

Univerzita Karlova v Praze
Přírodovědecká fakulta
Katedra učitelství a didaktiky chemie

Studijní program: Chemie
Studijní obor: Učitelství chemie a biologie pro SŠ



Marie Tomanová

**Podpůrný materiál pro výuku zaměřenou na NMR
spektroskopii na středních školách**
**Support material for teaching NMR spectroscopy
at secondary schools**

Diplomová práce

Školitel: RNDr. Zdeněk Tošner, Ph.D.

Praha, 2013

Na tomto místě bych ráda poděkovala svému školiteli RNDr. Zdeňkovi Tošnerovi, Ph.D. za pomoc při psaní mé diplomové práce, odborné rady, obětavý přístup a trpělivost.

Dále bych chtěla poděkovat svému konzultantovi RNDr. Petru Šmejkalovi, Ph.D. za velkou podporu, užitečné rady a velmi vstřícný přístup.

Velké díky patří mým rodičům a babičce.

V neposlední řadě patří poděkování všem, kteří se podíleli na hodnocení mé práce. Jsou to: Mgr. Jan Blahut, Veronika Firlová, Bc. Lucie Hlavová, Bc. Jiřina Laburdová, Mgr. Jitka Laburdová, Mgr. Luďek Míka a Zuzana Míková.

A také děkuji Kočkosurovi, a to konkrétně úplně za všechno.

Klíčová slova: NMR spektroskopie, chemické vzdělávání, výukový text, testy, databáze spekter naměřených látek

Keywords: NMR spectroscopy, chemical education, educational text, tests, database of measured spectra

Prohlášení:

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci zpracovala samostatně a že jsem uvedla všechny použité informační zdroje a literaturu. Tato práce ani její podstatná část nebyla předložena k získání jiného nebo stejného akademického titulu. Souhlasím se zapůjčením své diplomové práce ke studijním účelům.

V Praze, 10. 8. 2013

Marie Tomanová

Abstrakt

Nukleární magnetická rezonance je velmi důležitou, nenahraditelnou a zároveň běžnou metodou využívanou v chemii i v lékařství. Z tohoto pohledu je velmi žádoucí, aby NMR spektroskopie byla implementována do výuky přírodovědných předmětů na SŠ. V českém jazyce ale bohužel není dostatek materiálů pro žáky středních škol odpovídajících svou úrovní jejich znalostem.

Tato diplomová práce se zabývá tvorbou podpůrných materiálů pro výuku zaměřenou na NMR spektroskopii a možnostmi její implementace na střední školy. K tomuto účelu byly zpracovány následující materiály: výukový text, testy a databáze spekter naměřených látek (v příloze na CD). Materiály byly testovány formou cíleného rozhovoru a na základě získaných výsledků upraveny. Testování potvrdilo, že je text srozumitelný, motivační a že by zařazení tohoto tématu do výuky ocenili jak studenti, tak vyučující.

Pro učitele i studenty středních škol budou materiály dostupné na středoškolském výukovém portálu studiumchemie.cz.

Abstract

Nuclear magnetic resonance is an important, irreplaceable and very common method used in chemistry and medicine. From this perspective, it is highly desirable to implement NMR spectroscopy into high school education. But unfortunately there is not enough material in the Czech language, which would correspond to a high school student's level of knowledge.

This thesis looks at creating support materials for teaching NMR spectroscopy and the possibilities of its implementation into high school education. For this purpose, following materials were prepared: an educational text, tests and a database of measured spectra (appendix on CD). Materials were tested in the form of a directed interview and then modified according to the results. This testing confirmed that the text is clear, motivating, and that this topic would be appreciated by both students and teachers.

The materials will be available for teachers and high school students at the educational portal studiumchemie.cz.

Seznam použitých zkratek:

SŠ	střední škola
VŠ	vysoká škola
RVP	Rámcový vzdělávací program
ŠVP	Školní vzdělávací program
UK	Univerzita Karlova
MUNI	Masarykova Univerzita
VSCHT	Vysoká škola chemicko-technologická
CHF VUT	Chemická fakulta Vysoké učení technické
UO	Univerzita Ostrava
UPOL	Univerzita Palackého v Olomouci
ZSF JCU	Zdravotně sociální fakulta Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích
PřF	Přírodovědecká fakulta
LF	Lékařská fakulta
KSICHT	Korespondenční seminář inspirovaný chemickou tematikou
NMR	Nukleární magnetická rezonance
MRI	Zobrazování magnetickou rezonancí
IR	Infračervená spektrometrie
TMS	Tetramethylsilan
DMSO	dimethylsulfoxid
DSS	4,4-dimethyl-4-silapentan-1-sulfonová kyselina

Obsah

1. ÚVOD	7
2. CÍLE.....	9
3. METODY A EXPERIMENTÁLNÍ VYBAVENÍ.....	10
3.1. Výukový text.....	10
3.2. Testy.....	12
3.3. Databáze vlastních naměřených spekter upravených do příkladů k interpretaci	13
4. TEORETICKÁ ČÁST	15
4.1. Úvod.....	15
4.2. Rešerše zdrojů v českém jazyce	15
4.3. Kritéria pro hodnocení zdrojů v českém jazyce.....	16
4.4. Seznam vybraných hodnocených zdrojů v českém jazyce	18
4.5. Vyhodnocení zdrojů v českém jazyce.....	21
4.6. Názorné porovnání hodnocených zdrojů v tabulce.....	31
4.7. Diskuse k rešerši zdrojů v českém jazyce	33
4.8. Rešerše zdrojů v anglickém jazyce	33
5. PRAKTICKÁ ČÁST	37
5.1. Pojetí praktické části	37
5.2. Výukový text.....	39
5.3. Testové otázky	40
5.4. Určování reálných spekter.....	103
6. EVALUACE.....	111
6.1. Úvod.....	111
6.2. Otázky pro evaluační rozhovor	112
6.3. Seznam hodnotitelů.....	113
6.4. Vyhodnocení	113
6.5. Výsledky hodnocení.....	120
6.6. Diskuse k výsledkům hodnocení.....	121
7. ZÁVĚR	124
8. POUŽITÉ ZDROJE.....	125
9. PŘÍLOHY	130

1. ÚVOD

Významnou instrumentální metodou často využívanou ve vědě, průmyslu i v lékařství je NMR spektroskopie. Například určení struktury organických sloučenin se bez NMR spektroskopie již neobejde, využít ji lze i ke kvantitativní analýze a magnetická rezonance je pro lékaře metodou prakticky nenahraditelnou při diagnóze různých onemocnění, například rakoviny. Je tedy žádoucí, aby základy NMR spektroskopie byly implementovány i do výuky přírodovědných předmětů na středních školách.

Obecně u každé nové technologie platí, že se do výuky ve školách zavádí s mnohaletým zpožděním oproti využívání v praxi (počátky nukleární magnetické rezonance byly v 50. letech 20. století). Proto v nejpoužívanějších českých středoškolských učebnicích (např. [1] – [8]) téma NMR nenajdeme. Z těchto důvodů vznikla potřeba vytvořit nový výukový materiál, který by stávající učebnice doplnil.

Může se zdát, že výuka takto obtížné tematiky na SŠ postrádá smysl. Význam a využití NMR spektroskopie nejen na poli vědy a výzkumu však naznačuje, že poznatky nabyté v dané oblasti mohou mít širší význam, například eliminovat obavy z využití metody v lékařství, pochopit na molekulární a jaderné úrovni magnetické chování látek, pochopit strukturu chemických látek a její vztah k vlastnostem či obecně získat povědomí o využití a aplikacích instrumentálních metod v praxi. A je všeobecně známo, že je důležité spojovat ve výuce teorii s praxí. Lze považovat za velmi žádoucí seznámit žáky s každodenním chlebem mnohých chemiků. A nejen budoucí studenty přírodovědeckých i lékařských fakult by jistě zajímalo, co může být jednou náplní jejich práce i součástí života, neboť s magnetickou rezonancí se nejspíše setká úplně každý.

Zařazení nových témat podporují i relativně nové kurikulární dokumenty, aplikované ve výuce v posledních šesti letech, které jsou závazné pro každou školu a pro každého učitele.

Kurikulární dokumenty jsou vytvořeny na dvou úrovních – státní a školní. Státní úroveň představují Rámcové vzdělávací programy (RVP), školní úroveň představují školní vzdělávací programy (ŠVP). ŠVP si vytváří každá škola sama a může se tak aktivně

podílet na vytváření kurikula a zahrnovat do něj nové vědecké poznatky. Téma Nukleární magnetická rezonance by se z hlediska Rámcového vzdělávacího programu pro gymnázia mohlo zařadit do Očekávaných výstupů organické chemie, kdy „*Žák využívá znalosti základů kvalitativní a kvantitativní analýzy k pochopení jejich praktického významu v organické chemii*“ [9].

Zařazení výuky NMR spektroskopie do kurikula SŠ v zásadě nic nebrání a mohlo by být obohacím o nové a veskrze praktické téma.

2. CÍLE

Z hlediska významu NMR spektroskopie pro vědeckou a laboratorní praxi i pro život běžného člověka je hlavním cílem této diplomové práce zpracovat téma Nukleární magnetické rezonance pro výuku na středních školách vhodnou formou tak, aby téma bylo srozumitelné a přístupné jak středoškolským učitelům (kteří se v rámci své přípravy setkávají s tématem NMR jen velmi okrajově), tak jejich žákům a byla tím podpořena aplikace tématu do výuky přírodovědných předmětů na středních školách. Snahou je tedy připravit takové materiály, které pomůžou pedagogovi zvládnout danou problematiku a pomocí mnohých příkladů mu usnadní přípravu na hodinu. Pro naplnění uvedeného hlavního cíle bylo stanoveno, že budou zpracovány následující materiály:

- výukový text pro učitele a žáky SŠ, zejména pro ty se zájmem o chemii
- dva testy k problematice NMR spektroskopie vycházející z poznatků ve výukovém textu
- databáze vlastních naměřených NMR spekter implementovaných do příkladů k interpretaci NMR spekter

Tyto materiály budou následně kvalitativně rámcově zhodnoceny skupinou osob, které si materiály prostudují. Následně budou tyto osoby požádány o rozhovor, na jehož základě bude materiál zhodnocen. Na základě výsledků zhodnocení poté bude materiál upraven tak, aby mohl co nejlépe podpořit výuku NMR na SŠ.

3. METODY A EXPERIMENTÁLNÍ VYBAVENÍ

3.1. Výukový text

3.1.1. Rešerše

Prvním krokem zpracování práce byla rešerše relevantních zdrojů vztahujících se k problematice potenciální výuky NMR na SŠ. Vyhledávány byly zejména výukové materiály určené pro studenty. Tato rešerše sloužila primárně jako podklad a zdroj inspirace pro zpracování vlastního výukového materiálu. Sledováno tedy bylo zejména, zda existují vhodné materiály pro výuku NMR spektroskopie na SŠ, jaký je jejich výběr a jak jsou zpracovány. A dále byly hledány další vhodné materiály, například výukové materiály pro studenty VŠ, z nichž by bylo případně možné při tvorbě vlastního materiálu vyjít či se jejich prvky inspirovat.

Rešerše může sloužit nejen popsáním způsobem, ale také má za úkol usnadnit práci pedagogům při hledání vhodných zdrojů na téma NMR. Lze předpokládat, že učitelé využívají pro přípravu na výuku nejčastěji učebnice a internet. V našich nejběžněji používaných středoškolských učebnicích [1] – [8] není téma NMR zpracované, proto byla věnována pozornost internetovým zdrojům. Pro většinu pedagogů je nepochybně nejpřístupnějším jazykem čeština a v přípravě jsou využívány zejména materiály v českém jazyce, který je i oficiálním jazykem výuky. Příčinou není jen lepší znalost rodného jazyka učitele, ale i přístup či obsah materiálu, který je k tvorbě přípravy využit, neboť ten více respektuje zvyklosti a přístupy k výuce v ČR.

Z tohoto důvodu byla provedena primárně rešerše internetových zdrojů v českém jazyce. Tištěných zdrojů vhodných pro výuku NMR spektroskopie na SŠ existuje minimum, případně existuje i webová verze. Pro jednoduchost byly tedy recenzovány pouze verze z internetu. Rešerše je představena formou recenze, která zdroje nejen představuje, ale snaží se i o krátké a subjektivní (ale odborné) zhodnocení tak, aby mohla být dalším podkladem pro učitele chemie i žáky SŠ pro další studium. Tato recenze může také usnadnit učitelům práci při hledání různých doplňujících zdrojů. Vzhledem k velkému množství možných odkazů, které vyhledá internetový vyhledávač, a jejichž kvalita mnohdy kolísá nebo materiál není komplexní či úplný, by provedení komplexní a úplné rešerše, včetně recenzí, nebylo účelné a smysluplné. Proto byla

zvolena následující metoda k určení odkazů, které budou zrecenzovány a budou součástí komentované rešerše.

Bylo provedeno vyhledávání pomocí internetového vyhledávače Google [51] a vhodných vyhledávacích dotazů (nukleární magnetická rezonance, výuka NMR, NMR ve školách,...). Z nich bylo vybráno prvních 200 webových stránek, které byly prohlédnuty, a z nich byly vybrány ty nejrelevantnější z hlediska obsahu (komplexní, zajímavě zpracované – viz vlastní recenze) či způsobu zpracování (zajímavé obrázky, netradiční přístup apod.). Ve většině případů se jednalo o materiály přírodovědně či lékařsky zaměřených vysokých škol. Protože vyhledávání pomocí vyhledávačů nemuselo poskytnout komplexní obraz o materiálech zaměřených na NMR, bylo uvedené vyhledávání doplněno dalším způsobem vyhledávání. Důvodně jsem se, i na základě předchozí rešerše pomocí internetového vyhledávače, domnívala, že další kvalitní materiály budou na stránkách přírodovědně zaměřených českých veřejných vysokých škol. Podle seznamu veřejných vysokých škol [12] byly vyhledány relevantní webové stránky přírodovědně zaměřených vysokých škol a na nich případně dohledány další vhodné materiály týkající se NMR.

Dále byla provedena velmi hrubá rešerše materiálů zaměřených na NMR v anglickém jazyce. Nicméně, byly vyhledávány pouze materiály dostupné na webových stránkách a to s využitím postupu popsaného výše u rešerše českých webových odkazů. Přirozeně existuje řada kvalitních materiálů (v angličtině) v tištěné formě, velmi zdařilá je například část v učebnici Organická chemie McMurryho [47], nicméně vzhledem k vysoké ceně a omezené dostupnosti (pro učitele chemie) takových knih a dále jazykové bariéry a faktorům popsaným výše a skutečnosti, že jako knižní publikace tyto materiály byly recenzovány, recenze těchto anglicky psaných tištěných zdrojů by byla nad rámec této práce.

Je zřejmé, že v angličtině je dobře zpracovaných zdrojů zaměřených na NMR mnohem více. Vzhledem k důvodům uváděným výše jim nebyla věnována tak velká pozornost. Nicméně přesto nebylo možné nezmínit alespoň několik málo nejzajímavějších. Tyto zdroje byly vyhledávány buď pomocí vhodných vyhledávacích dotazů na internetu (NMR education, NMR high school,...), nebo byly využity tipy od spolužáků či školitele.

3.1.2. Zpracování výukového textu

Při vlastním zpracování textu vyvstalo několik problémů – především co se vysvětlování fyzikálního principu metody týče. Princip je totiž založen na kvantové teorii, což je učivo obtížné i pro mnohé vysokoškolské studenty. Metodou pro vysvětlení proto byly použity různé analogie, které mnohdy nebyly zcela přesným vyjádřením podstaty jevu, ale snad vyjádřením názorným a poučným. Například při vysvětlování principu pulsní metody NMR spektroskopie si vzorek můžeme představit jako ladičku a krátký radiofrekvenční puls jako zdroj mnoha tónů najednou. Jádro atomu si můžeme představit jako kolo (pulsní metoda) nebo jako kompas (kontinuální metoda). Precese jádra je pak vysvětlena pomocí dětské káči (viz kapitola 5.2 Výukový text).

Spektra používaná v průběhu výukového textu jsou buď naměřená (viz dále kapitola 5.4 Určování reálných spekter) nebo vygenerovaná programem ChemDraw (verze 8.0).

3. 2. Testy

Byly vytvořeny testy s různými typy testových úloh – s otevřenými i uzavřenými otázkami. Tyto testy mají za cíl evaluovat znalosti a schopnosti interpretace NMR spekter u žáků a byly zpracovány na základě vytvořeného výukového textu a materiálů Univerzity v Glasgow [50], které jsou používány k evaluaci znalostí a dovedností skotských žáků. Některé úlohy byly pouze přeloženy, jiné upraveny a další nově vytvořeny na základě inspirace uvedeným textem. Testové otázky byly uspořádány do dvou testů, které ovšem nejsou rovnocenné (nelze použít jako variantu A, B – na druhou stranu má učitel k dispozici dvě sady úloh, které si může podle potřeby upravit, např. na variantu A a B).

3. 3. Databáze vlastních naměřených spekter upravených do příkladů k interpretaci

Na procvičování interpretace spekter nebylo vhodné a žádoucí využívat spekter počítačově vygenerovaných či spekter převzatých. Spektra vygenerovaná programy jsou příliš „dokonalá“ a vzhledem k tomu na nich není možné demonstrovat tak přirozené záležitosti pro reálná spektra jako jsou šum, drobné artefakty a změny v intenzitách pásů apod., které pak ovlivňují interpretaci. Vzhledem ke snaze o spojení a implementaci reálného experimentu (který ale žáci v prostorách školy provést nemohou) do výukových materiálů bylo rozhodnuto, že pro výukové účely bude vhodnější využít reálně naměřených spekter. Proto byla za pomoci školitele naměřena spektra reálná.

Jako kritérium při výběru látek byly z didaktického hlediska zvoleny funkční skupiny organických látek, neboť v tomto duchu probíhá obvykle výuka organické chemie na SŠ. Od každé hlavní charakteristické skupiny organických látek byl vybrán jeden zástupce, a to s ohledem na jednoduchost a dostupnost látky. (Hlavní charakteristické skupiny organických látek: karboxylové kyseliny, estery, amidy, nitrily, aldehydy, ketony, alkoholy, fenoly, aminy, ethery, halogensloučeniny nitrosloučeniny).

Na měření byl použit NMR spektrometr Bruker 600 MHz. Měřeny byly následující látky:

Tabulka 1: Seznam měřených látek

	látka	čistota
1	acetaldehyd	p. a.
2	aceton	99,5 %
3	diethylether	p. a.
4	acetonitril	p. a.
5	butan-2-ol	čistý
6	ethylacetat	p. a.
7	fenol	p. a.
8	nitrobenzen	p. a.
9	chlorbenzen	čistý
10	difenylamin	čistý
11	acetamid	čistý
12	2,4-dimethylpyridin	čistý
13	kyselina L-jablečná	čistá

Používaná rozpouštědla: D₂O, DMSO, CDCl₃, MeOD.

