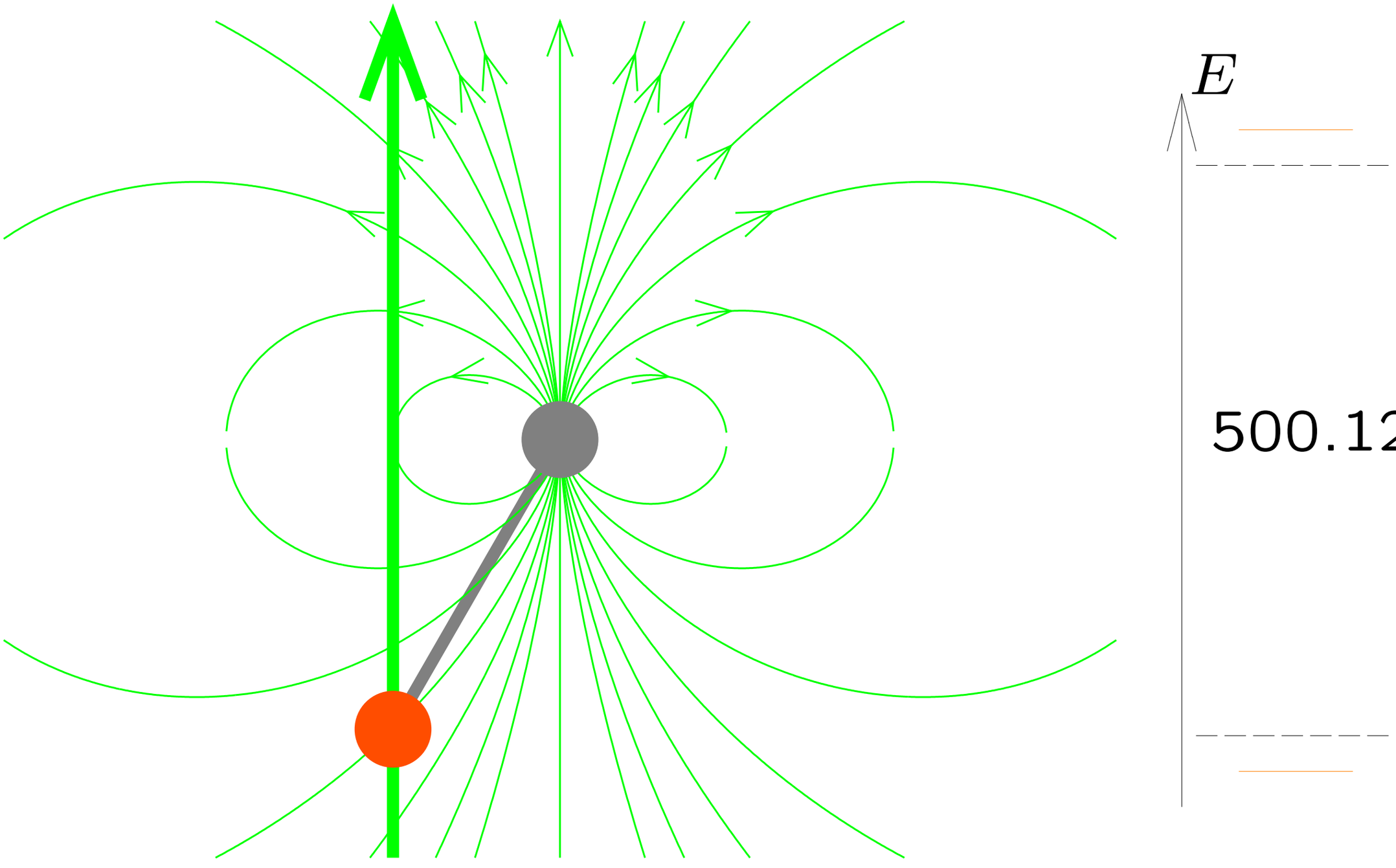
Přímá interakce s jiným jádrem:



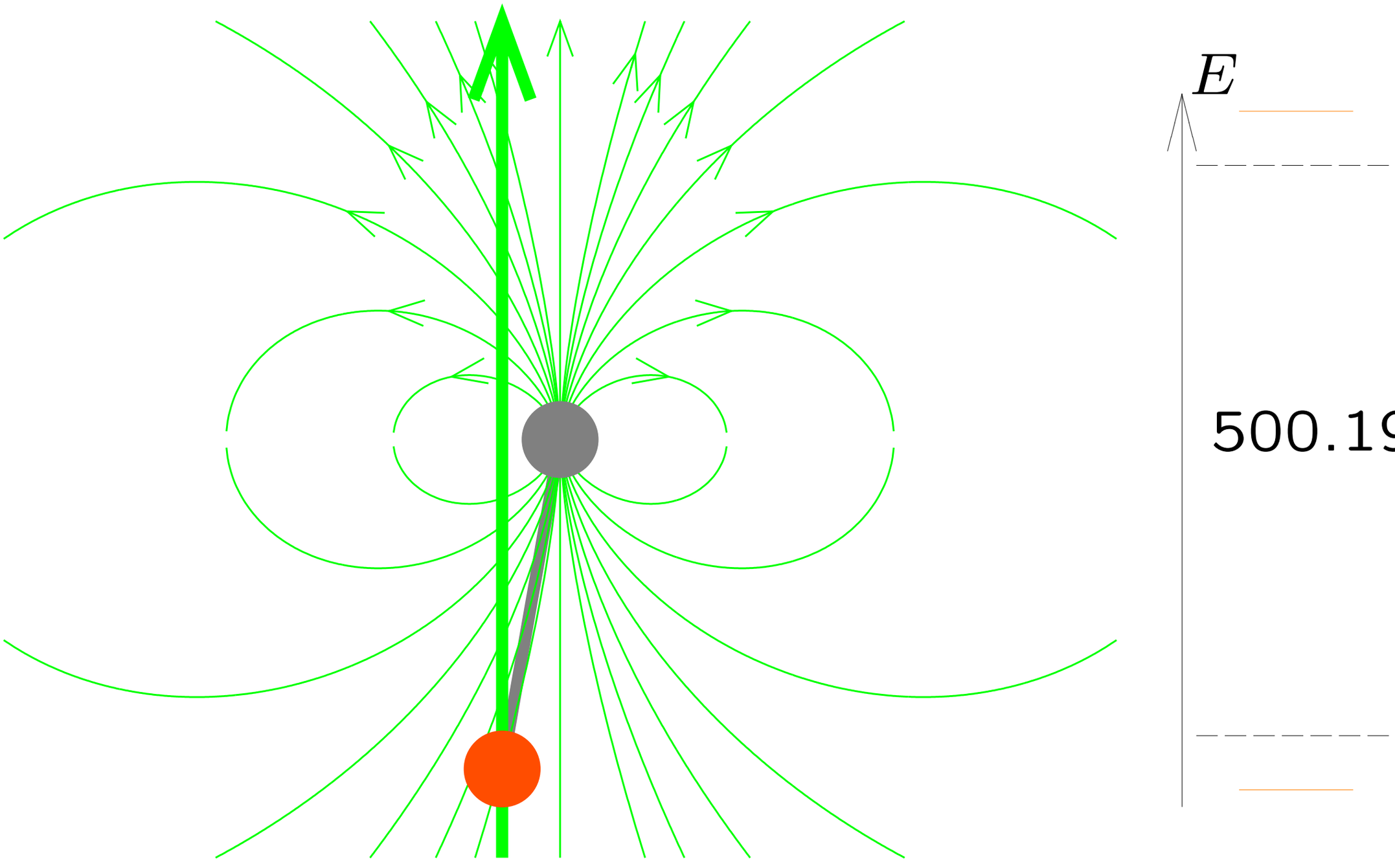
Přímá interakce s jiným jádrem:



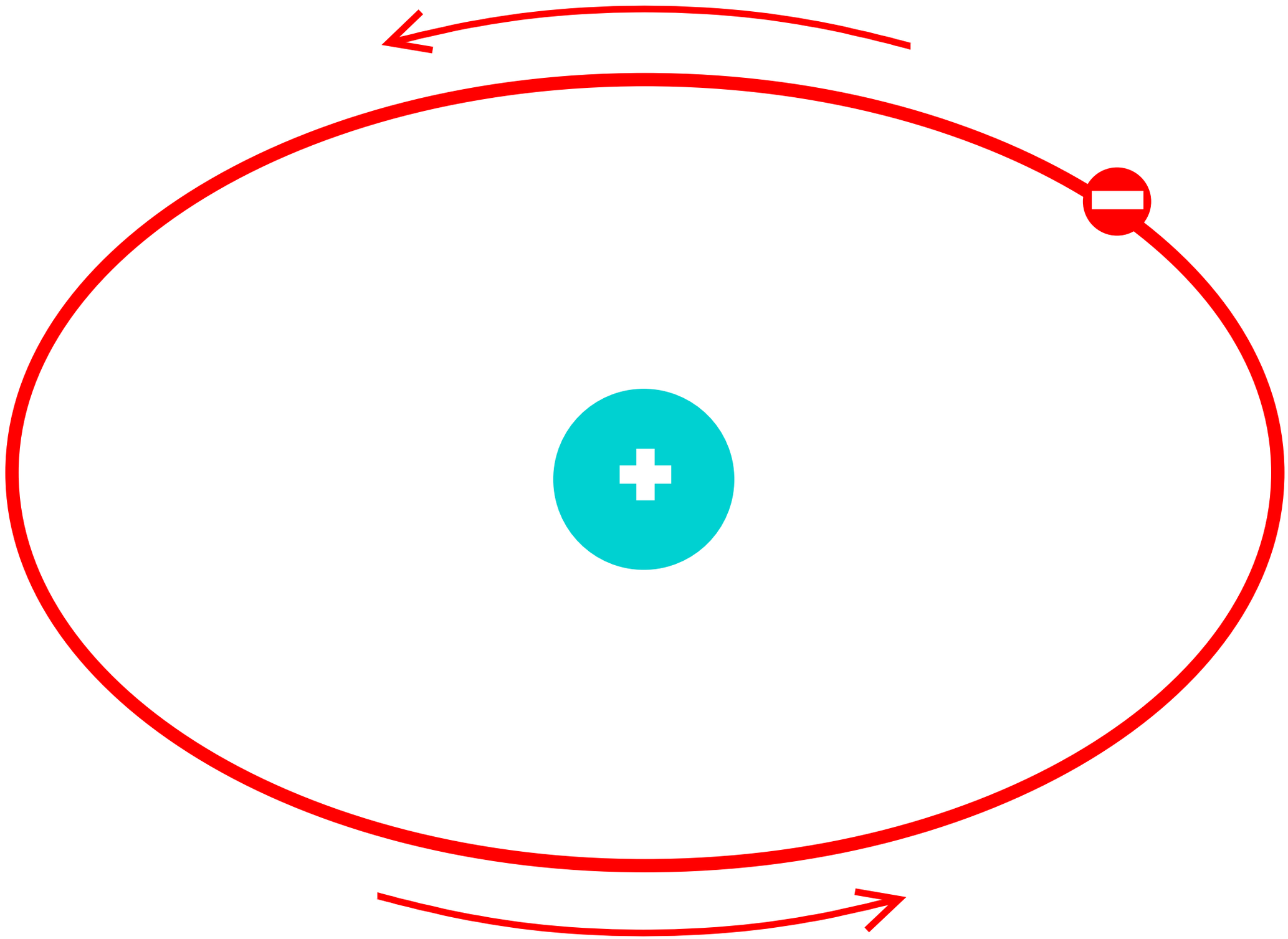
Přímá interakce s jiným jádrem:



