

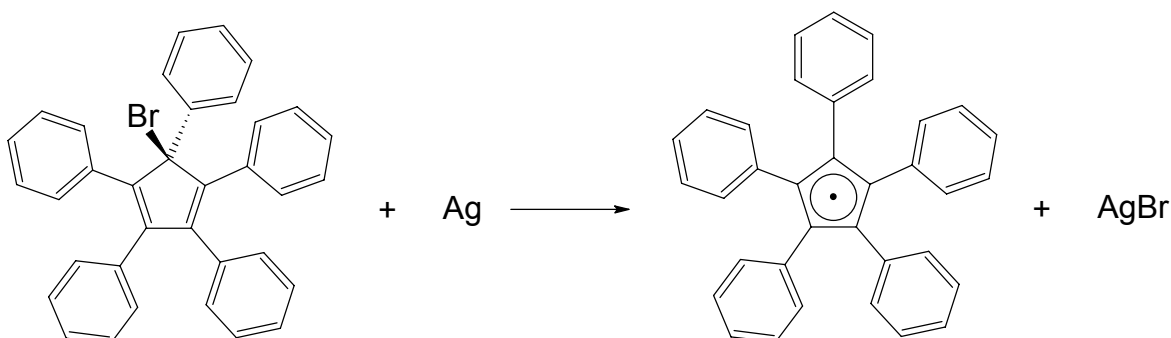
## PRAKTICKÉ CVIČENÍ - číslo II

Jméno organizátora praktického cvičení : Michal Horáček

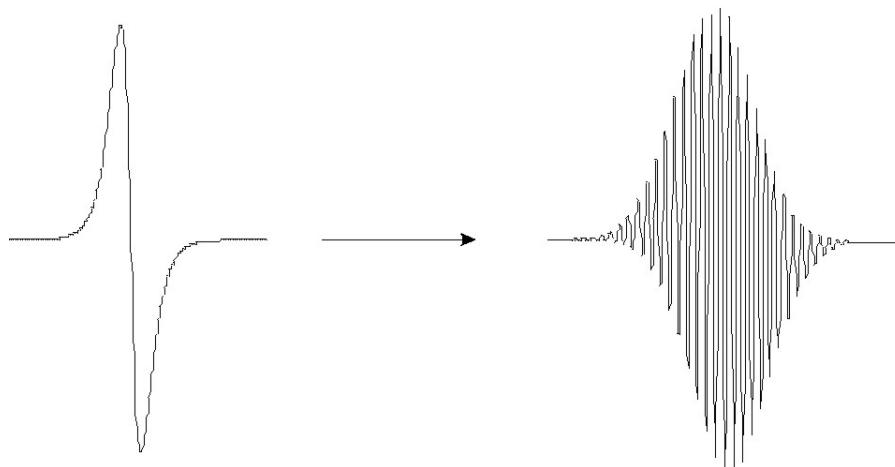
Název praktického cvičení: Studium struktury sloučenin pomocí ESR spektroskopie

V rámci praktických cvičení bude na pracovišti organometalické katalýzy vybaveném ESR spektrometrem předvedena činnost přístroje a ukázáno měření vzorků.

Vliv amplitudy magnetického pole a zředění roztoku na ESR spektrum bude ukázáno na příkladě termálně stabilního penta-fenylcyklopentadienového radikálu ( $C_5Ph_5$ ) vzniklého reakcí



Bude předvedena generace teoretického spektra a experimentální zjištění g-faktoru a štěpících konstant ( $o$ - +  $p$ -) a  $m$ - vodíků na fenylových substituentech.



V rámci praktika bude přednesena a vysvětlena následující teorie:

1. Princip metody, interakce vnějšího magnetického pole s volným elektronem a jádry majícími jaderný spin. Resonanční podmínka, přechody mezi spinovými stavy, výběrové pravidlo. Podmínky měření, relaxační procesy, saturace resonančního signálu. Schéma přístroje a jeho funkce. Proč záznam spektra jako první derivace absorpce?
2. Objekty měření: radikály organické, anorganické, jejich stabilita a jejich stabilizace, spin trapping, ionty přechodových kovů v roztoku a v matici. Strukturní informace získané z ESR spekter. Delokalizace elektronové hustoty radikálu, McConellův vztah.
3. Použití ESR spektroskopie při identifikaci titanocenových Ti(III) sloučenin. Informace o molekulové struktuře látek plynoucí z měření ESR spekter. Příklady z praxe, simulace spekter.