



Středoškolská technika 2010

Setkání a prezentace prací středoškolských studentů na ČVUT

NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÁ REZONANCE

Ondřej Maslikiewicz

SPŠ Hronov
Hostovského 910, Hronov

Úvod

Nukleární magnetická rezonance (NMR) spadá pod odvětví moderní fyziky. Pomocí NMR můžeme vysvětlit a využít chování látek v silném magnetickém poli. Své podstatné místo si našla v lékařství, biologii a chemii. Podstata NMR je využívána jako nedestruktivní a neinvazivní analytická metoda. Výhody těchto vlastností se naplno projevují v lékařství, kde nukleární magnetická rezonance přebírá pomyslnou štafetu po rentgenu. Na rozdíl od rentgenu při nukleární magnetické rezonanci není lidský organismus vystaven ionizujícímu záření, které je třeba pro samotnou funkci rentgenu. Pro funkci NMR je zapotřebí silné magnetické pole, které je pro lidský organismus neškodné, a tudíž není čeho se bát při častějším používání. Využití v chemii není také nijak zanedbatelné. Pomocí NMR snadno zjistíme složení neznámé látky.

K tomuto tématu mě vedl zájem o moderní fyziku a práce ve fyzikálním semináři na naší škole. Myslím si, že v dnešní době nelze striktně oddělovat vědní disciplíny. Jak praví klasik, všechno souvisí se vším, a NMR a její široké využití je toho důkazem.

Co to je nukleární magnetická rezonance?

Jak už bylo zmíněno v úvodu, jedná se o nedestruktivní a neinvazivní analytickou a diagnostickou metodu. Před tím, než se můžeme zabývat otázkou „Co to je NMR?“, musíme znát několik fyzikálních jevů, faktů a zákonitostí. Jak už každý člověk s ukončeným základním vzděláním jistě ví, materiály se skládají z molekul. Ty se skládají z atomů, které jsou složeny z elektronů, neutronů a protonů. Právě protony jsou pro NMR důležité. Mají své magnetické vlastnosti, které jsou využívány k průběhu samotné NMR. Jak je známo, protony se nacházejí v atomovém jádře. Proto hovoříme o jaderné magnetické rezonanci neboli nukleární magnetické rezonanci (z anglického nucleus – jádro). Ujasněním těchto pojmů jsme si vlastně odpověděli na otázku „Co to je NMR?“. NMR neboli jaderná magnetická rezonance je jev projevující se v silném magnetickém poli díky vlastnostem jádra atomu. Přesněji díky vlastnostem protonů uvnitř jádra. Tento děj umíme fyzikálně popsat a využít ve svůj prospěch.

Historie NMR

Drtivou většinu veškeré známé hmoty tvoří vodík, proto má pro NMR výjimečný význam. Atomová jádra vodíku díky svému vysokému gyromagnetickému poměru a přirozenému izotopickému zastoupení jsou vůbec nejcitlivější k NMR experimentům.

Jádro můžeme považovat za malinký magnetický dipól. S existencí jaderného spinu se pojí existence jaderného magnetického momentu.

NMR se začala rozvíjet během 2.světové války. Poprvé si možnosti manipulace s jaderným spinem všiml Isidor Isaak Rabi (1944, Nobelova cena). Felix Bloch v roce 1946 naměřil první signál atomů vodíku v molekule vody. V roce 1952 získal spolu s Millsem Purcellem Nobelovu cenu za tuto oblast. Nesmíme však zapomenout na jedno významné jméno, které má velmi úzkou spojitost právě s NMR. Jean Baptista Joseph Fourier (1763-1830). Právě on vypracoval vztahy, které převádějí funkce v časové oblasti do oblasti frekvenční. Fourierova transformace. Právě ta vychází z předpokladu, že každý signál lze vyjádřit jako superpozici nekonečně mnoha sinusových signálů. Právě touto procedurou získáváme radiační frekvenční spektrum.

Richard R.Ernst (1991, Nobelova cena) využil Fourierovy transformace k převedení volně doznívající indukce do podoby frekvenčního NMR spektra. Jednotlivé signály lze přiřadit k jednotlivým atomům a strukturním jednotkám v molekule. ^[1]

Od poloviny 60.let se NMR stala nedílnou součástí chemie a od roku 1970, kdy byl navržen první dvou-dimenzionální experiment, se toto odvětví rychle rozvíjí.

Radiofrekvenční spektroskopie

Ve 40.letech byl objeven jev jaderné magnetické rezonance. Jaderné proto, že nejen protony, ale i neutrony mají svůj moment hybnosti. Pokud budeme provádět měření na vodíku, můžeme hovořit pouze o protonové rezonanci.

V roce 1944 sestavil Zavoiský aparaturu, kterou použil ke zjištění elektronové paramagnetické rezonance, a v roce 1946 pánové Purcell, Bloch a Torrey sestrojili podobnou aparaturu pro jadernou magnetickou rezonanci.

Paramagnetická rezonance

Při jaderné paramagnetické rezonanci nepracujeme s izolovanými jadernými spiny, ale s celým souborem jaderných momentů, které jsou v interakci navzájem i s dalšími stupni volnosti systému.

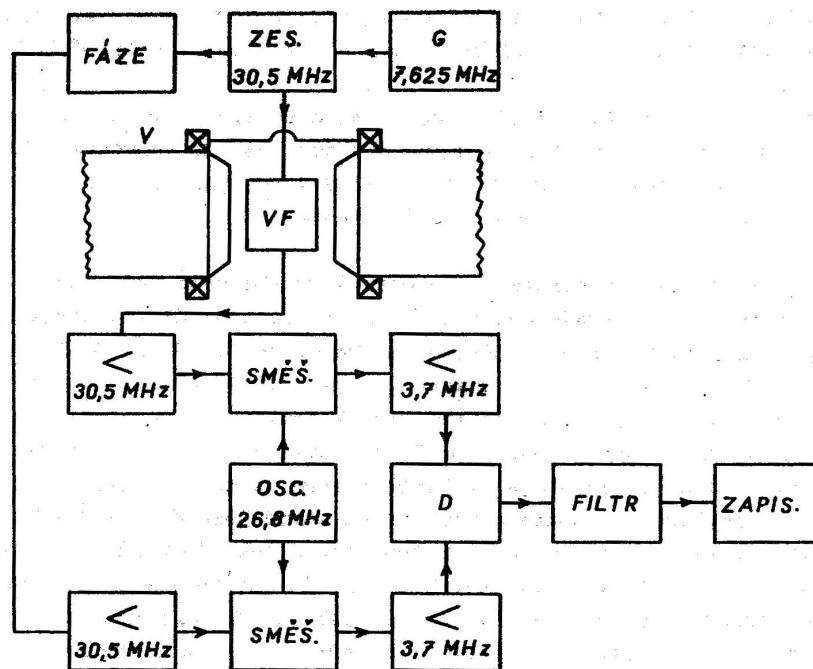
Jaderná paramagnetická rezonance se stala novou metodou měření magnetického pole.