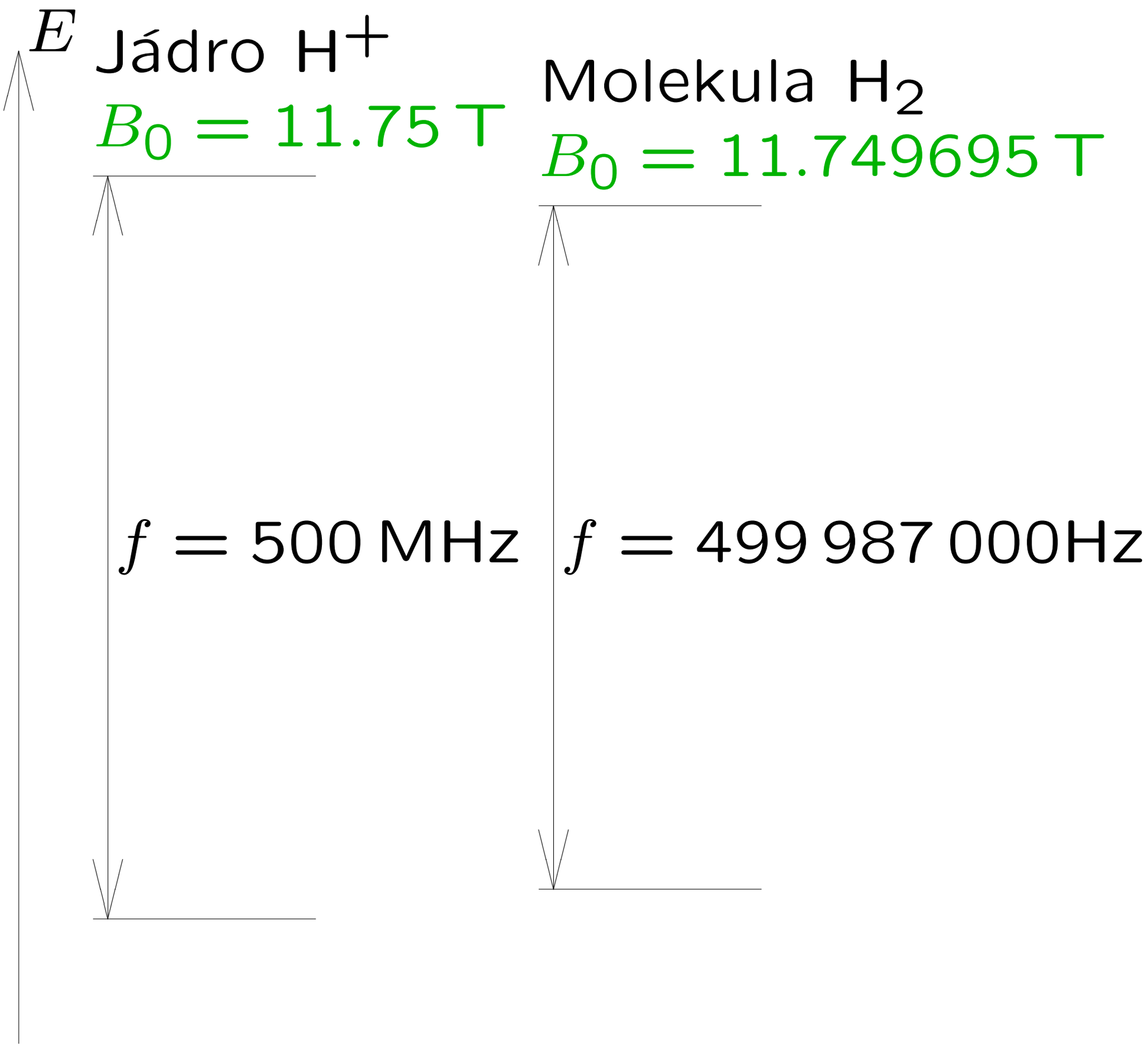
Přímá interakce s jiným jádrem:



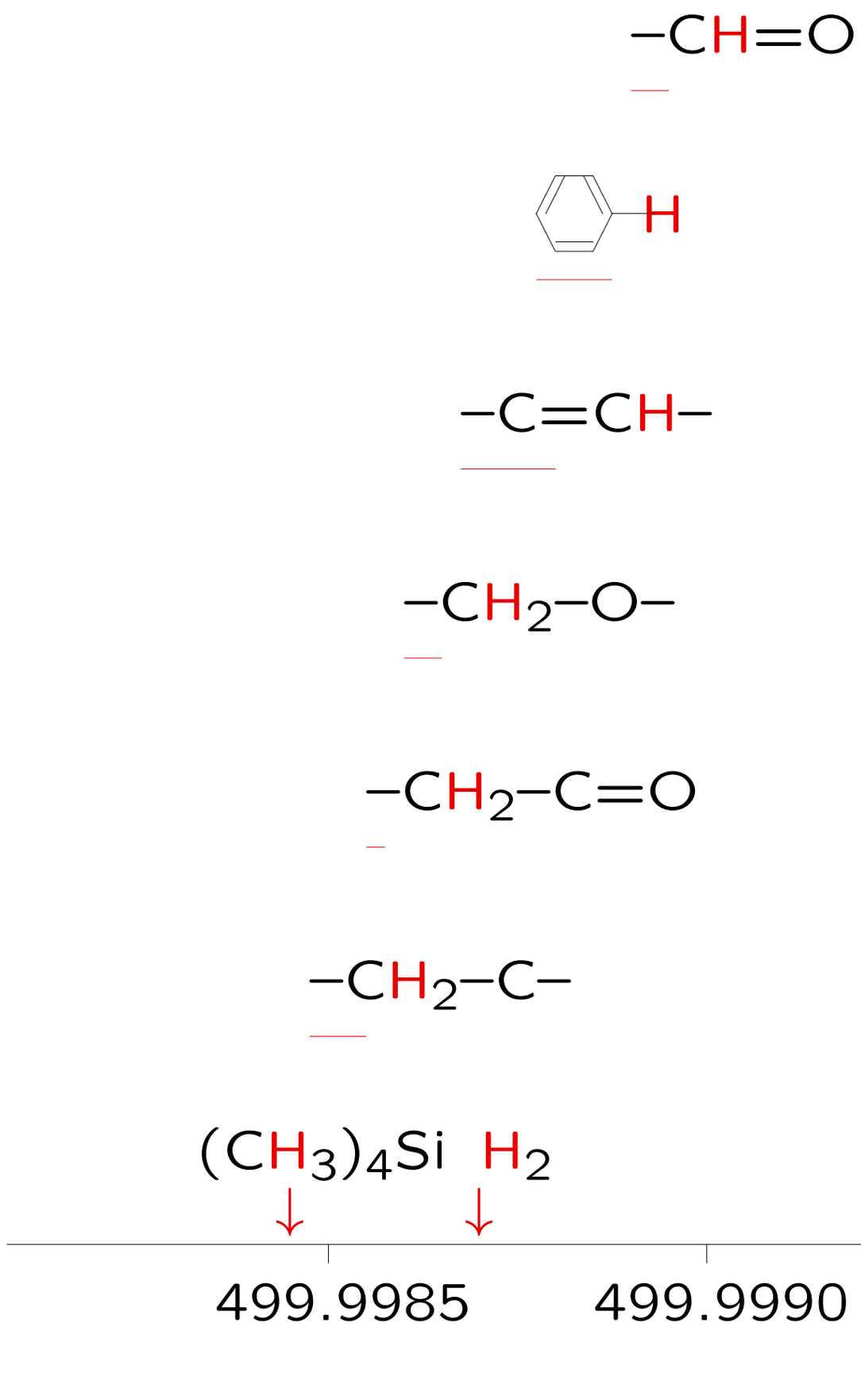
Interakce s elektrony:



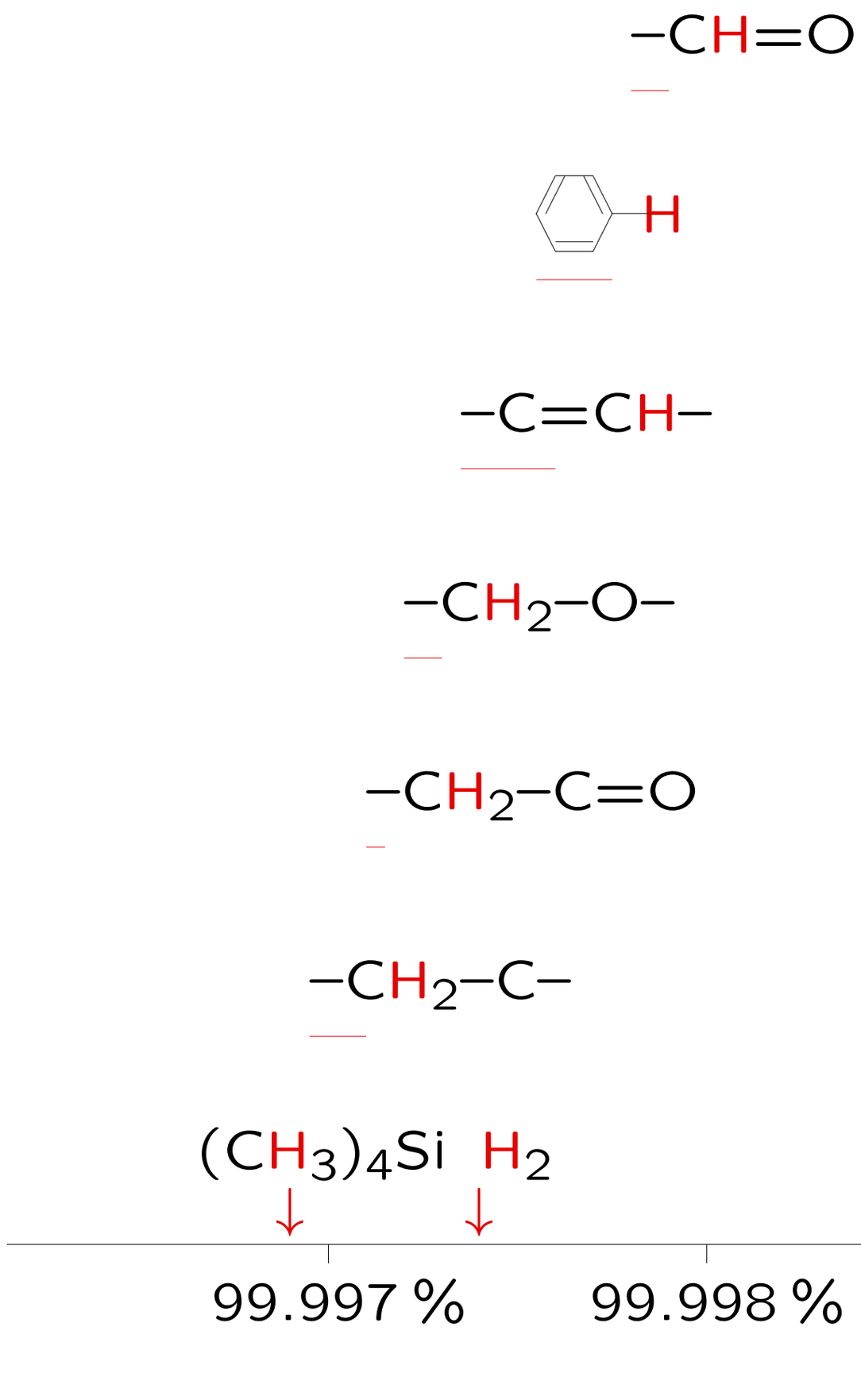
Interakce s elektrony:



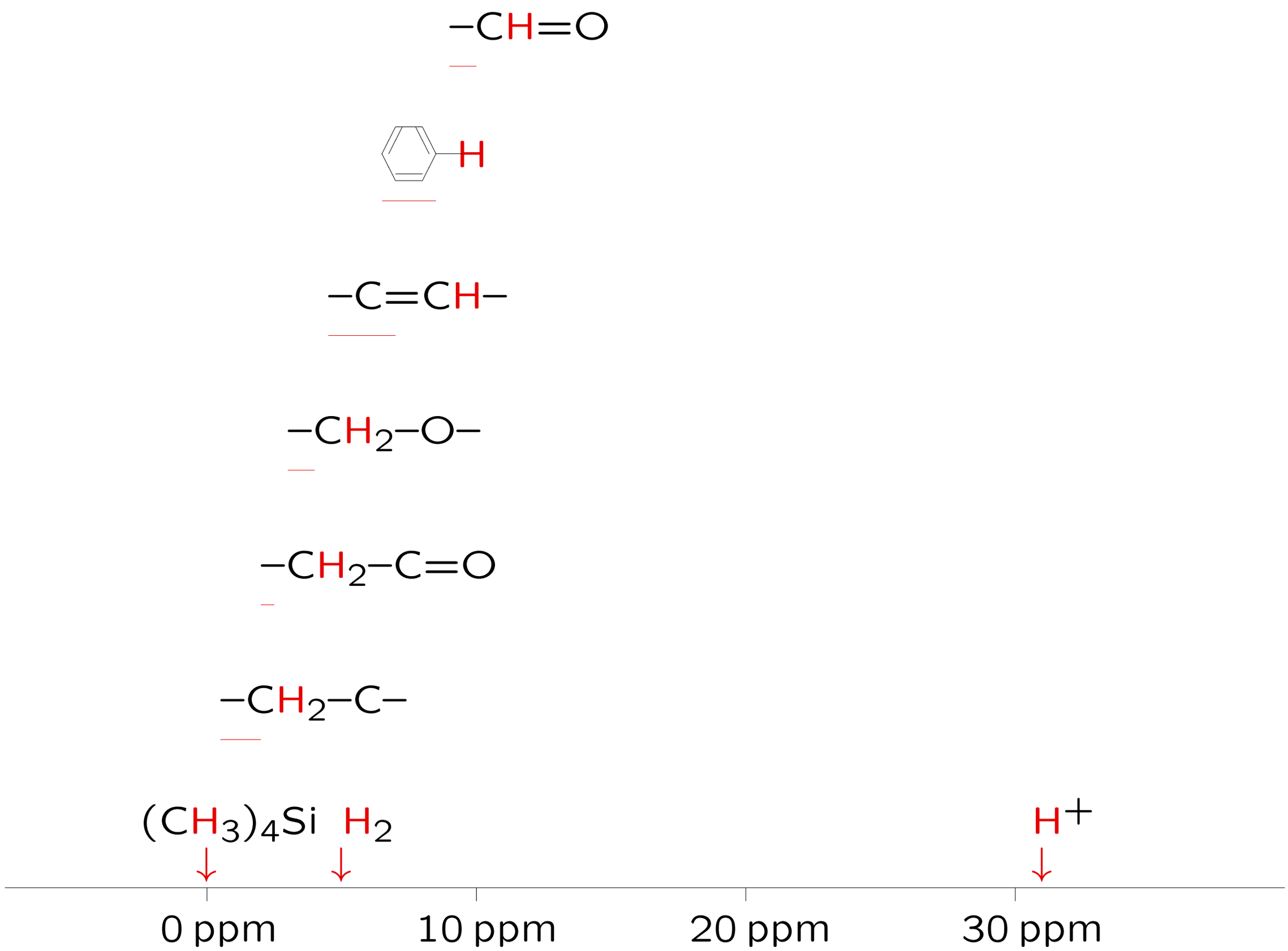
Interakce s elektrony



Interakce s elektrony

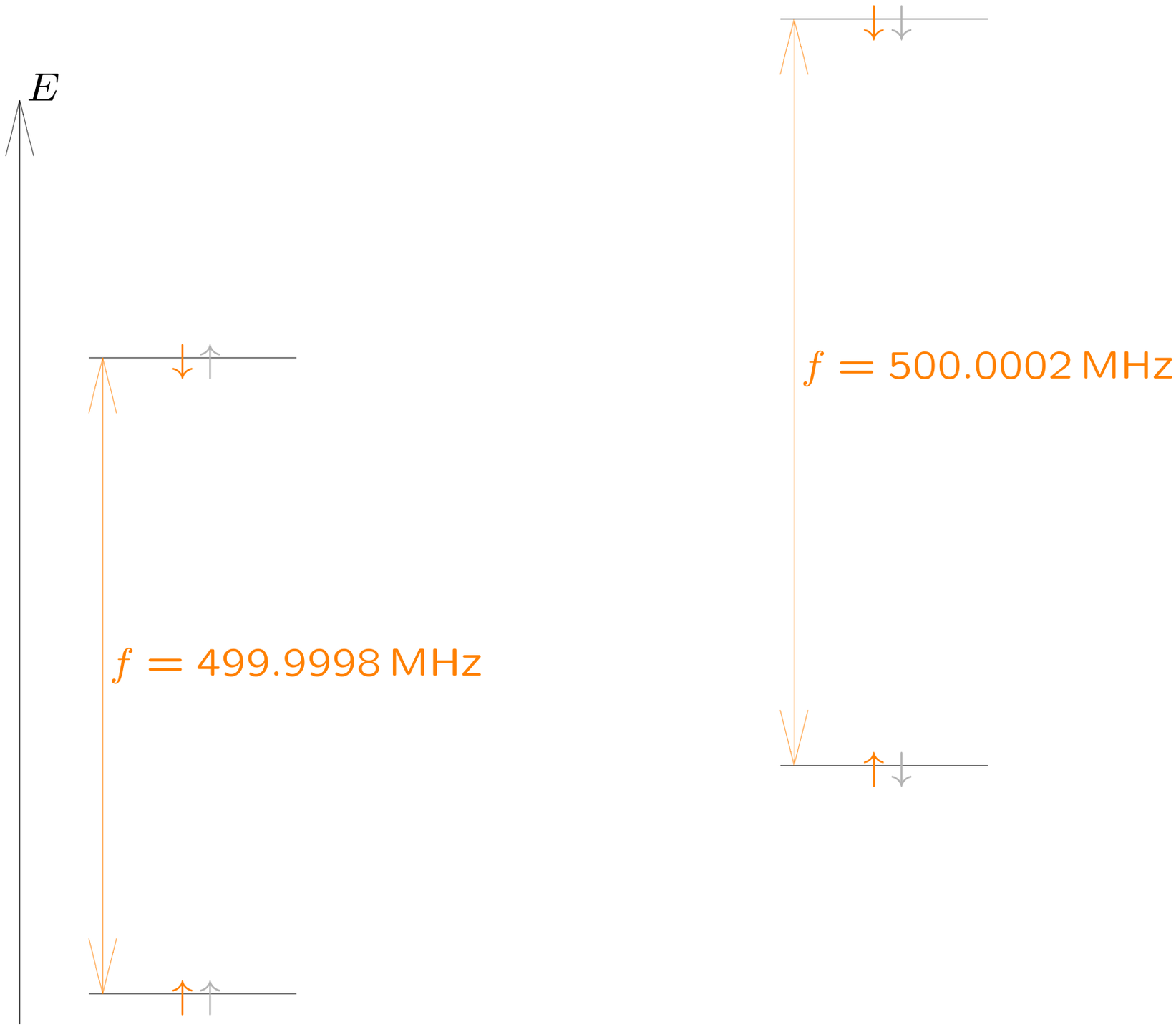


Interakce s elektrony - chemický posun

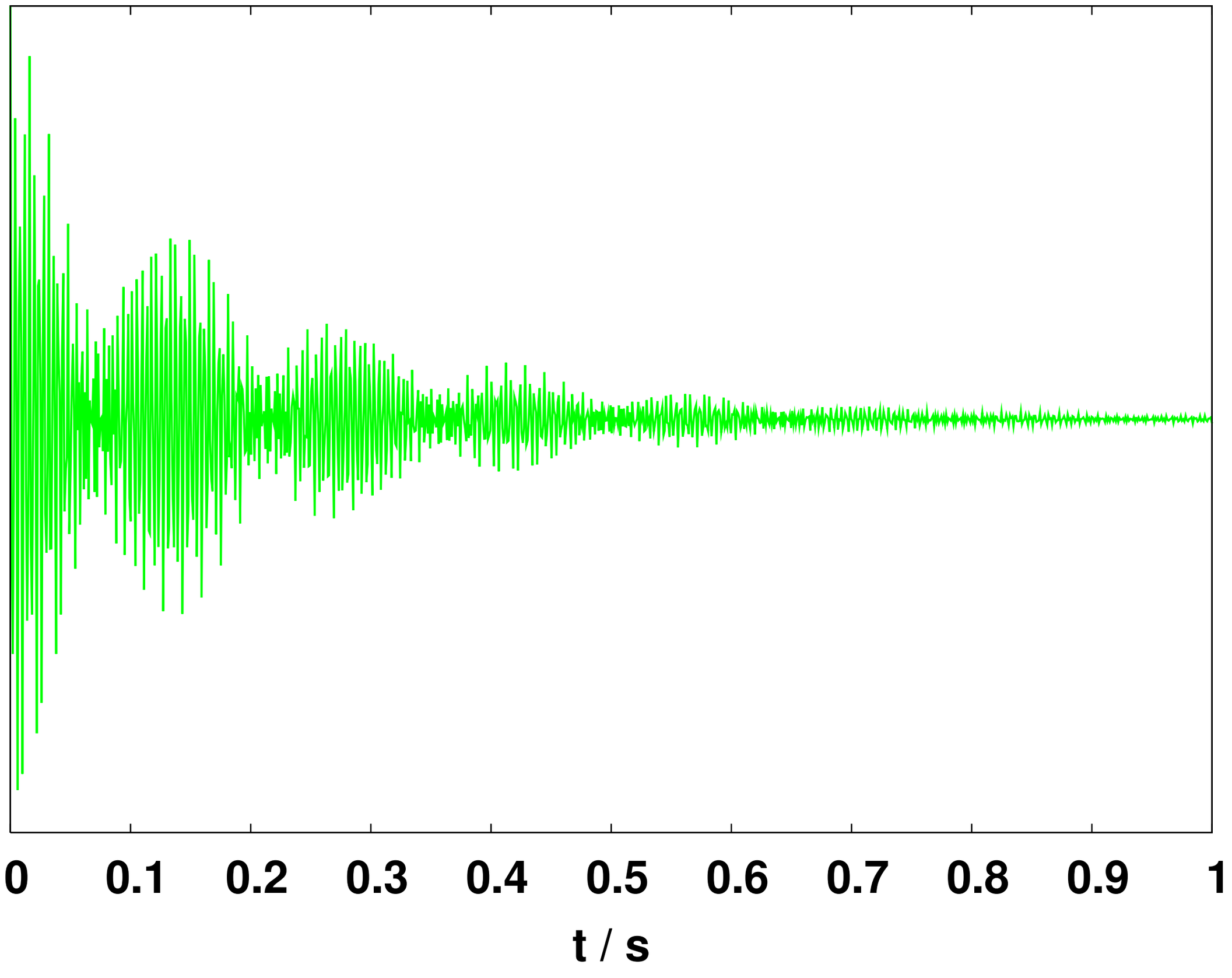


Interakce s jádry zprostředkovaná elektrony

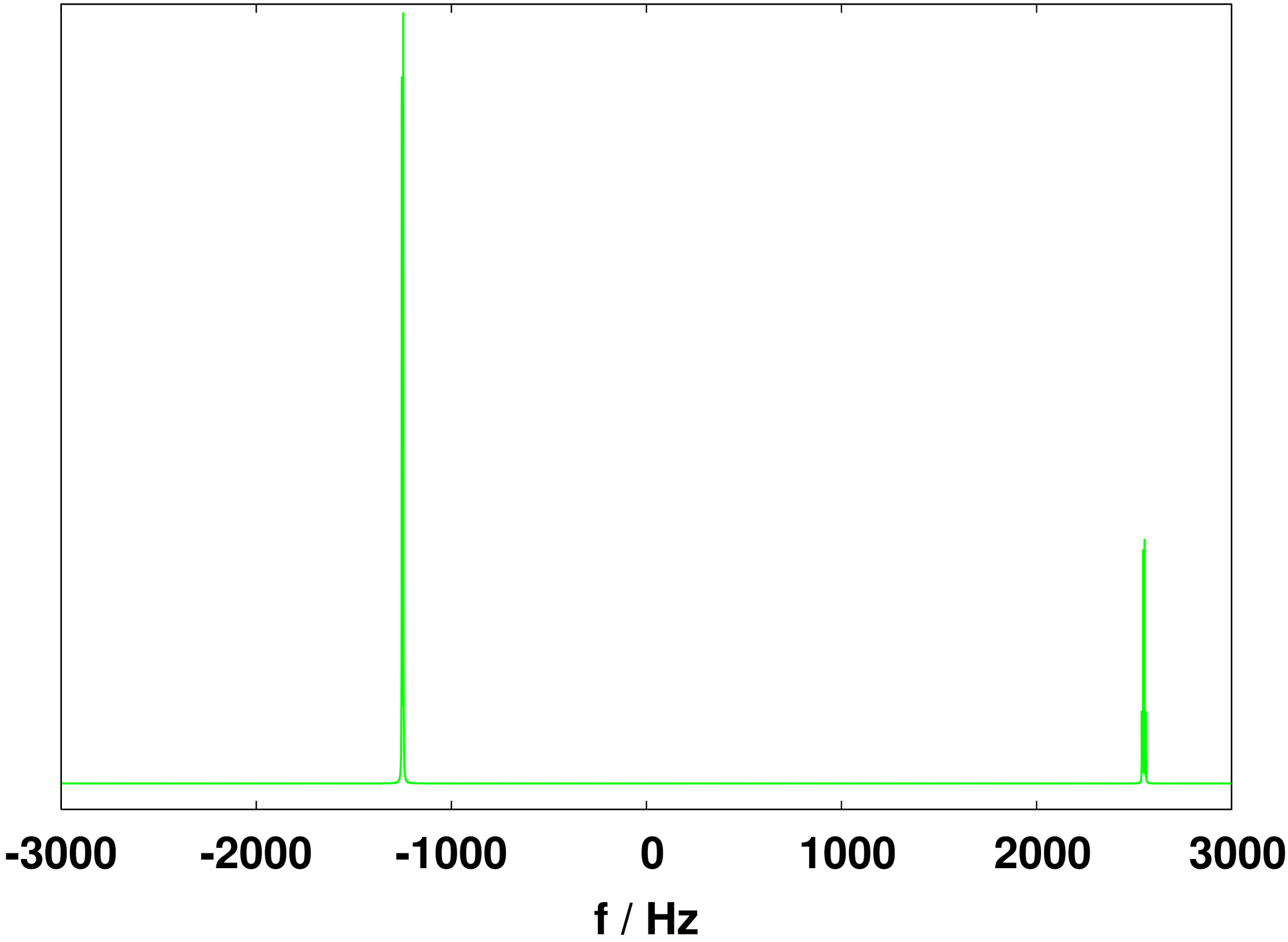
