

## НАНОНАУКИ, НОВИ МАТЕРИАЛИ И ТЕХНОЛОГИИ

**Тема: Съвременни ЯМР техники за количествен анализ**

Advanced NMR spectroscopy for quantitative analysis.

*Лектори:*

проф. дхн Светлана Симова

тел. 9606 140

E-mail: [sds@orgchm.bas.bg](mailto:sds@orgchm.bas.bg)

Д-р Явор Митрев

тел. 9606 146

E-mail: [yavor@orgchm.bas.bg](mailto:yavor@orgchm.bas.bg)

*Хорариум:*

30 учебни часа

*Анотация:*

Курсът “Съвременни ЯМР техники за количествен анализ” е предназначен за обучение на докторанти по специалност ОРГАНИЧНА ХИМИЯ (01.03.01) за образователната и научна степен ДОКТОР. Целта на предложения курс е да запознае слушателя с възможностите на съвременната на ЯМР спектроскопията за количествено определяне на органични съединения в разтвор, както самостоятелно, така и в смеси. Паралелно с различните подходи са представени и основни експериментални техники и елементи от импулсното програмиране във формат Bruker, необходими за практическото използване на представените или разработване на нови експерименти на наличната в центъра по ЯМР спектроскопия апаратура. Съдържа и съвместно приложение на ЯМР спектроскопия и хеометрия, често използвани при анализ на храни, растителни екстракти и др.

**Title: Advanced NMR spectroscopy for quantitative analysis.**

*Лектори:*

Prof. DSc Svetlana Simova

phone: 9606 140

E-mail: [sds@orgchm.bas.bg](mailto:sds@orgchm.bas.bg)

PhD Yavor Mitrev

phone: 9606 146

E-mail: [yavor@orgchm.bas.bg](mailto:yavor@orgchm.bas.bg)

*Summary:*

The course on “Advanced NMR spectroscopy for quantitative analysis” is addressed to PhD students in Organic Chemistry. It gives an overview of contemporary NMR techniques for quantitative analysis of organic compounds in solution, both as single components or in complex mixtures. In parallel with detailed introduction to the different experimental approaches, their practical implementation with Bruker pulse programming language is also given, thus building up the necessary skills for implementation of the presented, or for the development of new experiments on the currently available NMR spectrometers at the Bulgarian NMR Centre. The course presents the combined application of NMR spectroscopy and chemometrics, as one of the common approaches in food analysis, plant metabolomics etc.

## ПРОГРАМА

### за курс „Съвременни ЯМР техники за количествен анализ”

(хорариум 30 часа)

1. Основи на импулсното програмиране във формат на Bruker. 3 часа
2. Експериментални техники в съвременната ЯМР спектроскопия. Видове импулси в ЯМР спектроскопията – неселективни, селективни, адиабатни и композитни. Градиенти на магнитното поле.  
5 часа
3. Основни импулсни блокове и поредици – приложение, предимства и недостатъци. Спиново, J-компенсирано и градиентно ехо. Пренос на поляризация. Честотна и пространствена селективност.  
5 часа
4. Количествена ЯМР спектроскопията. Методи за абсолютни и относителни количествени определяния (вътрешен и външен стандарт, калибровачна крива, електронно референсиране).  
5 часа
5. Количествени аспекти в едномерни експерименти. Приложение на едноимпулсни и многоимпулсни техники за анализ на индивидуални съединения и смеси.  
4 часа
6. Количествени аспекти в двумерни експерименти. Приложение на хомо- и хетероядрени техники за анализ на индивидуални съединения и смеси.  
4 часа
7. Хемометрични методи в ЯМР спектроскопията. 4 часа

#### Литература:

1. Claridge T. High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, 3<sup>rd</sup> Ed., Elsevier 2016
2. Gouilleux B., Rouger L., Giraudeau P. „*Ultrafast 2D NMR: Methods and Applications*“, Annual Reports on NMR Spectroscopy (2018) 93, 75-144. (и литературата цитирана там)
3. Giraudeau, P. „*Challenges and perspectives in quantitative NMR*“ Magn. Reson. Chem. (2017) 55, 61–69. (и литературата цитирана там)
4. Giraudeau, P. „*Quantitative 2D liquid-state NMR*“(2014) Magn. Reson. Chem., 52, 259-272. (и литературата цитирана там)
5. D. Rongai, N. Sabatini, L Del Coco, E. Perri, P Del Re, N. Simone, D. Marchegiani, F. Fanizzi, *1H NMR and Multivariate Analysis for Geographic Characterization of Commercial Extra Virgin Olive Oil: A Possible Correlation with Climate Data*, Foods 2017, 6(11), 96.

Изготвили: проф. дхн Светлана Симова, д-р Явор Митрев