Od všech látek bylo zároveň změřeno ¹³C i ¹H spektrum. Některé látky byly měřeny ve více různých rozpouštědlech, u některých bylo měřeno dekaplované i nedekaplované

spektrum. Celkem bylo naměřeno 44 spekter, které byly uspořádány do třinácti příkladů (třináct látek) na procvičování jejich interpretace – student má určit ze sumárního vzorce za pomoci uhlíkového a vodíkového spektra strukturu dané látky.

Spektra byla dále upravována v programu ACD/NMR Processor (Advanced Chemistry Development, Inc., Kanada, verze 12.01). Byla provedena Fourierova transformace ([17], 2. přednáška) a další základní úpravy nutné pro možnost interpretace spekter jako jsou: zreferencování, upravení základní linie a fáze píků, integrace vodíkových spekter. Byly popsány jednotlivé píky a spektrum bylo zvětšeno na potřebnou velikost.

4. TEORETICKÁ ČÁST

4.1. Úvod

Při zpracovávání výukových materiálů bývá pro učitele obvykle základní pomůckou nějaká učebnice. Není-li tomu tak, či není-li hledané téma v učebnicích zpracováno, sahá pedagog po internetu. V českých středoškolských nejpoužívanějších učebnicích [1] – [8] se téma NMR nevyskytuje, a ani specializované tištěné texty o NMR vhodné pro výuku nejsou příliš dostupné. Z toho důvodu byla provedena rešerše internetových zdrojů. Výsledky této rešerše slouží nejenom jako podklad a inspirace pro vytvoření nového materiálu, ale také mají za úkol usnadnit práci pedagogům při hledání vhodných zdrojů na téma NMR. Rešerše je v následujícím textu představena formou recenze, což jednoduchým způsobem zprostředkuje učitelům přehled o dostupných materiálech. Jak bylo zmíněno v úvodních částech práce, pro české učitele je nejpřístupnější český jazyk, a tudíž nejčastěji používají české zdroje. Proto je rešerše zaměřena především na internetové zdroje v českém jazyce. Na druhou stranu angličtina je světový jazyk, který se vyučuje již od základních škol a jehož základy má tudíž každý. Přestože je jiná věc číst anglický text a pochopit problém z anglického textu, internetové zdroje psané v angličtině obsahují velké množství kvalitních materiálů, které není žádoucí úplně opomenout. Druhá část rešerše se tedy zabývá několika zajímavými zdroji v anglickém jazyce.

4.2. Rešerše zdrojů v českém jazyce

Zdrojem snadno internetově dostupných informací o nukleární magnetické rezonanci jsou v češtině především weby vysokých škol, Wikipedie [10], lékařská zařízení (např. [11], [52], [53]) a v malé míře také střední školy [13], [14], [15], [16].

Následující hodnocení se bude týkat vybraných středoškolských a vysokoškolských materiálů. Byla snaha vybrat co nejrelevantnější a komplexní materiály vhodné pro výuku, proto nebyla věnována pozornost české Wikipedii a lékařským zařízením, které pojednávají spíše o přípravě na vyšetření, nikoliv o metodě NMR jako takové.

Materiálů pocházejících ze středních škol není mnoho [13], [14], [15], [16]. Pedagog může čerpat i ze zdrojů vysokoškolských, u nich se však musí předpokládat, že jsou složitější, neboť způsob a koncepce výkladu učiva v těchto materiálech vyžaduje a předpokládá poměrně hluboké znalosti ze základních vysokoškolských přednášek.

Podle seznamu veřejných vysokých škol [12] byly prohledány weby všech přírodovědných, technických, lékařských a matematicko-fyzikálních fakult (viz kapitola 3 – Metody a Experimentální vybavení). V případě některých fakult bylo nalezeno více materiálů zaměřených na problematiku NMR, ty jsou popsány v dalším textu, jiné je měly zabezpečené (a nebylo je možné stáhnout) či vůbec nebyly nalezeny. Seznam všech nalezených vysokoškolských zdrojů je uveden v kapitole 4.4.

Materiály jsou hodnoceny recenzí, formou komentovaných tabulek. V tabulkách je hodnocena přítomnost (✓) či nepřítomnost (✗) některých faktorů či tematických celků. Tabulky shrnují informace sloužící k vytvoření představy o daném materiálu a jsou doplněny popisem.

Recenze neobsahuje materiály ze všech fakult. Hodnoceny nebyly takové materiály, které se o NMR zmiňují jen velmi okrajově a v podstatě neposkytují komplexní či vhodné informace, nebo které nejsou fakticky správné (podrobněji k těmto zdrojům v kapitole 4.4).

4.3. Kritéria pro hodnocení zdrojů v českém jazyce

Recenzované zdroje byly zhodnoceny z hlediska několika vybraných kritérií. Pro jednoduchou orientaci a rychlou představu o daném materiálu je každá recenze doplněna tabulkou. Recenze a zhodnocení (a položky v tabulce) byly zpracovány na základě následujících kritérií:

Obrázky

Zde je hodnoceno, zda materiál obsahuje obrázky, ať už se jedná o obrázky usnadňující pochopení, či obrázky motivační a jaká je kvalita obrázků.

Vzorce

Toto kritérium hodnotí přítomnost vzorců.

Historie

Zde je hodnoceno, jestli je materiál doplněn o historické souvislosti, zda jsou zmíněni držitelé Nobelových cen za NMR. Kritérium tak mimo jiné poukazuje na komplexnost materiálu.

Zajímavosti

Zajímavosti ožívují celý text. Může se jednat o různá přirovnání, poukázání na souvislosti, motivační videa či témata z lékařské praxe. U materiálů na téma NMR je hodnoceno, zda se zmiňují i o Magnetickém zobrazování (tématu s vazbou na praxi).

Příklady k procvičení

Zda jsou v materiálu přítomny příklady k procvičení, např. vzorová spektra, na kterých si student může procvičovat určování struktur látek. Toto kritérium je hodnoceno pouze u materiálů na téma NMR a nikoliv MRI, protože výsledkem MRI jsou snímky tkání a nikoliv spektra.

Typy MRI

U materiálů na téma MRI je hodnoceno, zda pojednávají i o různých typech této metody.

Nutnost doplnění mluveným slovem

Pro vytvoření představy o materiálech, které jsou ve formě prezentace k výuce, je důležité vědět, jestli jsou vhodné/dostačující k samostudiu, nebo zda potřebují výklad vyučujícího. Toto kritérium je hodnoceno škálou od jedné do tří. Číslo tři značí prezentaci vhodnou pro samostudium (pochopí ji čtenář, který o NMR dosud nic neví), číslo jedna znamená, že prezentace bez mluveného slova (nebo znalostí z jiných zdrojů) nestačí k pochopení problému, číslo dva označuje prezentaci nacházející se mezi těmito dvěma extrémy (čtenář bez žádných znalostí neporozumí/porozumí pouze některým snímkům, čtenář se základními znalostmi NMR si své poznatky doplní a rozšíří).

4.4. Seznam vybraných hodnocených zdrojů v českém jazyce

Nalezené materiály pro střední školy:

- Seriál Korespondenčního semináře inspirovaného chemickou tematikou (KSICHT) [13]
- Příručka k chemické olympiádě [14]
- prezentace Střední zdravotnické a vyšší odborné školy zdravotnické v Mladé Boleslavi [15]
- webové stránky Střední zdravotnické školy Šumperk [16]

Nalezené materiály pro vysoké školy:

- Univerzita Karlova v Praze
 - Základy spektroskopie molekul – Část NMR, přednáška Přírodovědecké fakulty (10 prezentací) [17]
 - Spektrální metody NMR II, přednáška Přírodovědecké fakulty (8 prezentací) [18]
 - Analytická chemie I, II, přednáška Přírodovědecké fakulty, katedra analytické chemie (text, 0,5 normostrany + obrázky) [19]
 - Spektrální metody NMR I, přednáška Přírodovědecké fakulty, katedra organické chemie (10 prezentací + 6 prezentací s příklady) [20]
 - Spektrální metody NMR II, přednáška Přírodovědecké fakulty, katedra organické chemie (9 prezentací + 1 prezentace s příklady, 5 výukových textů) [21]
 - Jaderná magnetická rezonance, skripta Přírodovědecké fakulty, katedra organické chemie (skriptum, 25 normostran + obrázky) [22]
 - Základy magnetické rezonance - MR technika, výukový portál První lékařské fakulty (1 prezentace, 41 snímků) [23]
 - II. LF UK: Magnetická rezonance, prezentace Druhé lékařské fakulty (1 prezentace, 22 snímků) [24]
 - Zobrazovací metody kloubů, prezentace Druhé lékařské fakulty (1 prezentace, 85 snímků) [37]
 - Neinvazivní zobrazování cév, prezentace Druhé lékařské fakulty (1 prezentace, 27 snímků) [36]

- Nukleární magnetická rezonance, návod na praktikum matematicko-fyzikální fakulty, fyzikální sekce (text, 18 normostran + obrázky) [38]
- Vysoká škola chemicko-technologická
 - NMR spektroskopie pro studium přírodních látek, přednáška (17 prezentací) [26]
 - Nukleární magnetická rezonanční spektrometrie, skripta (9 normostran + obrázky) [27]
- Vysoké učení technické v Brně
 - NMR Spektroskopie – Instrumentální a strukturní analýza, prezentace Chemické fakulty Vysokého učení technického v Brně (1 prezentace, 68 snímků) [28]
 - Organická chemie I: Organická strukturní analýza, prezentace Chemické fakulty Vysokého učení technického v Brně [29]
- Univerzita Ostrava
 - Nukleární magnetická rezonance, prezentace Přírodovědecké fakulty, katedra fyziky [30]
- Masarykova Univerzita
 - Základy fyzikální chemie, webové stránky Přírodovědecké fakulty (rozsah odpovídá 4,5 normostranám + obrázky) [31]
 - Magnetická rezonance, prezentace Lékařské fakulty (1 prezentace, 87 snímků) [32]
 - Spektroskopie magnetické rezonance, prezentace Přírodovědecké fakulty (1 prezentace, 10 snímků) [39]
- Univerzita Palackého v Olomouci
 - Nukleární magnetická rezonance, skripta Přírodovědecké fakulty (14 normostran) [33]
 - Základy nukleární magnetické rezonance, prezentace Přírodovědecké fakulty (1 prezentace, 28 snímků) [34]

- Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
 - Biofyzika tkání a orgánů, skripta Zdravotně sociální fakulty (skripta, 44 normostran) [35]

V následující recenzi nebyly hodnoceny tyto materiály:

- Zobrazovací metody kloubů, prezentace Druhé lékařské fakulty (1 prezentace, 85 snímků) [37]
- Neinvazivní zobrazování cév, prezentace Druhé lékařské fakulty (1 prezentace, 27 snímků) [36]
- Nukleární magnetická rezonance, návod na praktikum matematicko-fyzikální fakulty, fyzikální sekce (text, 18 normostran + obrázky) [38]
- Spektroskopie magnetické rezonance, prezentace Přírodovědecké fakulty (1 prezentace, 10 snímků) [39]

První dva materiály [37], [38] jsou specializované na téma cévy a klouby a jsou pojaty ve stylu „podle snímku z MRI poznejte chorobu“. O principu metody MRI a NMR je uvedena pouze jedna věta.

Třetí materiál [38] je návod na fyzikální praktikum, krátce se věnuje principu NMR – vysvětlen pomocí kvantové fyziky, některé pojmy nejsou vysvětlené vůbec.

V poslední materiálu [39] jsou NMR věnovány tři snímky a neposkytuje v podstatě téměř žádné informace.

Z těchto důvodů se lze domnívat, že by dané materiály učitelům ani studentům neposloužily, a proto nejsou dále zpracované ve formě recenze.

4.5. Vyhodnocení zdrojů v českém jazyce

4.5.1. Vybrané materiály pro střední školy

Nukleární magnetická rezonance, seriál KSICHTU (Korespondenčního semináře inspirovaného chemickou tematikou), (text, délka 7 normostran + obrázky) [13]

Tabulka 2

obrázky	✘
vzorce	✘
historie	✘
zajímavosti	✘
příklady k procvičení	✓

Materiál je vypracovaný jako pomocný text pro řešitele korespondenčního chemického semináře (pro studenty středních škol). Je relativně stručný. Text je černobílý, neobsahuje žádný motivační

prvek – chybí obrázky, historie nebo jakákoliv zajímavost. Není zmíněno využití NMR – ve vědě ani v lékařství (MRI). Materiál je přehledně strukturovaný, ale soustředí se pouze na NMR vodíku (ke spektrům uhlíku není uvedena ani tabulka chemických posunů). Nevysvětluje některé pojmy – například spinové kvantové číslo. Z ničeho nic je zmíněn pojem Karplusova křivka, bez toho, aby byl dále vysvětlen. Chybí popis přístroje. Text obsahuje čtyři řešené úlohy (přiřazování názvů sloučenin k jejich spektrům). Celkově je text přehledný, dobře vysvětluje chemický posun, intenzitu signálu a základy multiplicity signálu. Přehled viz Tabulka 2.

Úvod do jaderné magnetické rezonance (NMR), Příloha úloh školního kola chemické olympiády (text, délka 18 normostran + obrázky) [14]

Tabulka 3

obrázky	✘
vzorce	✘
historie	✓
zajímavosti	✓
příklady k procvičení	✓

Materiál je vytvořen jako pomocný text na přípravu k chemické olympiádě. Je rozdělen na tři části. První část stručně nastíní princip metody, druhá část se magnetickou rezonancí zabývá

podrobněji a třetí část tvoří řešené úlohy. Text je černobílý, neobsahuje obrázky. Začíná historií, zmiňuje nepostradatelnost metody a různé způsoby využití. Nevysvětluje některé pojmy – například spinové kvantové číslo. Podrobnější část (text je velmi podobný skriptům z PřF UK – Jaderná magnetická rezonance, viz dále) se zabývá i MRI a 2D spektry. Přehled viz Tabulka 3.

SZŠ MB: Nukleární magnetická rezonance (NMR), prezentace Střední zdravotnické a vyšší odborné školy zdravotnické v Mladé Boleslavi

(1 prezentace, 28 snímků) [15]

Tabulka 4

obrázky	✓
vzorce	✘
historie	✓
typy MRI	✓
zajímavosti	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	3

Prezentace je na téma MRI. Text je velmi jednoduchý a v podstatě nevysvětluje princip. Popisuje jednotlivé typy MRI a uvádí praktické poznámky (klaustrofobie pacientů, doba měření, kovové předměty). Zajímavostí je odkaz na snímek z MRI tlukoucího srdce. Obrázky dokreslují text,

některé však jen vyplňují prázdné místo (když se v textu zmiňuje lék Diazepam, tak je pod ním obrázek krabičky od Diazepamu). Přehled viz Tabulka 4.

SZŠ Š: Nejčastější diagnostické metody, webové stránky Střední zdravotnické školy Šumperk (rozsah odpovídá 1,5 normostraně + obrázky) [16]

Tabulka 5

obrázky	✓
vzorce	✘
historie	✘
typy MRI	✓
zajímavosti	✓

Materiál na téma MRI je rozdělený na dvě části – fyzikální princip a využití ve zdravotnictví. Informací je relativně málo, ale jsou hezky zpracované – stránky působí motivačně. Princip

vysvětlen třemi větami. Popisovány jsou výhody a nevýhody MRI, příprava pacienta, kontraindikace, dokonce jsou vyjmenováni výrobci MRI tomografů. Zajímavé je srovnání magnetické pole spektrometru s magnetickým polem Země (u spektrometru je 70 000krát silnější). Ve fotogalerii jsou MRI snímky různých částí těla. Na závěr je motivační obrázek – pohybující se orgány v hrudní dutině. Přehled viz Tabulka 5.

4.5.2. Vybrané materiály pro vysoké školy

Materiály jsou řazeny podle jednotlivých univerzit, kdy nejprve jsou zdroje zabývající se NMR a následně MRI.

UNIVERZITA KARLOVA

PŘ UK 1: Základy spektroskopie molekul – Část NMR, přednáška Přírodovědecké fakulty UK (10 prezentací) [17]

Tabulka 6

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✓
zajímavosti	✓
příklady k procvičení	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	2

Velmi podrobný a obsáhlý materiál. První prezentace je motivační – využití NMR. Princip je vysvětlen jasně a logicky. Na konci prezentací je vždy několik spekter k procvičení. Cílem je určit látku – z jejího sumárního vzorce a spektra. Materiál uvádí všechna základní témata, která

s NMR souvisí. Jedná se o velmi komplexní materiál. Poslední dvě prezentace jsou věnovány 2D spektrometrii a dynamickým procesům. Materiál obsahuje obrázky – motivační (staré vs. nové spektrometry, první úspěšný MRI snímek člověka – člověk s cívkou kolem hrudi) i vysvětlující daný problém, odkazy na zajímavá videa (gyroskop, Larmorova precese). Zajímavosti jsou v prezentacích dostatečně popsány, na princip je výklad potřeba (pokud nemá čtenář již základy odjinud). MRI je zmíněno pouze na začátku v motivační části. Přehled viz Tabulka 6.

PŘ UK 2: Spektrální metody NMR II, přednáška Přírodovědecké fakulty UK (8 prezentací) [18]

Tabulka 7

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	1

Sada prezentací k přednášce na vysoké úrovni znalostí, velmi podrobná. Navazuje na materiál I, témata rozebírá do hloubky. Zabývá se 2D NMR spektrometrií a dalšími pokročilými tématy. Přehled viz Tabulka 7.

PŘ UK 3: Analytická chemie I, II, přednáška Přírodovědecké fakulty UK, katedra analytické chemie (text, 0,5 normostrany + obrázky) [19]

Tabulka 8

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✗

Výukový materiál na téma Kvalitativní analýza organických látek – identifikace. Velmi stručně je popsán princip. Obrázky jsou dva – nákres přístroje a orientace jader v magnetickém poli. Není

zmíněno MRI, vzorec jeden (výpočet chemického posunu). Na jednom příkladu je ukázáno přiřazení signálů ve spektru k molekule vzorku. Přehled viz Tabulka 8.

PŘ UK 4: Spektrální metody NMR I, přednáška Přírodovědecké fakulty UK, katedra organické chemie (10 prezentací + 6 prezentací s příklady) [20]

Tabulka 9

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✓
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	1

Velmi rozsáhlý materiál, prezentace rozhodně nejsou určené k samostudiu. Podrobně se věnují všem tématům. Jsou přehledné, ale obsahují velmi málo obrázků – a všechno jsou to fotografie spektrometrů. Neuvádějí nic z historie. Vysvětlují na příkladech. Jedna z prezentací se zabývá 2D

spektrometrií, další dynamickými procesy, jiná predikcí chemických posunů. Nezmiňuje se MRI. Prezentace s příklady slouží k procvičování určování spekter. Cílem je určit látku – z jejího sumárního vzorce a spektra. Jedná se o velmi komplexní materiál. Přehled viz Tabulka 9.

