

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, v.v.i.
Akademie věd České republiky

zve všechny zájemce na ústavní seminář,
na kterém promluví

Ing. Jiří Brus, Ph. D.
(*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.*)

na téma

**NMR spektroskopie a NMR krystalografie:
principy a aplikace v chemii,
biologii a lékařství**

Abstrakt:

Ačkoli slovo „nukleární“ může vyvolávat řadu smíšených pocitů spojovaných s řízeným i neřízeným uvolňováním obrovské energie při rozpadu atomových jader, nukleární magnetická rezonance (NMR) překvapivě pracuje s energiemi, které jsou tak nepatrné, že je mnohdy nedokážeme odlišit od elektronického šumu způsobeného tepelným pohybem. Přesto anebo možná právě proto je NMR spektroskopie v současné době tak rychle se vyvíjející oblast strukturní analýzy. Nedávný rozvoj nových experimentálních postupů a základních elektronických součástí NMR spektrometrů vedl k tomu, že dosažené rozlišení a selektivita NMR experimentů umožňují velmi přesně popisovat strukturu a vnitřní pohyblivost širokého spektra látek a systémů (od velice tvrdých a rigidních skel, organických i anorganických krystalů, přes syntetické polymery až po velice měkké a pohyblivé gely a roztoky polypeptidů či proteinů). Díky tomu je možné popsat strukturu a tří-dimenzionální uspořádání i u takových látek, které jen velmi neochotně poskytují krystaly vhodné k rtg. difrakci, které jsou nerozpustné anebo poskytují pouze velmi zředěné roztoky. Zcela nedávno se NMR spektroskopie začala využívat i k analýze tak složitých materiálů jako jsou potraviny anebo produkty jejich metabolismu. Navíc je řada fyzikálních veličin sledovaných metodou NMR citlivých na rychlost a amplitudu vnitřních pohybů sloučenin, a tak právě NMR spektroskopie podává komplexní informace o vnitřní struktuře a uspořádání hmoty. Proto můžeme NMR spektroskopii směle považovat za metodu komplementární k rentgenové difrakci. Cílem NMR spektroskopiků ale není zcela nahradit difrakční techniky, ale především doplnit chybějící údaje k úplnému popisu struktury a dynamiky krystalických a vysoce organizovaných systémů. Zatímco difrakční techniky jsou téměř slepé k atomům vodíku, protože ten má kolem sebe jen malou elektronovou hustotu (vím, že toto tvrzení je poněkud přehnané a kolegům od rtg difrakce se proto omlouvám), NMR experimenty jsou na přítomnost vodíku ^1H velmi citlivé. Ačkoli NMR spektroskopie tedy není alternativou difrakčním technikám při určování úplné třidimenzionální struktury a uspořádání molekul, poskytuje tato metoda významné krystalografické informace. Nejen díky tomu se tak NMR spektroskopie pevného stavu stala významnou součástí charakterizace např. farmaceuticky aktivních substancí a od roku 1997 je doporučována i hlavním a přísným regulátorem trhu s léčivy - FDA (Food and Drug Administration).

Seminář se koná **[v úterý 26. května 2009 od 14.30 hodin](#)**

v Brdičkově posluchárně ústavu v Praze 8, Dolejškova 3.

Těšíme se na Vaši účast. Hosté jsou vítáni.

