

NMR I

Martin Dračínský

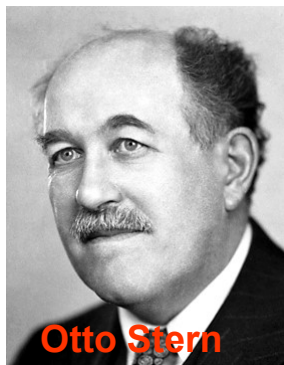
dracinsky@uochb.cas.cz

Využití NMR

- určování chemické struktury – přírodní látky, organická syntéza
 - konstituce, konformace, konfigurace
 - ověření čistoty
- studium dynamických procesů
 - reakční kinetika
 - chemické a strukturní rovnováhy
- určení prostorové struktury
 - peptidy a proteiny
 - oligonukleotidy a DNA, RNA
 - komplexy
 - polysacharidy
- navrhování léčiv – drug design
 - Structure-Activity-Relationship
- lékařství
 - zobrazování měkkých tkání – anatomie, patologie
 - funkční zobrazování
 - in vivo spektroskopie
- fyzika – struktura materiálů
- potravinářství
 - quality control – spektroskopie, zobrazování
 - falšované potraviny (alkohol, džusy, med,...)
- metabolomika

Nobelovy ceny a NMR

1943



Otto Stern

*magnetický moment
protonu*

1944



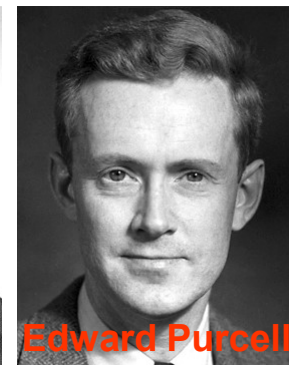
Isidor Rabi

*první měření magnetického
momentu atomového jádra*

1952



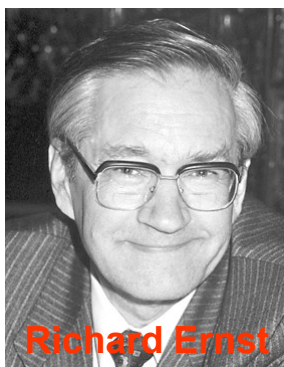
Felix Bloch



Edward Purcell

*rozvoj metod měření precese magnetického
momentu a objevů s tím spojených*

1991



Richard Ernst

*metodologie NMR vysokého rozlišení
(2D experimety)*



2002



Kurt Wüthrich

*NMR metodika určování prostorové
struktury biomolekul*

2003



Peter Mansfield

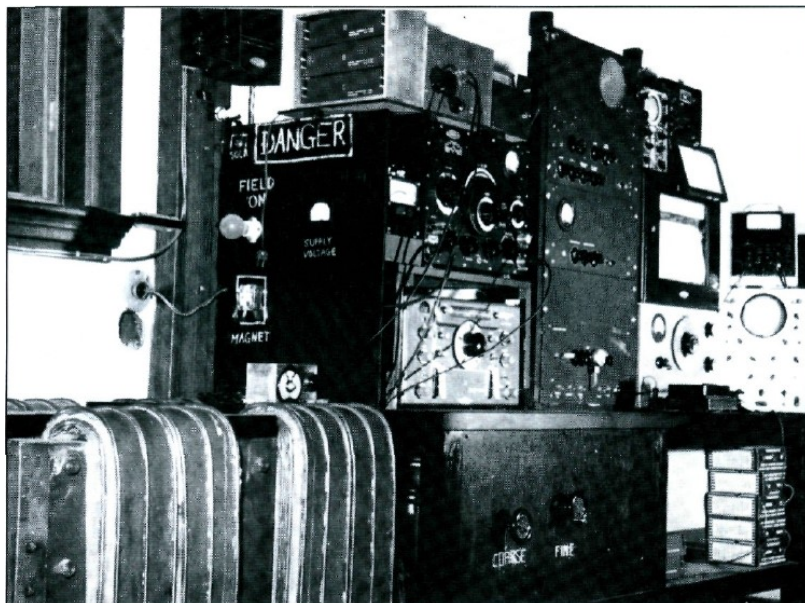


Paul Lauterbur

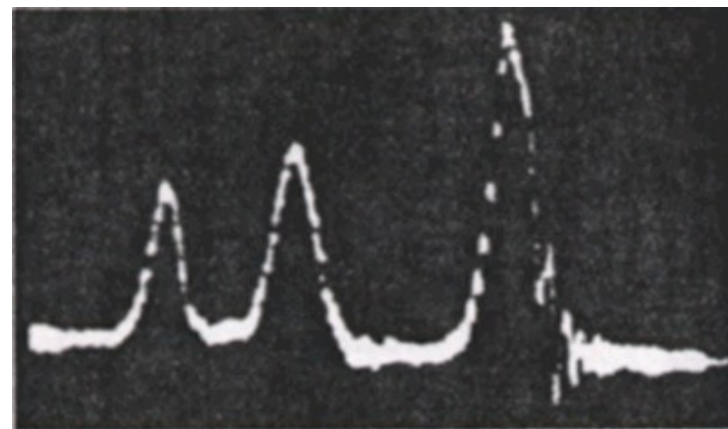
*zobrazování magnetickou rezonancí
(MRI)*

