Metody interpretace struktury organických molekul

Obsahem zkoušky jsou dvě témata (po jednom z oddílu NMR a MS), která slouží jako výchozí bod pro diskuzi u zkoušky. Příklady možných témat jsou uvedeny níže. Náplň je vymezena sylaby předmětů MC270P09 NMR spektroskopie organických látek, MC260P107 Techniky NMR spektroskopie, MC270P71 Úvod do hmotnostní spektrometrie včetně znalostí získaných při řešení diplomové práce.

**A – NMR**

1. Popište princip metody nukleární magnetické rezonance (co se měří, jak se měří, jaká je odezva). Jaké jsou její výhody a nevýhody?
2. Jaké informace se získávají z 1H a 13C NMR spekter? K čemu mohou sloužit?
3. Vysvětlete pojem chemický posun. Jaké je jeho využití a interpretace?
4. Co je to J interakce a jaké je její využití při stanovování chemické struktury?
5. Jaké požadavky na vzorek klade metoda NMR spektroskopie? Vysvětlete.
6. Co je to vícerozměrná NMR spektroskopie, jaké jsou její typy a využití?
7. Jaký je kompletní postup stanovení chemické struktury organické molekuly pomocí NMR? Jaké experimenty se měří a co se z nich vyčte?

**B - MS**

1. Experimentální uspořádání hmotnostního spektrometru. Přehled ionizačních technik. Hmotnostní analyzátory. Detektory.

2. Hmotnostní spektrum. Molekulární ion. Analýza izotopického složení. Stabilní izotopy. Určení počtu cyklů a dvojných vazeb ze sumárního vzorce.

3. Teorie fragmentace. Lokalizace náboje a nepárového elektronu v molekulárním iontu. Rozpad molekulárního iontu, fragmentační cesty. Faktory ovlivňující intenzitu iontů.

4. Mechanismy fragmentace organických molekul. Štěpení sigma vazby. Alfa štěpení iniciované radikálovým centrem. Štěpení iniciované nábojovým centrem. Štěpení cyklických struktur.

5. Přesmykové reakce. Přesmyky iniciované radikálovým centrem. Přesmyky iniciované nábojovým centrem.

6. Měkké ionizační techniky (API, MALDI), princip fragmentace, srovnání s EI spektry.