Jaderná rezonance

Jádra vodíku jsou ve zkoumaném vzorku vždy obklopena elektrony. V elektronově diamagnetických látkách vytváří vnější stejnosměrné pole H_0 vnitřní diamagnetické pole, které snižuje intenzitu pole uvnitř vzorku. Jednotlivé protony jsou tedy zčásti stíněny elektrony a hodnota magnetického pole je v bodě, kde je příslušný proton, nižší. Rezonance nastává proto při nižší frekvenci, než by nastala v případě volného protonu ve vakuu.

Diamagnetické stínění i posuv rezonanční frekvence protonů elektronovou obálkou je úměrné statickému magnetickému poli. Diamagnetickému posuvu rezonanční frekvence se říká chemický posuv.

Protonový magnetický rezonanční spektrometr



V roce 1956 Arnold popsal a realizoval aparaturu s extrémně vysokou rozlišovací schopností. ^[1]

Obr. 1. Aparatura s vysokou rozlišovací schopností pro protonovou magnetickou rezonanci [4]

K získání statického magnetického pole H_0 je použito permanentního magnetu ze slitiny AlNiCo, s třicentimetrovou mezerou mezi pólovými nástavci. Na magnetu je pomocné vinutí V, pomocí kterého realizujeme pomalou změnu magnetického pole. Pro efektivní zvýšení homogenity vzorek rotuje rychlostí několika set otáček za minutu.

Pro buzení vysokofrekvenčních přechodů ve vzorku byl použit vysoce stabilní vysokofrekvenční generátor. Magnetická rezonance byla měřena tzv. indukční metodou. Ve snímáči hlavě jsou dvě cívky, jedna je spojena s vysokofrekvenčním generátorem, druhá přijímá signál jaderné rezonance. Získaný vysokofrekvenční signál je znovu zesílen v mezifrekvenčním zesilovači a usměrněn fázově citlivým detektorem. Referenční napětí pro fázově citlivý detektor se získává z původního vysokofrekvenčního napětí 30,5 Mhz. Poměr signálu k šumu u tohoto zapojení je velmi dobrý.

Autor uvádí, že největším úskalím bylo dodržet dostatečnou stabilitu magnetického pole. ^[4]

Spektrometry pro NMR dnes vyrábí řada firem k tomu specializovaných. Upustilo se od permanentního magnetu, neboť dosažitelné stejnosměrné magnetické pole je poměrně nízké. Začalo se využívat elektromagnetu, v němž je pole stabilizováno zpětnovazební smyčkou z

pomocné cívky, která snímá časové fluktuace pole. Po zesílení tohoto signálu působí pomocí druhého vinutí tak, že pole v mezeře je neustále vyrovnáváno na konstantní hodnotu. To odstraňuje i vliv vnějších magnetických poruch.

Dnes byly permanentní magnety a elektromagnety nahrazeny supravodivými magnety, kde teplota kapalného helia dosahuje teplot nižších než 2 K. Supravodivé magnety dosahují úctyhodného magnetického pole (i více než 21 T).

K dalšímu zvýšení rozlišení spektrometru se používá metody tzv. zamknuté frekvence oscilátoru. Případné pomalé fluktuace magnetického pole se registrují rezonancí jiného vzorku.

Vedle pasivního snímání existujících spekter byla vyvinuta i metoda aktivního působení na stavy některých protonů v molekule – metoda dvojná rezonance.

Rezonance jiných jader

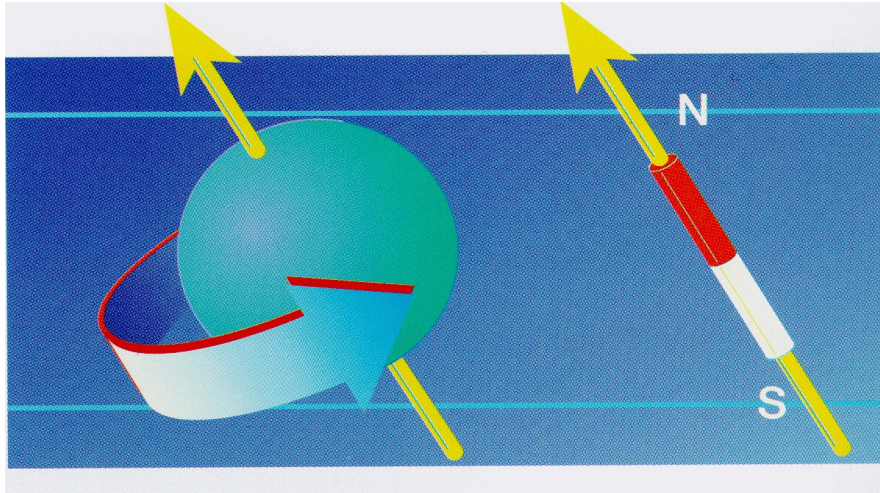
Kromě vodíkového jádra – protonu- existuje celá řada dalších jader s nenulovým magnetickým momentem (spin není roven nule). Metodou jaderné paramagnetické rezonance byly s velkou přesností změřeny jaderné g-faktory téměř všech stabilních jader a velké části jader radioaktivních izotopů.

Moderní jaderné magnetické spektrometry mají snadno vyměnitelné snímací hlavy pro rychlou změnu frekvence a tím možnost přejít na rezonanci jiného jádra ve vzorku.

NMR se s definitivní platností stává samostatným vědním odvětvím na pomezí aplikované fyziky a chemie. Začíná se používat vyšší magnetické pole a výpočetní technika k rychlému vyhodnocení spekter, k odčítání signálu pod hladinou šumu a k dalšímu zlepšení stabilizace magnetického pole a frekvence.

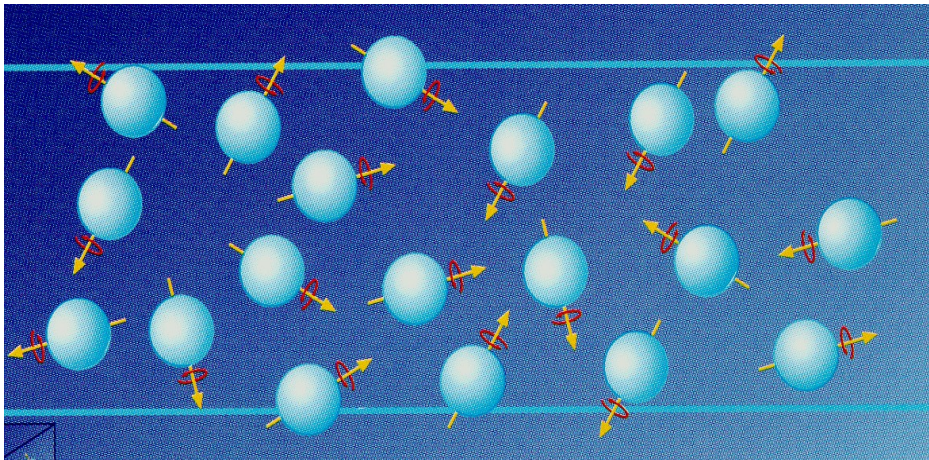
Fyzikální princip NMR

Každý proton (jádro) má vlastní spinový moment hybnosti S .
S S je úzce spojen spinový magnetický dipólový moment μ , který má stejný směr jako S .