NMR

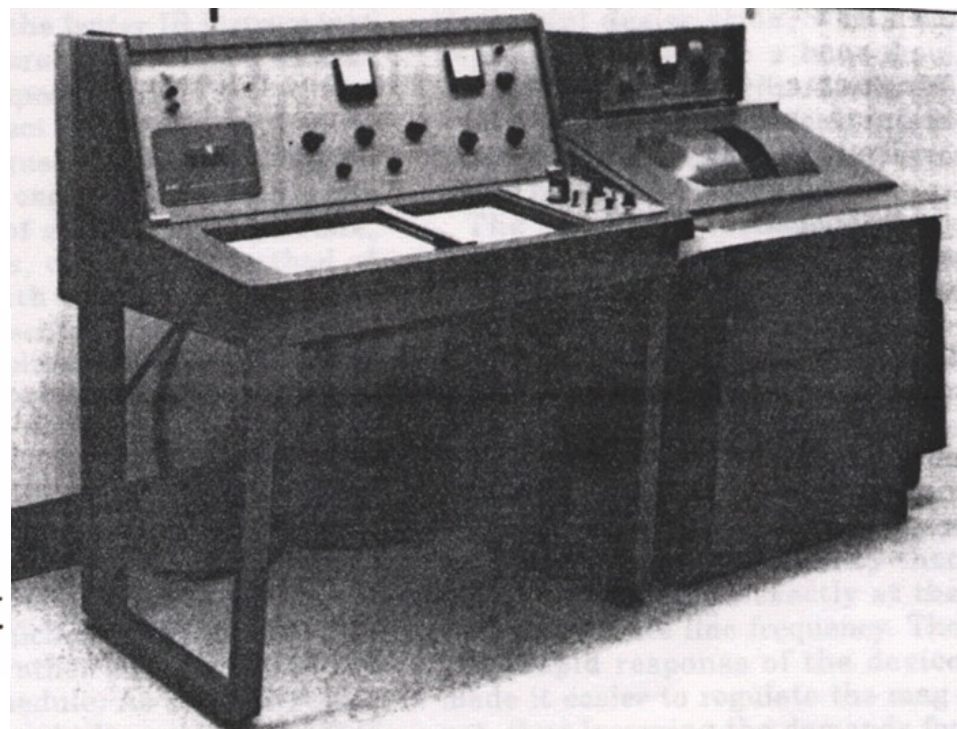
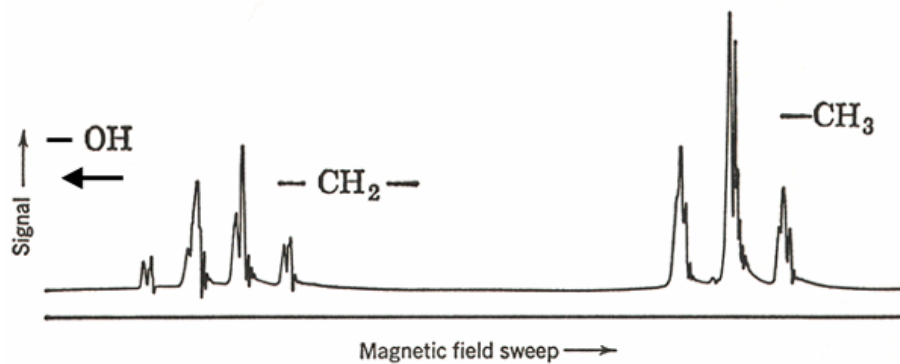
Purcell
1951



Early CW spectrometer built at Caltech in 1951 for the study of solids.