(J-coupling, spin-spin skalární interakce)



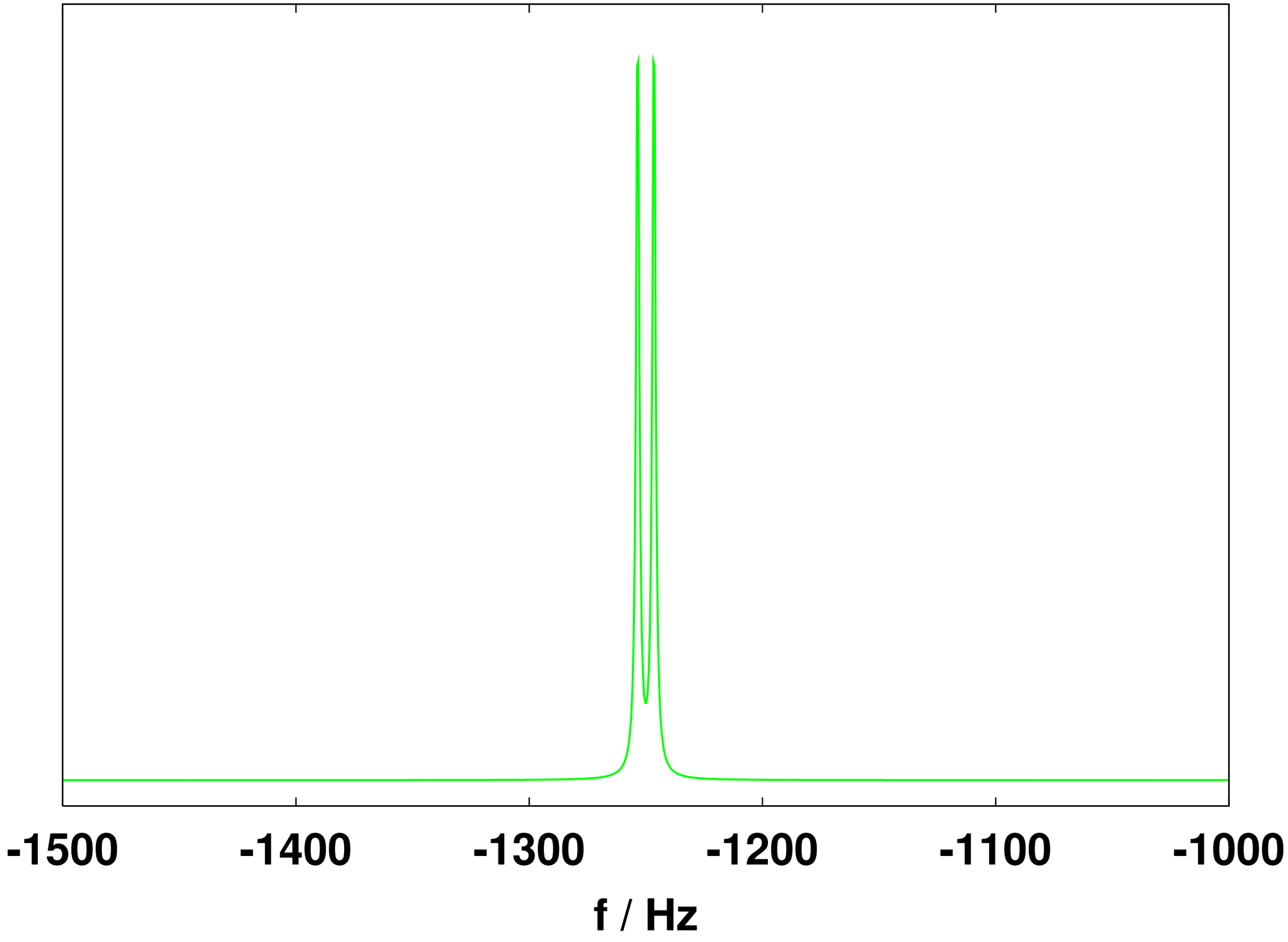
Měřený signál - FID (Free induction decay)



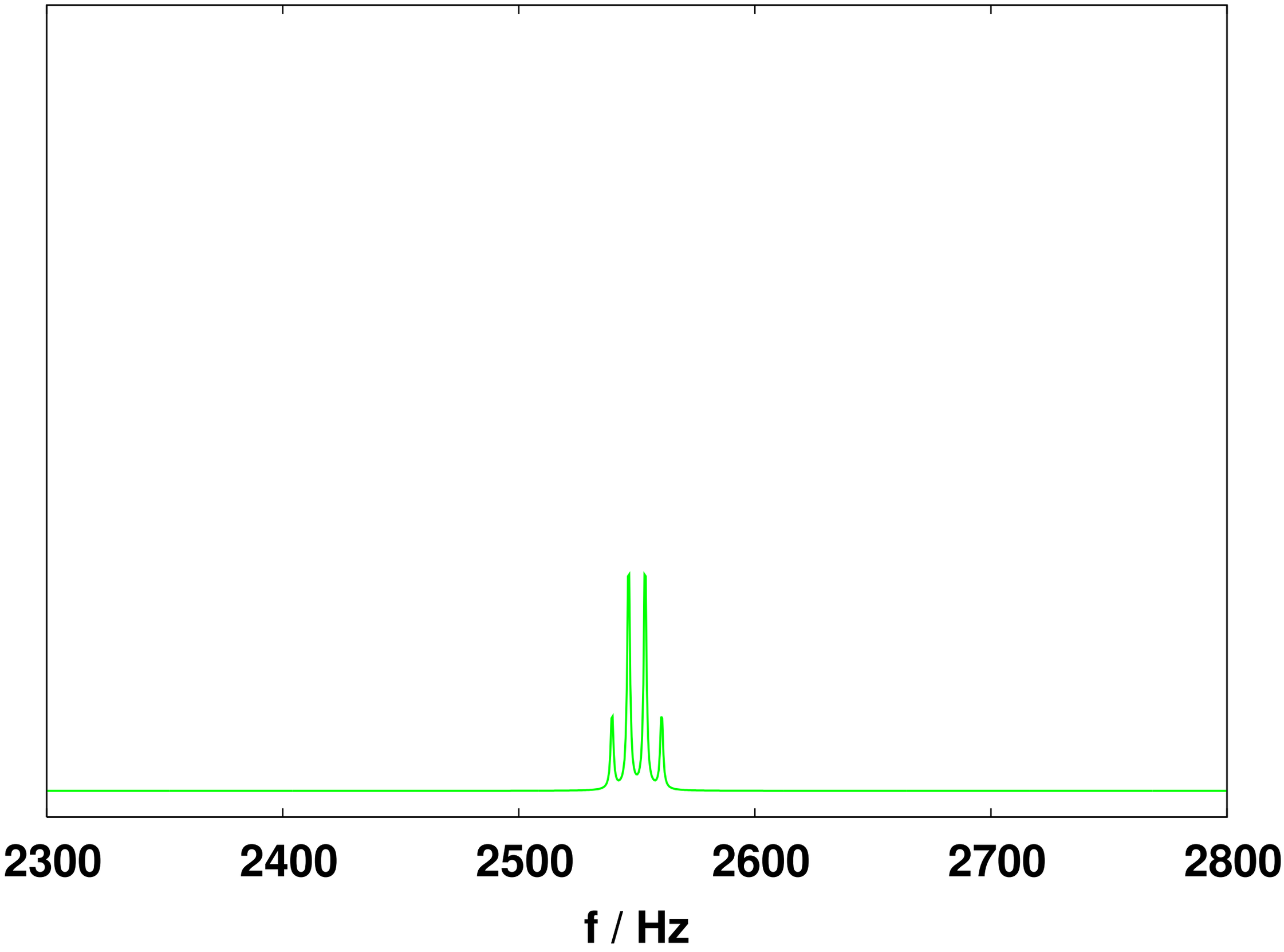
Spektrum (frekvenční závislost)



Spektrum (frekvenční závislost)



Spektrum (frekvenční závislost)