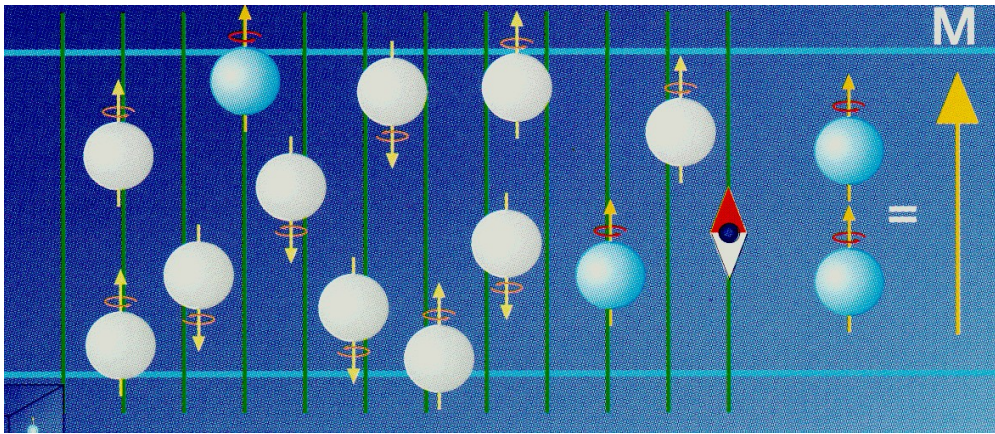
Obr. 2. Spinový moment hybnosti a magnetický dipólový moment [3]

Těchto magnetických dipólů je v látce mnoho a nejsou nijak uspořádané. Na venek se neprojevuje žádná jejich vlastnost. Záleží však na teplotě, s rostoucí teplotou se neuspořádanost zvyšuje.



Obr. 3. Magnetické dipóly v látce bez vnějšího magnetického pole [3]

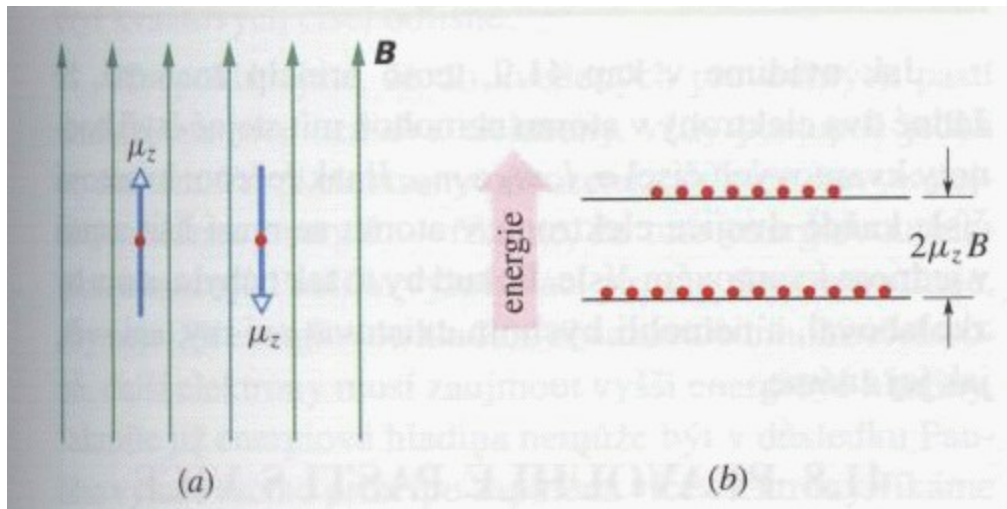
Je-li proton v magnetickém poli B orientovaném podle jedné z os (npř. z), průmět spinového magnetického momentu bude orientován shodně s B , nebo nesouhlasně.



Obr. 4. Magnetické dipóly v látce s vnějším magnetickým polem [3]

Energie opačně orientovaných μ se liší o energii $2\mu_z B$

To je energie potřebná k převrácení magnetického dipólu v homogenním magnetickém poli. Stav s nižší energií má μ_z má směr souhlasný s B , stav s vyšší energií μ_z má směr opačný.



Obr. 5. Energetické hladiny magnetických dipólových momentů [3]

Příklad - kapka vody^[3]:

Vložíme-li kapku vody do homogenního magnetického pole B , mají protony atomů vodíku μ_z orientován souhlasně, nebo nesouhlasně.

Budeme-li na kapku vody působit střídavým elektromagnetickým polem o frekvenci f , dojde k zvýšení energie μ_z s nižší energií, který přejde na μ_z s vyšší energií. Zároveň se změní i orientace u μ_z s původně nižší energií.

Pro převrácení magnetického dipólu potřebujeme, aby energie střídavého magnetického pole byla rovna rozdílu energií magnetických dipólů (princip rezonance).

Můžeme tedy napsat rovnici:

$$hf = 2\mu_z B \quad \{1\}$$

Po přechodu magnetického dipólu s nižší energií na μ_z s vyšší energií se tento magnetický dipól může vrátit na svou původní energetickou hladinu. Při tomto procesu uvolní stejnou energii jakou přijal po přejítí do vyšší energetické hladiny. Tato energie se projeví ve formě fotonu.

Vždy bývá více protonů v nižším než ve vyšším energetickém stavu, proto můžeme měřit absorpci energie v elektromagnetického pole.

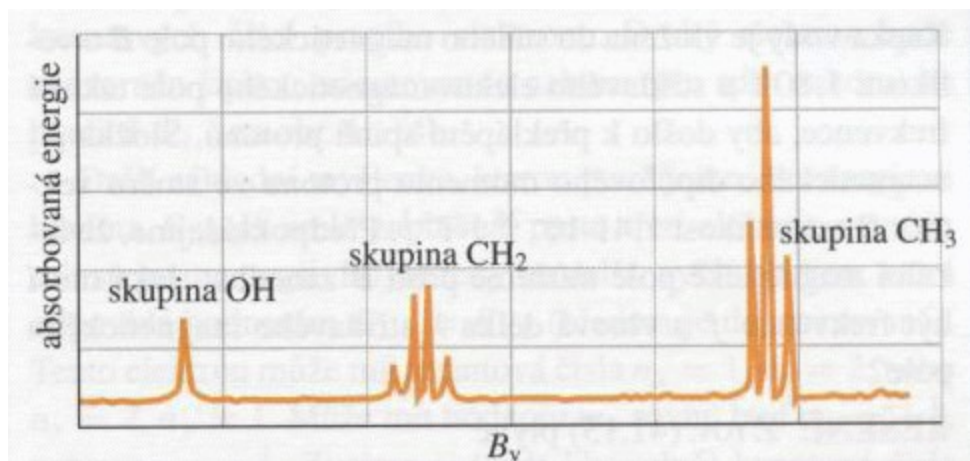
Magnetické pole B není ve skutečnosti rovno skutečnému magnetickému poli B_v . Je nutné přidat magnetické pole způsobeno magnetickými momenty atomů jader v blízkosti daného

protonu.

