NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÁ REZONANCE

Miloš Buděšínský a Jan Pelnař

Ústav organické chemie a biochemie
AV ČR, Praha

OBSAH

1. Vznik a vývoj metody 1
2. Princip a teoretické základy NMR 3
3. Stínění jader a chemický posun 6
4. Magnetické interakce jader 7
5. Relaxace a šířka signálu 9
6. Intenzity NMR signálů 11
7. Symetrie molekuly a NMR spektrum 12
8. Vliv dynamických procesů na NMR spektra .. 15
9. NMR spektrometr 16
10. Měření pulsních FT NMR spekter 39
11. Zpracování NMR dat 41
12. Vzorek, rozpouštědlo, standard 43
13. Dekaplink a nukleární Overhauserův efekt ... 45
14. Pulsní sekvence a jejich elementy 47
15. Jednorozměrná ^{1}H NMR spektra 52
16. Jednorozměrná ^{13}C NMR spektra 55
17. Princip dvourozměrné NMR spektroskopie ... 62
18. 2D NMR spektra rozlišená podle *J* 63
19. Homonukleární 2D korelovaná NMR spektra 64
20. Heteronukleární 2D korelovaná NMR spektra 68
21. Inverzní NMR techniky 70
22. 1D a 2D NMR experimenty využívající gradienty magnetického pole 72
23. 3D NMR experimenty 77
24. Potlačení signálu rozpouštědla 79
25. Vliv magnetického pole, koncentrace, rozpouštědla a teploty na NMR spektra 81
26. Posunová a relaxační činidla 82
27 Izotopové substituce 84
28. Derivatizační reakce 85
29. Stanovení optické čistoty a absolutní konfigurace 86
30. Strukturní korelace spin-mřížkových relaxačních časů 88
31. Dynamická NMR spektroskopie. Určování rychlostních konstant a aktivačních parametrů 87
32. Spinový systém, ekvivalence jader a řád spektra 95
33. Analýza NMR spektra 96
34. NMR vodíku 99
35. NMR uhlíku 107
36. NMR dusíku 114
37. NMR kyslíku a síry 116
38. NMR fosforu 118
39. NMR fluoru 122
40. NMR spektra deuteria a tritia 126
41. NMR spektra boru, křemíku, chloru, bromu a jodu 129
42. NMR spektra přírodních látek 132
43. NMR spektra steroidů 147
44. NMR spektra sacharidů 159
45. NMR spektra nukleosidů, nukleotidů a nukleových kyselin 177
46. NMR spektra peptidů a proteinů 192
47. NMR studie interakcí proteinů s ligandy 211
48. Syntetické polymery 214
49. Použití NMR v kombinatorní chemii 215
50. Kombinace HPLC s NMR 219
51. NMR v biochemii 221
52. NMR v biologii a medicíně 222
53. NMR "částečně orientovaných" molekul 225
54. NMR v pevné fázi 226
55. NMR v plynné fázi 230
56. Elektronová paramagnetická rezonance (EPR) 231
57. Chemicky indukovaná dynamická polarizace jader (CIDNP) 233
58. Programy používané v NMR spektroskopii ... 235
59. Akronymy a zkratky pulsních sekvencí a NMR metod 238
60. Parametry a symboly v NMR 242
61. Literatura 244