

T-REPORT

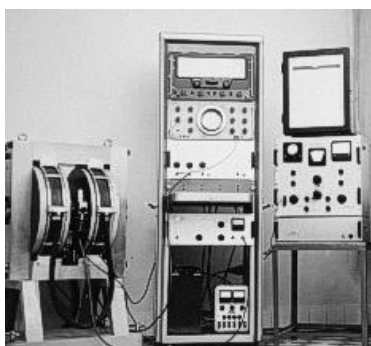
NMR ANEB MAGNETY NEJSOU JENOM NA LEDNÍČCE

Lektoři: Mgr. Vojtěch Kubáň, Mgr. Matúš Durec, Mgr. Jan Novotný
Místo konání: Národní NMR centrum Josefa Dadoka, CEITEC, MU
Vypracovala: Petra Vojáčková

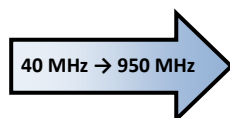
Spektroskopie nukleární magnetické rezonance je analytická metoda, s jejíž pomocí dokážeme například určit neznámou molekulu nebo popsat reakce různých látek. To vše lze vyčíst ze spekter, která jsou výstupem při NMR bádání. Asi nejjednodušší jsou 1D spektra, ve kterých pozorujeme píky a podle několika pravidel je přiřazujeme k jednotlivým atomům. Dnes se však také běžně používají 2D i vícedimenzionální spektra, která umí navíc zachytit i interakci dvou blízkých atomů nepropojených vazbou. Díky tomu můžeme třeba odhadnout i 3D podobu molekuly.

V online části T-exkurze jsme se seznámili s fyzikální podstatou NMR, zjistili jsme, jaká jádra lze zkoumat, a naučili jsme se orientovat v 1D a 2D NMR spektrech. Tyto znalosti se nám následně hodily v testu, po kterém byli všichni, kteří ho vyplnili, pozváni do největší NMR laboratoře v České republice.

Na začátku praktické části nám byla přiblížena historie NMR a všichni jsme se pousmáli při pohledu na staré NMR spektrometry, které sestávaly z obrovských magnetů. Poté jsme společně s lektory prošli test a všechny nejasnosti nám byly vysvětleny.