$$hf = 2\mu_z(B_v + B_l) \quad \{2\}$$

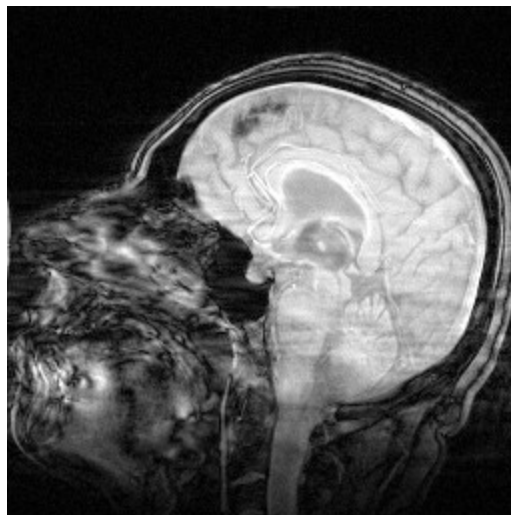
Při NMR je většinou frekvence neměnná a magnetické pole B je proměnlivé. Dojde-li ke splnění podmínek $\{1\}$ rovnice na cívce, zaznamenáme absorpční pík.

NMR je základem analogické metody vhodné k určování neznámých látek např. ethanol. Jednotlivé píky na obr. odpovídají překlopení spinů protonů.



Obr. 6. Výsledná křivka pro NMR ethanolu-spektrum 1H [3]

Na principu NMR je založena i zobrazovací technika NMR tomografie (MRI z ang. Magnetic Resonance Imaging). Tato technologie se používá v lékařské diagnostice. Protony v lidském těle jsou obklopeny různými magnetickými poli. Při působení vnějšího magnetického pole se tyto rozdíly projeví při počítačovém zobrazení podobně jako zobrazení u klasického rentgenu. Navíc ještě záleží na hustotě látek.

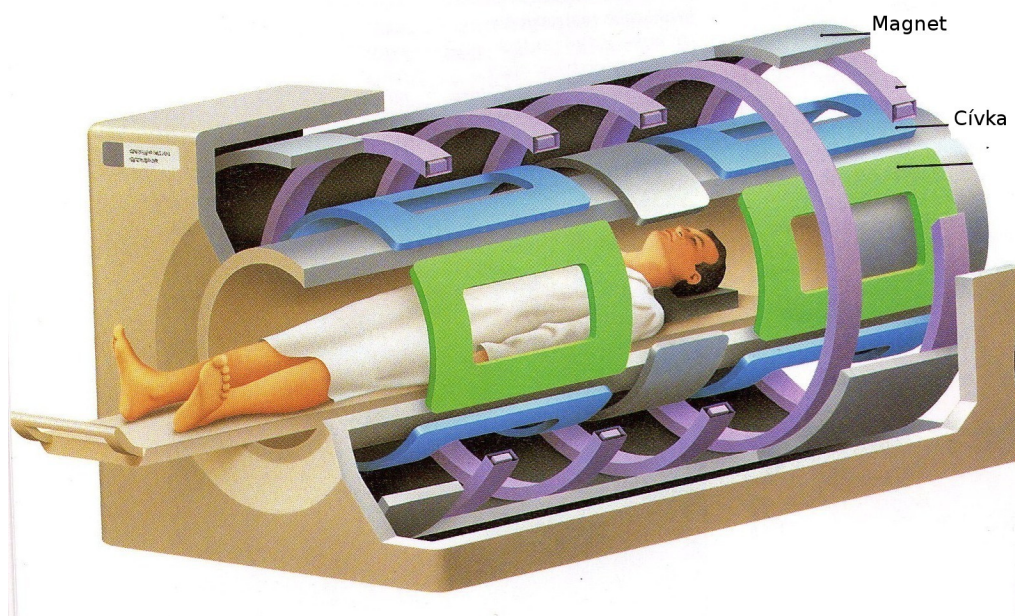


Obr. 7. Snímek lebky pomocí NMR tomografie

Použití NMR

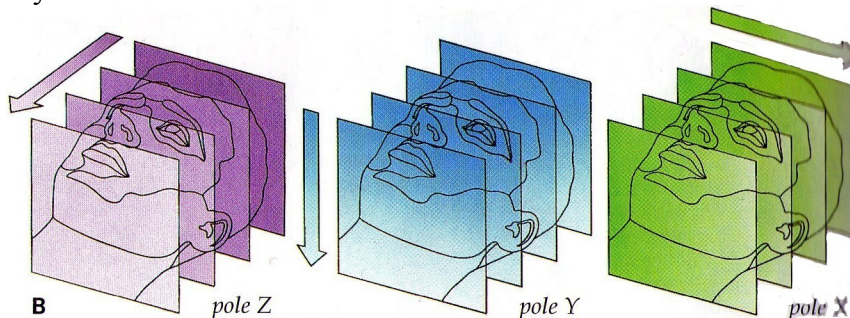
Jak už bylo řečeno v úvodu, NMR se používá zejména v lékařství a chemii. V lékařství tato technologie, tedy přesněji technologie MRI, představuje dnes už nepostradatelnou součást diagnostiky. Správně bychom měli používat termín – zobrazování nukleární magnetickou rezonancí – ale pod vlivem studené války byla v 70. letech averze ke slovu „nukleární“ tak silná, že toto slovo z odborného názvu vypadlo. Jedinečnost MRI spočívá v možnosti zobrazovat i měkké tkáně, což např. rentgen nedokáže (záření měkkými tkáněmi projde). MRI

je možné použít díky tomu, že protony jsou ve všech látkách bez rozdílu hustoty, skupení apod. Obraz pořízený pomocí MRI je oproti klasickému rentgenu ostřejší a kvalitnější. Rentgen je ale stále důležitou diagnostickou metodou. Pro svou činnost potřebuje ionizující záření, toto záření není to nejlepší pro náš organizmus a ve velkém množství škodí. To je důvod, proč se pracovníci s rentgenem musí chránit olověnými přepážkami. Ale ani NMR není samospasitelnou. Jednou z hlavních nevýhod MRI je samotná podstata činnosti NMR. NMR se projevuje jen při velkém magnetickém poli. Bez tohoto pole by MRI nefungovalo. Lidé s kardiostimulátorem nebo kovovými náhradami v těle nemohou být tímto přístrojem vyšetřeni. Další nevýhodou je vysoká pořizovací cena a také vysoké náklady na provoz. Znárodnění takového zařízení:



Obr. 8. Znárodnění MRI zařízení [6]

Pro třírozměrný obraz se musí zaznamenat obraz ve všech třech osách:



V chemii je NMR nenahraditelnou analytickou metodou. Bez větší námahy můžeme zjistit složení dané látky. Pro vyhodnocení výsledků musíme mít patřičné příslušenství. Při NMR zaznameneáme absorpční píky. Jen podle těchto píku však nic nezjistíme. K určení molekul látky je zapotřebí známý vzorek.

Pozornost se soustředí také na zajímavé makromolekuly, především jde o peptidy a proteiny, které řídí biologické procesy v živých buňkách.

