

Popis předmětu

Zkratka předmětu:	AFC/PGSNR	Strana:	1 / 2
Název předmětu:	NMR spektroskopie		
Akademický rok:	2019/2020	Tisknuto:	15.11.2019 02:09

Pracoviště / Zkratka	AFC / PGSNR	Akademický rok	2019/2020
Název	NMR spektroskopie	Způsob zakončení	Zkouška
Akreditováno/Kredity	Ano, 20 Kred.	Forma zakončení	
Rozsah hodin	Konzultace 20 [HOD/SEM]	Zápočet před zkouškou	NE
Obs/max	Statut A Statut B Statut C	Počítán do průměru	NE
Letní semestr	0 / - 0 / - 0 / -	Min. (B+C) studentů	nestanoveno
Zimní semestr	0 / - 0 / - 0 / -	Opakovaný zápis	NE
Rozvrh	Ano	Vyučovaný semestr	Zimní, Letní
Vyučovací jazyk	Čeština, Angličtina	Počet dnů praxe	0
Volně zapisovatelný předmět	Ano		
Hodnotící stupnice	S\N		
Hod. v komb. formě studia			
Automat. uzn. záp. před zk.	Ne		
Periodicita			
Nahrazovaný předmět	Žádný		
Vyloučené předměty	Nejsou definovány		
Podmiňující předměty	Nejsou definovány		
Předměty informativně doporučené	Nejsou definovány		
Předměty, které předmět podmiňuje	Nejsou definovány		

Cíle předmětu (anotace):

Přednáška " NMR spektroskopie" je určena studentům doktorského studia oborů anorganická chemie. Navazuje na magisterské studium anorganické chemie s cílem pokročilého seznámení a pochopení principu jaderné magnetické rezonance na základě klasických a kvantových fyzikálních zákonů. S cílem použití moderních technik měření NMR spekter jedno- i vícedimenzionálních za účelem získání informací o struktuře organických a komplexních sloučenin, způsobu koordinací ligandu a dynamice.

Požadavky na studenta

Obsah

Klasická a kvantová fyzika NMR experimentu, experimentální uspořádání - metoda kontinuální vlny a FT-NMR, kapalné vzorky. Chemický posun, stanovení (vnitřní a vnější standard), ovlivnění, korelace se strukturou. Spin-spinová interakce, hetero- a homonukleární, souvislosti se strukturou, spin-spinová interakční konstanta a její vztah k chemickému posunu a struktuře molekul. Intenzita NMR spektrálních linií, využití v kvantitativní a strukturní analýze. Relaxační časy, souvislost se strukturou, dynamikou intramolekulárních pohybů a intenzitou spektrálních linií. Dvourozměrová NMR spektrometrie, techniky COSY, HETCOR, HMQC, HMBC, TOCSY a INADEQUATE. NMR vysokého rozlišení tuhých vzorků. NMR jako metoda studia velmi rychlých procesů v roztoku (rotace kolem vazeb, inverze cyklů, záměnné reakce ligandů, elektronů a protonů). NMR jako metoda stanovení obsahu izomerů v jejich směsích.

Předpoklady - další informace k podmíněnosti studia předmětu

Získané způsobilosti

Analyzovat 1D a 2D spektra roztokové NMR spektroskopie za účelem získání informací

o struktuře sloučenin a dynamice.

Porovnání NMR spekter komplexu a ligandu pro získání informací o typu a způsobu koordinace.

" Výpočet hodnot chemických posunů, interakčních konstant, integrálních intenzit, relaxačních dob a dalších hodnot.

Studijní opory

Garanti a vyučující

- **Garanti:** RNDr. Bohuslav Drahoš, Ph.D.
- **Přednášející:** RNDr. Bohuslav Drahoš, Ph.D., prof. RNDr. Zdeněk Trávníček, Ph.D.

Literatura

- **Doporučená:** Sanders, J. K. M., Hunter, B. K. *Modern NMR Spectroscopy*. Wiley, Oxford, 1993.
- **Doporučená:** Derome, E. *Modern NMR techniques for chemistry research*. Pergamon Press, Oxford, 1997.
- **Doporučená:** Akitt, J. W. *NMR and Chemistry: An Introduction to Modern NMR Spectroscopy*. 3. vydání, Chapman and Hall, Londýn, 1992.
- **Doporučená:** Gunther, H. *NMR Spectroscopy*. Wiley, New York, 1995.
- **Doporučená:** Martin, G. E., Zektzer, A. S. *Two-Dimensional NMR Methods for Establishing Molecular Connectivity*. VCH, New York, 1998.

Vyučovací metody

Přednášení

Hodnotící metody

Ústní zkouška

Předmět je zařazen do studijních programů:

Studijní program	Typ stud.	Forma	Obor	Etapa	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Chemie	Doktorský	Prezenční	Anorganická chemie	1	2014	2019	Povinně volitelné předměty 1 - oborové	B		
Chemie	Doktorský	Kombinovaná	Anorganická chemie	1	2014	2019	Povinně volitelné předměty 1 - oborové	B		
Chemistry	Doktorský	Kombinovaná	Inorganic Chemistry	1	2014	2019	Povinně volitelné předměty 1 - oborové	B		
Chemistry	Doktorský	Prezenční	Inorganic Chemistry	1	2014	2019	Povinně volitelné předměty 1 - oborové	B		