

Obsah

Fředmluva	7
První díl. ZÁKLADY JADERNÉ MAGNETICKÉ REZONANCE	11
1 Fyzikální základy jaderné magnetické rezonance	11
1.1 Magnetické vlastnosti atomového jádra	11
1.2 Energetické hladiny atomového jádra v magnetickém poli	14
1.3 Experimentální pozorování jaderné magnetické rezonance	16
1.4 Relaxační procesy a šířka NMR linií	18
Literatura	20
2 Chemický posun	20
2.1 Stínění jader elektrony	20
2.2 Standardy a stupnice chemického posunu	23
2.3 Vlivy určující chemické posuny v molekulách organických látek	26
2.3.1 Elektronegativita substituentů	27
2.3.2 Magnetická anizotropie	27
2.3.3 Vliv elektrického pole	29
2.3.4 Sterický vliv	30
2.3.5 Vodíková vazba. Vliv rozpouštědla, koncentrace a teploty na chemický posun	30
2.3.6 Posunová činidla	32
Literatura	34
3 Spin-spinová interakce	35
3.1 Jemná struktura NMR spekter	35
3.2 Spin-spinová interakce mezi protony	40
3.2.1 Spin-spinová interakce mezi geminálními protony	40
3.2.2 Spin-spinová interakce mezi vicinálními protony	43
3.2.3 Spin-spinová interakce v aromatických systémech	47
3.2.4 Spin-spinová interakce přes větší počet vazeb	49
3.3 Spin-spinová interakce protonů s jinými jádry	51
3.3.1 Spin-spinová interakce protonu s uhlíkem ^{13}C	51
3.3.2 Spin-spinová interakce protonu s fluorem ^{19}F a fosforem ^{31}P	53
3.3.3 Spin-spinová interakce protonu s deuteriem	54
Literatura	55
4 Analýza NMR spekter	56
4.1 Chemická a magnetická ekvivalence. Klasifikace spekter	56
4.2 Analýza spekter prvního řádu	59
4.3 Analýza spekter druhého řádu	61
4.3.1 Systém AB	64
4.3.2 Systém AB_2	65
4.3.3 Systém ABX	65
4.3.4 Systém ABC	70
4.3.5 Systémy $\text{AA}'\text{XX}'$ a $\text{AA}'\text{BB}'$	70
4.4 Kvantově mechanická teorie NMR spekter	72
4.5 Použití počítačů při analýze složitých spekter	79
Literatura	81

5	Jaderná magnetická rezonance jiných jader	81
5.1	NMR fluoru ^{19}F	81
5.2	NMR fosforu ^{31}P	82
5.3	NMR boru ^{11}B	83
5.4	NMR uhlíku ^{13}C	84
5.5	NMR dusíku ^{14}N a ^{15}N	88
5.6	NMR křemíku ^{29}Si	90
	Literatura	91
6	Dynamická nukleární magnetická rezonance	92
	Literatura	98
7	Experimentální technika jaderné magnetické rezonance s vysokým rozlišením	98
7.1	NMR spektrometry	99
7.1.1	CW spektrometry	102
7.1.2	PFT spektrometry	107
7.2	Technika měření NMR spekter s vysokým rozlišením	109
7.2.1	Příprava vzorků	109
7.2.2	Měření na NMR spektrometru	111
	Literatura	116
Druhý díl. POUŽITÍ JADERNÉ MAGNETICKÉ REZONANCE V ORGANICKÉ CHEMII		117
8	NMR spektra a struktura organických sloučenin	117
8.1	Alkylové skupiny	117
8.2	Alkenylové skupiny	120
8.3	Alkinylové skupiny	123
8.4	Aromatické kruhy	124
8.5	Aromatické heterocykly	129
8.6	Funkční skupiny obsahující uhlík a heteroatom	132
8.7	Funkční skupiny obsahující vodík vázaný na heteroatom	133
8.8	Využití NMR spektroskopie ve strukturní analýze	137
8.9	Spektra přírodních látek	142
8.10	Spektra polymerů	148
	Literatura	154
9	Použití jaderné magnetické rezonance ve stereochemii	155
9.1	Konformace acyklických sloučenin	155
9.2	Konformace cyklických sloučenin	159
9.3	Konfigurační izomery	162
9.4	Použití ^{13}C -NMR spektroskopie ve stereochemii	164
	Literatura	166
10	Jiné způsoby využití jaderné magnetické rezonance v organické chemii	167
10.1	Kvantitativní analýza	167
10.2	Kinetika a mechanismus organických reakcí	172
10.3	Tautomerie a výměna protonů	174
10.4	Molekulární komplexy	177
10.5	Organické ionty a radikály	179
10.6	Orientované molekuly	183
	Literatura	184
11	Cvičení	184
11.1	Úlohy	184
11.2	Odpovědi	189
	Doporučená literatura	191
	Rejstřík	194