PŘ UK 5: Spektrální metody NMR II, přednáška Přírodovědecké fakulty UK, katedra organické chemie (9 prezentací + 1 prezentace s příklady, 5 výukových textů) [21]

Tabulka 10

obrázky	✗
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	1

Sada prezentací k přednášce na vysoké úrovni znalostí, velmi podrobná. Navazuje na materiál IV. Zabývá se 2D NMR spektrometrií a dalšími pokročilými tématy. Přehled viz Tabulka 10.

PŘ UK 6: Jaderná magnetická rezonance, skripta Přírodovědecké fakulty UK, katedra organické chemie (skriptum, 25 normostran + obrázky) [22]

Tabulka 11

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✓
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✗

Velmi podrobný materiál. Obsahuje obrázky – ale jedná se o fotografie držitelů Nobelových cen – jiné v textu nejsou. Dále jsou zde různé nákresy a schémata, několik vzorců. Začíná historií.

Nevysvětluje spin, Larmorovu precesi, chybí tabulka chemických posunů pro uhlíky. Nezmiňuje MRI. Jsou studijním materiálem k přednášce Spektrální metody NMR I. Přehled viz Tabulka 11.

I. LF UK: Základy magnetické rezonance - MR technika, výukový portál První lékařské fakulty UK (1 prezentace, 41 snímků) [23]

Tabulka 12

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
typy MRI	✗
zajímavosti	✗
nutnost doplnění mluveným slovem	1

Prezentace na téma MRI je umístěna na výukovém portálu první lékařské fakulty, nedá se stáhnout. Snímky se posunují po pěti vteřinách (jde zastavit). Materiál začíná výhodami a nevýhodami MRI, následuje popis magnetů a cívek a teprve poté začíná princip metody. Ten je uveden poněkud

netypicky – zprostředka. Pro názornost uvádím první větu: „Vektor magnetického momentu koná dva pohyby“. Nevysvětluje pojem Magnetický moment, Larmorova frekvence. Prezentace zahrnuje několik vzorců a obrázků (tomografy, orientace jádra v magnetickém poli). O principu MRI jako takového pojednávají dva snímky. Jednoduché věci jsou v textu popsány slovy, u složitějších problémů je jen graf nebo schéma. Přehled viz Tabulka 12.

II. LF UK: Magnetická rezonance, prezentace Druhé lékařské fakulty UK (1 prezentace, 22 snímků) [24]

Tabulka 13

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✓
typy MRI	✗
zajímavosti	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	1

Prezentace je na téma MRI. Zběžně vysvětluje princip, uvádí historii metody, obsahuje obrázky (kreslené – jádro i fotografie – tomograf). Materiál je velmi stručný – nejsou typy MRI nebo ukázky MRI snímků (kromě jednoho). Některé slidy obsahují podrobný text (kontrastní látky), jiné

pouze nadpisy a prázdné místo (spin, precese). Na konci je několik zajímavostí ohledně přípravy pacienta. Přehled viz Tabulka 13.

LF UK HK: MRS – Magnetická rezonanční spektroskopie, prezentace lékařské fakulty v UK v Hradci Králové (1 prezentace, 11 snímků) [25]

Tabulka 14

obrázky	✗
vzorce	✗
historie	✗
typy MRI	✓
zajímavosti	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	3

Prezentace je tvořena černým textem na bílém pozadí, neobsahuje žádné obrázky. V krátkosti uvádí princip a využití. V závěru shrnuje výhody a nevýhody MRI. Zajímavé je nastínění možnosti použití MRI v psychiatrii. Přehled viz Tabulka 14.

VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ

VSCHT 1: NMR spektroskopie pro studium přírodních látek, přednáška Vysoké školy chemicko-technologické (17 prezentací) [26]

Tabulka 15

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✓
příklady k procvičení	✗
nutnost doplnění mluveným slovem	1

Jedná se o rozsáhlý materiál, který je velmi podrobný. Přednášky tvořilo více lidí, což se projevuje v roztříštěnosti jednotlivých témat – ne vždy na sebe navazují a občas se překrývají. Některé informace jsou na úrovni pokročilého kurzu z NMR. V prezentacích se důkladně

rozebírá, co se děje se signálem v počítači, tvar signálu (Lorenzova křivka), velmi podrobně je mluveno o 2D spektrometrii. Užitečné je vyjmenování různých programů

na zpracování spekter. Pro představu o obtížnosti toho materiálu jsou dále uvedeny některé probírané pojmy: využití NOE k určení anomerní konfigurace, spinová difuze, výpočet vzdáleností (měření výstavbové křivky), odhad vzdáleností u exo- a endo-cykloaduktů, ROESY, TOCSY, pseudorotační itinerář, kvadrurní detekce. V prezentacích je část věnována MRI. Pečlivě je popisován přístroj. Celá jedna přednáška je na téma měření proteinů. Zmíněna je historie NMR. Přehled viz Tabulka 15.

VŠCHT 2: Nukleární magnetická rezonanční spektrometrie, skripta Vysoké školy chemicko-technologické (9 normostran + obrázky) [27]

Tabulka 16

obrázky	✓
vzorce	✗
historie	✗
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✓

Skripta jsou na rozdíl od prezentací VŠCHT daleko jednodušší, odpovídají „základnímu kurzu NMR“. Obsahují málo obrázků (jádra atomů) a schéma spektrometru. Zmiňují se o rozpouštědlech

používaných při NMR spektrometrii a jako jeden z mála zdrojů uvádí, že TMS není rozpustný ve vodě a uvádí další standardy. Materiál rozepisuje posuny jednotlivých organických látek včetně různých vlivů, které je ovlivňují. Ke každé skupině organických látek udává příklad a spektrum. Na základě otázky „jak si zjednodušit spektrum“ popisuje dekaplink, deuteraci a změnu teploty vzorku. Nepíše se zde o MRI. Jedná se o velmi hezky a přehledně zpracovaný materiál. Přehled viz Tabulka 16.

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

CHE VUT 1: NMR Spektroskopie – Instrumentální a strukturní analýza, prezentace Chemické fakulty Vysokého učení technického v Brně (1 prezentace, 68 snímků) [28]

Tabulka 17

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✓
příklady k procvičení	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	2

Velmi hezky, přehledně a barevně zpracovaný materiál, dobře se čte. Zajímavé je porovnání spektra získaného Kontinuální a Pulzní metodou nebo porovnání spekter z různě „silných“ přístrojů (60 MHz a 300 MHz). Prezentace téměř polopaticky vysvětlují štěpení signálů (znázorněno

barevně). Je zde popisován vznik APT a DEPT spekter, 2D spektra, o MRI je pouze jeden snímek. 27 z 68 snímků tvoří příklady spekter (vodíková, uhlíková i 2D spektra, barevně označené signály – koresponduje s barevným značením atomů v molekulách). Obrázky vhodně vysvětlují daný problém. Pokud již čtenář má základní znalosti NMR, tak mluvené slovo není nezbytné. Přehled viz Tabulka 17.

CHE VUT 2: Organická chemie I: Organická strukturní analýza, prezentace Chemické fakulty Vysokého učení technického v Brně (1 prezentace, 37 snímků) [29]

Tabulka 18

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✗
nutnost doplnění mluveným slovem	2

Prezentace se zabývá NMR, Infračervenou spektrometrií a hmotnostní spektrometrií, NMR je věnováno pouze osm snímků. Částečně čerpá z materiálu CHEM VUT 1. Metoda je v krátkosti nastíněna, ale logicky vysvětlena. Materiál obsahuje obrázky jader atomů v magnetickém poli

a fotografie spektrometrů. Nezmiňuje MRI. Prezentace obsahuje hodně textu. Přehled viz Tabulka 18.

UNIVERZITA OSTRAVA

PŘ UO: Nukleární magnetická rezonance, prezentace Přírodovědecké fakulty Univerzity v Ostravě, katedra fyziky (1 prezentace, 27 snímků) [30]

Tabulka 19

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✓
zajímavosti	✓
příklady k procvičení	✗
nutnost doplnění mluveným slovem	2

Prezentace působí poměrně jednoduše. Má netradiční design, snaha o motivaci a vtípnost. Obsahuje hodně textu – nahrazuje mluvené slovo. Ale obsahuje pouze jedno ukázkové spektrum, které je velmi nepřehledné (vysvětluje na něm chemický posun). Není zmíněna integrace spekter,

MRI je věnován jeden snímek se schématem tomografu. Přehled viz Tabulka 19.

MASARYKOVA UNIVERZITA

PŘ MUNI: Základy fyzikální chemie, webové stránky Přírodovědecké fakulty Masarykovy Univerzity (rozsah odpovídá 4,5 normostranám + obrázky) [31]

Tabulka 20

obrázky	✘
vzorce	✓
historie	✘
zajímavosti	✘
příklady k procvičení	✘

Materiál je velmi stručný, není ničím zajímavý nebo motivační. Neobsahuje obrázky. Pár větami sděluje existenci chemického posunu, intenzity signálů a multiplicity. Uvádí několik vzorců. Bez vysvětlení mluví o spinu, chybí tabulky posunů pro vodíková a uhlíková spektra. Ukázka jednoho spektra není komentována. Neuvádí MRI. Přehled viz Tabulka 20.

LF MUNI: Magnetická rezonance, prezentace Lékařské fakulty Masarykovy Univerzity (1 prezentace, 87 snímků) [32]

Tabulka 21

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✓
typy MRI	✓
zajímavosti	✓
nutnost doplnění mluveným slovem	3

Prezentace je na téma MRI a jedná se o jednoznačně nejlepší materiál na toto téma. Princip je velmi jasně, logicky popsán. Vysvětleny jsou i používané pojmy – spin, magnetický moment, magnetizace. Obrázky jsou názorné – porovnání snímků z CT a MRI, porovnání snímků z MRI při různé síle pole. Probírány jsou kontrastní látky a další modalities MRI: MR angiografie (MRA), funkční MR (fMRI), difuzní MR (DT MRI, DTI). V tabulkách názorně shrnuty výhody a nevýhody. Materiál je plný zajímavostí a trefných obrázků (např. obrázek MRI zvířat či různé „nehody“ – silné magnetické pole v tomografu vs. kovové předměty). Přehled viz Tabulka 21.

UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI

PŘ UPOL 1: Nukleární magnetická rezonance, prezentace Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci (1 prezentace, 28 snímků) [33]

Tabulka 22

obrázky	✓
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✓
příklady k procvičení	✗
nutnost doplnění mluveným slovem	2

Prezentace je hezká a přehledná. Poslední tři snímky jsou na jiné téma – Elektronová paramagnetická rezonance. Zmiňuje všechny důležité informace, i když o něco jednodušeji než například materiály PřF UK. V prezentaci jsou pouze dva obrázky (jádra atomů a magnet),

schémata, vysvětluje slovo „precese“. MRI je věnován jeden snímek. Nezabývá se interpretací spekter – v prezentaci je pouze jedno spektrum vysvětlující posun, multiplicitu, intenzitu – je černobílé, nepřehledné, malé. Chybí tabulka chemických posunů funkčních skupin v ^{13}C spektrech. Není to vhodný materiál pro pochopení interpretace spekter, ale princip metody je popsán dostatečně. Přehled viz Tabulka 22.

PŘ UPOL 2: Základy nukleární magnetické rezonance, skripta Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci (14 normostran) [34]

Tabulka 23

obrázky	✗
vzorce	✓
historie	✗
zajímavosti	✗
příklady k procvičení	✗

Ve skriptech je vysvětlován pouze princip NMR, a to pomocí kvantové fyziky. Pro ty, kdo kvantové fyzice nerozumí, je text absolutně nesrozumitelný. Omezuje se pouze na fyzikální podstatu jevu.

Devadesát procent textu tvoří vzorce. Není vysvětlena multiplicita, chemický posun, ... Přehled viz Tabulka 23.

JIHOČESKÁ UNIVERZITA V ČESKÝCH BUDĚJOVICÍCH

ZSF JCU: Biofyzika tkání a orgánů, skripta Zdravotně sociální fakulty Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích (skripta, 44 normostran) [35]

Tabulka 24

obrázky	✘
vzorce	✘
historie	✘
typy MRI	✘
zajímavosti	✘

Výukový text na téma Biofyzika tkání a orgánů, MRI je věnována pouze 1,5 normostrany.

Jedná se o prostý černobílý souvislý text, bez obrázků. Vysvětluje princip metody. Přehled viz Tabulka 24.

4.6. Názorné porovnání hodnocených zdrojů v tabulce

Pro rychlou orientaci v recenzovaných zdrojích je s využitím předchozích tabulek (Tabulka 2 – Tabulka 24) přehledně porovnána komplexita materiálů – a to ve dvou souhrnných tabulkách.

První tabulka (Tabulka 25) porovnává středoškolské materiály, druhá tabulka (Tabulka 26) vysokoškolské materiály.

Tabulka 25: Porovnání středoškolských zdrojů v českém jazyce

	seriál KSICHTu	příručka k chemické olympiádě	SZŠ MB	SZŠ Š
obrázky	x	x	✓	✓
vzorce	x	x	x	x
historie	x	✓	✓	x
zajímavosti	x	✓	✓	✓
příklady k procvičení	✓	✓	-	-
nutnost doplnění mluveným slovem	-	-	3	-
typy MRI	-	-	✓	✓

Tabulka 26: Porovnání vysokoškolských zdrojů v českém jazyce

	PŘ UK1	PŘ UK2	PŘ UK3	PŘ UK4	PŘ UK5	PŘ UK6	ILF UK	ILLF UK	LF UK HK	VS CHT1	VS CHT2	CHE VUT1	CHE VUT2	PŘ UO	PŘ MUNI	LF MUNI	PŘ UPOL1	PŘ UPOL2	ZSF JCU
obrázky	✓	✓	✓	✓	x	✓	✓	✓	x	✓	✓	✓	✓	✓	x	✓	✓	x	x
vzorce	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	x	✓	x	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	x
historie	✓	x	x	✓	x	✓	x	✓	x	x	x	x	x	✓	x	✓	x	x	x
zajímavosti	✓	x	x	x	x	x	x	✓	✓	✓	x	✓	x	✓	x	✓	✓	x	x
příklady k procvičení	✓	✓	x	✓	✓	x	-	-	-	x	✓	✓	x	x	x	-	x	x	-
nutnost doplnění mluveným slovem	2	1	-	1	1	-	1	1	3	1	-	2	2	2	-	3	2	-	-
typy MRI	-	-	-	-	-	-	x	x	✓	-	-	-	-	-	-	✓	-	-	x

4.7. Diskuse k rešerši zdrojů v českém jazyce

Materiály na téma NMR zpracované pro střední školy (v odpovídající úrovni) byly nalezeny jen dva. Další dva potom na téma MRI. To není mnoho. Navíc tyto materiály nejsou příliš názorné, spoustu pojmů nevysvětlují, neobsahují obrázky, obsahují málo příkladů a nejsou nijak motivující. Ostatní relevantní materiály jsou určeny studentům vysokých škol. Pro naprostou většinu středoškoláků je proto lze považovat za příliš složité a z hlediska pochopení náročné. Dalším problémem je, že vyžadují znalosti nabyté v jiných vysokoškolských přednáškách z chemie a fyziky.

Materiály z vysokých škol jsou obecně barevnější, mají více obrázků a zajímavostí než materiály středoškolské. Také jsou snáze dostupnější, než ty středoškolské.

Zdroje mezi sebou zjevně kopírují obrázky, takže ty se v materiálech opakují (například vzájemně materiály [13], [14] a [22] nebo [32] a [44] a mnoho dalších). Materiály lékařských fakult a zdravotních škol jsou většinou zaměřeny na téma Magnetické zobrazování, nemají proto příklady na procvičování interpretace spekter. Naopak oproti materiálům na téma NMR často uvádějí různé typy MRI.

Ve výsledku lze konstatovat, že materiály pro středoškoláky na téma NMR nejsou dostačující a obecně je nelze považovat za vhodné jak pro učitele a jeho přípravu na výuku tak pro žáky a samostudium. Pověštinou jsou buď příliš náročné a vyžadují absolvování navazujících VŠ přednášek nebo metodu vůbec nevysvětlují. Zpracování dalšího materiálu, který by se pokusil o nový přístup ve zpracování problematiky NMR pro SŠ, je tak nepochybně žádoucí.

4.8. Rešerše zdrojů v anglickém jazyce

V případě rešerše zdrojů v anglickém jazyce bylo cílem vyhledat zajímavé, inspirující webové zdroje, které by se zabývaly buď výukou NMR na středních školách, nebo se komplexním způsobem věnovaly tématu NMR případně MRI, a jejichž zpracování by bylo na vysoké úrovni jak z hlediska odborného, tak i motivačního (design stránek).

Není tedy cílem zmapovat maximum existujících materiálů, ale jen ty nejzajímavější z pohledu výuky NMR na SŠ.

Získané poznatky z rešerše anglických zdrojů poté byly využity při tvorbě vlastního materiálu.

Výuka NMR na středních školách je v anglických zdrojích prezentována různými projekty, například ve smyslu „NMR do škol“ – kdy je na University of Massachusetts Amherst vyvíjen NMR spektrometr, který by byl levný a snadno ovladatelný a mohl by být umístěn ve středoškolských laboratořích [40]. K zakoupení jsou také různé publikace, zabývající se výukou NMR – konkrétně publikace *Modern NMR Spectroscopy in Education* [41], kde je kapitola věnována tématu „Jak implementovat NMR do výuky na SŠ“. Tato práce není bohužel zdarma k dispozici.

Zajímavým materiálem věnujícím se výuce NMR na SŠ, který je dostupný na internetu, je prezentace Univerzity Colorado v Colorado Springs [42]. Po technické stránce se jedná o velmi profesionální prezentaci, jejíž hlavní předností je motivační efekt. Obsahuje mnoho názorných obrázků. Nejdříve se poměrně podrobně věnuje elektromagnetickému záření, a dále spinu, NMR spektrometru a především určování struktury látek ze spekter. Souvislosti jsou znázorňovány barevně a poutavě. Na závěr je několik spekter k interpretaci. Negativně lze naopak hodnotit velké množství animace textu, především v první části, které působí rušivě.

V rámci vysokoškolské výuky NMR stojí za zmínku pět zajímavých zdrojů.

The basics of NMR [43]

Autorem je Dr. Hornak, profesor chemie a zobrazovacích metod na Rochesterově Institutu technologií v New Yorku.

Jedná se o velmi komplexní materiál na vysoké úrovni.

Graficky jsou stránky rozloženy do dvou oken – vpravo text, vlevo obsah. V rámci textu jsou odkazy na obrázky, tabulky, grafy, reference, figury, animace a jiné detaily – po kliknutí se zobrazí vlevo (místo obsahu).

V průběhu textu jsou odkazy na jiné, doplňující webové stránky k dané tematice.

Obsahuje základní i rozšiřující informace (pokročilé učivo je například matematika nukleární magnetické rezonance nebo princip zobrazování Fourierovou transformací). Zajímavou je kapitola Praktická stránka NMR, kde je popisováno jak připravit vzorek,

porovnávají se spektra stejné látky ze dvou spektrometrů o různé indukci magnetického pole nebo se mluví o ladění sondy. Na konci jsou příklady spekter k určování.

