

Fyzikálně-chemické základy NMR

Středa, 13.00 - 14.40, posluchárna CH-1, 21.9. - 16.12.2005

Vladimír Sklenář (podzimní semestr 2005/2006, 2 hod./týden)

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

Kampus Bohunice, pavilon A4, místnost 1.22, 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.
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. **Součinný operátorový formalismus:** základní principy, názvosloví, vývoj součinných operátorů, Hamiltonián v součinné 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

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. Basic 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>
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

Navazující kurzy na PřF MU:

- ▶ PřF: **C6770 NMR Spectroscopy of Biomolecules** (jaro 2006)
[RNDr. Radovan Fiala, CSc.](#), [Mgr. Jaromír Toušek, Dr.](#), [Mgr. Lukáš Židek, Ph.D.](#)
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C6800 Multinukleární NMR spektroskopie** (jaro 2006)
[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 2005)
[RNDr. Radovan Fiala, CSc.](#), [Mgr. Lukáš Židek, Ph.D.](#)
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C7999 Advanced Methods of NMR Spectroscopy** (podzim 2005)
[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 2006)
[doc. RNDr. Radek Marek, Ph.D.](#)
2 kr. Doporučované ukončení: zkouška. Jiná možná ukončení: kolokvium. [Chemická sekce PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C8951 NMR spektroskopie pevného stavu - základní principy a aplikace v chemii.** (podzim 2005)
Ing. Jiří Brus, PhD.
1 kr. Ukončení: zkouška. [Laboratoř NMR spektroskopie PřF MU](#)
- ▶ PřF: **C9904 Dynamic NMR spectroscopy of organometallic compounds** (podzim 2004)
Prof. Alojz Demšar, [doc. RNDr. Jiří Pinkas, Ph.D.](#)
1 kr. Doporučované ukončení: kolokvium. Jiná možná ukončení: zkouška. [Chemická sekce PřF MU](#)