Varian 60 MHz spektrometr
1958



NMR



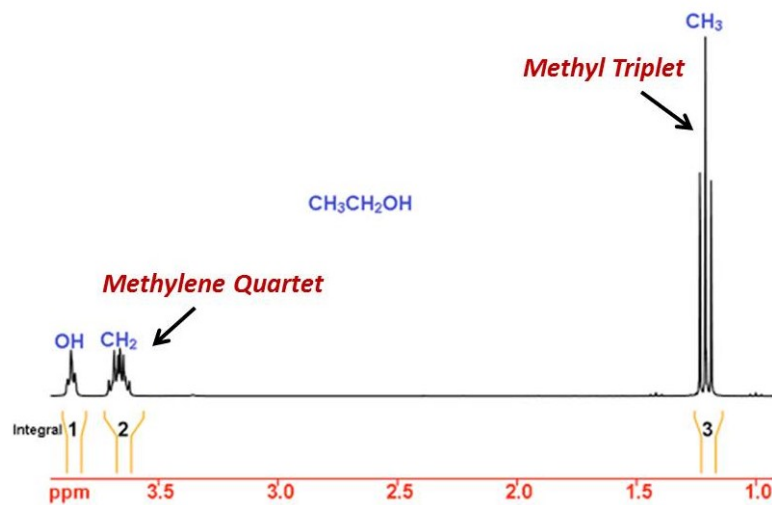
Bruker



Jeol

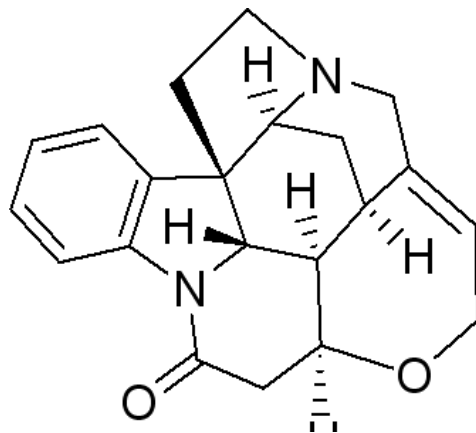


Varian / Agilent

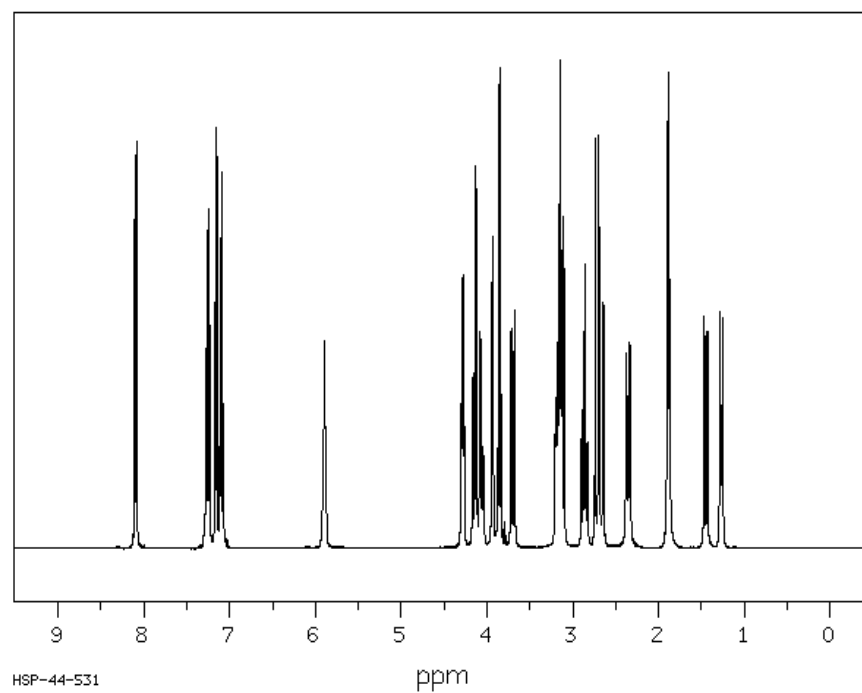
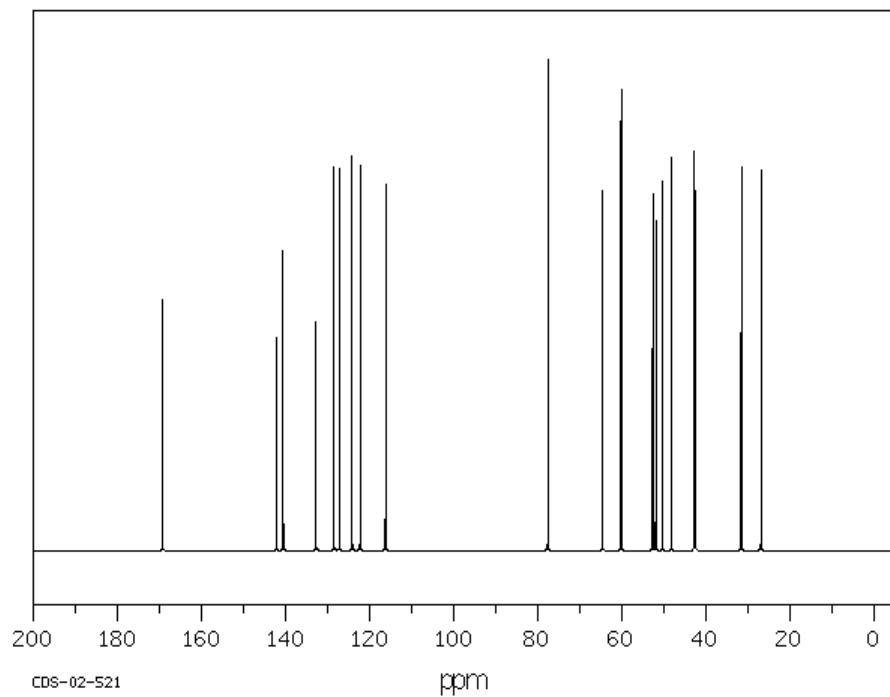