The basics of MRI [44]

Stránky jsou od stejného autora jako předchozí materiál [43] a mají stejnou koncepci. Text je v angličtině, italštině nebo ruštině.

Několik kapitol je v obou materiálech stejných (matematika NMR, spin, Fourierova transformace,...).

Na závěr každé kapitoly je několik problémových úloh s odpovědí.

Zajímavé jsou dvě poslední kapitoly – MRI a pacient (popis celého vyšetření) a Příklady klinických snímků z MRI.

Virtual Textbook of Organic Chemistry [45]

Jedná se o velmi rozsáhlý materiál vytvořený Prof. Williamem Reuschem na Michigan State University, Department of chemistry.

Pokrývá všechna témata organické chemie, včetně nukleární magnetické rezonance. Následující poznámky se budou týkat právě jen NMR.

Text je propojen odkazy na související témata z jiných částí této Virtuální učebnice, uvedeny jsou i odkazy na jiné zajímavé webové stránky k tématu.

Složité věci jsou jednoduše vysvětlované, didakticky se jedná nádherně zpracovaný materiál (barevný, motivační), obsahuje mnohé animace pro vysvětlení, obrázky, grafy, tabulky (po kliknutí na obrázek se ukáže vysvětlení – dává prostor se zamyslet).

Téma je rozděleno na ^1H NMR a ^{13}C NMR.

Na konci jsou příklady ^1H spekter k určování – sumární vzorec a spektrum. Po kliknutí na spektrum se objeví řešení. V řešení je stejnou barvou označen signál a jemu odpovídající část molekuly. K dispozici je integrace a velikost integrační konstanty.

Část o uhlíkové NMR spektroskopii je kratší, nejsou příklady k procvičování – pouze jedno na ukázkou (možnost překlikávat mezi dekaplovanou a nedekaplovanou formou).

Závěrem je deset problémových úloh s řešením.

Není zde zmíněno MRI.

Magritek [49]

Magritek je firma zabývající se praktickým využitím NMR a MRI – poskytuje vybavení laboratoří, výukové programy a nabízí různé aplikace pro chemický, ropný, potravinářský a výrobní průmysl.

Pro výuku NMR vytvořila deset krátkých výukových videí (cca šestiminutových). Videi provází Sir Paul Callaghan, fyzik na Victoria University of Wellington. Videi jsou velmi názorné a Callaghan využívá různá přirovnání k tomu, aby vysvětlil těžko představitelné pojmy a jevy. Například využívá obyčejné kolo z jízdniho kola, aby ukázal jaderný spin a vysvětlil precesi.

Spectral games [46]

Jedná se o webovou hru, kdy hráč určuje strukturu látky z předloženého spektra.

Hráč se zaregistruje a vybere si z nabídky, jaká spektra chce určovat (^1H NMR, ^{13}C NMR, IR, UV-Vis,...). Po zobrazení spektra vybírá ze dvou možností – ze dvou molekul. Za každou správnou odpověď získává bod, při první špatné odpovědi hra končí. V NMR spektrech je zakreslená integrální křivka. Jedná se o reálná spektra, často s velkým množstvím šumu. Určování je poměrně obtížné.

5. PRAKTICKÁ ČÁST

5.1. Pojetí praktické části

Ačkoliv je NMR nenahraditelnou a velmi běžně používanou metodou v chemii i v medicíně, neexistují k ní v češtině komplexní učební materiály, které by byly srozumitelné nejen vysokoškolským studentům chemie, ale i zájemcům z řad studentů středních škol nebo širší veřejnosti.

Materiál, který byl vytvořen, má za úkol doplnit tyto chybějící zdroje. Aby byl tento cíl splněn, musí být práce dostupná. Proto bude, v případě úspěšného recenzního řízení, umístěna na výukový portál www.studiumchemie.cz.

Práce je zaměřena především na středoškolské učitele a jejich studenty, kteří se zajímají o moderní chemii. Obsahuje dostatečné množství informací, takže z něj mohou čerpat jako ze studijního materiálu, mnoho příkladů, ze kterých mohou vybírat, návrhů, jak daný problém vysvětlit (různé analogie). Pro zájemce z řad studentů je pak pro práci zvolen přístupný jazyk, jehož úkolem je udržovat pozornost čtenářů a motivovat je k dalšímu čtení.

A právě těmito zmíněnými vlastnostmi se materiál snaží odlišit od dvou materiálů na téma NMR vypracovaných pro středoškolské studenty (seriálu KSICHTU [13] a příručky pro chemickou olympiádu [14]). Jedná se o materiál rozsáhlejší než dva zmíněné (vytvořený materiál: 35 normostran, seriál KSICHTU: 7 normostran, příručka k chemické olympiádě: 18 normostran), jehož cílem je postupovat vždy od začátku – vysvětlovat všechno, nepředpokládat u studentů rozsáhlé znalosti z fyziky a chemie, vysvětlovat každý pojem. Snaží se o vysloveně polopatický, „blbuvzdorný“ přístup, avšak zároveň zprostředkovat maximální množství informací, které je středoškolák schopen pochopit.

Z hlediska kritérií používaných v tabulkách při recenzi, splňuje tento materiál všechny: obsahuje obrázky, vzorce, zmiňuje historii, zajímavosti (kapitola o MRI) a zahrnuje příklady k procvičování.

Při tvorbě textu vyvstala otázka, jak vysvětlit fyzikální princip metody, který je založený na kvantové chemii a velmi náročný na pochopení. Proto byly zvoleny různé analogie, například představa vzorku měřené látky jako ladičky nástrojů, radiofrekvenčního pulsu jako zdroje mnoho tónů najednou, jádra atomu jako kompasu nebo kola. Precese jádra byla popisována na dětské káče.

Nově vytvořený materiál oproti dvěma výše zmiňovaným také nabízí navíc databázi reálných naměřených spekter, která jsou uspořádána do příkladů sloužících k procvičování jejich interpretace. Na začátku databáze je jakýsi „návod“, jak při určování postupovat, čeho si ve spektrech všimnout a co neopomenout. Každý příklad se stává se sumárního vzorce určované (neznámé) látky a jejího vodíkového a uhlíkového spektra. U některých příkladů jsou vodíková spektra měřena ve dvou různých rozpouštědlech (protickém a aprotickém) a uhlíková spektra dekaplovaná a nedekaplovaná. Poté následuje řešení – strukturní vzorec látky, který má očíslované atomy, a ty jsou přiřazeny jednotlivých signálům. Každý příklad končí vysvětlením – „jak na to přijít“.

Nově vytvořený materiál je doplněn dvěma testy, které jistě každý učitel ocení. Testové otázky byly vytvořeny s pomocí testů vytvořených na Univerzitě v Glasgow [50].

Výukový text byl zpracováván na základě vlastních poznatků, materiálů z navštěvované přednášky Spektrální metody NMR I na Přírodovědecké fakultě UK [20], [22], textu vytvořeného pro KSICHT [13], chemické olympiády [14] a skript z VSCHT [27]. Dále byla využita Organická chemie od McMurryho [47], prezentace Lékařské fakulty Masarykovy univerzity [32] a pro zpracování kapitoly o MRI okrajově také MRI in Practice [48], výukové DVD s Paulem Callaghamem [49] a The basics of MRI [44].

Z devadesáti obrázků, které text obsahuje, je 17 obrázků vlastních (14 vytvořených v programu ChemSketch, 3 fotografie), 26 spekter vygenerovaných v programu ChemDraw, 4 spektra naměřená (spektra z vlastní databáze) a 43 obrázků je převzatých z internetu (8 z toho je upravovaných v programu Malování – anglické popisky, dokreslení).

Obrázky byly převzaty z internetu z důvodu přílišné komplikovanosti pro vlastnoruční překreslování. Zdrojem fotografií NMR spektrometrů je také internet, protože nebylo

jednoduše proveditelné umístit všechny hlavní součásti spektrometru do jednoho obrázku (účelem bylo ukázat spektrometr celý).

Návrh na rozdělení tématu Nukleární magnetická rezonance do vyučovacích hodin

Možnosti implementace tématu Nukleární magnetická rezonance do výuky chemie závisí především na hodinové dotaci chemie na konkrétních školách. Nejsnáze je zařaditelné do chemického semináře. Na probrání celého učiva navrhuji dva dvouhodinové semináře. Jednu z možností jak učivo rozvrhnout ukazuje následující Tabulka 27.

Tabulka 27: Návrh na rozložení tématu NMR do dvou seminářů

1. hodina	motivace (běžná praxe chemiků, lékařství – odhalování nádorů, methanolová aféra), historie, fotografie přístroje a kyvet
	princip metody
2. hodina	jak číst spektra – chemický posun, počet, intenzita a multiplicita signálů, vyměnitelné vodíky, rozpouštědla
3. hodina	interpretace spekter
4. hodina	

5.2. Výukový text

NUKLEÁRNÍ MAGNETICKÁ REZONANCE

Obsah

1. Co je to nukleární magnetická rezonance?	42
2. Teoretický úvod – co ve vzorku měříme?.....	47
3. Snímání dat – jak vzorek měříme?.....	49
4. Interpretace NMR spektra – jak „čteme“ spektra?	56
a) Chemický posun.....	56
b) Počet signálů.....	61
c) Intenzita signálu	65
d) Multiplicita signálu	69
e) Rozpouštědla	76
f) Vyměnitelné vodíky	77
5. NMR spektrometr – přístroj	80
6. MRI.....	83
Další vhodná literatura na téma NMR doporučená čtenářům (vhodná i pro studenty).....	88
Seznam použitých zdrojů	89

1. Co je to nukleární magnetická rezonance?

Existují metody, kterými můžeme odlišit jednu látku od druhé. Jednou z těchto to metod je Nukleární magnetická rezonance (NMR).

Touto metodou můžeme zjišťovat struktury jednotlivých sloučenin.

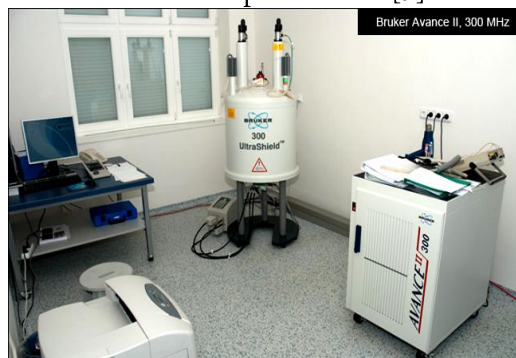
Jsou chvíle, kdy je důležité umět rozlišit dvě látky, které vypadají, voní i chutnají stejně – například ethanol a methanol. Vzpomeňme si na methanolovou aféru v roce 2012, kdy zemřelo 39 lidí a mnoho dalších oslepo [1]. K tomu můžeme využít Nukleární magnetickou rezonanci.

Umístíme vzorek látky do velkého přístroje zvaného NMR spektrometr a necháme ho v něm změřit.

Obrázek 1: NMR spektrometr [2]

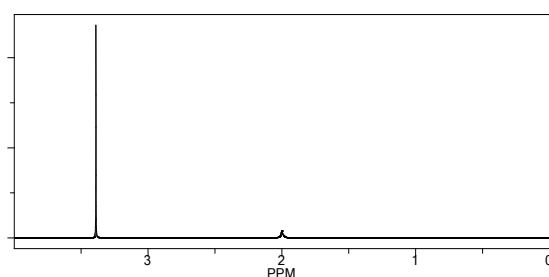


Obrázek 2: NMR spektrometr [3]

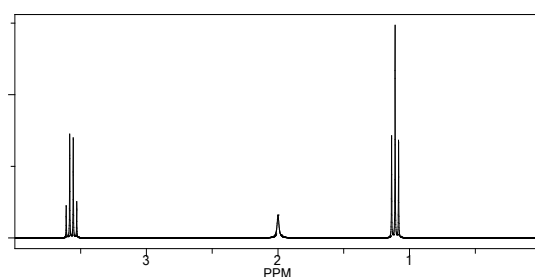


Tím získáme tato spektra:

Obrázek 3: Spektrum methanolu – CH_3OH



Obrázek 4: Spektrum ethanolu – $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$

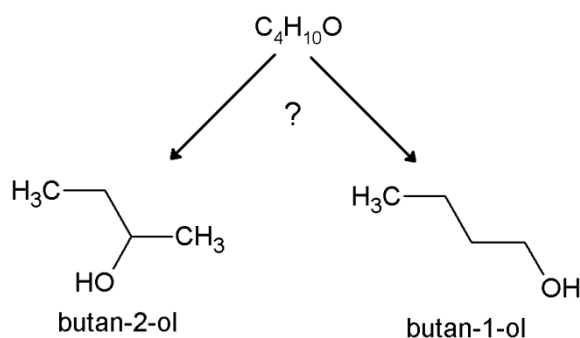


Vidíme, že spektra se liší. Každá látka totiž poskytuje jiné signály.

Nukleární magnetickou rezonanci používají chemici, když v laboratoři pracují na nějakém experimentu a potřebují ověřit, zda jim vznikl očekávaný produkt, nebo když potřebují zjistit, kterým směrem reakce probíhala.

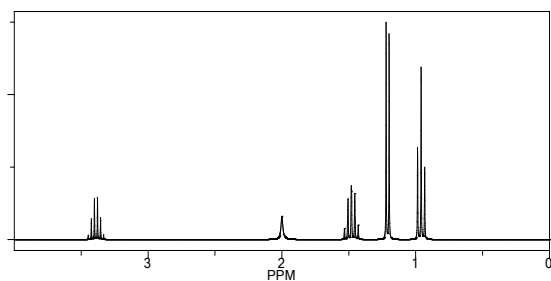
Také je možné odlišit dva izomery jedné látky. Izomery mají stejný sumární vzorec, ale jinak se liší – mají jiné uspořádání uhlíkového řetězce, jiné funkční skupiny,... Tímto je NMR naprosto unikátní ve srovnání s jinými spektrometrickými metodami.

Například strukturní vzorec $C_4H_{10}O$ mohou mít dvě látky – dva izomery – Obrázek 5:

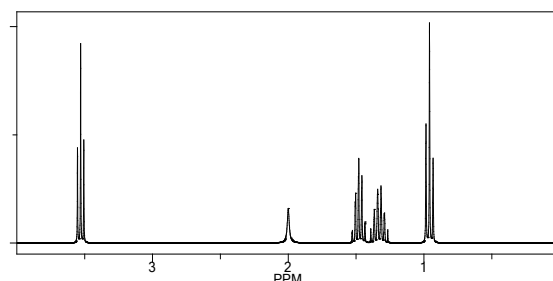


A každý z těchto izomerů má jiné spektrum:

Obrázek 6: Spektrum butan-2-olu



Obrázek 7: Spektrum butan-1-olu



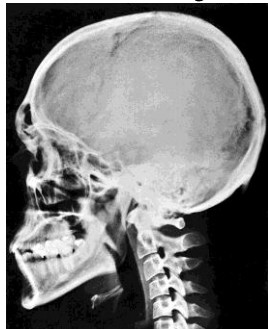
Obrovský význam má tato metoda také v medicíně. Nenazývá se však Nukleární magnetická rezonance, ale pouze Magnetická rezonance, nebo také Zobrazování magnetickou rezonancí a má zkratku MRI (je odvozená z anglického názvu Magnetic resonance imaging).

Pomocí MRI neměříme spektra, ale speciální snímky.

Podívejte se pozorně na následující dva obrázky – v čem se liší?

Na obrázku vlevo vidíme lebku = kost, na obrázku vpravo pak vidíme mozek = měkkou tkáň. Obrázek lebky vznikl pomocí rentgenu, kdežto obrázek mozku pomocí magnetické rezonance.

Obrázek 8: Rentgen [4]



Obrázek 9 Magnetická rezonance [5]

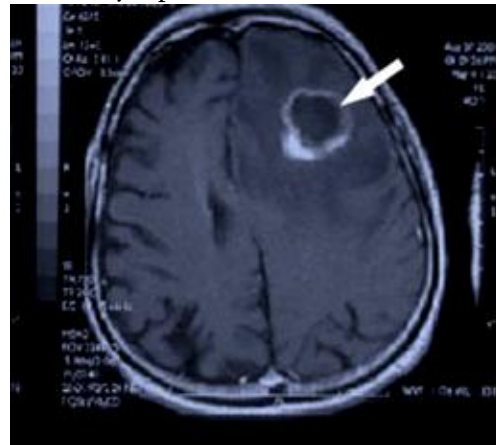


To nám demonstruje, že magnetická rezonance slouží k zobrazování měkkých tkání – měří rozložení a vlastnosti vody v těle – což se využívá například k odhalování nádorů.

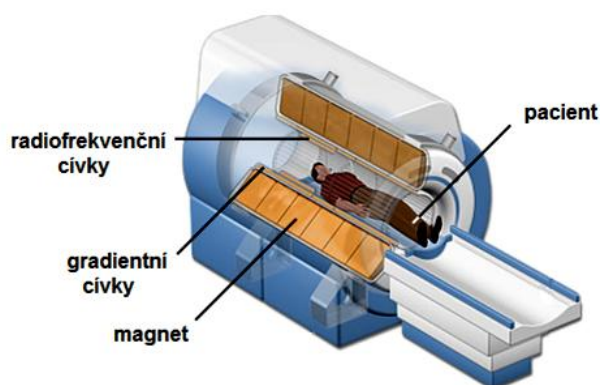
Obrázek 10: Přístroj používaný pro zobrazování magnetickou rezonancí, tzv. MR tomograf [6]



Obrázek 11: Nádor na mozku (označený šipkou) [7]



Obrázek 12 a 13: Umístění pacienta v MR tomografu [8, 9]



Kdybychom tedy měli ještě jednou shrnout využití Nukleární magnetické rezonance, tak bychom mohli říci, že se jedná o metodu velmi významnou a široce využívanou v mnohých chemických oborech a lékařských odvětvích:

V chemii se používá k identifikaci látek.

Je-li znám sumární vzorec látky (získaný pomocí jiných spektrometrických metod), je možné zjistit její strukturu. To znamená, že lze například od sebe odlišit izomery (funkční, polohové, řetězové, geometrické, ve speciálním rozpouštědle je možno odlišit i optické izomery). Za určitých podmínek je možné odlišit konformaci dané látky (např. židličková/vaničková konformace cyklohexanu). Toho se dá využít při ověřování struktury produktů, sledování průběhu reakcí.

Některé náročnější techniky umožňují dokonce sledovat trojrozměrnou strukturu biopolymerů (proteiny, polysacharidy, nukleové kyseliny), a to za podmínek velmi podobných fyziologickým, nebo zjišťovat slabé ne vazebné interakce mezi molekulami.

V lékařství se používá k zobrazování orgánů. Jedná se především o diagnostiku různých nádorů. Toto odvětví se nazývá Zobrazování magnetickou rezonancí.