NMR se využívá i ve farmaceutickém průmyslu pro zkoumání účinků nových látek a jejich vývoj. Slouží především pro popis fázového složení aktivních substancí řady léků, ke kontrole čistoty produktu. Také zkoumání farmakokinetických vlastností látky (především rozpustnost), která jsou v závislosti na krystalické formě, má své opodstatnění. Ovlivňují účinnost léků a při nevhodné krystalické formě by mohlo dojít k předávkování.

Rozvoj NMR jde ruku v ruce s rozvojem informačních a komunikačních technologií, neboť

výsledky jsou zpracovávány a zobrazovány počítačovými metodami.

Návrh pokusu s NMR

Na základě znalostí teorie NMR byl navržen pokus. Jak je už zmíněno v teorii, pro NMR je zapotřebí silné magnetické pole a oscilační cívka o frekvenci, která vytváří další magnetické pole. Samozřejmě dále musíme mít záznamové zařízení např. osciloskop, na kterém zaznamenáme absorpční pík. Bohužel pokus nebyl uskutečněn. Aparatura nebyla sestavena, protože magnet o tak velkém magnetickém poli jsem nesehnal.

Vlastnosti magnetu pro NMR

Magnet pro NMR je jednou z nejdůležitějších částí samotné aparatury pro magnetickou rezonanci. Zároveň je také jedním z největších problémů při sestavování aparatury NMR. Magnetické pole pro NMR musí splňovat nejen požadavek velikosti řádově jednotky *Tesla*, ale také musí být dostatečně homogenní. Nesplnění dostatečné velikosti povede k tomu, že nedojde k rezonanci (nebudeme schopni kmitat na tak velkou frekvenci viz. vzorec {1}). Při nesplnění druhé podmínky homogenity pole sice rezonance nastat může, ale my ji s velkou pravděpodobností nerozeznáme, a když ano, tak křivka rezonance bude neostrá.

Magnety pro NMR lze rozdělit do dvou základních skupin:

a) Elektromagnety

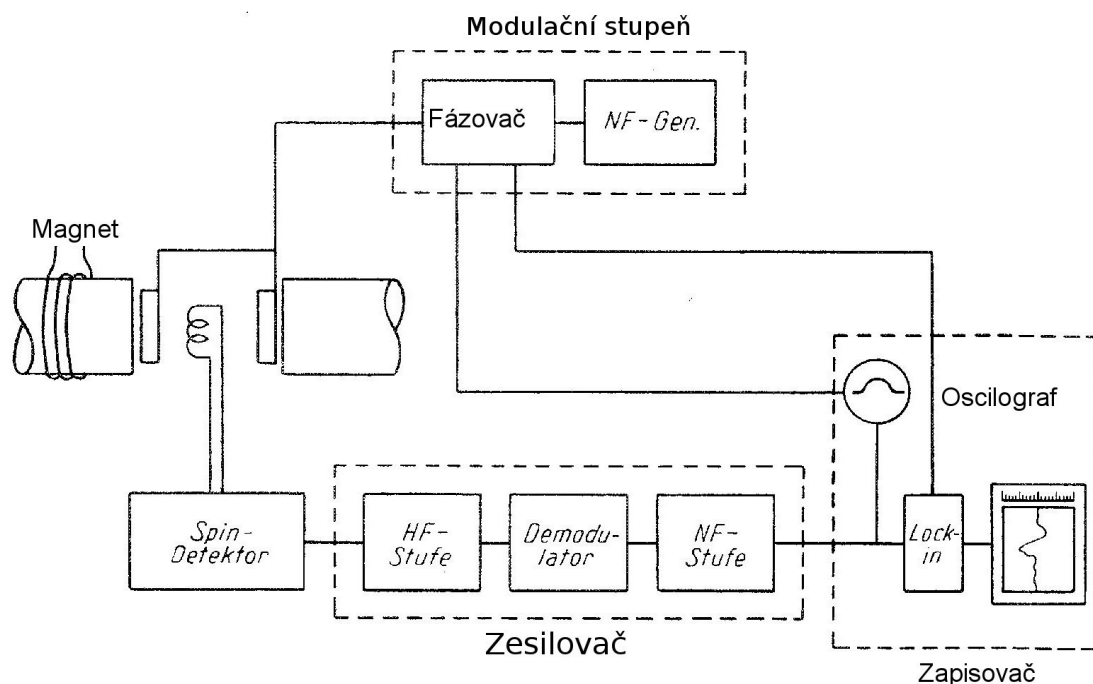
Cívky s jádrem, kterými necháme procházet velký proud. Tyto cívky kolem sebe vytvoří magnetické pole. Velkým problémem při sestavení magnetického pole tímto způsobem je velká energetická náročnost. Potřebujeme velký a konstantní zdroj elektrické energie.

b) Permanentní magnety

Permanentní magnety pro NMR mají tu nevýhodu, že potřebujeme velké magnetické pole řádově jednotky *Tesla*. Takto silné magnety jsou poměrně drahé (na finanční možnosti školy). Jako permanentní magnety se dají použít feritové a neodymové magnety. Pro náš pokus by bylo vhodné použít neodymové magnety pro vytvoření silného a homogenního magnetického pole. To v praxi znamená dva silné magnety za sebou oddělené vzduchovou mezerou. V této vzduchové mezeře docílíme obou podmínek na magnetické pole pro NMR – homogenita a dostatečná síla.

Popis aparatury

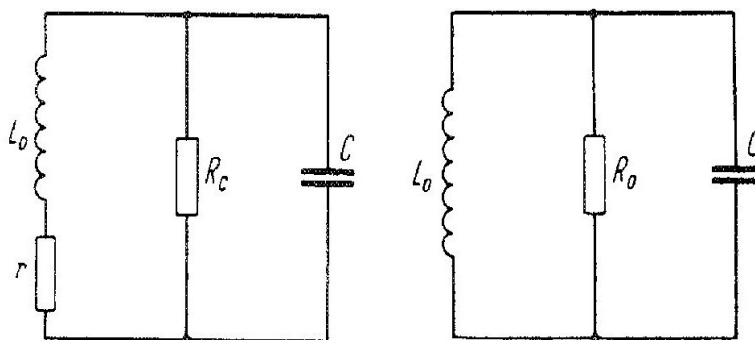
Experimentální zařízení má tyto části: magnetické pole s modulací, modulátor pro magnetické pole (NF generátor), detektor spinu, zesilovač, amplitudový detektor, „registrátor“ zařízení, díky kterému můžeme dále zpracovávat signál NMR. V našem případě by byl nejvhodnější oscilograf/osciloskop.