^1H NMR Spectrum of *ethanol* at 700 MHz

NMR pro chemiky

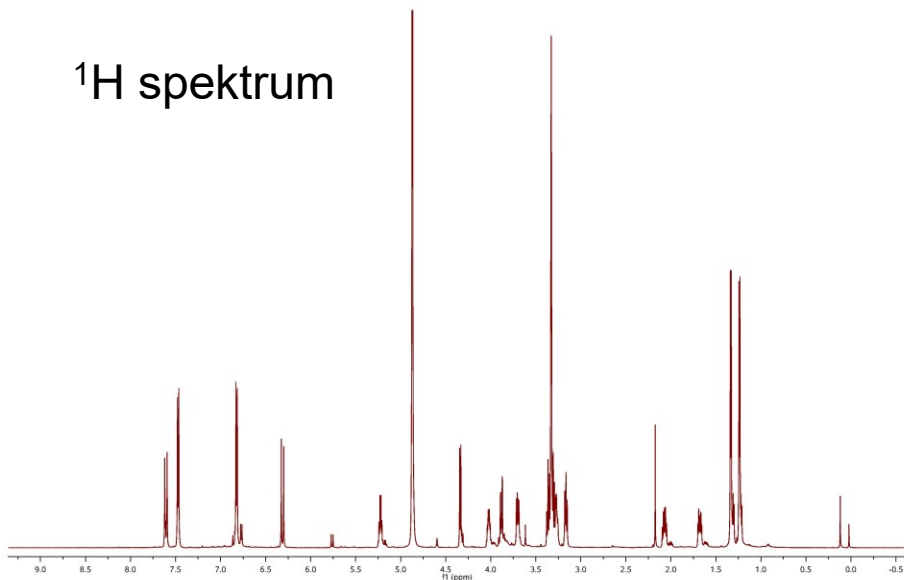


strychnin

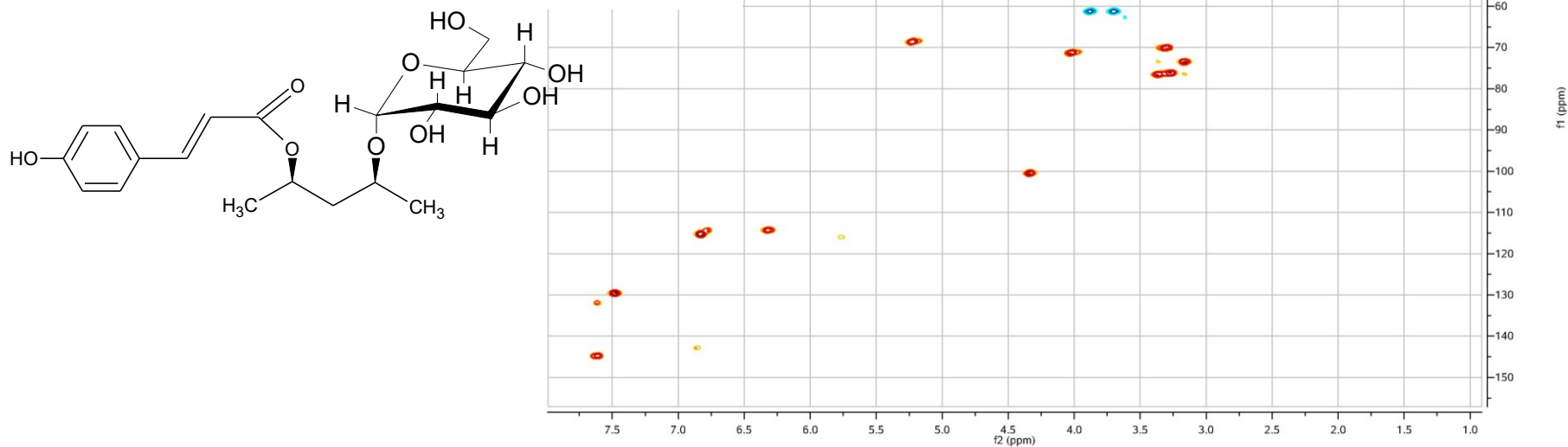


Vícerozměrná spektra

^1H spektrum



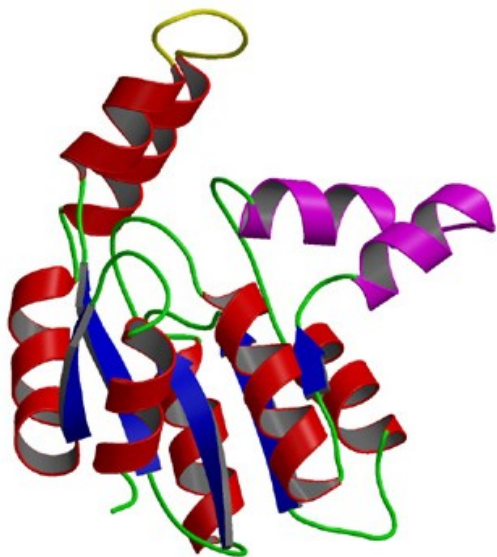
2D HSQC korelační spektrum



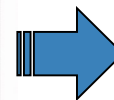
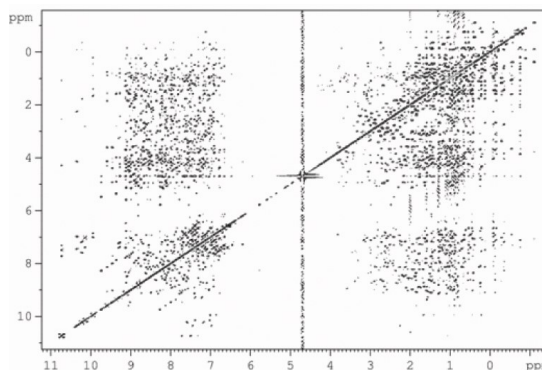
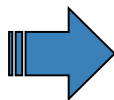
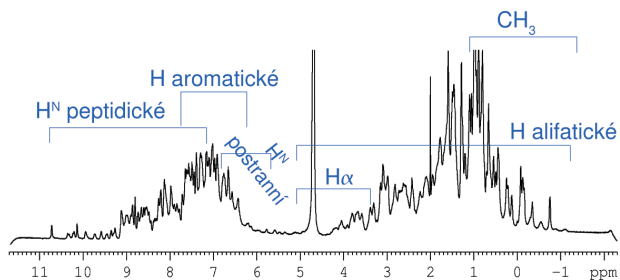
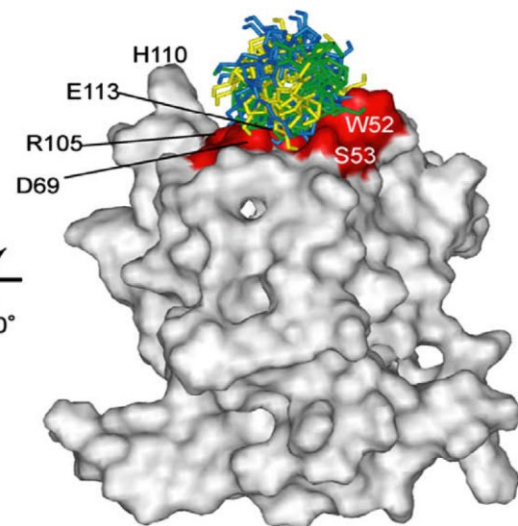
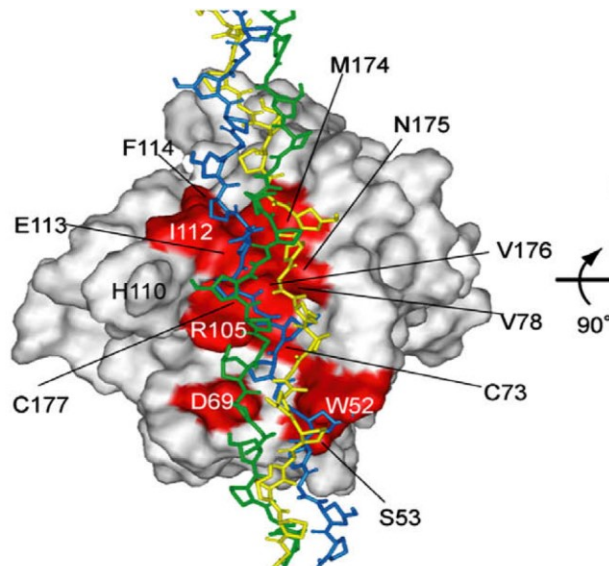
NMR biomolekul