Nukleární magnetická rezonance se používá od padesátých let minulého století a za její objev a rozvoj i za objevy jevů a principů, na jejichž základě NMR funguje, bylo uděleno několik Nobelových cen¹ za fyziku, chemii, fyziologii a medicínu:

V roce 1943 získal Nobelovu cenu za fyziku Otto Stern za **objev magnetického momentu protonu.**



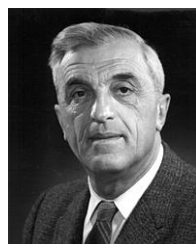
Obrázek 14 [10]



Obrázek 15 [11]

V roce 1944 získal Nobelovu cenu za fyziku Isidor Isaac Rabi za **objev metody pro zjištění magnetických vlastností atomových jader.**

V roce 1952 získali Nobelovu cenu za fyziku Felix Bloch a Edward Mills Purcell za **rozvoj nových metod pro zjišťování magnetických vlastností atomových jader a první detekci NMR signálu.**



Obrázek 16 [12]



Obrázek 17 [13]



Obrázek 18 [14]

V roce 1991 získal Nobelovu cenu za chemii Richard Robert Ernst za **rozvoj spektroskopie s vysokým rozlišením a za zavedení pulsních technik měření.**

V roce 2002 získal Nobelovu cenu za chemii Kurt Wüthrich za vývoj nukleární magnetické rezonance jako metody k **určování trojrozměrné struktury biologických makromolekul.**



Obrázek 19 [15]

¹ cizí pojmy jako magnetický moment a pulsní techniky měření budou vysvětleny dále v textu

² Co je to magnetický moment? K vysvětlení použijeme obyčejný magnet. Každý ze zkušenosti ví, jak se magnety chovají. Toto chování charakterizuje magnetický dipól. Když si nyní vezmeme místo



Obrázek 20 [16]



Obrázek 21 [17]

V roce 2003 získali Nobelovu cenu za fyziologii a medicínu Paul Christian Lauterbur a Peter Mansfield za **vypracování metody NMR-zobrazování.**

V následujících pěti kapitolách se čtenář dozví:

- které látky můžeme pomocí NMR spektroskopie měřit (kapitola 2)
- jaký je fyzikální princip celé metody (kapitola 3)
- jak ze spektra poznat strukturu látky (kapitola 4)
- jak vypadá a z čeho se skládá přístroj na měření NMR (kapitola 5)
- využití NMR v medicíně (kapitola 6)

2. Teoretický úvod – co ve vzorku měříme?

Nukleární = jaderná magnetická rezonance.

Již z názvu vyplývá, že se tato metoda zabývá jádry atomů.

Můžeme měřit všechna jádra atomů nebo jenom některá?

Podle čeho poznáme, která jádra jsou měřitelná?

Hlavní složkou spektrometru je velký magnet (konkrétně supravodivá cívka, která vytváří magnetické pole, viz kapitola 5). Některé atomy (jádra atomů) s tímto magnetem dokážou interagovat. A tuto interakci potom vidíme ve formě spektra.

Protože se zde jedná o jádra atomů, tak nezáleží pouze na tom, o který prvek se jedná, ale záleží konkrétně na daném izotopu prvku (například uhlík má izotopy ^{12}C , ^{13}C , ^{14}C , z čehož měřit můžeme pouze ^{13}C – viz dále)

Ovšem ne všechna jádra dokážou s magnetickým polem ve spektrometru interagovat. A podle toho je také dělíme do dvou skupin.

Jádra bez takzvaného magnetického momentu² μ

Tato jádra nedokážou interagovat \rightarrow nejsou pozorovatelná.

Jsou to jádra se sudým počtem protonů i neutronů, jako např. $^{12}_6\text{C}$, $^{16}_8\text{O}$, $^{32}_{16}\text{S}$.

Jádra s magnetickým momentem μ

Tato jádra dokážou interagovat \rightarrow jsou pozorovatelná.

Jsou jádra, která mají liché protonové nebo nukleonové číslo. Např. ^1_1H , $^{13}_6\text{C}$, $^{15}_7\text{N}$, $^{19}_9\text{F}$, $^{31}_{15}\text{P}$.

Ještě podrobnější dělení jader atomů prvků je odvozeno od takzvaného jaderného spinu, respektive jaderného spinového kvantového čísla neboli momentu hybnosti (viz následující kapitola). Toto číslo popisuje vlastnosti jádra atomu a značí se symbolem I . (Pozor! Nesmíme ho zaměňovat s pojmem Elektronové spinové kvantové číslo, které se týká elektronů a značí se symbolem s).

Obrázek 22:
„magnet“ – část
spektrometru [3]



² Co je to magnetický moment? K vysvětlení použijeme obyčejný magnet. Každý ze zkušenosti ví, jak se magnety chovají. Toto chování charakterizuje magnetický dipól. Když si nyní vezmeme místo magnetu jádro atomu, tak to samé chování nazýváme magnetický moment.

μ je řecké písmeno „mí“.

Dělení jader tedy můžeme rozšířit na:

1. Jádra bez magnetického momentu, která mají nulové jaderné spinové kvantové číslo a nejsou v NMR pozorovatelná.
2. Jádra s magnetickým momentem, která dále můžeme ještě rozdělit na:
 - a. Jádra se spinovým kvantovým číslem $I=1/2$. Tato jádra jsou snadno měřitelná. Příkladem je vodíkový proton, ^1H , který má vysoké přírodní zastoupení mezi jádry vodíku a je nejběžnějším měřeným jádrem. Uhlík ^{13}C představuje další často měřené jádro. Má nižší citlivost a zároveň nízké přírodní zastoupení (1,11 %), takže jeho signály („čáry“ ve spektru) jsou zhruba 5700 x slabší než signály ^1H . (Ten „klasický“ uhlík je ^{12}C – má sice přirozený výskyt 98,93 %, ale má sudý počet protonů a i neutronů, takže nelze měřit.) Další jádra se spinem $1/2$ jsou například ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P .
 - b. Jádra se spinovým kvantovým číslem I větším než $1/2$. Tato jádra jsou velmi často obtížně měřitelná. Jádra s lichým nukleonovým číslem mají poločíselná spinová kvantová čísla ($1/2$, $3/2$, $5/2$...). Jádra se sudým nukleonovým číslem a lichým protonovým číslem mají celočíselná spinová kvantová čísla (1, 2, 3...). Např. ^{14}N .

My se budeme zabývat jen jádry se spinovým kvantovým číslem $1/2$ (tedy ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P).

V praxi se nejčastěji měří vodík ^1H (měří se „vodíky“) a uhlík ^{13}C (měří se „uhlíky“).

Spektra, která jsme si ukazovali v první kapitole, jsou spektra, kdy se v daném vzorku měřily vodíky = jedná se o vodíková spektra.

3. Snímání dat – jak vzorek měříme?

Z předchozí kapitoly víme, že měřit můžeme jen jádra s magnetickým momentem, nejlépe se spinovým kvantovým číslem $I = 1/2$.

Co se s těmito jádry po vložení do NMR spektrometru stane?
Jaký je fyzikální princip této metody?

Kdybychom chtěli popsat, co se s atomovými jádry při NMR spektrometrii skutečně děje, museli bychom použít kvantovou teorii. Ovšem představovat si různé děje pomocí kvantové teorie je velmi složité, (je to vysokoškolské učivo), a proto si pomůžeme pomocí různých přirovnání.

Při NMR spektrometrii umístíme jádra do magnetického pole vytvářeného v NMR spektrometru.

Jen pro představu – magnetické pole Země má magnetickou indukci (intenzitu³) 1 Gauss a oproti tomu magnetické pole ve spektrometru má indukci (intenzitu) 100 000 Gauss. Spektrometr má tedy magnetické pole stotisíckrát větší než Země!

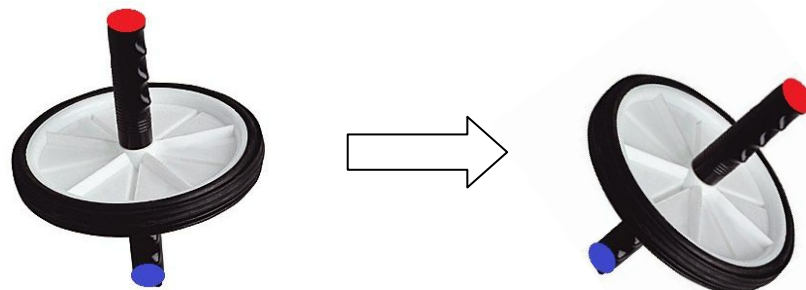
V magnetickém poli se jádra atomů chovají podobně, jako se chová všem známá dětská káča. Toto chování se potom zkoumá pomocí radiofrekvenčního záření.

Pojďme si to vysvětlit.

Představme si jádro jako kolo.

Když kolo (umístěné v gravitačním poli Země) postavíme na osu, tak spadne (protože se snaží být ve stavu s nejnižší energií).

Obrázek 23: Jádro jako kolo [upraveno dle 18]



Jenže každé jádro má oproti kolu vlastnost, díky které nespadne.

³ hodnota magnetické indukce číselně odpovídá intenzitě magnetického pole; jednotka Gauss odpovídá 10^{-4} Tesla

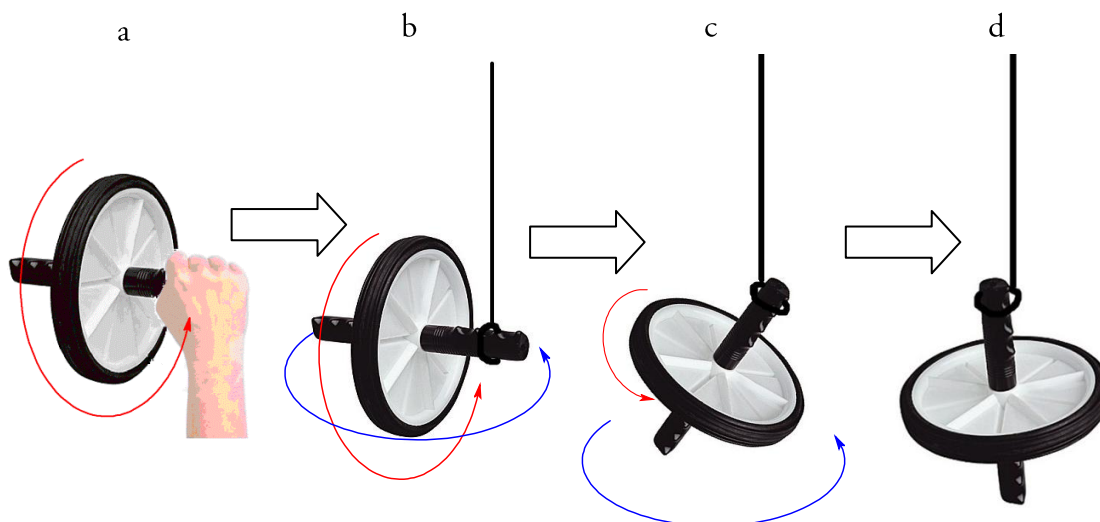
Této vlastnosti se říká **spin** (spinové kvantové číslo), nebo také **moment hybnosti**. Spin si můžeme představit tak, že vezmeme kolo a roztočíme ho. Točící se kolo má spin.

(Jádro jako takové se sice ve skutečnosti netočí, nicméně navenek se tak projevuje. A ostatně - kdyby se na otáčejícím se kolu nemíhala struktura výpletu, také bychom si nevšimli, že se točí.) Můžeme říct, že jaderný spin má původ ve vnitřní struktuře jádra.

Nyní si ukážeme, jak se takové obyčejné kolo chová, když se točí. Pokud ho chytré zavěsíme na provaz za jednu jeho osu, tak nejen že nespadne, ale ještě začne vykonávat specifické pohyby.

Chytneme kolo za jeho osu a roztočíme ho (šipka červeně, Obrázek 24 a). Roztočené ho zavěšíme na provaz.

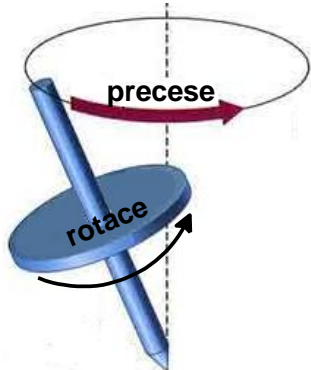
Obrázek 24, upraveno dle [18], [19]



Nyní začne kolo vykonávat ještě druhý pohyb (modře, Obrázek 24 b). Bude se stále točit kolem vlastní osy (červeně) a zároveň se začne točit kolem dokola provazu (modře). Tento druhý pohyb nazýváme **precesí** (Obrázek 24 b, c).

Takhle to skutečně funguje – můžete si to sami vyzkoušet.

Obrázek 25: Precese [20]



Precesi zná každý z nás, protože to je pohyb, který vykonává dětská káča. Když káču roztočíme, tak se točí na špičce a rovně stojí, (protože je osa otáčení přesně svislá). Když osu vychýlíme, začne precedovat.

Osa káči opisuje povrch kužele obráceného špičkou dolů.

Obrázek 26: Dětská káča [21]



Stejně se chová i kolo zavěšené na provaze. Jeho otáčení se při precesi zpomaluje, až se nakonec točit přestane a spadne – Obrázek 24 c. (Na našich obrázcích visí na provaze, takže nespadne, ale zůstane volně viset).

Shrneme to: jádro má tedy spin. Pokud ho umístíme do magnetického pole ve spektrometru, začne vykonávat precesi. Chová se podobně, jako dětská káča.

V magnetické rezonanci měříme frekvenci, s kterou jádro vykonává precesi. (Kdybychom měřili frekvenci precese u káči, počítali bychom, kolikrát za určitý čas "opíše kolečko".) Každé jádro preceduje s jinou frekvencí – závisí to na sloučenině, které je součástí (důvod si vysvětlíme v následující kapitole). Takže podle frekvence precese jednotlivých jader od sebe rozeznáme různé látky.

Můžeme ji vypočítat podle vzorečku (1):

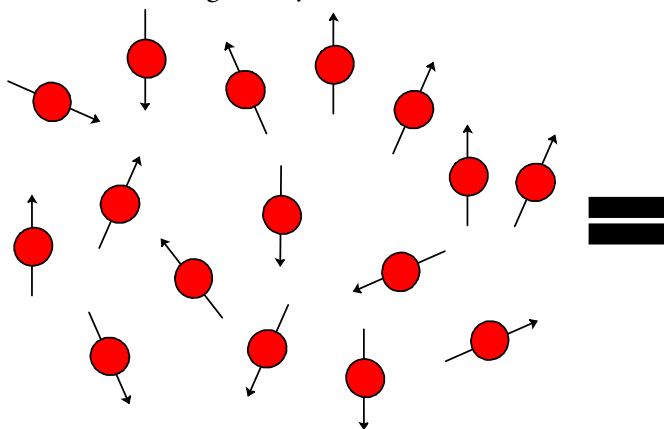
$$(1) \omega = \gamma \cdot B_0,$$

kde je ω frekvence, γ je gyromagnetický poměr (konstanta charakteristická pro jádro každého izotopu) a B_0 je indukce vnějšího magnetického pole.

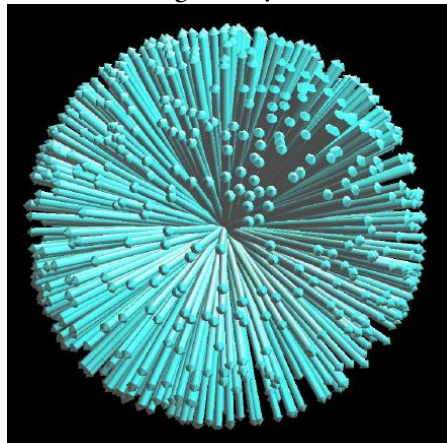
Kromě spinu – momentu hybnosti – má každé měřitelné jádro (ať už je umístěné v magnetickém poli nebo není) ještě další vlastnost, které se říká **magnetický moment**⁴.

Když jádra nejsou umístěna v magnetickém poli, může být jejich magnetický moment orientován naprosto náhodně. Jelikož jsou jader milióny, tak každým směrem je orientováno stejné množství jader.

Obrázek 27: Magnetický moment



Obrázek 28: Magnetický moment [22]



Oba obrázky znázorňují stejnou situaci – mnoho jader náhodné orientace. Šipičky (černé na obr. vlevo a modré na obr. vpravo) značí magnetický moment.

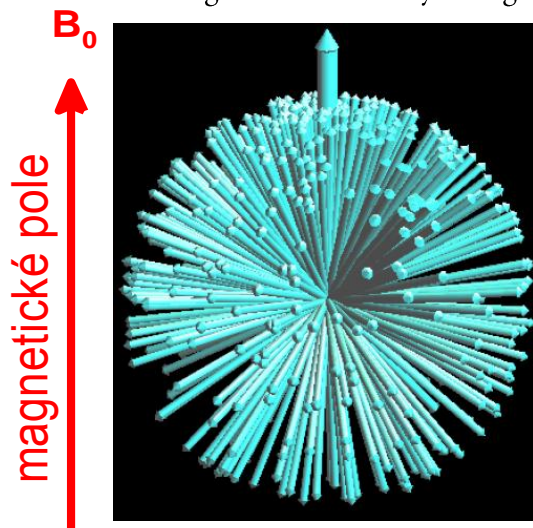
Když jádra umístíme do magnetického pole, tak už jejich orientace nebude náhodná – ve všech směrech stejná. Důvodem je, že magnetické pole (B_0) má nějaký směr. Jádra umístěná do magnetického pole začnou

a) vykonávat precesi

⁴ Vysvětlení viz kapitola 2.

b) měnit svoji orientaci v závislosti na směru magnetického pole. Výsledkem je, že o něco málo více jader je zorientováno ve směru magnetického pole, neboť tato pozice je méně energeticky náročná než pozice opačná.

Obrázek 29: Magnetické momenty v magnetickém poli [23]



Všimněte si, že šipičky v dolní části obrázku prořídly – více šipek je orientováno směrem nahoru – tedy ve směru magnetického pole.

Součtem všech magnetických momentů jader (šipiček) je veličina zvaná **magnetizace** (tlustá šipka – ale je to jenom ukázka směru – není to jedno velké tlusté jádro).

Každý jednotlivý magnetický moment vykonává precesi, ale jejich součet, magnetizace, nikoli.

Když jádra nejsou umístěna v magnetickém poli, tak žádnou magnetizaci nezískáme, protože magnetické momenty jsou náhodné a jejich součtem získáme nulu – nulová magnetizace (navzájem se odečtou).

Vrátíme se ještě jednou ke vzorečku 1 a připomeneme si, že naším cílem je změřit frekvenci. Jsou dvě metody, jak to udělat.

První metoda, kterou si vysvětlíme, je takzvaná Pulsní metoda.