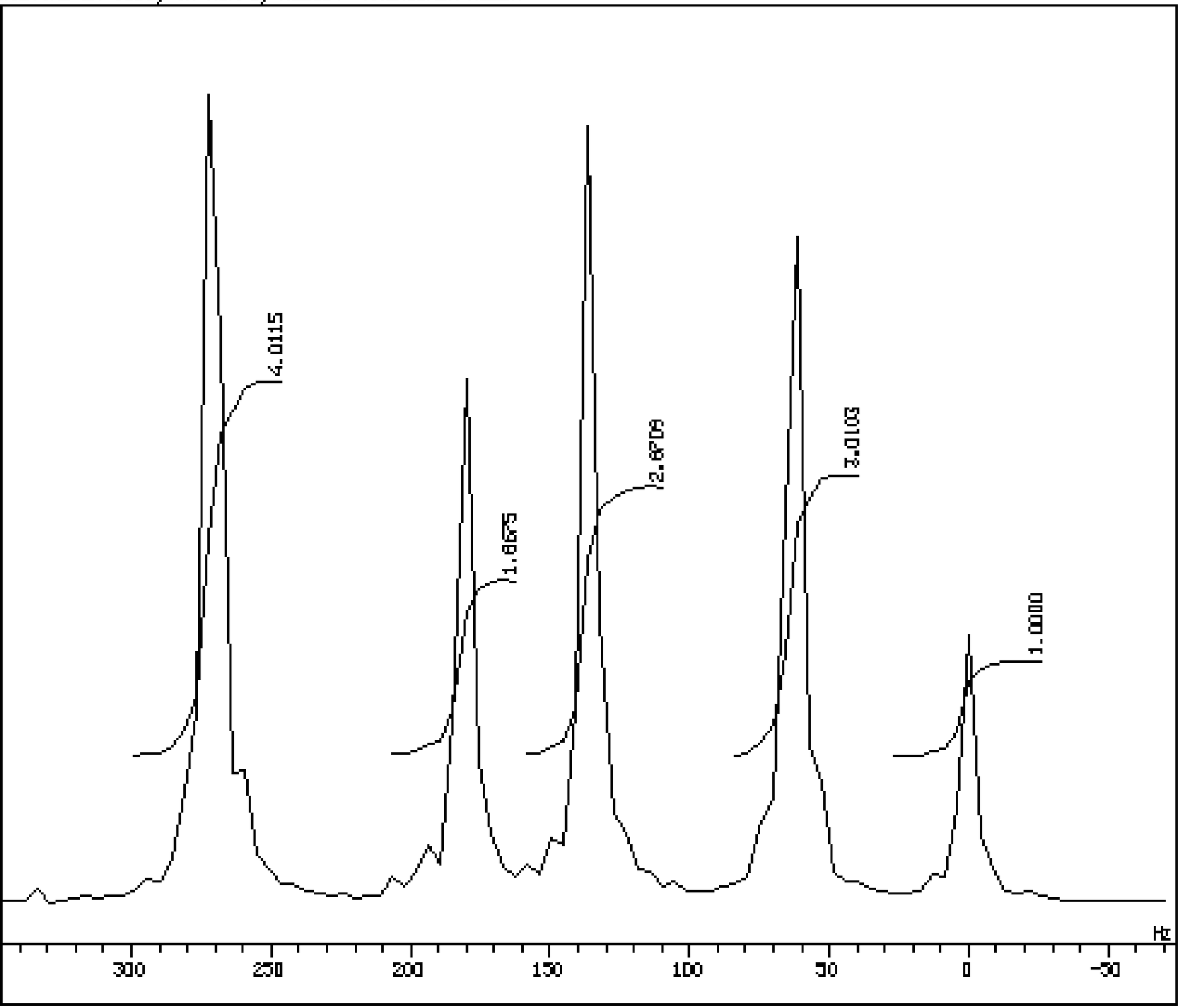


Acetaldehyd

Methyl acetaldehydu

Písnička Hänschen klein

ACETONE IN C6D6, 1H H5XFG, MELODY "HAENSCHEN KLEIN"

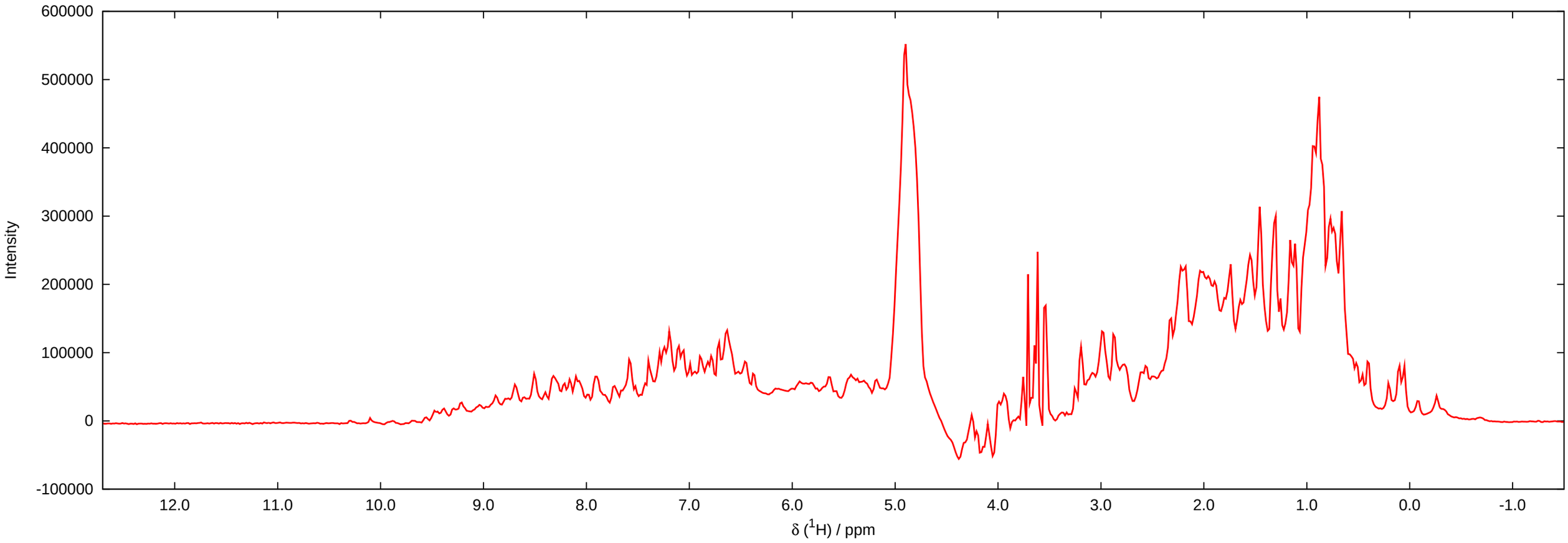


JEOL

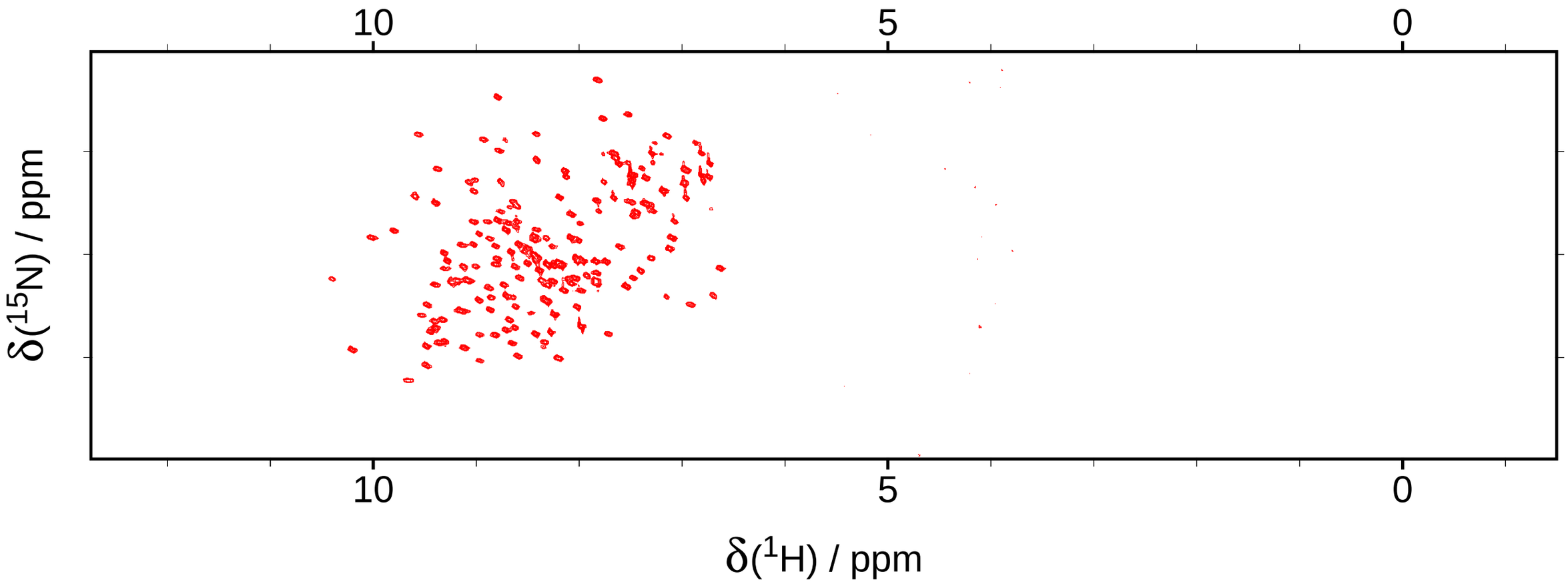
12-AUG-1996 19:16:29.54

SFILE	HANS	
EXMOD	HANS	
IRMOD	NON	
POINT	2048	
SAMPO	2048	
FREQU	9000.90	Hz
FILTR	4500	Hz
SCANS	1	
DUMMY	0	
ACQTM	0.2275	sec
PD	2.7232	sec
RGAIN	10	
PW1	1.00	usec
OBNUC	1H	
OBFRQ	500.00	MHz
OBSET	160200.00	Hz
IRNUC	13C	
IRFRQ	125.65	MHz
IRSET	127958.00	Hz
IRATN	511	
IRPWH	50.0	usec
IRBP1	50	
IRBP2	6	
IRRNS	0	
TRNUC	1H	
TRFRQ	500.00	MHz
TRSET	162410.00	Hz
TRATN	511	
TRPWH	50.0	usec
TRBP1	30	
TRBP2	6	
TRRNS	0	
CTEMP	24.1	c
CSPED	11	Hz
SLVNT	C6D6	
RESOL	4.39	Hz
NMOMD	8	
BF	0.10	Hz
GF	0.00	Hz
PP	840	cp
ABSP0	-92.11	deg
ABSP1	0.00	deg
T1	0.00	x
T2	0.00	x
T3	90.00	x
T4	100.00	x
REFVL	0.00	ppm
THSP	902	
XE	421.92	Hz
XS	-676.83	Hz
YS	0.000	

