

## T7TMA – Teorie a metody strukturní analýzy

### Sylabus:

- 1.) Úvod. Elektromagnetické záření. Energetické procesy na (sub)molekulární úrovni. Rozdělení metod a základní pojmy.
- 2.) Mikrovlnná spektra, Ramanova spektroskopie.
- 3.) Infračervená spektroskopie.
- 4.) UV-Vis spektroskopie, Jablonského diagram, fluorescence, fosforescence.
- 5.) Hmotnostní spektrometrie – fyzikální podstata, přístrojová technika (zdroje iontů, detektory).
- 6.) Hmotnostní spektrometrie – interpretace spekter, výpočet sumárního vzorce z molekulového clusteru, stabilní a metastabilní ionty.
- 7.) Elektronová paramagnetická resonance.
- 8.) Nukleární magnetická resonance (NMR) - fyzikální podstata, přístrojová technika, vztah mezi strukturou a spektrem.
- 9.) NMR – počet signálů, chemický posun.
- 10.) NMR – intenzita signálů, multiplicita.
- 11.) NMR – dynamická NMR, vícedimenzionální techniky.
- 12.) Optické vlastnosti látek. Index lomu. Optická aktivita. Polarimetrie. Cirkulární dichroismus.
- 13.) Rentgenová strukturní analýza. Monokrystalové a práškové metody.
- 14.) Strukturní analýza neznámých látek – komplexní praktické cvičení.

### Literatura:

- Viktor Milata, Peter Segl'a  
**Spektrálne metódy v chémii**  
STU Bratislava, 2004, ISBN 80-227-2049-6
- Robert M. Silverstein, Francis X. Webster, David J. Kiemle  
**Spectrometric identification of organic compounds**  
Wiley & Sons NY, 2005, ISBN 0-471-39362-2
- Fred W. McLaferty, František Tureček  
**Interpretation of mass spectra**  
University Science Books Sausalito, 1993, ISBN 0-935702-25-3

**Seminář** bude zaměřen na procvičování aplikací spektrálních metod na strukturní analýzu zejména organických sloučenin. Valná většina času bude věnována interpretacím spekter MS, IR, UV-VIS, NMR a základním 2D NMR. V polovině semestru studenti obdrží spektrální charakteristiky dvou až tří neznámých látek, které na základě získaných znalostí identifikují. Své závěry zdůvodní v krátké zprávě (cca 2 strany A4) a po odevzdání akceptovatelné verze získají zápočet.

V rámci **přednášky** budou probrány teoretické i praktické aspekty základních spektrálních metod používaných k určování struktury zejména organických sloučenin. Hlavním cílem předmětu je naučit studenty „číst“ strukturu neznámých látek ze spektrálních dat.

Zkouška má část písemnou zahrnující výpočty a praktické příklady interpretace spekter a část ústní zaměřenou na okruhy otázek vyplývající se sylabu přednášky.

Okruhy otázek ke zkoušce:

- 1) Elektromagnetické záření, energie, spektrum, zdroje. Adekvátní procesy na úrovni atomů a molekul.
- 2) *Základní modely pro rotační a vibrační spektroskopii.*
- 3) *Typy přechodů, typy vibrací.*
- 4) *Charakteristické vibrace funkčních skupin.*
- 5) *Praktické aspekty IČ spektroskopie, přístroje, příprava vzorků, způsoby měření.*
- 6) Teoretické základy UV-VIS spektroskopie, typy přechodů, Jablonského diagram.
- 7) Fluorescence, fosforescence.
- 8) *Rovnice pohybu nabitých částic v magnetickém poli a využití pro hmotnostní spektrometrii.*
- 9) *Komponenty hmotnostního spektrometru, iontový zdroj, separace iontů, detektory. Základní charakteristiky přístrojů (citlivost, rozlišení, rozsah).*
- 10) *Fragmentace základních typů organických sloučenin.*
- 11) *Izotopové složení a význam pro MS, interpretace molekulového clusteru.*
- 12) Teoretické základy NMR, rezonanční podmínka, aktivní jádra.
- 13) Počet signálů v  $^1\text{H}$  NMR, chemická ekvivalence, enantiotopní a diastereotopní skupiny.
- 14) Stínící konstanta a mechanismy stínění, anisotropie násobných vazeb, rozsah a definice stupnice ppm pro  $^1\text{H}$  NMR.
- 15) Spin–spinová interakce, význam pro strukturní analýzu.
- 16) Relaxace a intenzita signálu v  $^1\text{H}$  NMR a v  $^{13}\text{C}$  NMR.
- 17)  $^{13}\text{C}$  NMR – rozsah stupnice ppm, poloha jednotlivých typů uhlíků, BB dekapling, APT.
- 18) *NOE, 2D aplikace NOE – NOESY, ROESY.*
- 19) *Základní 2D NMR metody, COSY, HMBC, HMQC.*
- 20) EPR – teorie a interpretace spekter.
- 21) *CD a ORD teorie a interpretace spekter.*

Předmětem ústní zkoušky bude prezentace názorů na dvě témata vylosovaná z uvedeného seznamu (jedna otázka + *druhá otázka*).