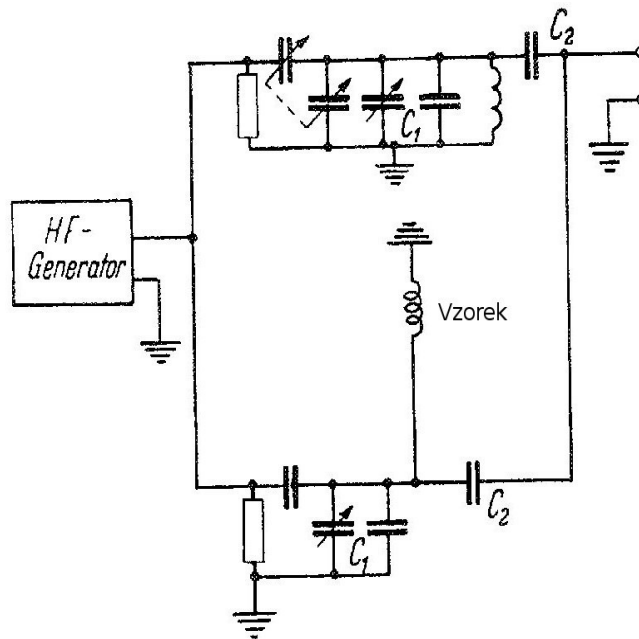
Obr. 9. Návrh experimentálního zařízení ^[7]

Detekce překlopení spinů (rezonance)

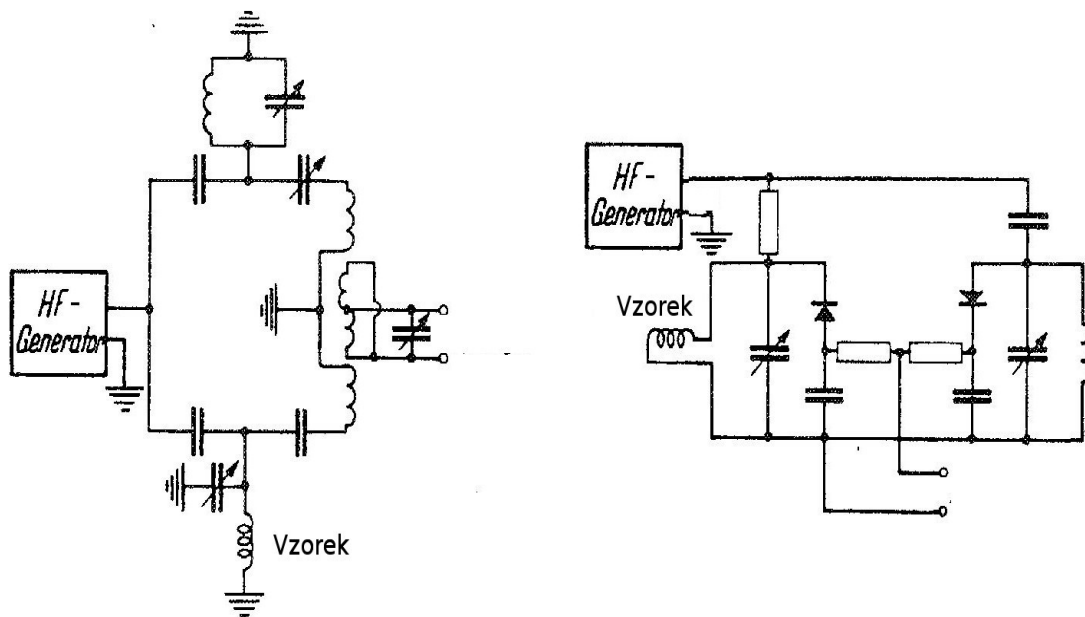
Nejjednodušší způsob jak detekovat rezonanci při NMR je použití jednoduchého LC rezonančního obvodu (paralelně spojená cívka s kondenzátorem). Zkoumaný vzorek je vložen do cívky a cívka i se vzorkem do magnetického pole s modulací. Při splnění podmínek nukleární magnetické rezonance se změní vlastnosti jádra cívky (vzorku). Tuto změnu zaznameneáme pomocí rezonančního obvodu. Dalším způsobem detekce překlopení spinu je použití složitějšího zapojení. Toto zapojení má sice stejnou cívku jako v předešlém případě, ale tato cívka není spojena paralelně s kondenzátorem. V tomto případě je zdrojem kmitů vysokofrekvenční generátor.



Obr. 10. Možné zapojení rezonančních obvodů ^[7]



Obr. 11. Návrh spin detektoru ^[7]



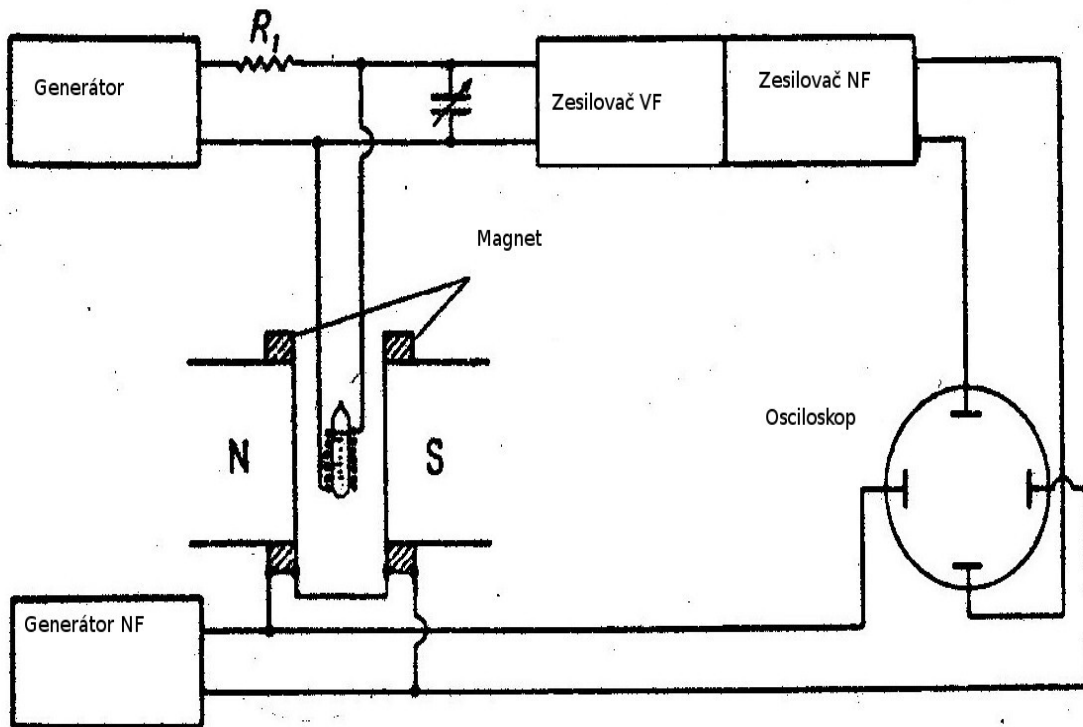
Obr. 12. Jiné varianty spin detektoru ^[7]

Amplitudový detektor

Signál, který vychází ze spin detektoru, je přiváděn na vstup amplitudového detektoru. Toto zařízení je zapojeno tak, aby zpracovalo signál při překlopení spinu. Signál je až do překlopení sinusový. Překlopení spinu se projeví na tomto signálu tak, že se zvýší jeho amplituda. Amplitudový detektor na tuto změnu reaguje a dále se signál změní na pík v místě rezonance. Signál z amplitudového detektoru je pak dále upraven (zesílen) a přiveden na

vertikální kontakty osciloskopu. Na horizontální kontakty je přiveden signál NF generátoru z modulače magnetu. Na osciloskopu se pak zobrazí pík představující překlopení spinů.

