

Texty pro odborné stránce posoudil RNDr. Miroslav Budíšínský, CSc.

01 ÚVOD

1.1	Proč se učit NMR spektroskopii.....	12
1.2	Komu je tato učebnice určena	12
1.3	Historický úvod	12
1.4	Jazykové okénko	14

02 PRINCIPY NMR SPEKTROSKOPIE

2.1	Úvod.....	16
2.2	Jaderný spin	16
2.3	Chemický posun.....	20
2.4	Snímání NMR signálu.....	21
2.5	Fourierova transformace	23
2.6	Magnetické interakce jader	24

03 ^{13}C NMR SPEKTROSKOPIE

3.1	Chemické posuny	30
3.1.1	Alkany a cykloalkany	30
3.1.2	Alkany a cykloalkany	31
3.1.3	Alkyny	32
3.1.4	Areny.....	32
3.1.5	Deriváty karboxylových kyselin.....	33
3.1.6	Aldehydy, ketony	33
3.2	Interakční konstanty	33

04 ^1H NMR SPEKTROSKOPIE

4.1	Chemická a magnetická ekvivalence.....	36
4.2	Spinový systém, řád spektra	38
4.3	Chiralita.....	39
4.4	Stínění jader prostorově blízkými chemickými vazbami nebo funkčními skupinami	43
4.5	Vyměnitelné vodíky	44

4.6	Vliv magnetického pole, rozpouštědla, koncentrace a teploty.....	47
4.7	Chemické posuny vodíků.....	48
4.7.1	Alkany a cykloalkany	48
4.7.2	Alkeny	49
4.7.3	Alkyny	49
4.7.4	Aromatické sloučeniny.....	49
4.7.5	Aldehydy	50
4.7.6	Vyměnitelné vodíky	50
4.8	Skalární interakce vodíků	50
4.8.1	Geminální interakce	50
4.8.2	Vicinální interakce	51
4.8.3	Interakce přes více vazeb.....	52

05 PULSNÍ SEKVENCE A JEJICH ELEMENTY

5.1	Elementy pulsních sekvencí.....	56
5.2	Jednodimenzionální pulsní sekvence	58
5.3	Dvojdimenzionální experimenty	69
5.4	Trojdimenzionální experimenty	76

06 PŘÍKLADY URČOVÁNÍ STRUKTURY POMOCÍ NMR SPEKTER

6.1	Řešení struktury z jednodimenzionálních spekter	78
6.2	Řešení struktury z dvojdimenzionálních spekter	79

07 RELAXACE V NMR SPEKTROSKOPII

7.1	Podélná relaxace	84
7.2	Příčná relaxace	85
7.3	Relaxační mechanismy.....	87

08 NUKLEÁRNÍ OVERHAUSERŮV EFEKT92

09 GRADIENTY MAGNETICKÉHO POLE

- 9.1 Gradientové echo..... 100
- 9.2 DOSY..... 101
- 9.3 Zobrazování pomocí magnetické rezonance (MRI)..... 103

10 PRAKTICKÉ ASPEKTY NMR SPEKTROSKOPIE

- 10.1 Spektrometr 106
 - 10.1.1 Magnet 106
 - 10.1.2 Sonda 107
 - 10.1.3 Konzole..... 107
- 10.2 Příprava experimentu..... 108
 - 10.2.1 Kyvety pro NMR 108
 - 10.2.2 Rozpouštědlo, standard 109
 - 10.2.3 Ladění rezonančního obvodu..... 112
 - 10.2.4 Rotace vzorku 112
 - 10.2.5 Ladění homogenity magnetického pole (shim) 112
 - 10.2.6 Teplota..... 112
- 10.3 Parametry experimentu..... 113
- 10.4 Zpracování NMR dat 114

11 DYNAMICKÉ PROCESY

- 11.1 Chemické reakce 120
- 11.2 Chemická výměna 121

12 DALŠÍ BĚŽNĚ MĚŘENÁ JÁDRA ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N , ^2H

- 12.1 Fluor 126

- 12.2 Fosfor 130
- 12.3 Dusík 132
- 12.4 Deuterium..... 134

13 PREDIKCE NMR SPEKTER

- 13.1 Analogie 140
- 13.2 Empirická korelace 141
- 13.3 NMR-Prediktory 142
- 13.4 Kvantově chemické výpočty 143
- 13.5 Simulace spekter 144

14 NMR SPEKTROSKOPIE PEVNÝCH LÁTEK

- 14.1 Principy NMR spektroskopie pevných látek 146
 - 14.1.1 Chemický posun v pevných látkách 146
 - 14.1.2 Rotace pod magickým úhlem 147
 - 14.1.3 Přímé dipól-dipólové interakce 149
 - 14.1.4 Nepřímé spin-spinové interakce ... 149
 - 14.1.5 Kvadrupolární interakce 150
 - 14.1.6 Křížová polarizace..... 151
- 14.2 Příklady využití NMR spektroskopie pevných látek – NMR krystalografie..... 151
 - 14.2.1 Polymorfie 152
 - 14.2.2 Solváty..... 152
 - 14.2.3 Přítomnost více molekul v asymetrické buňce..... 153

MATERIÁLY K DALŠÍMU STUDIU 156

REJSTŘÍK 157