# NMR spectroscopy 강의 안내

#### 모시는 글

지난 4 년동안에 Bruker (BioSpin Korea)의 후원으로 많은 대학원생, 연구자들과 함께 NMR에 관한 강의(NMR-1,2)를 무사히 마칠 수가 있었습니다. 지난 봄에는 NMR-1의 강의가 있었고 2D NMR을 포함한 advanced level의 강의인 NMR-2의 강의는 Bruker 후원으로 아래의 기간 동안에 있을 예정입니다. 여러분의 연구 시간을 단축 할 수 있고 연구의 수준을 높일 수 있는 NMR의 사용을 위해서 반드시 알아야 할 첨부된 강의 내용을 참조하셔서 연구에 도움이 되는 유익한 시간이 되 시길 바랍니다. 감사합니다.

## The Aims of Lectures

These lectures will be aimed at those who want to learn 2D-NMR spectroscopy and possess a basic 1D-NMR spectroscopy and, ideally, have some experience in obtaining and interpreting NMR spectra in organic chemistry.

Lectures will, however, review some of basic concepts and parameters for the understanding of NMR spectroscopy and be concentrated on largely the modern pulsed 2D-NMR techniques to relate the operation of NMR instruments.

Especially, all the parameters for the 2D spectra will be explained with the related real spectra and newly developed experiments to use easily such as phase sensitive and gradient experiments will be demonstrated by theory with spectra.

#### 강의안내

일시 : 2019년 11월 7일(목) 9:30 ~ 6:00 11월 8일(금) 9:30 ~ 6:00

연사 : 이석근 박사 (한국화학연구원 자문위원, 한양대 화학과 초빙교수).

장소 : 성남시 분당구 판교로 338 한국무역정보통신 2층(KT Net 빌딩, Bruker Korea). (주차는 가능하나 종일권(3만원) 구매가 필요하오니 대중교통 이용바랍니다.)

참가비: 40 만원 (2일 교육기준, VAT 별도).

제공사항: 중식, 강의교재와 책 "NMR(핵자기공명분광학)", 저자: 이석근, 자유아카데미.

NMR Workshop 참가를 희망하시는 분은 10월 31일 까지 등록 통보해주시면 감사하겠습니다.

접수및문의 e-mail: kjkang21c@naver.com

전화: 010-9414-9814

계좌번호: 국민은행, 468401-04-168640 (T&TS, 강금진) (# 전자세금계산 서 발행 가능합니다).

### 1 (Thursday, 11/7/2019)

1. Bloch Equation: Nuclear Induction Classical formulation of NMR.

Laboratory frame Rotating frame.

Solution of Bloch equation. Vector model of NMR. Signal detection and phase.

2. Basic concepts of 2D-NMR Principles.

Introducing 2D-NMR COSY experiment.

Coherence and coherence transfer 2D data acquistion and processing Axial peak and phase cycle

Quadrature detection of second dimension. simultaneous and sequential sampling.

(States and TPPI methods)
2D lineshape and digital resolution

Interpreting COSY.

3. Practical aspects of 2D-NMR. Instrumental artefacts

COSY-45

Long-range COSY

TOČSY

Phase-sensitive COSY Peak fine structure

Active and passive couplings NOESY and Solomon equation

4. Homonuclear double quantum Double quantum filtered(DQF)-COSY

INADEQUATE experiment Variations on INADEQUATE

5. J-resolved spectroscopy Homonuclear J-resolved

Heteronucleat J-resolved

## 2 (Friday, 11/8/2019)

6. Heteronuclear correlation Traditional X-detected correlation

One-bond correlation Multiple-bond correlation Relay coherence transfer

7. Heteronuclear correlation (inverse) Heteronuclear multiple quantum corr.(HMQC)

Heteronuclear single quantum corr.(HSQC)
Heteronuclear multiple bond corr.(HMBC)
Transverse relaxation optimized spec.(TROSY)

8. Gradient experiments Signal selection with PFGs

Phase sensitive experiments

g-COSY, g-HMQC, g-HSQC, g-HMBC Excitation sculpting(water suppression) Diffusion ordered spectroscopy.(DOSY)

9. Structure determinations Solution by using 2D-NMR spectra

10. Product operator formalism Manipulation of product operators

Bruker NMR software