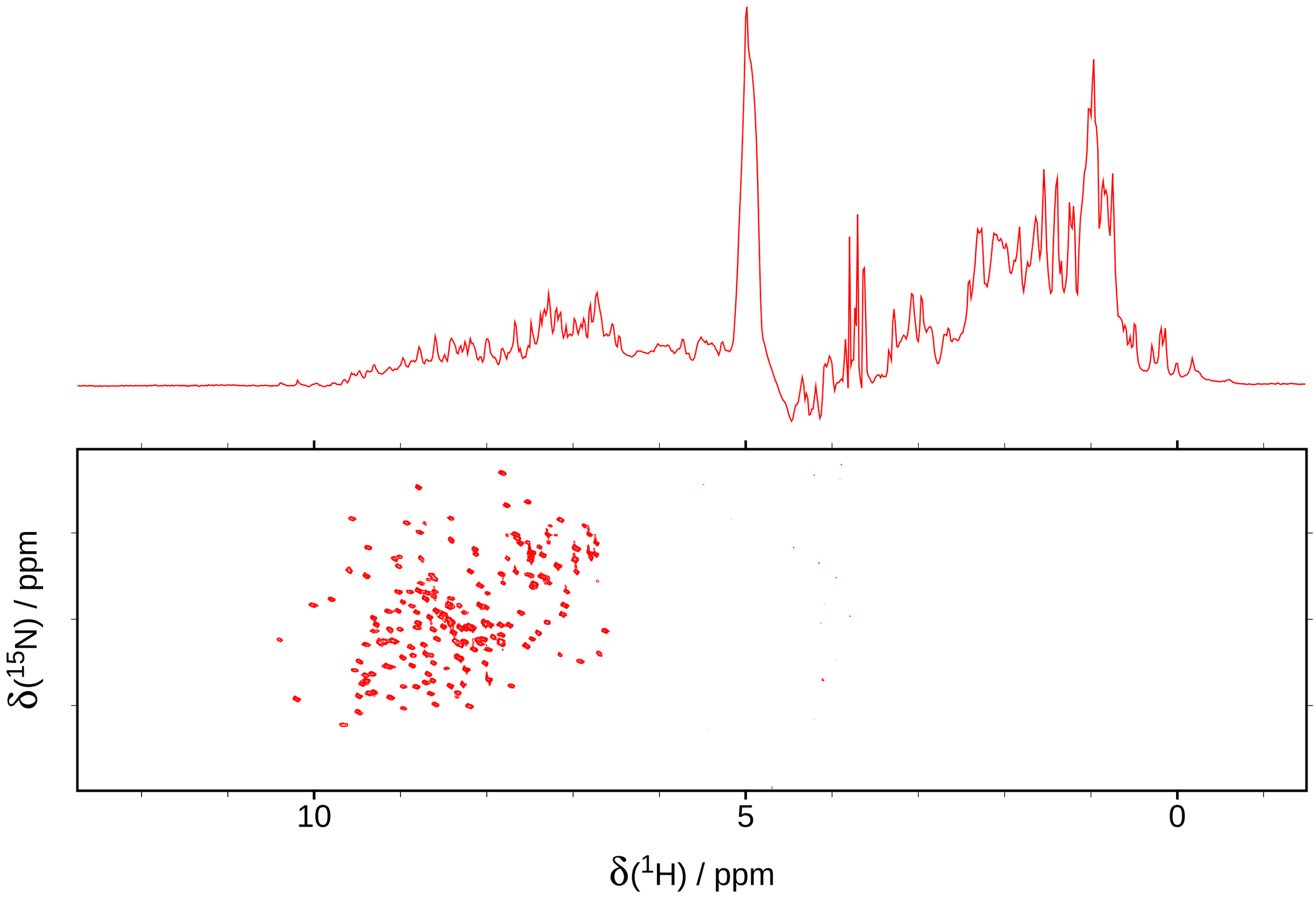
1D ^{1}H spektrum proteinu



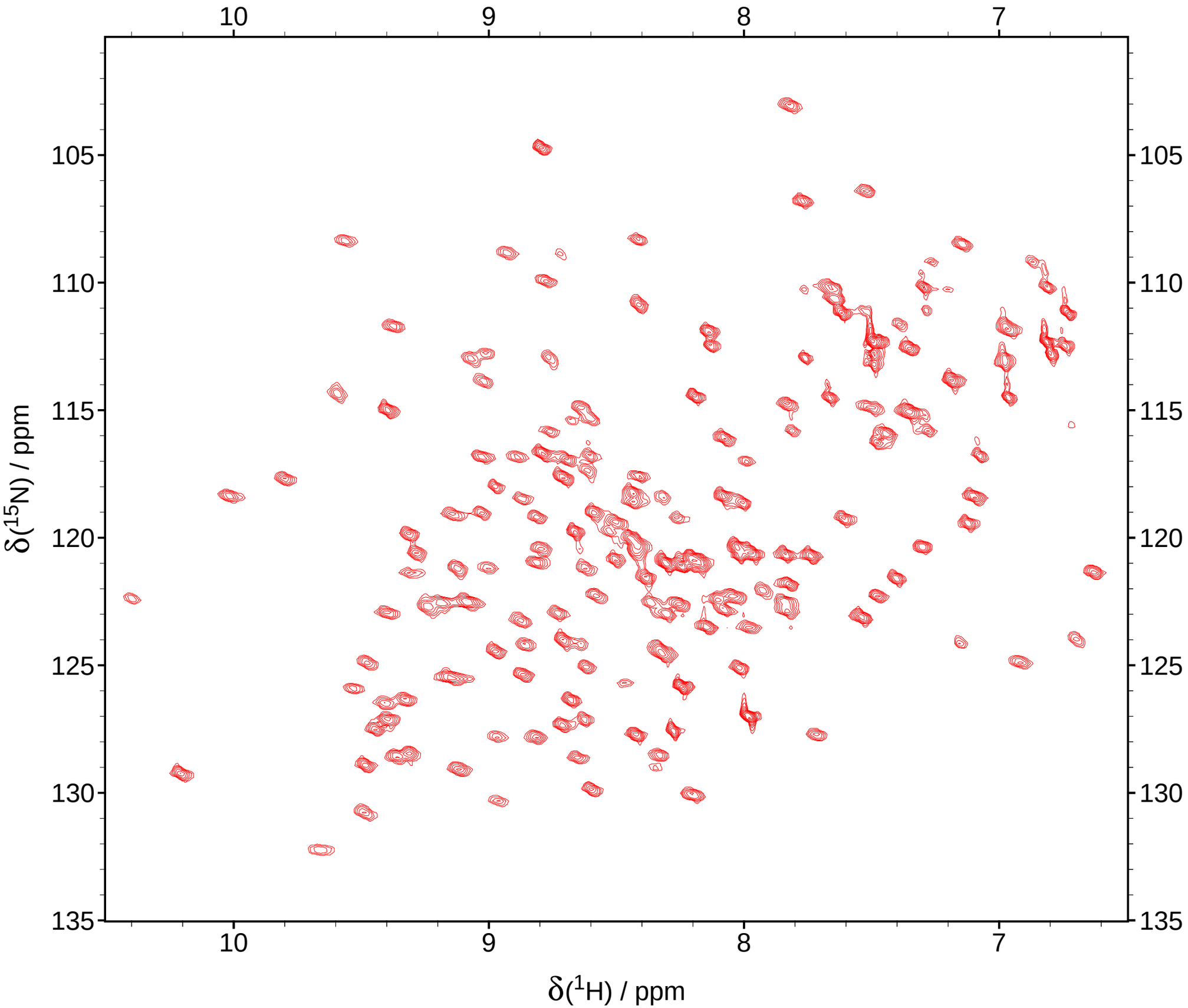
2D ^{1}H-^{15}N korelační spektrum (HSQC) proteinu



srovnání 1D and 2D spekter proteinu

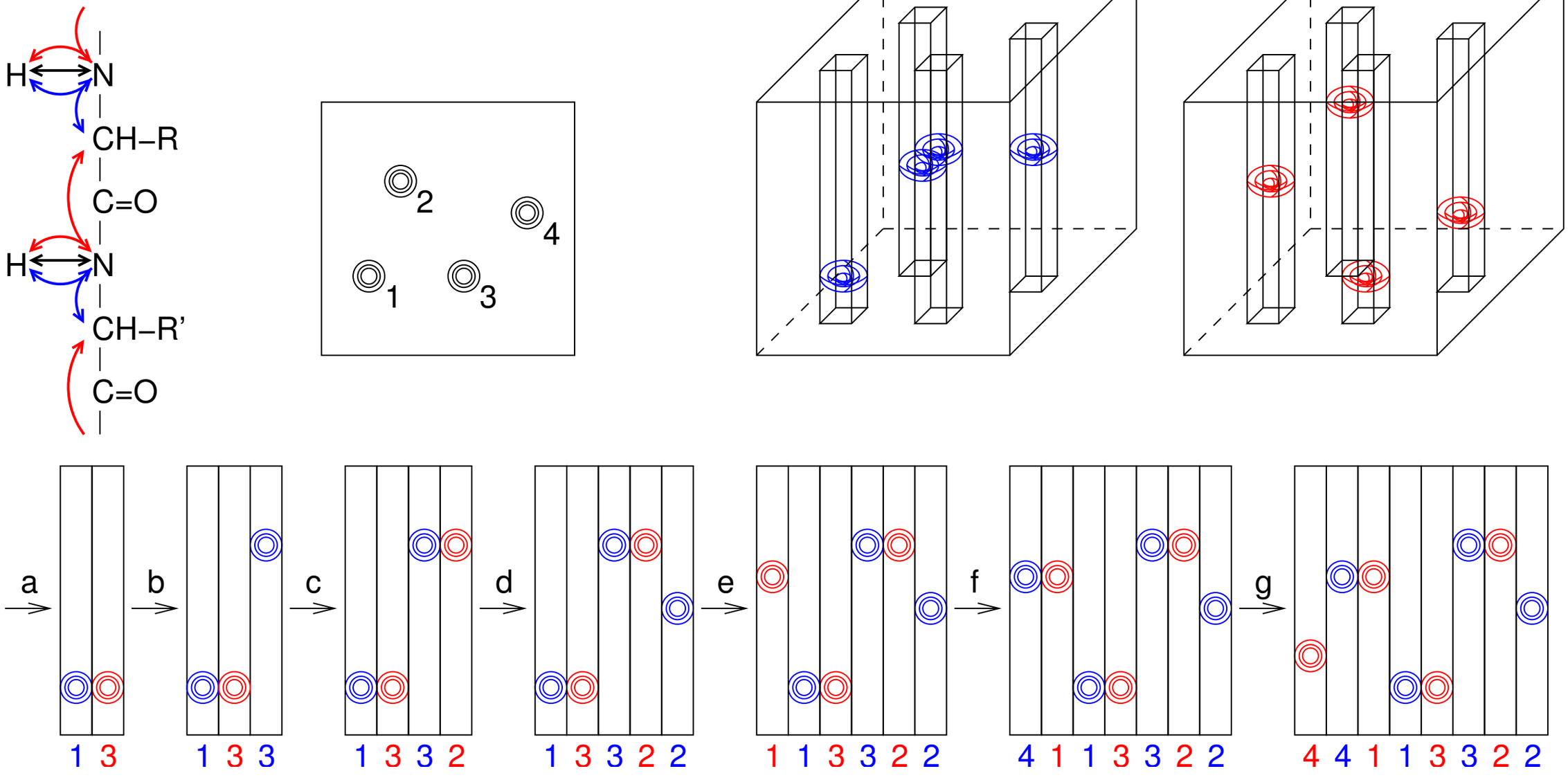


amidická oblast 2D ^{1}H-^{15}N korelačního spektra (HSQC) proteinu



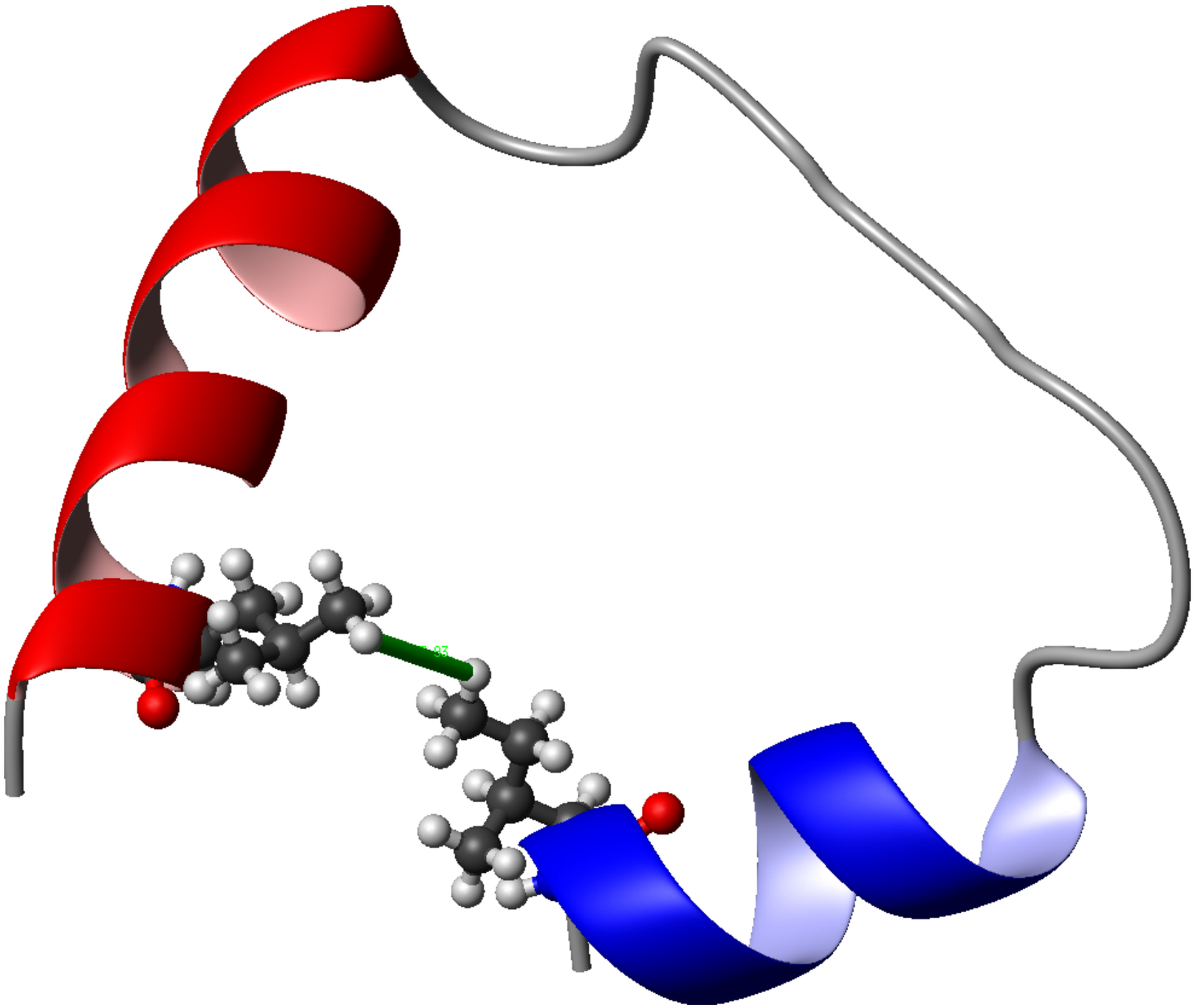
Strategie přiřazení signálů (frekvencí) jader páteře jednotlivých aminokyselin