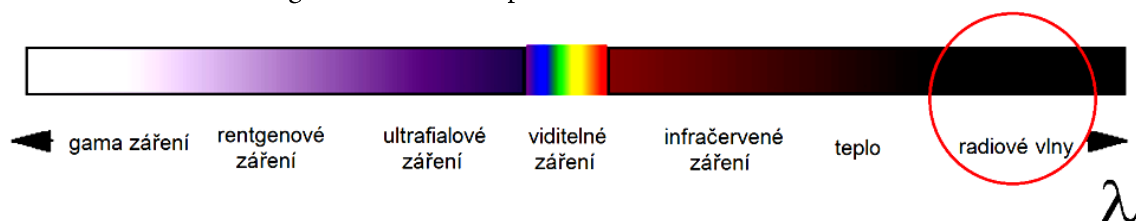
Druhá metoda se nazývá Kontinuální, ale dnes se již nepoužívá.

Pulsní metoda

Cílem je změřit frekvenci precese.

Vzorek je umístěn v NMR spektrometru do jádra cívky, kterou protéká střídavý proud a vytváří v ní další magnetické pole orientované kolmo k základnímu statickému. Pomocí proudu se vyše na jádro velmi krátký radiofrekvenční puls o trvání řádově několik mikrosekund. Radiofrekvenční záření je oblast elektromagnetického záření, která spadá do oblasti rádiových vln.

Obrázek 30: Elektromagnetické záření [upraveno dle 24]



Pokud je precese měřeného jádra shodná s frekvencí pulsu měřící cívky, tak dojde k takzvané **rezonanci**. Rezonance způsobí, že se celá magnetizace začne vychylovat ze směru

magnetického pole B_0 a po skončení pulsu bude precedovat stejně, jak jsme si vysvětlili u magnetického momentu. Precedující magnetizace nám indukuje elektrickou odezvu v měřící cívce (velmi citlivé anténě).

Shrňme to ještě jednou. Nejdřív precesi vykonávají jenom magnetické momenty jader. To se ale nedá změřit, protože magnetické momenty každého jádra jsou mikroskopické veličiny a je jich velké množství. Celá magnetizace je ale veličinou makroskopickou – ta by se změřit dala – ale ona nepreceduje. Jak to uděláme?

Vyšleme na ní puls radiofrekvenčního záření. Ten ji vychýlí (velká šipka se nakloní). Pak tento puls vypneme – a teď – celá magnetizace vykonává precesi! Jako když jsme vychýlili osu káčí. Ta nám pak indukuje proud v měřící cívce a my to změříme.

Také bychom si mohli celý proces vysvětlit přirovnáním:

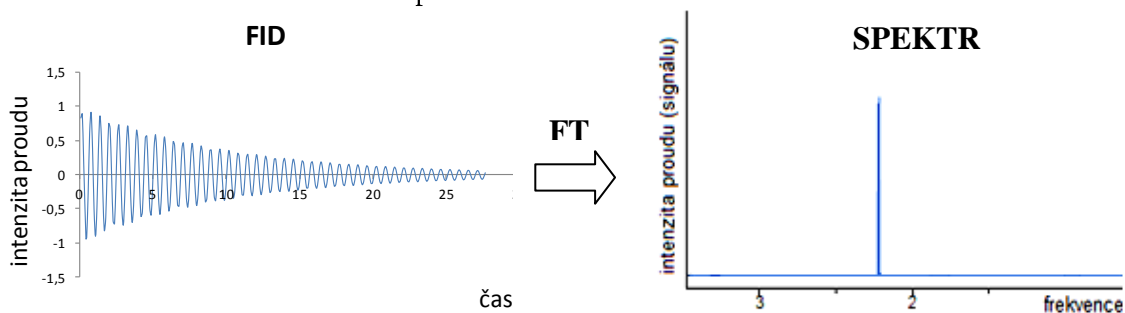
Vzorek si můžeme představit jako ladičku, krátký radiofrekvenční puls jako zdroj mnoha tónů najednou. Ladička je naladěná na jeden tón = má vlastní frekvenci odpovídající tomu tónu. Pustíme-li ladičce mnoho tónů najednou, zachytí z toho ten jeden tón, který má stejnou frekvenci jako ona a rozezná se = začne rezonovat. Když zdroj tónů vypneme, ladička zní dál tím jedním tónem. A frekvenci toho daného tónu my změříme.

Obrázek 31: Ladička [25]



Tón ladičky postupně slábne, což se v přístroji projeví jako tzv. FID (free induction decay, volné doznívání indukce). FID má tvar exponenciálně tlumené periodické funkce. Představuje závislost intenzity proudu indukovaného ve snímací cívce na čase. V počítači je podroben matematické operaci, která se nazývá Fourierova transformace (zkratka FT). Pomocí ní dostaneme výsledné spektrum – závislost intenzity na frekvenci. Modře je označen výsledný signál ve spektru.

Obrázek 32: Převedení FIDu na spektrum



Kontinuální metoda

Tato metoda vychází z trochu jiného pohledu na celý princip. Pojdme se na něj podívat.

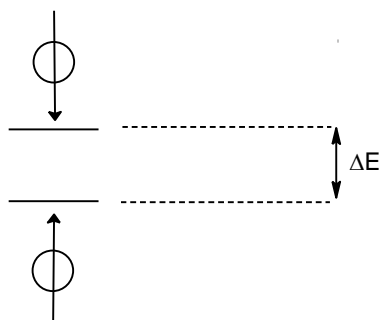
Představme si jádro jako kompas. Jeho střílka směřuje na sever, tedy ve směru magnetického pole vytvářeného Zemí. Kdybychom chtěli, aby směřovala opačným směrem, museli bychom ji násilím otočit – museli bychom dodat energii, abychom ji dostali do tohoto energeticky velmi náročného stavu.

Jádro v magnetickém poli vytvářeném ve spektrometru se chová v jistém ohledu podobně, jako střílka kompasu v magnetickém poli Země.

Obrázek 34: Jádro jako kompas [26]



Obrázek 33: Energetický rozdíl



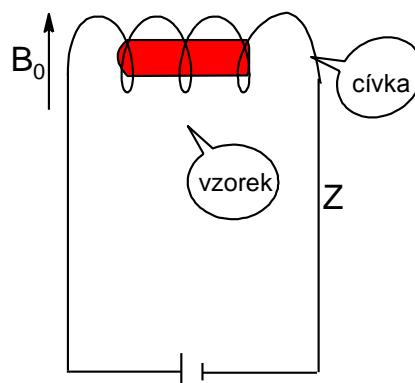
Dva stavy kompasu nám charakterizují dva možné stavy jádra, mezi nimiž lze vyvolat přeskok. Přeskok jádra z jednoho stavu do druhého můžeme vyvolat pomocí radiofrekvenčního záření. Z energetického rozdílu mezi oběma stavy (obrázek vlevo) můžeme vypočítat jeho frekvenci potřebnou k tomuto přeskoku,

$$(2) \Delta E = \omega \cdot h,$$

kde h je Planckova konstanta a ω je frekvence přechodu z jednoho stavu do druhého (když se vrátíme k představě jádra jako kola – tak z jedné pozice kola do druhé). Čím větší je intenzita magnetického pole vytvářeného v NMR spektrometru, tím větší je energetický rozdíl mezi těmito dvěma stavy. Naším cílem je změřit frekvenci přechodu jádra z jednoho stavu do druhého.

Máme elektrický obvod s cívkou. Obvod je připojen ke zdroji střídavého proudu. Ten v cívce vytváří magnetické pole. V jádru cívky je umístěn vzorek. Měříme odpor (respektive u střídavého proudu Impedanci, Z) a měníme frekvenci střídavého proudu (tedy radiofrekvenčního záření uvnitř cívky). Při stejné frekvenci záření a frekvenci přechodu měřených jader z jednoho stavu do druhého dojde k **rezonanci** – projeví se tím, že se záření začne v cívce ztrácet (spotřebovávat na přechod do energeticky náročnějšího stavu) a změní se odpor (impedance).

Obrázek 35: Umístění vzorku v elektrickém obvodu



Tato změna se ve spektru projeví jako signál.

I zde můžeme pro lepší pochopení využít analogii s ladičkou.

Ladička je naladěná na jeden tón (například tón A) = to znamená, že ladička má vlastní frekvenci. Ale my nevíme, na který tón je ladička naladěna, takže jí pouštíme postupně, tón po tónu celou stupnicí, a teprve při tónu A se ladička rozezní. Jenže my to neslyšíme – jak pouštíme jednotlivé tóny, tak přehluší ten, při kterém se ladička rozezní – nemůžeme tedy měřit frekvenci tónu. Ale stane se něco jiného. Při tónu A se ladička nejen rozezní, ale začne i vibrovat – a právě intenzitu vibrací my změříme.

Kontinuální metoda se mimo jiné dnes nepoužívá proto, že je velmi časově náročná. Vidíme to i z příkladu na ladičce – je rozdíl, jestli pouštíme postupně tón po tónu nebo všechny tóny najednou.

Významnou výhodou Pulsní metody je fakt, že měření lze opakovat a signály sčítat, což značně zvyšuje citlivost měření⁵.

Takto vznikají signály (píky – z anglického peak = vrchol). Každá látka obsahuje jádra různých vlastností – rezonančních frekvencí. A proto je v každém spektru různý počet a různý typ (výška, poloha) signálů. Více si vysvětlíme v následující kapitole.

⁵ Opakovat měření a sčítat signály by teoreticky šlo i u kontinuální metody, ale trvalo by to řádově dny.

4. Interpretace NMR spektra – jak „čteme“ spektra?

Nyní se naučíme, jak rozumět spektrům – jak z nich umět „přečíst“ strukturu měřené látky.

Budou nás zajímat v podstatě čtyři věci:

ve které části osy x se pík nachází – takzvaný **chemický posun**

kolik píků daná látka poskytuje – **počet signálů**

jaká je plocha píku – **intenzita signálu**

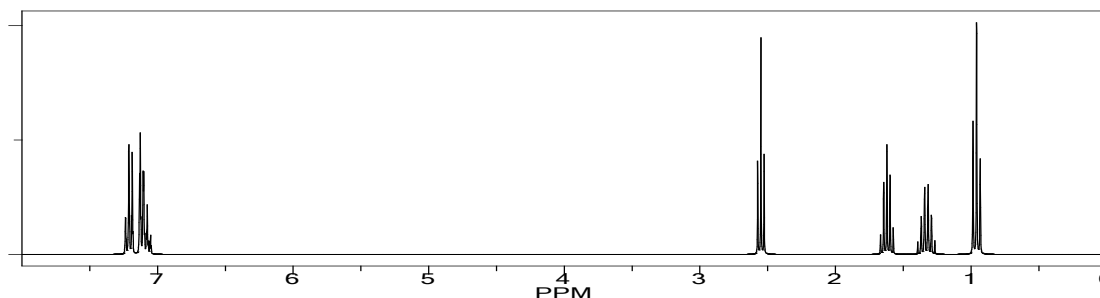
na kolik linií je pík rozdělený – **multiplicita signálu**

Dále se budeme zabývat:

rozpuštědly používanými v NMR spektrometrii

takzvanými **vyměnitelnými vodíky**

Obrázek 36: Ilustrační spektrum

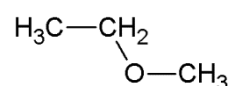


a) Chemický posun

Nyní už víme, že měříme frekvenci precese jader. Jak nám to ale pomůže k tomu, abychom od sebe odlišili všechny vodíky v molekule (pokud měříme vodíky) nebo všechny uhlíky v molekule (pokud měříme uhlíky)?

Na konci minulé kapitoly jsme si říkali, že každá látka obsahuje jádra různých vlastností – různých rezonančních frekvencí. Jak to? Každé jádro má frekvenci precese ovlivněnou tím, jaké jiné další atomy ho v jeho molekule obklopují. A to se projeví polohou signálu daného atomu (jádra) ve spektru.

Například molekula ethyl(methyl)etheru:



- skupina CH₃ v ethylu má jiné okolí než skupina CH₃ v methylu, skupina CH₂ má také jiné okolí než obě skupiny CH₃,

- proto by se ve spektru objevily tři různé signály (píky) – každý v jiné části osy x.

Proč to tak je? Důvodem je, že jádra atomů jsou od magnetického pole, v němž se nacházejí, stíněna elektrony, které jsou v molekule.

Elektrony totiž reagují na vnější magnetické pole (B_0) a vytvářejí vlastní magnetické pole ($B_{stínící}$), které má opačný směr než to vnější pole, do kterého se celý vzorek vkládá.

Na jádro tedy nepůsobí přímo vložené magnetické pole B_0 , ale pouze efektivní pole (B_{ef}), které je kvůli elektronům o něco slabší než vložené magnetické pole:

$$(3) B_{ef} = B_0 - B_{stínící}$$

Vztah mezi indukcí magnetického pole (B_0) a rezonanční frekvencí jádra je popsán vzorečkem⁶:

$$(4) \nu = \gamma B_0 / 2\pi$$

kde ν je rezonanční frekvence jádra (řecké písmeno „ný“),

γ je gyromagnetický poměr (konstanta charakteristická pro jádro každého izotopu) a

B_0 je indukce magnetického pole.

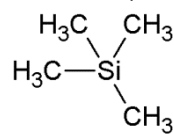
Při pohledu na vzorečky 3 a 4 vidíme, jak spolu souvisí **stínící elektrony**, B_0 a ν . Elektrony přímo úměrně mění velikost indukce magnetického pole B_0 a změnou B_0 se přímo úměrně mění rezonanční frekvence jádra ν .

To znamená – například – roste-li indukce magnetického pole, tak roste i rezonanční frekvence jádra.

Jak moc je jádro stíněno se ve spektru projeví tím, na jakém místě osy x se nachází.

Frekvence radiofrekvenčního záření, při níž dané jádro rezonuje, je ve spektru zobrazena na ose x a nazývá se chemický posun. Frekvence má jednotku hertz. Chemický posun se ale v hertzech udávat nemůže, protože by docházelo k tomu, že by jedna látka měla na různých přístrojích signály v různých částech osy x. Důvodem je, že každý přístroj má jinak velkou intenzitu magnetického pole (respektive jí odpovídající hodnotu indukce, B_0), a ta je přímo úměrná frekvenci, při které rezonují jádra (viz vzoreček 4).

tetramethylsilan



Ukážeme si to na příkladu: Ve spektrometru, který má $B_0 = 11,74$ T (T = Tesla – jednotka indukce magnetického pole), rezonují vodíky tetramethylsilanu při 500 000 000 Hz a na spektrometru, který má poloviční B_0 (tedy 5,87 T), rezonují při 250 000 000 Hz.

(Poznámka: všimněte si, že CH_3 skupiny v tetramethylsilanu mají všechny úplně stejné okolí – takže ve spektru by byl pouze jeden signál – na rozdíl od příkladu na začátku kapitoly – ethyl(methyl)etheru).

⁶ Vzoreček (1) $\omega = \gamma \cdot B_0$ a vzoreček (4) $\nu = \gamma B_0 / 2\pi$ jsou stejné. Akorát v druhém případě frekvence vyjde v hertzech (proto je výraz lomen 2π a proto je frekvence značena písmenkem „ný“).

V jakých jednotkách se tedy chemický posun uvádí, aby k tomuto problému nedocházelo? Zavedla se takzvaná stupnice delta δ s jednotkou ppm (= parts per milion, odpovídá miliontině frekvence). V této stupnici je frekvence měřených jader vztahována k frekvenci referenční sloučeniny, a díky tomu ať vzorek měříme v jakémkoliv přístroji, rezonuje při stejné hodnotě ppm = spektrum má píky na stejných místech osy x.

Na příkladu si můžeme ukázat, že to tak opravdu je:

Vztah mezi chemickým posunem v hertzech a ppm je následovný:

$$(5) \delta_x = \frac{v_x - v_{ref}}{v_{ref}} \cdot 10^6,$$

kde δ_x je chemický posun atomu x,

v_x je rezonanční frekvence atomu x,

v_{ref} je rezonanční frekvence referenční sloučeniny (u ^1H a ^{13}C spekter je to tetramethylsilan).

Na jednom spektrometru rezonují vodíky CH_3 skupiny methanolu při 500 001 650 Hz (referenční sloučenina tetramethylsilan rezonuje při 500 000 000 Hz) a na druhém spektrometru, který má poloviční intenzitu magnetického pole, rezonují při 250 000 825 Hz (referenční sloučenina tetramethylsilan rezonuje při 250 000 000 Hz).

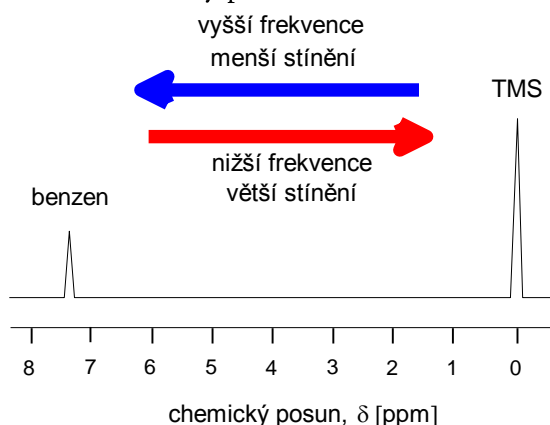
$$1. \text{ spektrometr: } \delta_{500001650} = \frac{500\,001\,650 - 500\,000\,000}{500\,000\,000} \cdot 10^6 = 3,3 \text{ ppm}$$

$$2. \text{ spektrometr: } \delta_{250000825} = \frac{250\,000\,825 - 250\,000\,000}{250\,000\,000} \cdot 10^6 = 3,3 \text{ ppm}$$

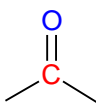
Vodíky CH_3 skupiny methanolu mají na obou spektrometrech chemický posun 3,3 ppm.

Čím více je jádro stíněno, tím nižší je rezonanční frekvence. A opačně.

Obrázek 37: Vliv elektronů na chemický posun



Na obrázku si všimněme poněkud nezvyklého směru⁷ osy x – roste zprava doleva.



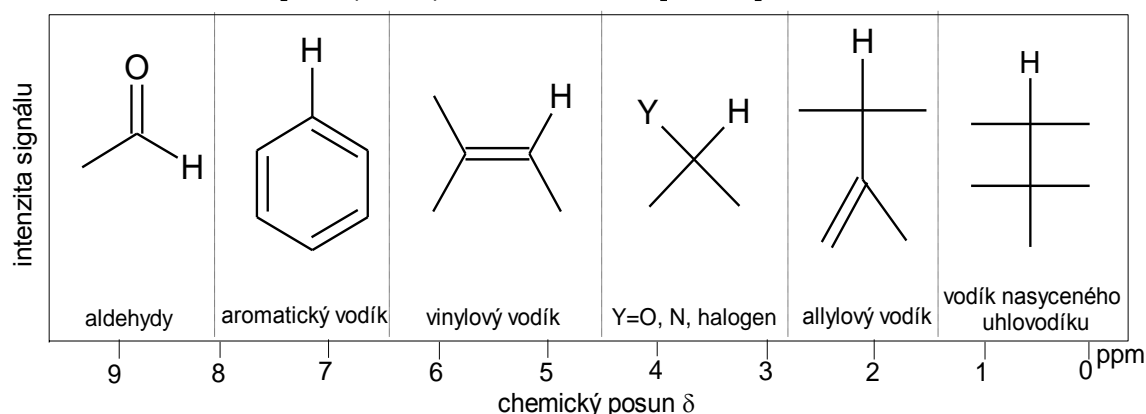
Ukažme si to na příkladu keto skupiny:

Měříme uhlík, kyslík tvoří jeho okolí. Kyslík má vysokou elektronegativitu – to znamená, že má velkou schopnost přitahovat k sobě elektrony. Tím pádem je uhlík málo stíněný elektrony (kyslík je přitáhl k sobě). Takže na uhlík působí relativně vysoké $B_{\text{efektivní}}$ ($B_{\text{stínící}}$ je malé). Ze vzorečku (4) vyplývá, že čím vyšší $B_{\text{efektivní}}$, tím vyšší je rezonanční frekvence jádra (\rightarrow vyšší chemický posun).