Prostorová struktura molekul

Pohyblivost a lokální flexibilita struktury



Vzájemné interakce biomolekul



3D **4D**

zředění informace

Metabolomika

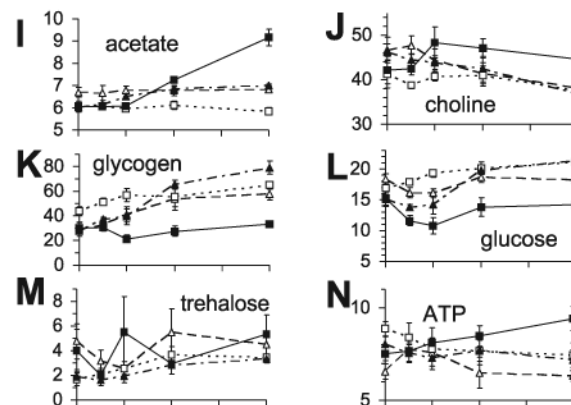
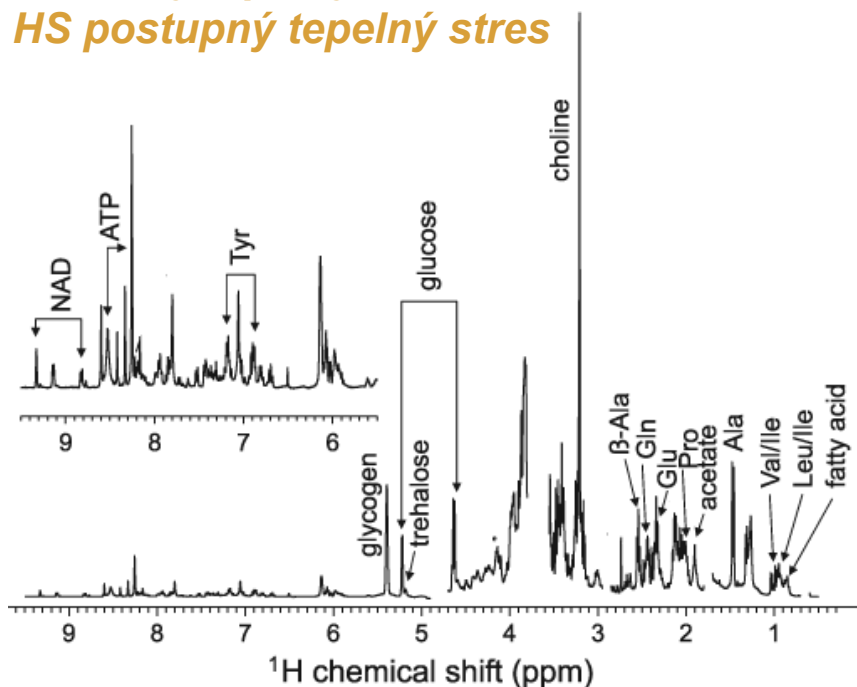
analýza změn složení metabolitů v reakci na tepelný stres *Drosophila melanogaster*

C kontrola

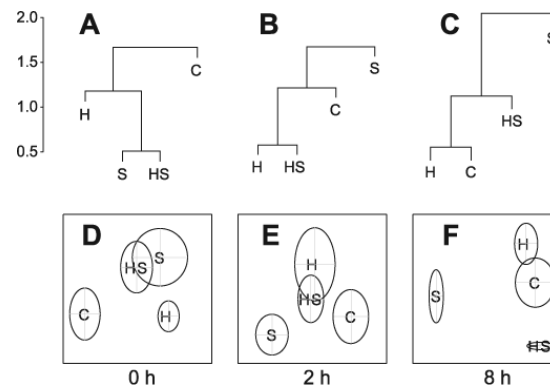
H malý tepelný stres

S velký tepelný stres (20% mortalita)