^[1] Historický NMR spektrometr TESLA



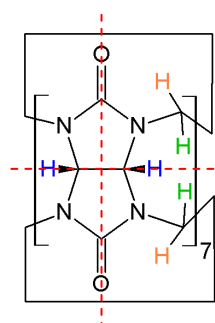
40 MHz → 950 MHz

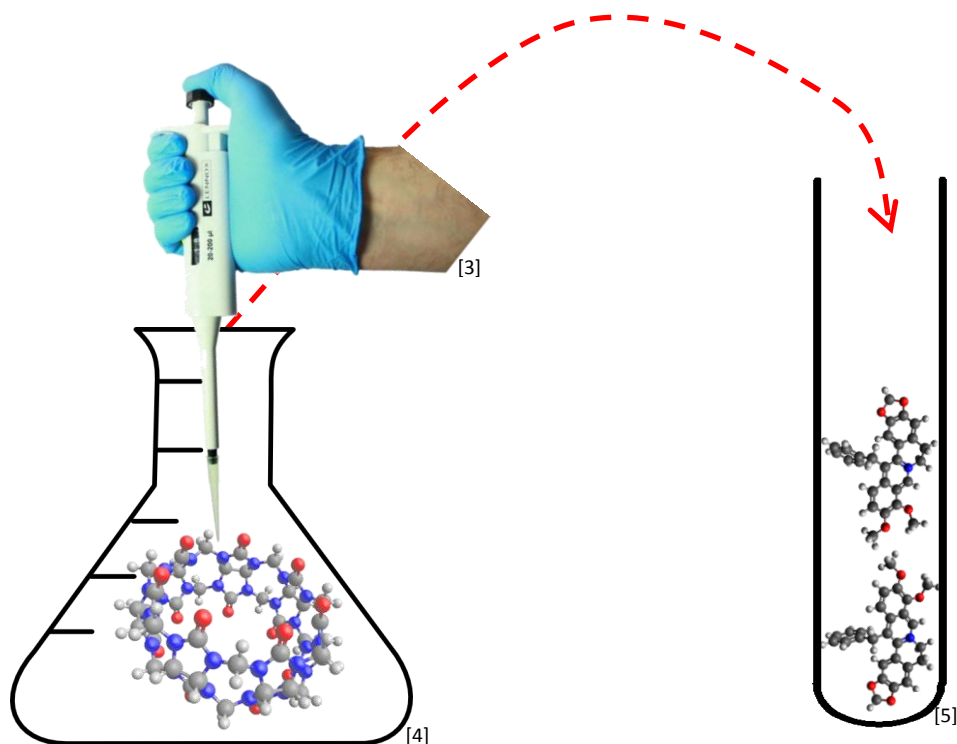


^[2] Jeden z nejvýkonnějších současných NMR spektrometrů BRUKER

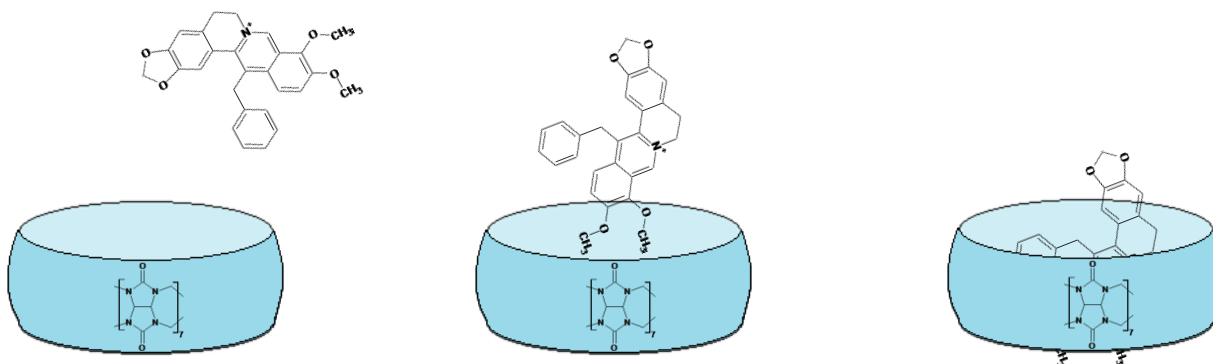
Hlavní náplní poslední části T-exkurze byla NMR titrace. Touto metodou jsme měli za úkol zjistit, jakým způsobem vlézá molekula 13-benzylberberinu do kukurbit[7]urilu.

Nejdříve jsme do kyvety napipetovali vzorek benzyberberinu a zjistili jeho NMR spektrum. Dále jsme přidávali v určitých poměrech kukurbituril a pozorovali, jak se s jeho vzrůstající koncentrací píky obou molekul mění a posouvají. Spektrum samotného kukurbiturilu je oproti spektru benzyberberinu jednodušší, protože tato molekula obsahuje pouze tři skupiny neekvivalentních vodíků. Ve spektru kukurbiturilu tedy vidíme dva dublety a jeden singlet.





Po přiřazení píků jednotlivým vodíkům jsme následně odhalili, které atomy začínají s partnerskou molekulou reagovat jako první.



Tato T-exkurze byla pro mě velmi inspirativní. Nikdy předtím jsem se s 2D NMR spektry nesetkala, a proto pro mě byla orientace v nich trochu složitější, ale o to zajímavější. O NMR titracích jsem se také dozvěděla poprvé až díky této t-exkurzi. Mohla jsem si vyzkoušet pracovat v NMR laboratoři a na vlastní oči jsem viděla dva NMR obry, jejichž velikost jsem předtím mohla odhadovat pouze podle dvou nad zem čnících kupolí. Celá t-exkurze byla pro mě velmi přínosná. Děkuji za to všem, kteří ji pro nás připravili.

[1] Dostupné z: http://www.ebyte.it/library/hist/Tesla_27.jpg [cit. 2013-06-23].

[2] Dostupné z: http://www.bruker.com/typo3temp/pics/A_9b952cedf9.jpg [cit. 2013-06-23].

[3] Dostupné z: <http://shop.laboratorysupplies.ie/image/cache/data/Lennox/pipette-in-hand-500x500.jpg> [cit. 2013-06-23].

[4] Dostupné z: <http://www.clker.com/cliparts/Q/K/x/q/i/P/empty-erlenmeyer-flask-hi.png> [cit. 2013-06-23].

[5] Dostupné z: <http://electronpolka2.info/Lab/LabEquip/files/MT%20Test%20tube.png> [cit. 2013-06-23].