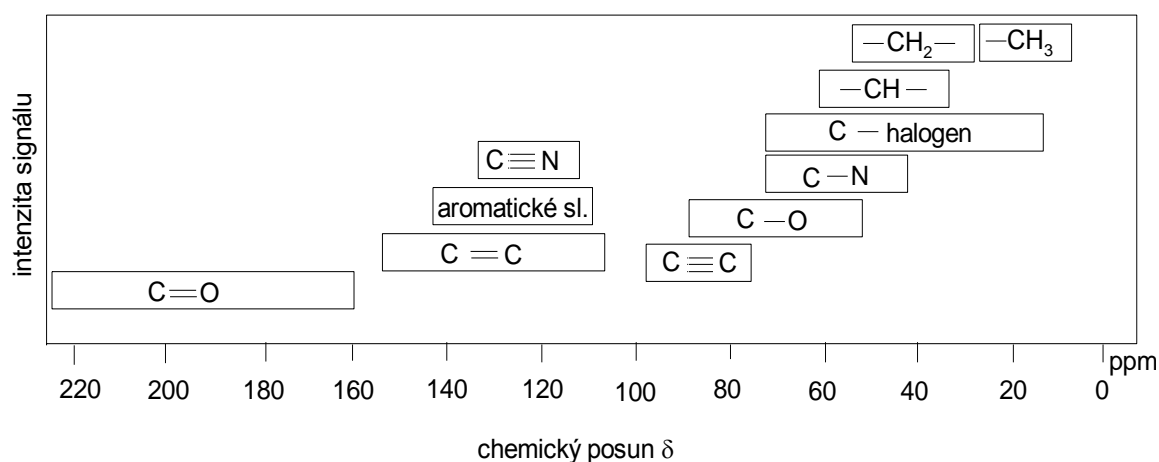
Takto bychom mohli rozebrat každou funkční skupinu a určit u ní, jestli bude mít spíše vyšší nebo nižší chemický posun – určit, jak na tom budou tyto funkční skupiny vůči sobě.

Hodnoty chemických posunů pro jednotlivé funkční skupiny jsou uvedeny v následující tabulce. Přičemž záleží na tom, jestli měříme vodíky, uhlíky nebo jiná jádra.

Tabulka 1: Chemické posuny různých funkčních skupin ve spektrech ^1H NMR



Tabulka 2: Chemické posuny různých funkčních skupin ve spektrech ^{13}C NMR



⁷ z historických důvodů

U obou tabulek si všimněte rozsahu osy x – hodnot ppm chemického posunu. U vodíkového spektra mají vodíky chemické posuny v rozmezí 0–10 ppm, u uhlíkového spektra mají uhlíky chemické posuny v rozmezí 0–220 ppm.

Nejnižší chemický posun mají alkylové skupiny (methylóvá, ethylová,...). Vyšší chemické posuny způsobují elektronegativní atomy (halogeny, dusík, kyslík) a násobné vazby. Velmi vysoké jsou chemické posuny aromatických jader. Úplně nejvyšší jsou potom v uhlíkových spektrech posuny aldehydové a ketonové skupiny.

Vliv různých substituentů na chemické posuny látek

Vodíky v methanu mají chemický posun 0,23 ppm. Když ovšem jeden či více z nich nahradíme nějakým substituentem, tak se posun zbylých vodíků změní. Tento fakt shrnuje následující tabulka, kde jsou chemické posuny (v ppm) vodíků různě substituovaného methanu.

Tabulka 3: Vliv různých substituentů na chemické posuny látek

Sloučenina	X = Cl	X = Br	X = I	X = O-R	X = S-R
CH ₃ X	3,0	2,7	2,1	3,1	2,1
CH ₂ X ₂	5,3	5,0	3,9	4,4	3,7
CHX ₃	7,3	6,8	4,9	5,0	

Z tabulky vyčteme, že čím elektronegativnější je substituent, tím vyšší mají zbylé vodíky posun.

Například jód má elektronegativitu 2,6 a chemický posun vodíků v jodmethanu je 2,1 ppm.

Oproti tomu chlor má elektronegativitu 3,1 a chemický posun vodíků v chlormethanu je 3,0 ppm.

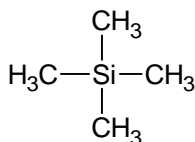
Dále můžeme z tabulky vyčíst, že čím více vodíků v methanu je nahrazeno nějakým substituentem, tím větší mají zbylé vodíky chemický posun.

Například vodíky chlormethanu mají posun 3,0, kdežto vodík trichlormethanu má posun 7,3 ppm.

Nebo ethery – skupina CH₃–O–R má menší chemický posun než CH₂–(O–R)₂

Tyto tendence jsou platné všeobecně.

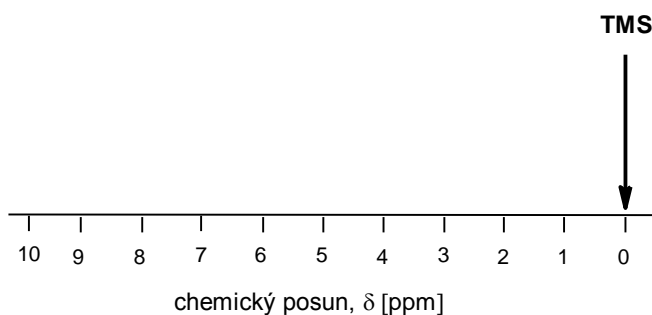
tetramethylsilan Do měřeného vzorku se někdy přidává malé množství takzvané referenční sloučeniny (standardu). U vodíkových a uhlíkových spekter je touto látkou tetramethylsilan (zkratka TMS). Byl vybrán pro svou inertnost. Výhodou je, že dává v obou typech spekter pouze jeden signál (okolí všech čtyřech skupin vodíků i uhlíků je stejné).



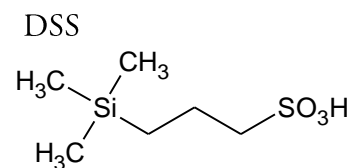
Referenční sloučenina je taková látka, ke které se vztahují posuny všech ostatních měřených látek a má chemický posun nula (což vyplývá z již zmiňovaného vzorečku (5))

$$\delta_x = \frac{v_x - v_{ref}}{v_{ref}} \cdot 10^6$$

Obrázek 38: Chemický posun TMS



Referenčních sloučenin existuje více. Tetramethylsilan není rozpustný ve vodě, takže když v ní chceme náš vzorek rozpustit, musíme použít jinou referenční sloučeninu. Například to může být 4,4-dimethyl-4-silapentan-1-sulfonová kyselina = DSS, jejíž devět methylových vodíků dává signál s chemickým posunem 0 ppm.



b) Počet signálů

Každá látka poskytuje jiné spektrum – spektrum s jinými signály. Nyní se budeme zabývat jejich počtem. Počet signálů jedné látky se může lišit, podle toho, jestli měříme u dané látky vodíky (vodíkové spektrum) nebo uhlíky (uhlíkové spektrum).

Nejdříve si vysvětlíme **vodíkové spektrum**.

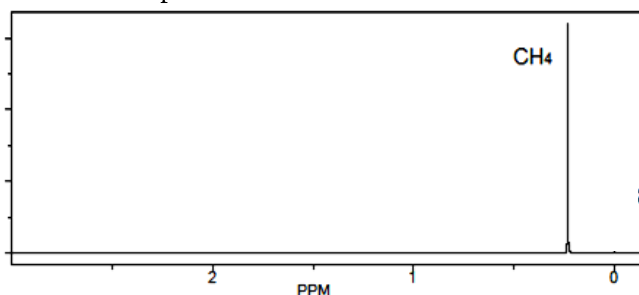
Látka poskytuje tolik signálů, kolik různých vodíků nebo skupin vodíků obsahuje. Vysvětlíme si to na příkladech.

Methan CH_4 má čtyři vodíky, které jsou stejné – proto poskytuje jeden signál.

Co si představit pod pojmem „stejně“ vodíky?

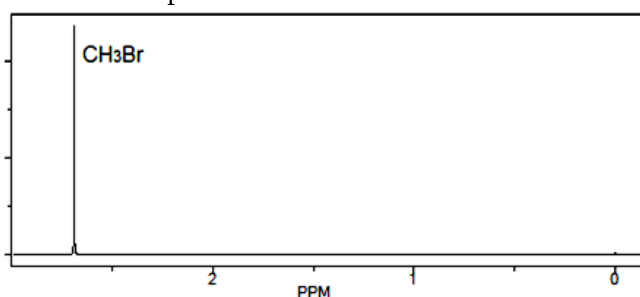
Kdybychom v methanu jeden ze čtyř vodíků vyměnili za nějaký jiný prvek, vznikla by ta samá látka, jako kdybychom za tento prvek vyměnili jiný z vodíků v methanu. Jinak řečeno – stejné vodíky mají stejné okolí.

Obrázek 39: Spektrum methanu



Brommethan CH_3Br má tři vodíky, které jsou stejné, proto poskytuje jeden signál. Oproti methanu si můžeme všimnout vyššího chemického posunu způsobeného elektronegativním brómem.

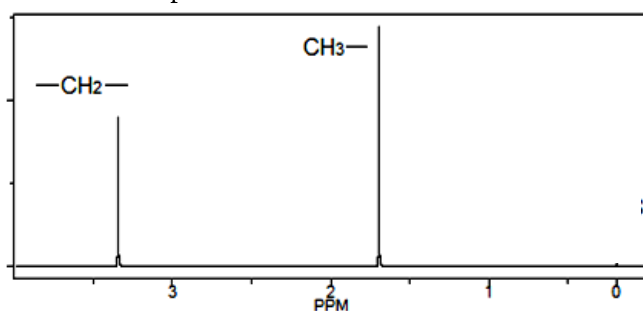
Obrázek 40: Spektrum brommethanu



Bromethan $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ má dva typy vodíků – jeden typ tvoří tři vodíky ve skupině CH_3 a druhý dva ve skupině CH_2 . Takže látka poskytuje dva signály.

Všimněte si, že vodíky, které jsou blíž elektronegativnímu brómu, mají větší chemický posun.

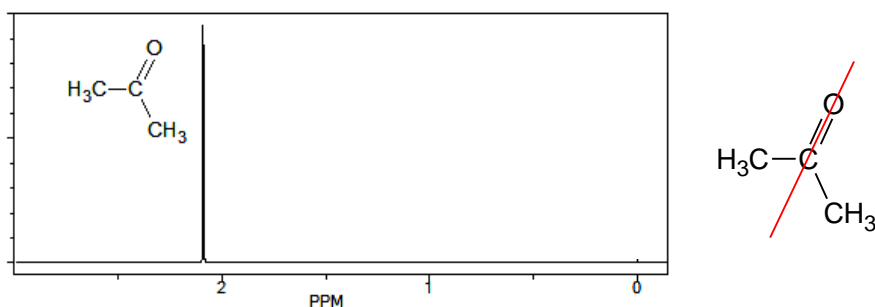
Obrázek 41: Spektrum bromethanu



Dalším faktem, který musíme brát v potaz, je symetrie. Vodíky, které jsou vzájemně symetrické, jsou stejné.

Například propanon má dvě methylové skupiny – ale obě jsou stejné, protože molekula je symetrická – červená čára značí zrcadlo – takže ve výsledku má tato molekula jednom jeden typ vodíků – čemuž odpovídá jeden signál ve spektru.

Obrázek 42: Spektrum propanonu



Podívejme se na několik příkladů symetrických molekul, které dávají v ^1H spektru jen jeden signál.

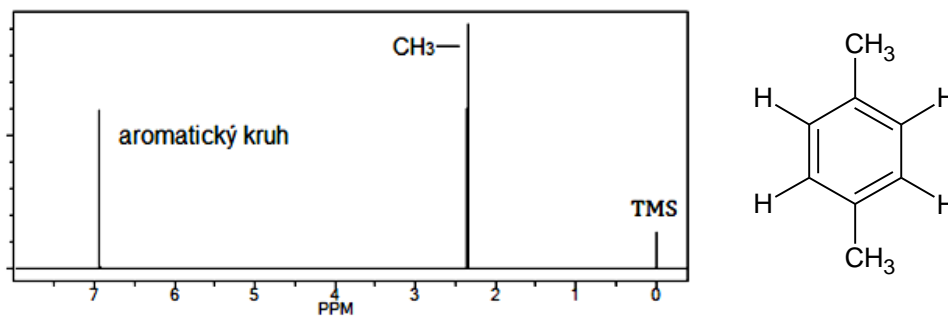
Obrázek 43: Symetrické molekuly (červenými čarami je znázorněna symetrie molekul)

benzen	dioxan	aceton	cyklohexan

1,4-dimethylbenzen má stejné obě methylové skupiny, stejně tak jako čtyři vodíky na aromatickém kruhu. Proto poskytuje dva signály.

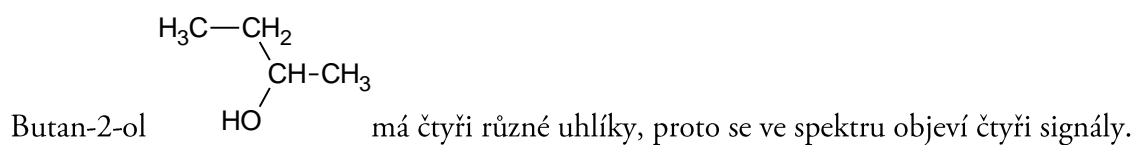
Všimněte si vysokého chemického posunu u vodíků na aromatickém kruhu.

Obrázek 44: Spektrum 1,4-dimethylbenzenu

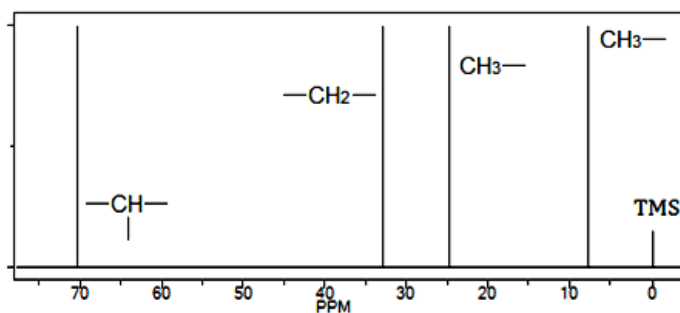


Nyní si ukážeme **uhlíkové spektrum**.

I zde platí, že látka poskytuje tolik signálů, kolik různých uhlíků obsahuje, stejně tak jako že uhlíky, které jsou vzájemně symetrické, jsou stejné.

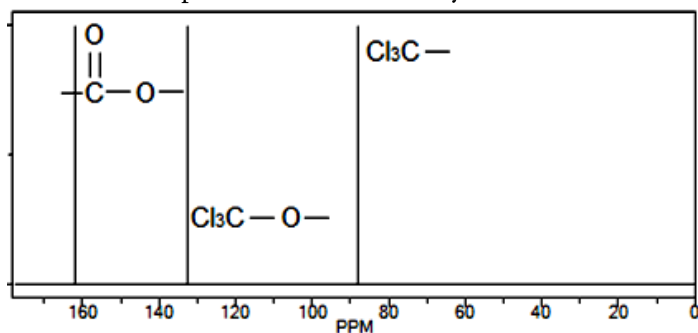


Obrázek 45: Spektrum butan-2-olu



Trichlormethyl trichloracetát CCl3C(=O)OCCl3 má tři různé uhlíky, proto budou ve spektru tři signály. Nejvyšší chemický posun má karboxylová skupina.

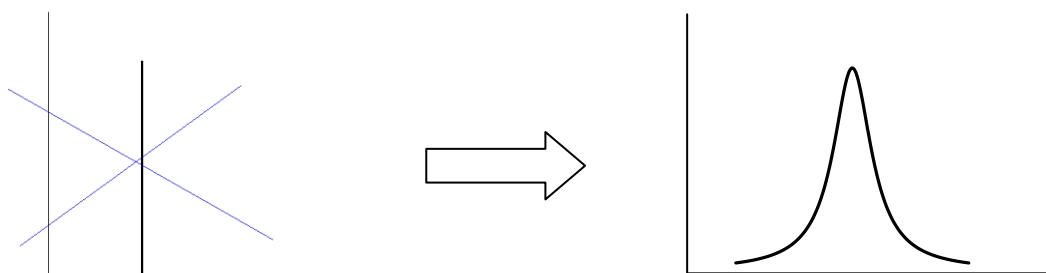
Obrázek 46: Spektrum trichlormethyl trichloracetátu



c) Intenzita signálu

Signál není jen „čárka“, jak to někdy ve zmenšeném spektru vypadá nebo se zjednodušeně kreslí. Vždy má nějakou plochu. A tato plocha udává Intenzitu signálu. Je dána počtem jader, která vyvolaly jeho vznik.

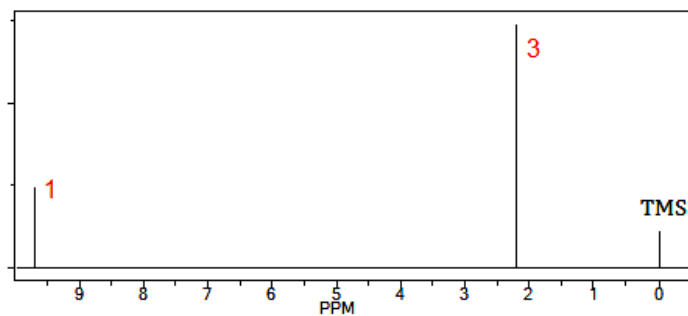
Obrázek 47: Tvar signálu



Uvedeme si několik příkladů pro **vodíkové spektrum**.

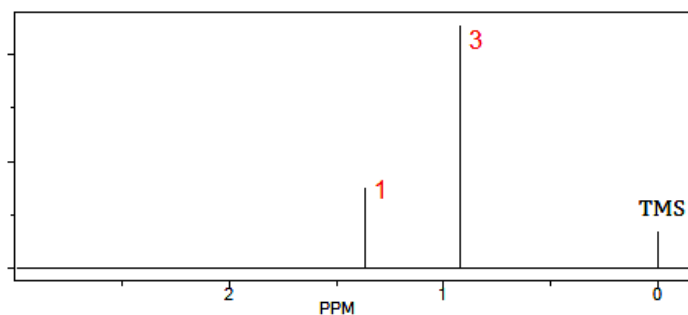
Acetaldehyd $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}=\text{O}$ má dva různé typy vodíků. Proto bude mít dva signály. Tři stejné vodíky jsou v methylové skupině a jeden vodík v aldehydické skupině. Proto poměr intenzit signálů bude 3:1.