Uvnitř magnetického pole vytvořeného magnetem by se nacházel zkoumaný vzorek, např. kapka vody. Kolmo na toto magnetické pole je umístěna cívka, která nám zajišťuje kolmou složku magnetického pole. Na tuto cívku z rezonančního obvodu je připojen osciloskop. Před tento zobrazovací člen lze zařadit zesilovač signálu pro lepší viditelnost na zobrazovacím zařízení. Na obr.9 je blokové schéma podobné, ale složitější aparatury.



Obr. 13. Aparatura pro pokus s NMR

Průběh pokusu

Do magnetického pole umístíme vzorek, tedy kapku vody. Magnetické dipólové momenty vody se naklopí souhlasně, nebo opačně se směrem magnetického pole. Na rezonančním obvodu nastavíme potřebnou velikost frekvence, řádově MHz. V tomto okamžiku jsou podmínky pro rezonanci splněny. Na zobrazovací technice zaznamenáme projev rezonance v podobě absorpčního píku.

Pro představu místo výsledků neuskutečněného pokusu uvedu příklad pro výpočet frekvence pro rezonanci.

Do magnetického pole o velikosti 1,8 T vložíme kapku vody. Magnetický dipólový moment je $1,41 \cdot 10^{-26} \text{ JT}^{-1}$. Spočítejte frekvenci f tak, aby došlo k rezonanci. Určete vlnovou délku.

Z rovnice popsané v teorii můžeme psát:

$$f = \frac{2 \mu_z B}{h} = \frac{2(1,41 \cdot 10^{-26} \text{ JT}^{-1})(1,8 \text{ T})}{(6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js})} = 76,6 \text{ MHz}$$

Odpovídající vlnová délka pro tuto frekvenci je:

$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{3,00 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}}{7,66 \cdot 10^7 \text{ Hz}} = 3,92 \text{ m}$$

Z výsledků je patrné, že pro NMR je zapotřebí nejen silné magnetické pole, ale i frekvence z oblasti VHF (velmi vysoké frekvence). S frekvencí je spojena i vlnová délka, která se pohybuje v oblasti metrových vln.

Experimentální měření

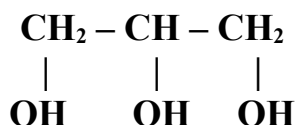
Z důvodů výše uvedených se mi nepodařilo postavit NMR aparaturu, tak jsem hledal náhradní řešení, abych mohl provést konkrétní měření. Naskytla se mi možnost využít zařízení v laboratoři NMR spektroskopie vysokého rozlišení na MFF UK v Praze. Experimentálně jsme měřili dva vzorky – glycerol a ethanol (třešňovice 2006).

V laboratoři jsme měl možnost se podrobně seznámit s NMR aparaturou.

Laboratoř NMR spektroskopie vysokého rozlišení

Laboratoř je vybavena NMR spektrometrem Bruker Avance 500 pracujícím s magnetickým polem 11.75 T (^1H rezonanční frekvence 500 MHz). Přístroj je vybaven pro měření v kapalně fázi za současného ozařování až na třech radiových frekvencích (trojitá rezonance, např. ^1H , ^{15}N , ^{13}C). Přístroj také umožňuje měření NMR spekter v pevném stavu za podmínek rotace vzorku pod magickým úhlem (MAS).^[8]

První měřený vzorek byl glycerol neboli glycerín, systematickým názvem propan-1,2,3-triol, hygroskopická bezbarvá viskózní kapalina bez zápachu, sladké chuti.

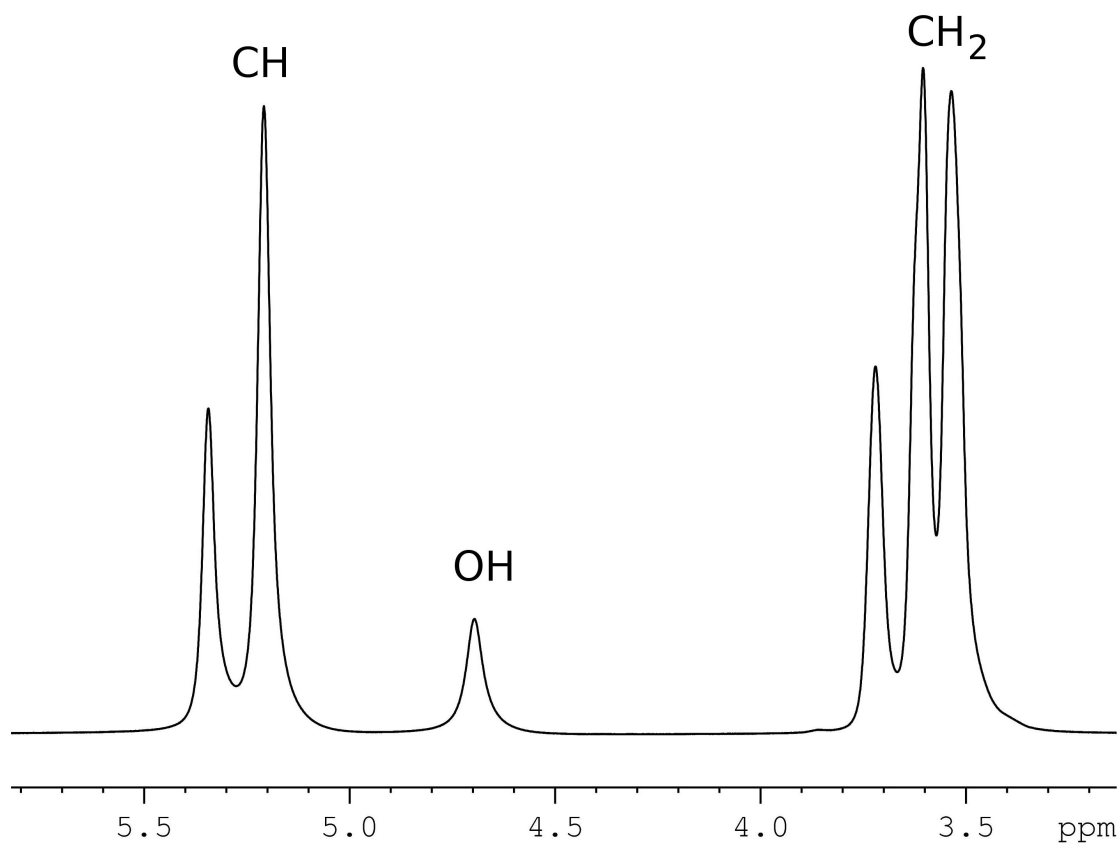


Pro náš pokus jsme glycerol naředili vodou v poměru 19:1. Roztok jsme z pipety vypustili do malé zkumavky a uzavřeli gumovou zátkou. Zkumavku se vzorkem určeným k měření jsme vložili do větší zkumavky a tu vyplnili deuterizovanou vodou (deuterium ^2H), která slouží ke kalibraci zařízení. Kdybychom použili obyčejnou vodu H_2O , byl by výsledek měření zkreslen, protože by se nám vodík ^1H projevil ve výsledku.