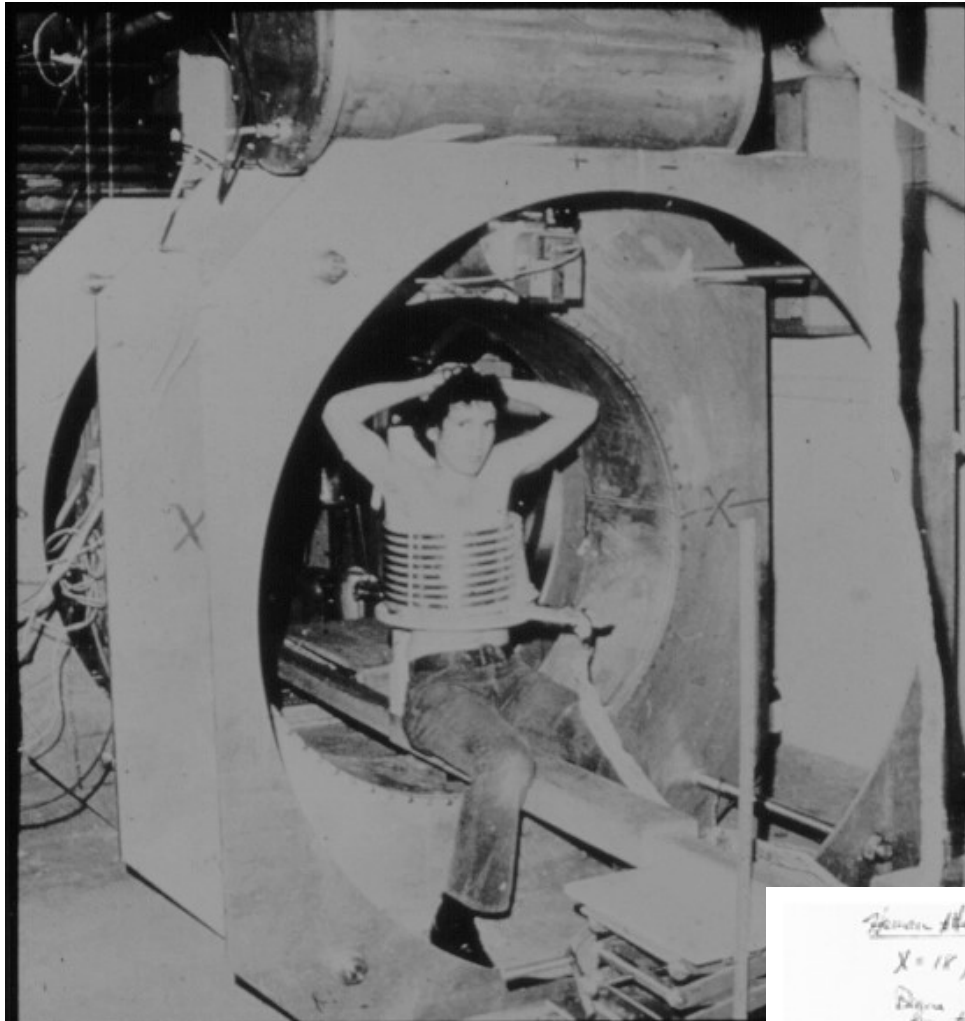
HS postupný tepelný stres



multikomponentní statistická analýza



MRI



**First successful NMR scan, July 1977
in Damadian's machine, patient Dr. Minkoff**

Human Image 11:03 PM 7/1/77

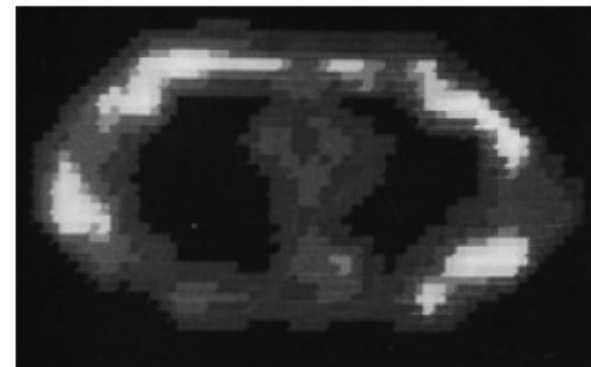
X=18, Y=2, Z=6%

*Image at 3% from bottom surface of
head to right lower corner*

FANTASTIC SUCCESS!

4:55 AM

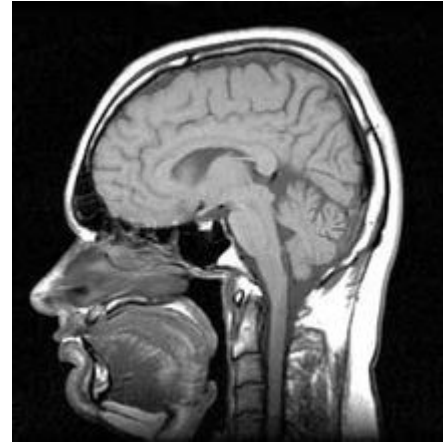
*First Human Image
Complete in Amazing Detail
Showing Heart
Lungs
Uterus
Musculature*



