

Obsah

1	Úvod.....	9
1.1	Srovnání NMR spektroskopie s dalšími analytickými technikami	9
1.2	Stručná historie NMR spektroskopie	11
2	Základní principy NMR spektroskopie	14
2.1	Magnetické vlastnosti atomového jádra	15
2.2	Chování atomových jader ve statickém vnějším magnetickém poli	16
2.3	Zjednodušený popis základního NMR experimentu	18
2.4	Relaxace	25
3	Spektrum NMR a jeho interpretace.....	33
3.1	Chemický posun.....	34
3.1.1	Kalibrace spekter a vyjadřování chemického posunu	38
3.2	NMR a symetrie molekul	41
3.3	Intenzita signálu	44
3.4	Multiplicita a tvar signálu	47
3.4.1	Spin-spinové interakce	47
3.4.2	Interakční konstanta.....	58
3.4.3	Spinové systémy	60
3.4.4	Multiplety prvního řádu.....	60
3.4.5	Analýza multipletů prvního řádu.....	62
3.4.6	Systémy vyššího řádu.....	66
3.4.6.1	Magnetická ekvivalence/neekvivalence.....	69
3.4.6.2	Řešení spekter vyššího řádu.....	70
4	Protonová NMR spektroskopie	73
4.1	Protonové chemické posuny.....	73
4.2	Protonové interakční konstanty	73
4.2.1	Geminální interakční konstanty $^2J_{(H,H)}$	73
4.2.2	Vicinální interakční konstanty $^3J_{(H,H)}$	75
4.2.3	Interakční konstanty dlouhého dosahu (long-range coupling)	80
4.3	Protonová spektroskopie jednotlivých tříd organických sloučenin.....	82
4.3.1	Alkany	82

4.3.2	Cykloalkany.....	84
4.3.3	Alkyny.....	86
4.3.4	Alkeny.....	87
4.3.4.1	Vybrané spinové systémy zahrnující dvojně vazby.....	89
4.3.4.1.1	Vinylskupina.....	89
4.3.4.1.2	Allylové systémy.....	90
4.3.5	Aromatické a heteroaromatické sloučeniny.....	91
4.3.5.1	Aromatické a heteroaromatické spinové systémy.....	95
4.3.5.1.1	Monosubstituované benzeny.....	95
4.3.5.1.2	Disubstituované benzeny.....	96
4.3.5.1.3	Trisubstituované benzeny.....	100
4.3.5.1.4	Tetrasubstituované benzeny.....	101
4.3.5.1.5	Kondenzované aromatické uhlovodíky.....	102
4.3.5.1.6	Pyridin a jeho deriváty.....	108
4.3.5.1.7	Šestičlenné heterocykly s více heteroatomy.....	112
4.3.5.1.8	Furan, pyrrol, thiofen a jejich deriváty.....	116
4.3.5.1.9	Pětičlenné heterocykly s více heteroatomy.....	119
4.3.5.1.10	Kondenzované heterocykly.....	120
4.3.6	Skupina CHO.....	124
4.3.7	Protony vázané na heteroatomy.....	124
4.3.8	Protonová spektra amidů.....	127
5	NMR spektroskopie uhlíku.....	129
5.1	Základní informace.....	129
5.2	Způsoby měření uhlíkových spekter.....	130
5.2.1	Dekaplink.....	131
5.2.1.1	Širokopásmový dekaplink (broadband decoupling).....	131
5.3	Uhlíkové chemické posuny.....	133
5.3.1	Faktory, které ovlivňují uhlíkový chemický posun.....	134
5.3.2	Kalibrace uhlíkových spekter.....	139
5.3.3	¹³ C chemické posuny jednotlivých tříd organických sloučenin.....	140
5.3.3.1	Alkany.....	140
5.3.3.2	Substituované alkany.....	141
5.3.3.2.1	Alifatické halogenderiváty.....	142

5.3.3.2.2	Alkoholy.....	144
5.3.3.2.3	Alifatické ethery	144
5.3.3.3	Cykloalkany, substituované cykloalkany a polycykloalkany	145
5.3.3.4	Alkeny, dieny a cykloalkeny	146
5.3.3.5	Alkyny, cykloalkyny a alleny	151
5.3.3.6	Aromatické sloučeniny	152
5.3.3.7	Karbonylové sloučeniny	156
5.3.3.7.1	Aldehydy a ketony.....	157
5.3.3.7.2	Chinony	159
5.3.3.7.3	Karboxylové kyseliny a jejich funkční deriváty.....	160
5.3.3.8	Dusíkaté organické sloučeniny	163
5.3.3.8.1	Aminy.....	163
5.3.3.8.2	Iminy a příbuzné sloučeniny s fragmentem C=N.....	164
5.3.3.8.3	Nitrily a izonitrily	166
5.3.3.8.4	Nitrosloučení, nitrososloučení a nitrity	167
5.3.3.9	Heterocyklické sloučeniny.....	167
5.3.3.9.1	Nasycené heterocyklické sloučeniny.....	167
5.3.3.9.2	Nenasycené heterocyklické sloučeniny	169
5.3.3.9.3	Heteroaromáty	170
5.3.3.9.4	Organické sloučeniny síry	172
5.3.3.9.5	Deriváty kyseliny uhličitě.....	173
5.4	Spin-spinové interakce v ^{13}C NMR spektrech.....	174
5.4.1	Interakce $^{13}\text{C}-^1\text{H}$	174
5.4.1.1	Určování hodnot interakčních konstant $J(^{13}\text{C}, ^1\text{H})$	174
5.4.1.1.1	Určování z protonových spekter.....	174
5.4.1.1.2	Určování z uhlíkových spekter	175
5.4.2	Vztah mezi hodnotami $^1J(^{13}\text{C}, ^1\text{H})$ a strukturou molekuly	176
5.4.3	Interakce $^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$	179
5.5	Integrální intenzity v uhlíkových NMR spektrech	179
6	Praktické aspekty NMR spektroskopie	181
6.1	NMR spektrometr.....	181
6.2	Vzorek pro NMR spektroskopii	182
6.3	Zpracování NMR dat a jejich prezentace	183

7	Seznam použité a doporučené literatury	184
8	Přílohy	5
9	Seznam rovnic	1
10	Seznam symbolů, zkratek a konstant	2