- experimenty HNCA a HN(CO)CA

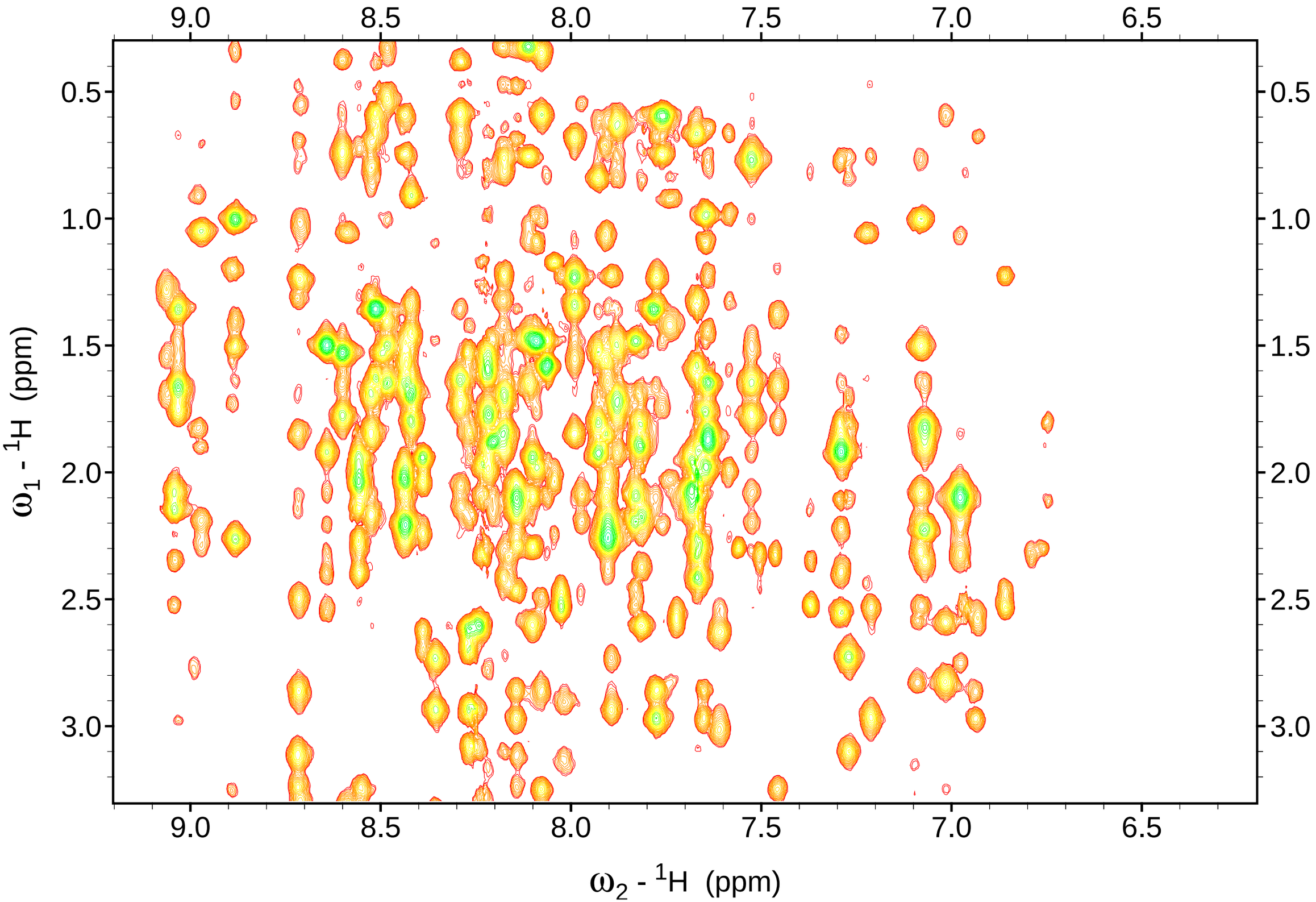


informace o vzdálenosti mezi atomy (NOE)