MRI



denes

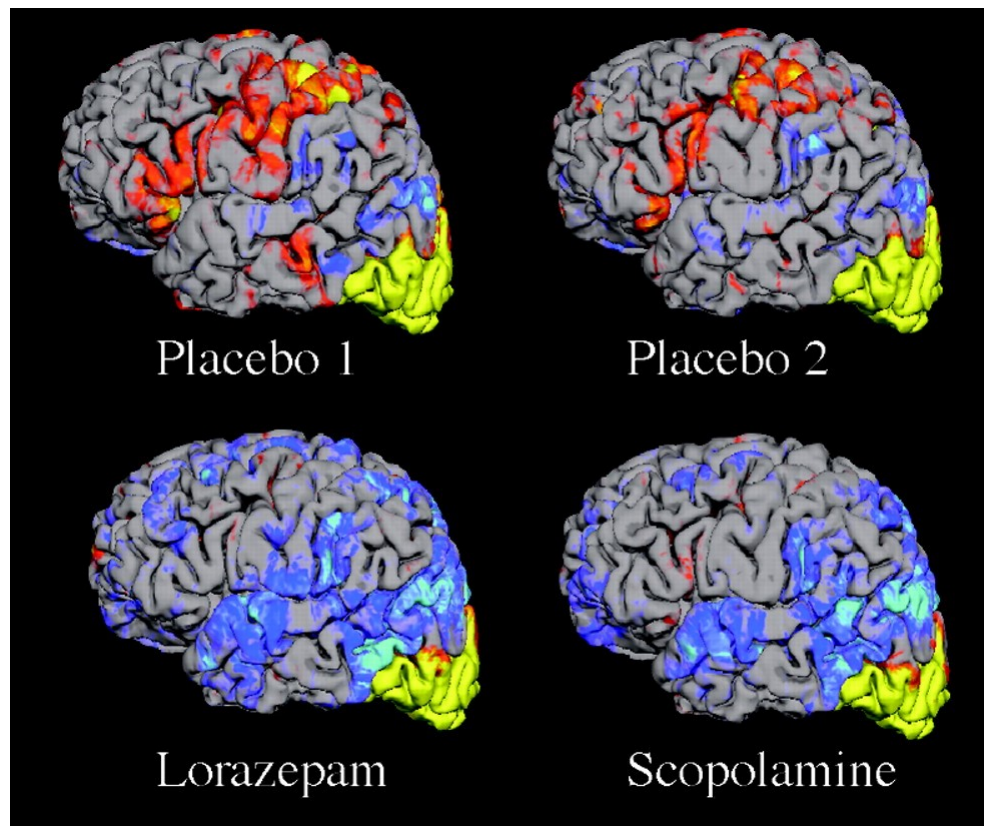


MRI

Angiografie



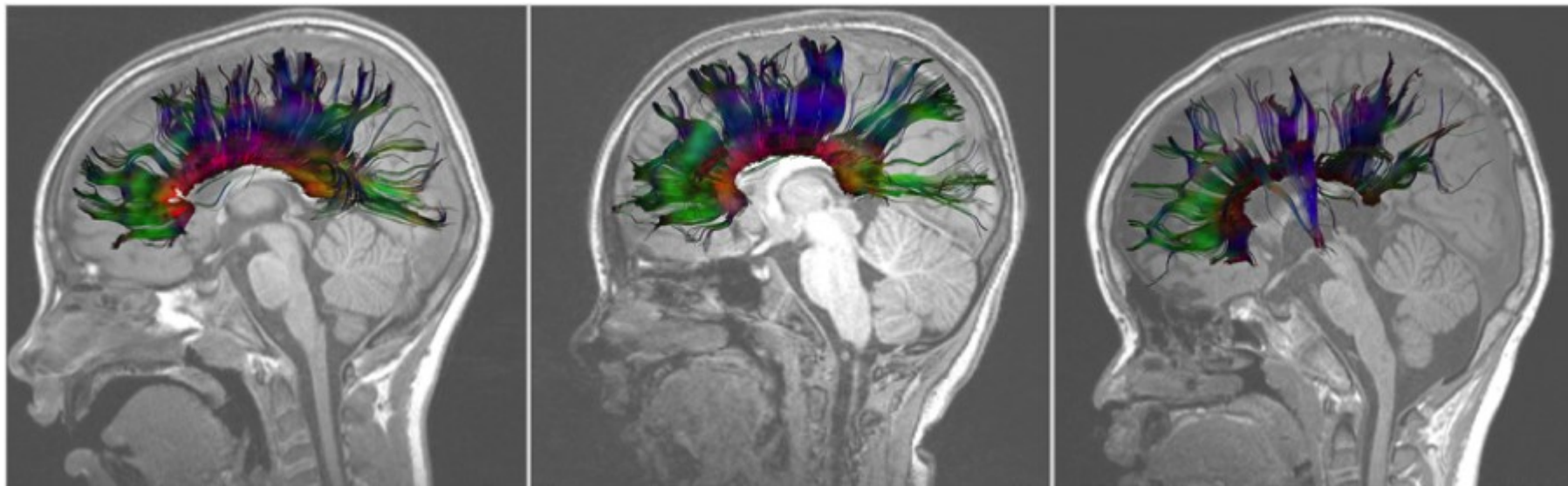
Funkční MRI



aktivace různých částí mozku při použití „drog pravdy“

MRI

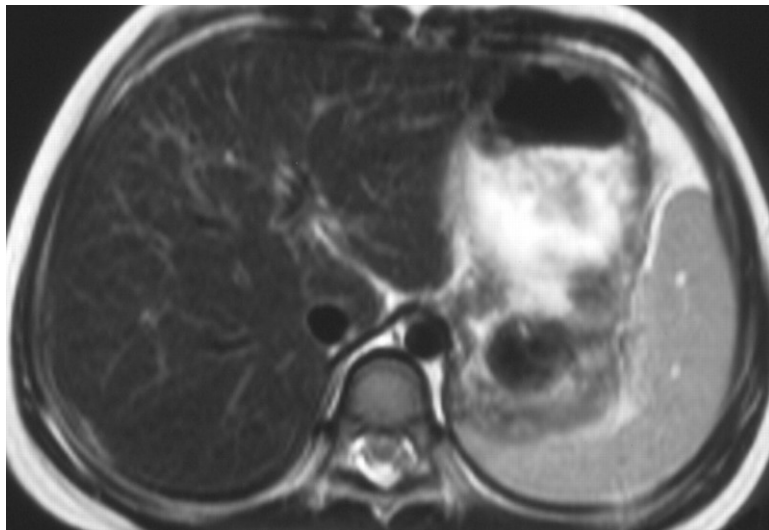
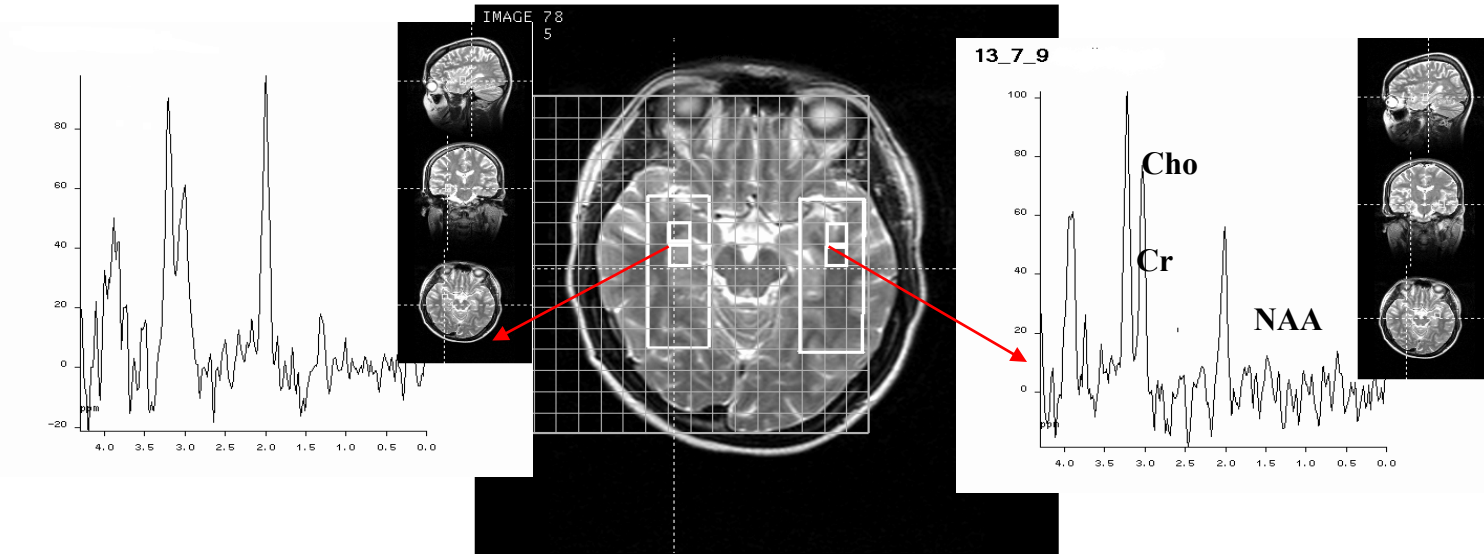
Sledování uspořádání neuronových vláken



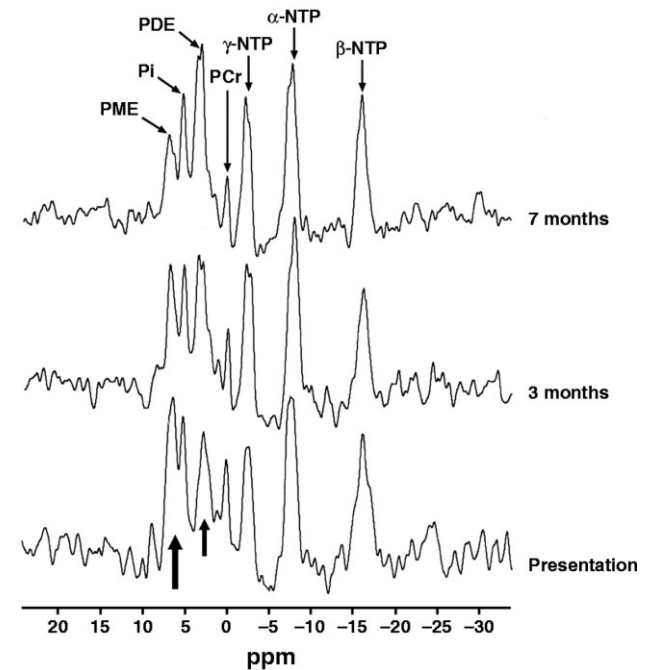
A view of autism: altered brain pathways, disordered white matter

J.M. Peters *et al.*, Academic Radiology 2012, 19 (1), 17-25.

in vivo MR spektroskopie

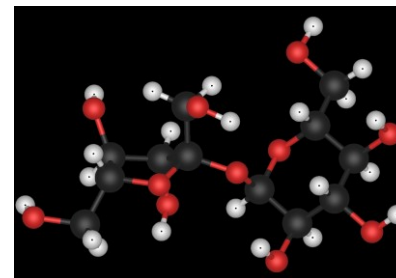


Wilson's disease



Sylabus

- základní principy NMR
- chemický posun, stínění
- uhlíkové chemické posuny
- interakční konstanty
- protonové chemické posuny
- vztah mezi spektrem a strukturou



Řešení spekter

Literatura

Böhm, Smrčková-Voltrová: Strukturní analýza organických sloučenin

S. Voltrová: Příklady pro cvičení ze strukturní analýzy organických sloučenin

Buděšínský, Pelnář: UOCHB: Fyzikálně – chemické metody 3: Nukleární magnetická rezonance

R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle: Spectrometric identification of organic compounds (2005)

P.J. Hore: Nuclear magnetic resonance

P.J. Hore, J.A. Jones, S. Wimperis: NMR: the toolkit

Friebolin: Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy

Günter: NMR Spectroscopy

Claridge: High-resolution NMR techniques in organic chemistry

...

Další zdroje

<https://nmr.group.uochb.cz/cs/kurz-nmr-i>

VŠCHT: NMR spektroskopie pro studium přírodních látek

www.vscht.cz/nmr/predmet/predmet-nmr.html

Různé kurzy v anglickém jazyce

www.cis.rit.edu/htbooks/nmr

www.cis.rit.edu/htbooks/mri/inside.htm (MRI)

...

Spectral Database for Organic Compounds:

http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng

Řešení NMR spekter:

<https://www3.nd.edu/~smithgrp/structure/workbook.html>

<http://www.vscht.cz/nmr/predmet/priklady/priklady.html>

<http://www.chem.ucla.edu/~webspectra/>