Takto připravený vzorek zasuneme do spektrometru a spustíme kalibraci a následně měření. Výsledky se zobrazí na monitoru připojeného PC a lze je i vytisknout.

Zobrazovat můžeme echo nebo rovnou s použitím Fourierovy transformace frekvenční NMR spektrum, ve kterém nacházíme jednotlivé signály, které lze přiřadit jednotlivým atomům a strukturním jednotkám v molekule. Takovéto spektrum je vlastně zobrazení molekuly a její struktury.

Viz graf

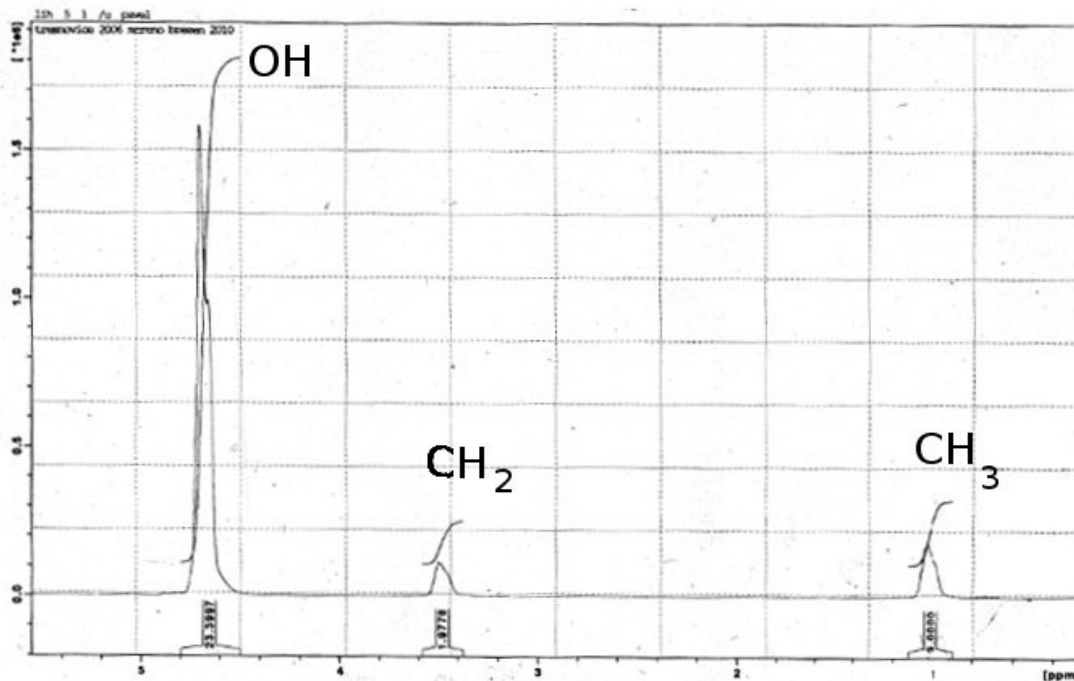


Obr. 14. Frekvenční spektrum glycerolu

Druhé měření bylo provedeno na třešňovici. Cílem měření bylo určit procento alkoholu v roztoku. Postup měření byl stejný jako v prvním případě. Z časových důvodů byla provedena pouze rychlá kalibrace, což se projevilo na výsledcích měření. Křivky frekvenčního spektra jsou deformované. Křivky odpovídají postupně skupinám OH-CH₂-CH₃.

Za pomoci integrálního počtu (plocha pod křivkou) získáme plochy jednotlivých skupin. Porovnáním se vzorkem čistého ethanolu (viz obr. 6) určíme kolikanásobně je skupina OH zastoupená víc a vypočteme procento alkoholu v roztoku. V našem případě je třešňovice asi 40%.

Viz graf



Obr. 15. Frekvenční spektrum třešňovice

Dalším pracovištěm, kde využívají NMR spektrometrii a které jsem měl možnost navštívit, je Společná laboratoř NMR spektroskopie ve Výzkumném ústavu organických syntéz Pardubice (VUOS), vedená Prof. Ing. Antonínem Lyčkou, DrSc. Pan profesor mi ochotně vysvětlil použití NMR spektroskopie v chemické praxi a provedl mě laboratoří, která využívá pro své potřeby spektrometr Bruker Avance 500 (stejně jako na MFF UK), který je společný s Univerzitou Hradec Králové. Pouze pro potřeby VUOS používají Bruker AMX 360, dvoukanálový NMR spektrometr s třemi sondami.

Hlavní náplní práce NMR laboratoře je měření vzorků chemikálií vyráběných na zakázku. Dalším programem je vědecká činnost.



Obr. 16. Laboratoř vysokého rozlišení MFF UK Praha ^[8]

Závěr

Tato práce měla za cíl popsat metodu NMR, poukázat na její široké využití. Zvláště pro laiky je dnes její nejznámější použití v medicíně, kde se bude jistě i v budoucnu uplatňovat především v diagnostice.

Postavit popisovanou aparaturu je poměrně materiálně a finančně náročné, jen cena vhodných magnetů by byla asi 5500Kč. Proto jsem využil možnosti měřit vzorky na profesionální aparatuře v NMR laboratoři MFF UK. Z naměřených hodnot je patrné, že metoda NMR spektrometrie má široké využití jak ve vědě, tak v praxi. Celkem jednoduše se na základě frekvenčního NMR grafu dá určit složení chemikálie. Jednoduše však znamená mít výborné znalosti chemie, abychom mohli v první fázi čtení grafu odvodit chemickou skupinu a chemické vazby.

Využití NMR v medicíně jsem se nevěnoval záměrně, protože navštívit pracoviště magnetické rezonance v lékařském zařízení je poněkud složitější.

Věřím, že práce alespoň částečně splnila očekávání a podala ucelený přehled o využití NMR a nastínila možnosti postavení aparatury pro pokus. Návštěva obou specializovaných pracovišť byla pro mě velkým přínosem.

Seznam použité literatury

- [1]BRUS, Jiří: *NMR spektroskopie, principy a aplikace v biologii, chemii a lékařství*
(www.otevrena-veda.cz)
- [2]ČERNÁ, Jaroslava: NMR Imaging, in *Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*,
ročník 49, 2004
- [3]HALLIDAI, D.-RESNICK, R. - WALKER, J: *Fyzika, Část pátá Moderní fyzika*,
článek: Jaderná magnetická rezonance,
VUT Brno
- [4]PEKÁREK, Luděk: *Vysokofrekvenční fyzika*, SPN Praha
- [5]TINTĚRA, Jaroslav: *Základy MRI*, 2002
- [6]*Vědecké objevy v praxi*, kolektiv autorů, překlad Arnošt Kotyk, Praha 1998
- [7]LÖSCHE, A.: *Kerninduktion*, Berlín 1957
- [8]<http://physics.mff.cuni.cz/>