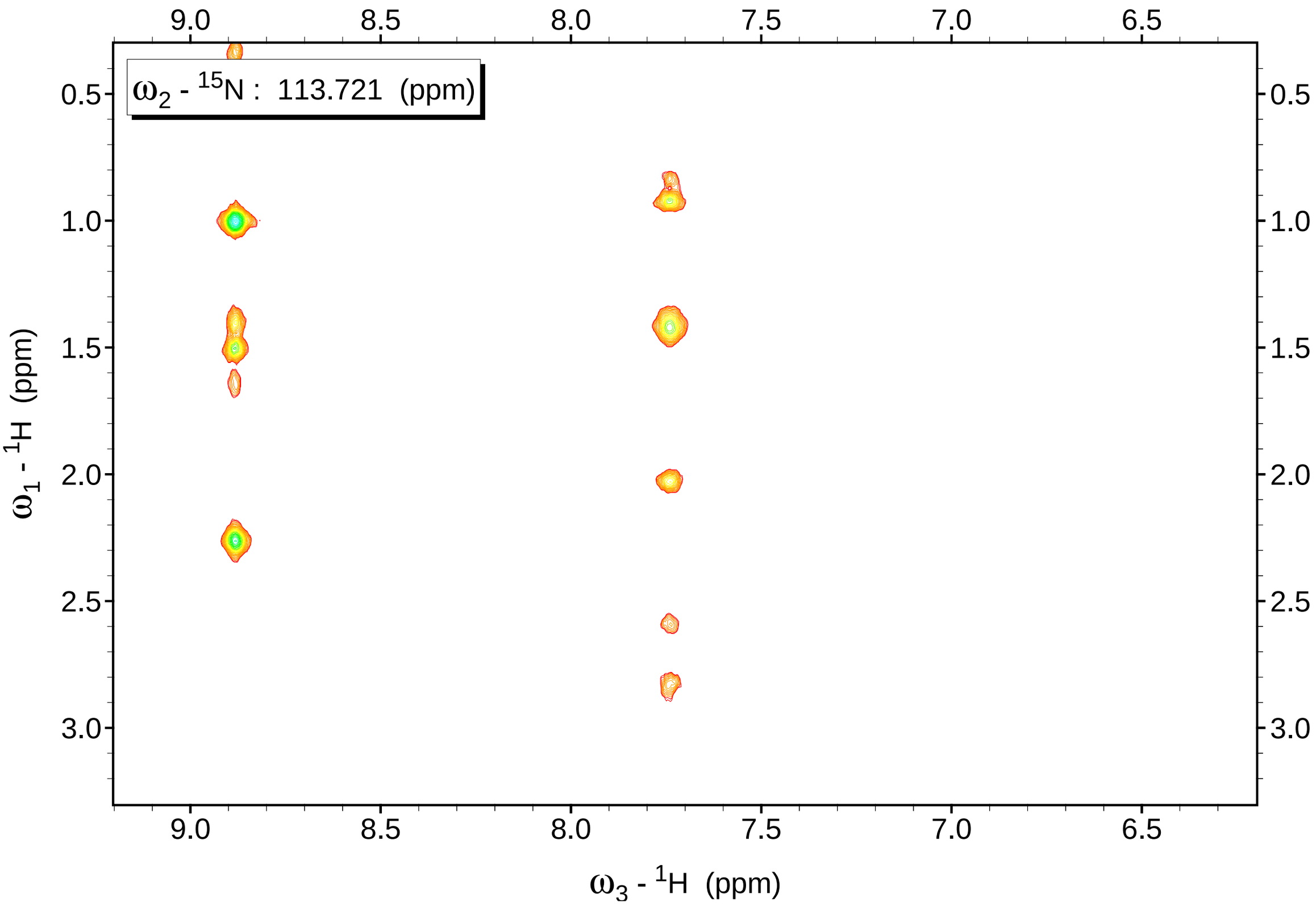
$1/r^6 \rightarrow$ krátké vzdálenosti



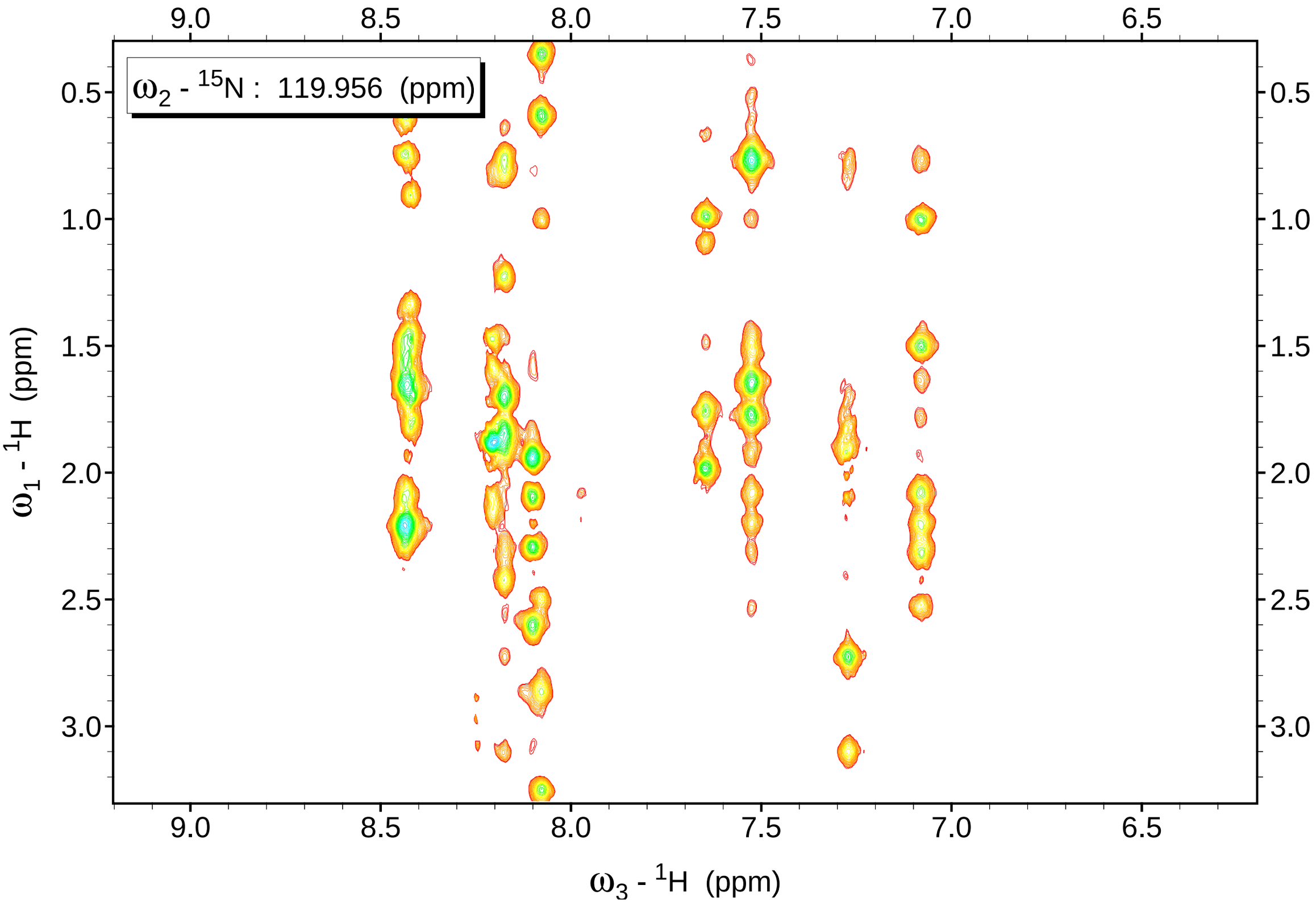
hodně interakcí = hodně signálů



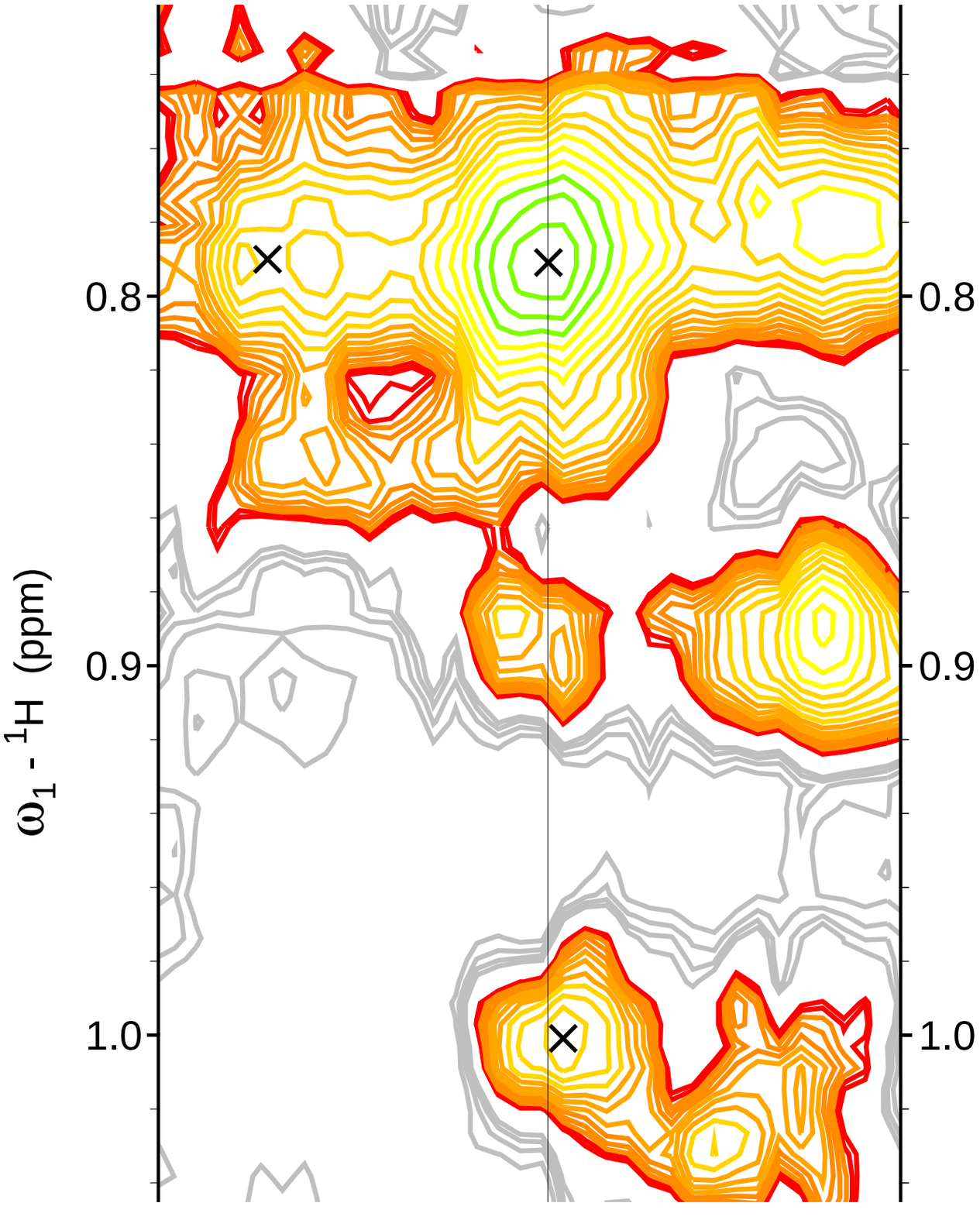
lepší rozlišení - výběr signálů + více dimenzí



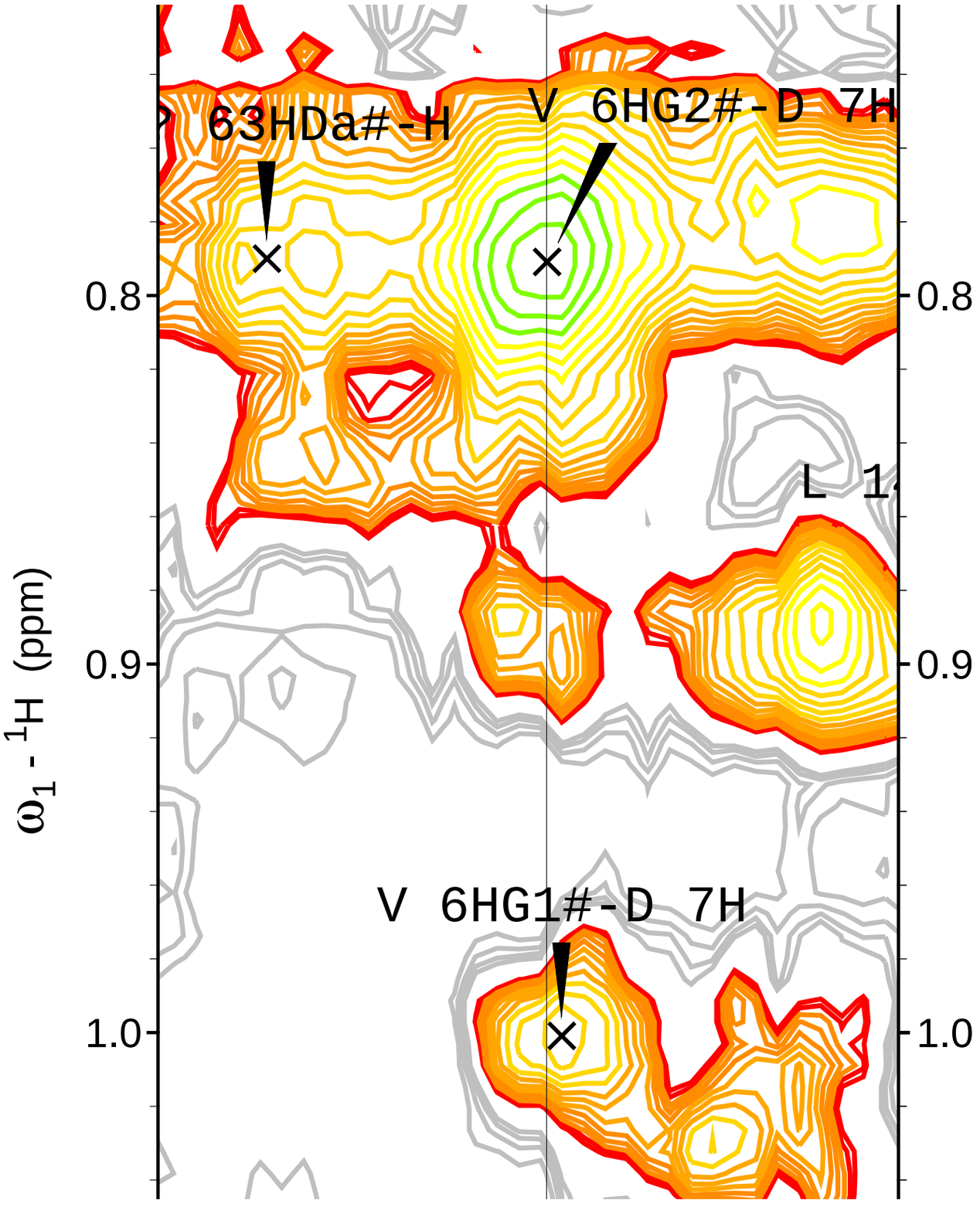
lepší rozlišení - výběr signálů + více dimenzí



Postup práce - označení sigálů



Postup práce - asociace signálu s (určitým) atomem v proteinu



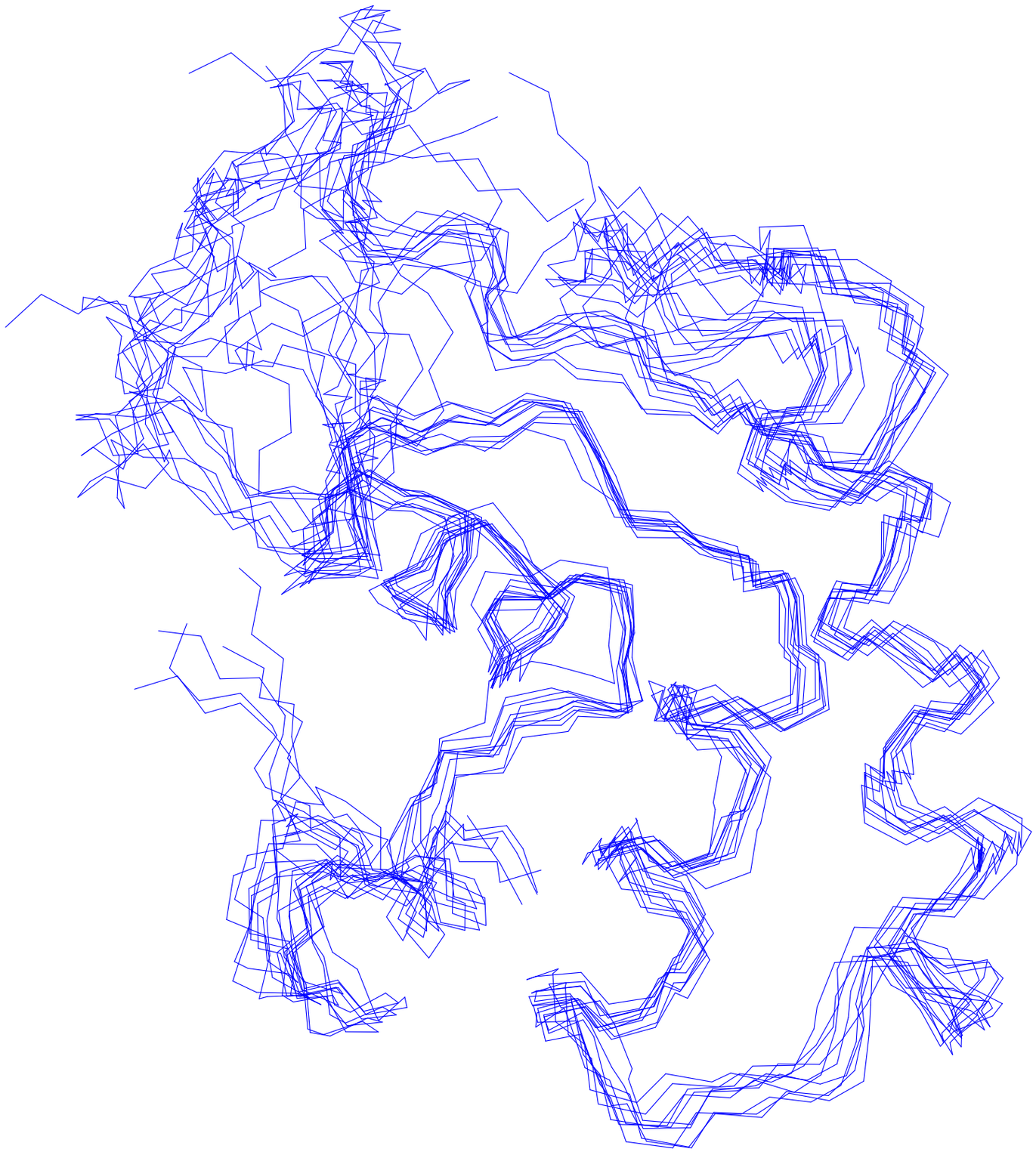
Převod intenzity signálu na informaci o meziatomové vzdálenosti

$$\frac{S}{S_{\mathrm{ref}}} = \left(\frac{r_{\mathrm{ref}}}{r}\right)^6 \tag{1}$$

$$r = r_{\mathrm{ref}} \sqrt[6]{\frac{S_{\mathrm{ref}}}{S}} \tag{2}$$

Známé vzdálenosti protonů		
geminální v CH_2 skupině	H–C–H	0.17 nm
ortho v aromatickém kruhu	H–C=C–H	0.25 nm
meta v aromatickém kruhu	H–C=CH–C–H	0.42 nm

Výsledek výpočtu - modely struktur



Výsledek výpočtu - modely struktur