

Popis předmětu

Zkratka předmětu:	KOANCH/C846	Strana:	1 / 2
Název předmětu:	NMR spektroskopie		
Akademický rok:	2021/2022	Tisknuto:	24.05.2024 20:28

Pracoviště / Zkratka	KOANCH / C846			Akademický rok	2021/2022
Název	NMR spektroskopie			Způsob zakončení	Zkouška
Akreditováno/Kredity	Ano, 5 Kred.			Forma zakončení	Kombinovaná
Rozsah hodin	Přednáška 2 [HOD/TYD] Seminář 2 [HOD/TYD]			Zápočet před zkouškou	NE
Obs/max	Statut A	Statut B	Statut C	Počítán do průměru	ANO
Letní semestr	0 / -	0 / -	0 / -	Min. (B+C) studentů	nestanoveno
Zimní semestr	2 / -	0 / -	0 / -	Opakovaný zápis	NE
Rozvrh	Ano			Vyučovaný semestr	Zimní semestr
Vyučovací jazyk	Čeština			Počet dnů praxe	0
Volně zapisovatelný předmět	Ano				
Hodnotící stupnice	A B C D E F				
Počet hodin kontaktní	0				
Automat. uzn. záp. před zk.	Ne				
Periodicita	K				
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):

Seznámit studenty se základy NMR spektroskopie a jejího využití při charakterizaci organických a anorganických molekul.

Požadavky na studenta

Zvládnout učivo přednášek, schopnost využít znalosti při interpretaci jednotlivých NMR spekter a zvládnout jejich grafickou úpravu pomocí příslušného softwaru.

Obsah

1. týden: Obecný princip spektroskopických metod; úvod a vývoj NMR spektroskopie, využití NMR spektroskopie, spin a magnetický moment, jaderný spin, spinové kvantové číslo, spin a magnetický moment atomových jader.
2. týden: Atomové jádro v magnetickém poli, energie jaderných kvantových stavů, intenzita NMR signálu. NMR spektroskopie, jaderné spiny a jejich okolí, Larmorova frekvence, makroskopické magnetizace, působení rf. pulsu, FID, Fourierova transformace.
3. týden: Stínění a stínící konstanta, chemický posun, stupnice chemického posunu, faktory ovlivňující hodnoty chemického posunu.
4. týden: Spin-spinová interakce jader s $I = 1/2$, interakční konstanta, heteronukleární spin-spinová interakce, faktory ovlivňující hodnotu interakční konstanty a její vztah ke struktuře molekul.
5. týden: Příklady experimentálních NMR spekter a procvičování návrhu teoretických NMR spekter u jednoduchých organických a anorganických molekul s důrazem na jádra s $I = 1/2$. Základy práce v softwaru potřebném ke zpracování 1D NMR spekter a zpracování získaných experimentálních dat.
6. týden: Spin-spinová interakce jader s $I > 1/2$, a odpovídající heteronukleární spin-spinová interakce, rozdíly vůči jádrům se jaderným spinem $I = 1/2$. Přírodní zastoupení izotopů, satelity, hetero- a homonukleární decoupling. Procvičení na odpovídajících konkrétních příkladech.
7. týden: Klasifikace spinových systémů, interakce vyššího řádu, chemické vs. magnetická ekvivalence spinů.
8. týden: Mechanismy relaxace, a jejich důsledků při měření NMR jevu. Dynamické procesy v NMR spektroskopii.
9. týden: Úvod do problematiky 2D NMR spektroskopie, Využití a základní rozdělení 2D NMR spekter.
10. týden: Základní metody $1H, 1H - COSY$, $1H, 13C-HMBC$ a $HMQC$. Práce se softwarem při zpracování 2D NMR dat.

11. týden: Další dostupné 2D NMR techniky a jejich využití při popisu struktury organických a anorganických sloučenin.
 12. týden: Aplikace využívající 1D i 2D NMR spektroskopii na konkrétní komplexní příklady. Samostatné řešení experimentálních úkolů z NMR spektroskopie tzn. kompletní přiřazení NMR spektrech různých vzorků ve vztahu k jejich struktuře
 13. týden: NMR tuhé fáze - CP/MAS NMR rozdílů proti roztoku.

Předpoklady - další informace k podmíněnosti studia předmětu

Získané způsobilosti

Pochopení základů NMR jevu. Aplikace NMR spektroskopie pro popis struktury organických a anorganických molekul.

Studijní opory

Garanti a vyučující

- **Garanti:** doc. Ing. Libor Dostál, Ph.D.
- **Přednášející:** doc. Ing. Libor Dostál, Ph.D. (100%)
- **Vede seminář:** doc. Ing. Libor Dostál, Ph.D. (100%)

Literatura

- **Doporučená:** *Přednášky.*

Vyučovací metody

Přednášení
 Monologická (výklad, přednáška, instruktáž)

Hodnotící metody

Ústní zkouška
 Písemná zkouška

Předmět je zařazen do studijních programů:

Studijní program	Typ stud.	Forma stud.	Obor	Etap	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Anorganická a bioanorganická chemie	Navazující	Prezenční	Anorganická a bioanorganická chemie	1	2021	2021	povinné předměty	A	1	ZS
Anorganická a bioanorganická chemie	Navazující	Prezenční	Anorganická a bioanorganická chemie	1	2020	2021	povinné předměty	A	1	ZS