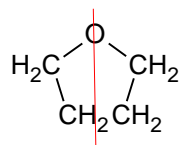
Obrázek 48: Spektrum acetaldehydu



Propan $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ má dvě methylové skupiny, jejichž vodíky jsou stejné (molekula je symetrická) a skupinu $-\text{CH}_2-$ (methylenová skupina). Ve spektru budou dva signály. Šest stejných vodíků je na methylových skupinách a dva stejné vodíky methylenové – proto budou v propanu signály v poměru 3:1 (6:2 po zkrácení).

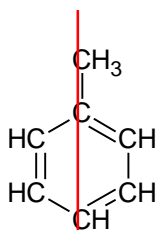
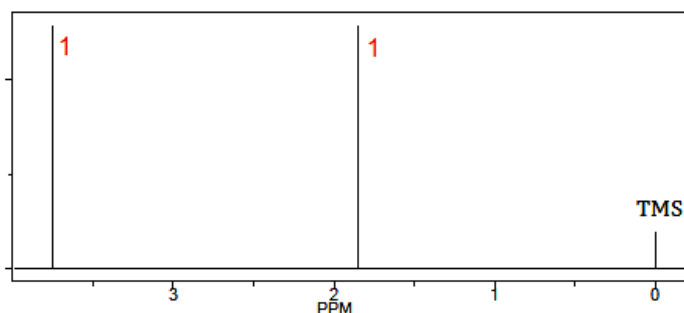
Obrázek 49: Spektrum propanu





Tetrahydrofuran je symetrická molekula (červená čára značí zrcadlo), a proto má pouze dva typy vodíků – dva signály. Každá skupina vodíků je po čtyřech → tedy osm vodíků v poměru 4:4, po vykrácení 1:1.

Obrázek 50: Spektrum tetrahydrofuranu



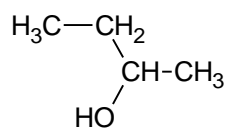
Toluen je symetrický (červeně je zrcadlo). Jeden vodík je poloze para vzhledem k methylové skupině, dva vodíky jsou v poloze meta, další dva jsou v poloze ortho a v methylové skupině jsou tři stejné vodíky. Takže signály budou v poměru 1:2:2:3.

Integrace

Právě jsme si vysvětlili, jak ze vzorce sloučeniny určit intenzitu jeho signálů ve spektru. Nyní se na to podíváme z opačné strany. Pro vodíkové⁸ spektrum totiž můžeme zjistit, kolika vodíky je signál dané látky tvořen.

Pomocí počítače můžeme spočítat, jakou má který signál plochu. Tuto hodnotu potom počítač porovná s ostatními signály a počtem vodíků v molekule. Ve výsledku dostaneme u každého signálu číslo = počet vodíků, kterými je tvořen.

⁸ Pro uhlíkové spektrum se integrace nedělá, protože signály (z několika důvodů) nemají intenzitu odpovídající tomu, kolik jich je.



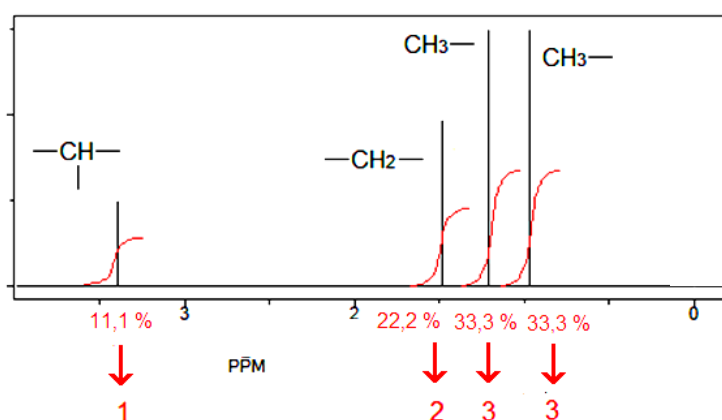
Například butan-2-ol má na uhlících vázané čtyři různé skupiny vodíků. Proto má čtyři signály. Počítač nám určil poměr ploch všech integrovaných signálů ve spektru, my jsme mu dodali informaci o počtu vodíků ve sloučenině a počítač napsal výsledná čísla červeně pod každý signál.

Když budeme postupovat zleva, tak první signál má číslo 1 – takže tento signál je tvořen jedním vodíkem.

Druhý signál má číslo 2 – takže tento signál je tvořen dvěma vodíky.

A tak dále...

Obrázek 51: Integrace spektra butan-2-olu



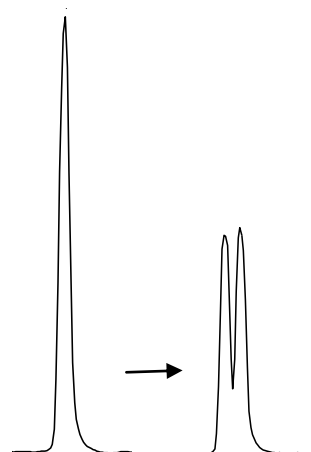
Plocha pod křivkou je matematicky řečeno Integrál, proto mluvíme o Integraci.

d) Multiplicita signálu

aneb **J interakce** neboli **J-kaplink** (z anglického couple) či **Štěpení**

Vodíková i uhlíková spektra byla z důvodu zjednodušení v předcházejících kapitolách uváděna bez štěpení, a tudíž nepřesně.

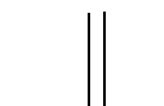
Každý signál však může být vlivem okolních jader rozštěpen na jednotlivé linie.



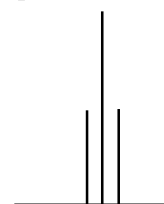
Když je signál tvořen jen jednou linií, tak se nazývá singlet



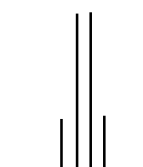
Když je signál tvořen dvěma liniemi, které jsou v poměru 1:1, tak se nazývá dublet



Když je signál tvořen třemi liniemi, které jsou v poměru 1:2:1, tak se nazývá triplet



Když je signál tvořen čtyřmi liniemi, které jsou v poměru 1:3:3:1, tak se nazývá kvartet



Když je signál tvořen mnoha liniemi (kde není jasně zřejmé, jakou strukturu signál vlastně



má – například překrývající se dva triplety), tak se nazývá multiplet

Přítom platí tato pravidla:

Ve vodíkovém spektru počet linií v signálu odpovídá počtu atomů vodíku na sousedních atomech uhlíku zvětšeném o 1.

V uhlíkovém spektru počet linií v signálu odpovídá počtu atomů vodíku na daném atomu uhlíku zvětšeném o 1.

Nyní se pečlivěji podíváme, co to znamená, když se řekne, že je signál štěpen vlivem okolních jader.

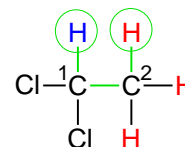
Existují dva typy interakcí:

vodík je štěpen vodíky

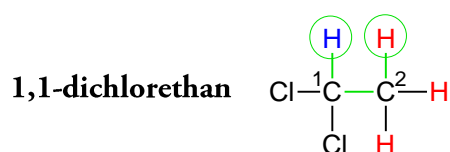
uhlík je štěpen vodíky

Štěpení, které pozorujeme ve **vodíkovém spektru**, je štěpení vodíků vodíky.

Jedná se především o štěpení vodíků vzdálených od sebe tři vazby¹⁰ (tři vazby znázorněny zeleně).



Ukážeme si příklady:



Počet signálů: uhlík číslo jedna má jeden vodík, uhlík číslo dva má tři stejné vodíky (vidíme na obrázku níž). Proto ve vodíkovém spektru uvidíme dva signály vodíků.

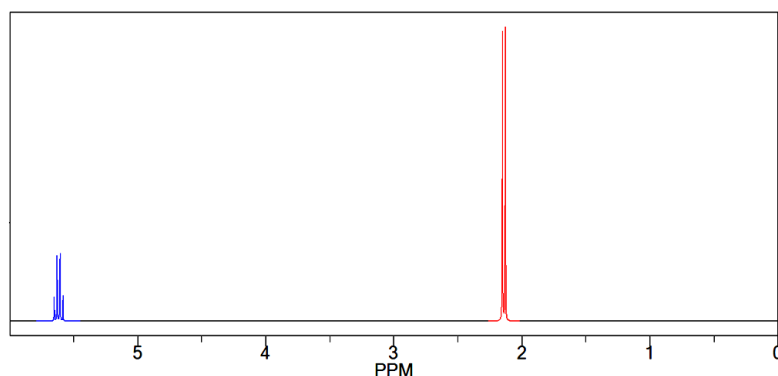
Intenzita signálů: jeden signál bude mít intenzitu jedna, druhý tři.

Multiplicita: oba signály budou štěpeny na jednotlivé linie – a nás zajímá, na kolik linií.

Přes tři vazby (zeleně) bude docházet ke štěpení. Podle pravidla uvedeného výše bude signál modrého vodíku na uhlíku číslo jedna štěpen na tolik linií, kolik je vodíků na uhlíku dva plus přičteme jedničku. To znamená, že signál modrého vodíku bude štěpený na čtyři linie = kvartet (3+1), signál červených vodíků na dvě linie = dublet (1+1).

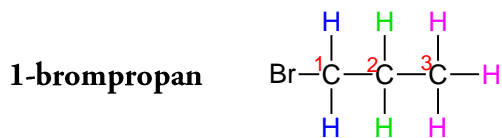
Ještě si povšimněte toho, že vodíky blíže elektronegativnímu chloru mají vyšší chemický posun.

Obrázek 52: Spektrum 1,1-dichlorethanu



⁹ Existuje více typů interakcí než tyto dvě, nicméně zde se jimi nebudeme zabývat.

¹⁰ Existuje i štěpení přes více vazeb, které je ale slabé, a proto je špatně vidět.

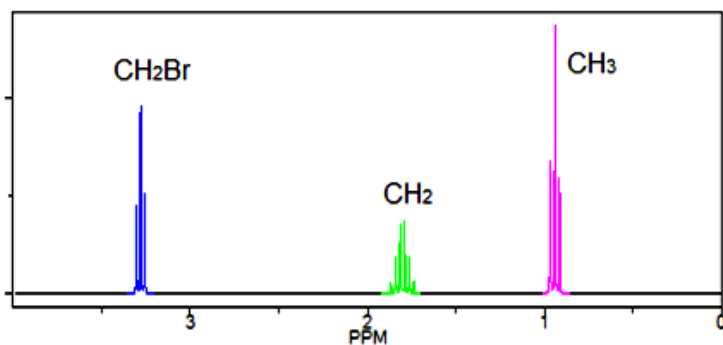


Počet signálů: 1-bromopropan má tři typy vodíků, bude mít tedy tři signály.

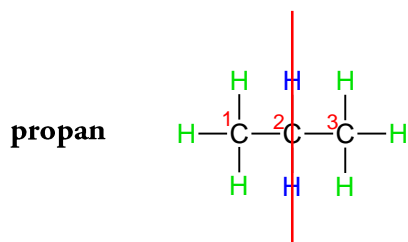
Intenzita signálů: signály vodíků na uhlíku číslo jedna i na uhlíku číslo dva budou mít intenzitu dva, signály vodíků na uhlíku číslo tři budou mít intenzitu tři.

Multiplicita: signály vodíků na uhlíku číslo jedna budou štěpeny na tři linie = triplet (2 vodíky na uhlíku číslo dva + 1), signály vodíků na uhlíku číslo tři budou štěpeny také na tři linie = triplet (2 vodíky na uhlíku číslo dva + 1). Složitější je situace u vodíků na uhlíku číslo dva, neboť jejich signály jsou štěpeny z obou stran. Modré vodíky je štěpí na triplet, fialové je zároveň štěpí na kvartet. Výsledkem je takzvaný triplet kvartetu nebo kvartet tripletu (první udáváme štěpení s větší interakční konstantou – co je to interakční konstanta bude vysvětleno dále v textu). Signál by tedy měl být rozštěpen na dvanáct linií (3×4). Ovšem ty ve spektru pravděpodobně nevidíme, neboť se triplet s kvartetem většinou¹¹ překrývají, některé z linií splývají a výsledkem je proto multiplet.

Obrázek 53: Spektrum 1-bromopropanu



¹¹ Závísí to na velikosti takzvané Interakční konstanty, viz dále.

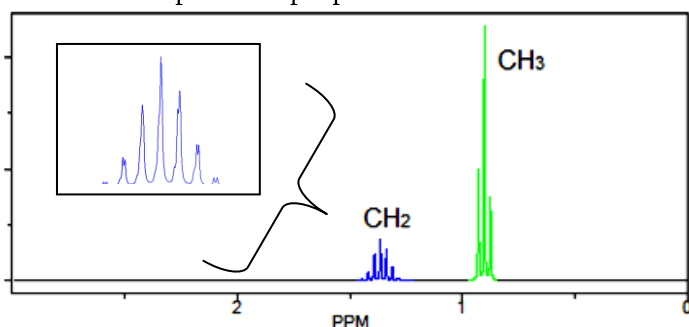


Počet signálů: molekula je symetrická (červeně zrcadlo), takže má dva typy vodíků – dva signály.

Intenzita signálů: molekula má šest stejných vodíků a dva stejné vodíky – tedy intenzita je 3:1 (6:2).

Multiplicita: signál vodíků na uhlíku číslo jedna je štěpen na tři linie = triplet (2+1) a ze symetrie vyplývá, že stejně tomu bude i u signálu vodíků na uhlíku číslo tři. Vodík číslo dva je opět trochu složitější. Obklopuje ho šest identických vodíků, to znamená, že jeho signál bude štěpen na sedm linií = septet (6+1).

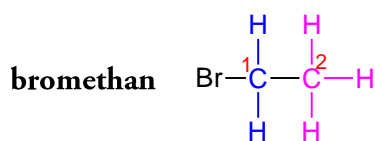
Obrázek 54: Spektrum propanu



Štěpení, které pozorujeme v **uhlíkovém spektru**, je štěpení uhlíků vodíky.

Jedná se o štěpení přes jednu vazbu¹².

Ukážeme si příklady.

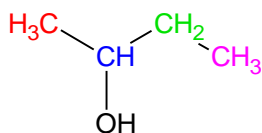


Počet signálů: molekula má dva různé uhlíky, proto bude mít dva signály.

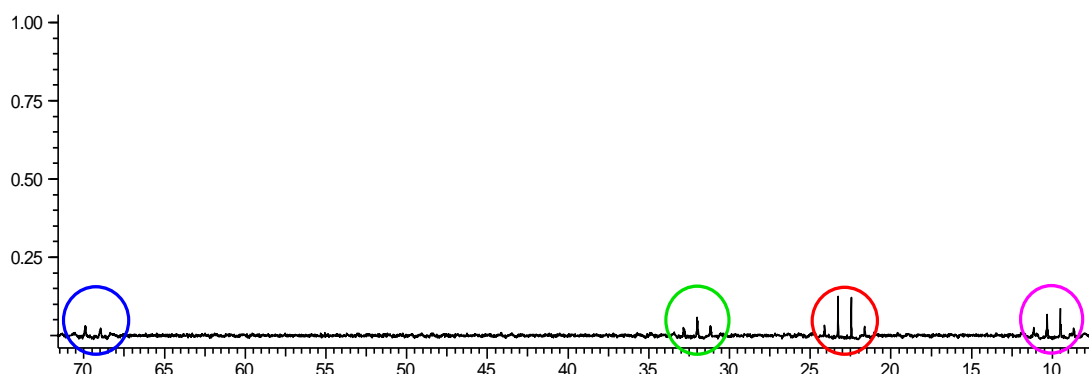
Multiplicita: podle pravidla uvedeného výše, počet linií v signálu odpovídá počtu atomů vodíku na daném atomu uhlíku zvětšeném o 1. Tedy signál uhlíku číslo jedna bude štěpen na tři linie = triplet (2+1), signál uhlíku číslo dva bude štěpen na čtyři linie = kvartet (3+1).

¹² Je možné i štěpení přes více vazeb, ale vzhledem k tomu, že tyto interakce jsou velmi malé, tak jsou často pod hranicí rozlišitelnosti.

butan-2-ol



Obrázek 55: Spektrum butan-2-olu



Počet signálů: molekula není symetrická, bude tedy dávat čtyři různé signály uhlíků.

Multiplicita: modrý uhlík má navázán jeden vodík, proto bude jeho signál rozštěpen na dublet. Zelený uhlík má dva vodíky, proto bude jeho signál štěpen na triplet. Červený a fialový uhlík mají každý tři vodíky, oba signály proto budou štěpeny na kvartet.

Dekaplink

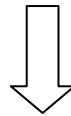
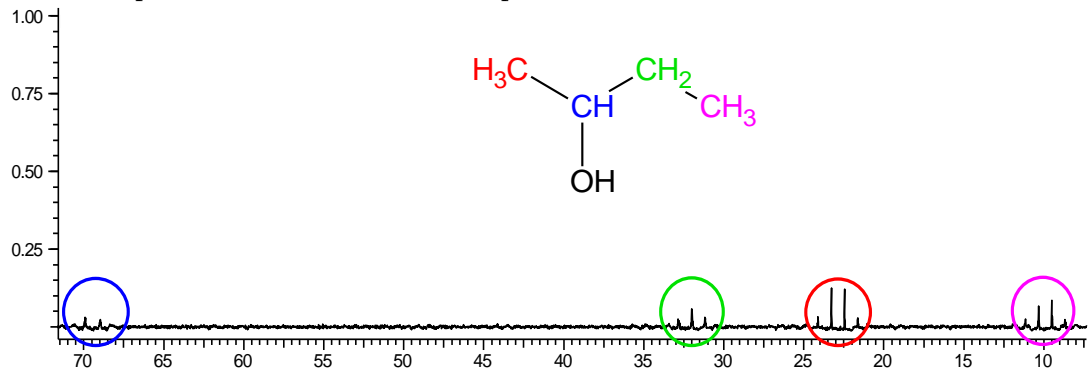
Právě jsme si vysvětlili, co je to multiplicita a ukázali jsme si, že je vyvolána J-kaplinkem mezi jádry. J-kaplink může ztěžovat interpretaci uhlíkových spekter, neboť rozštěpený signál má menší výšku než singlet. Navíc jádra uhlíku ^{13}C mají nízkou citlivost a malé přírodní zastoupení, jak jsme si říkali v úvodu.

Proto se u uhlíkových spekter často dělá takzvaný vodíkový dekaplink – neboli potlačení štěpení uhlíku vodíky¹³. Výsledkem je, že každý signál vidíme jako singlet.

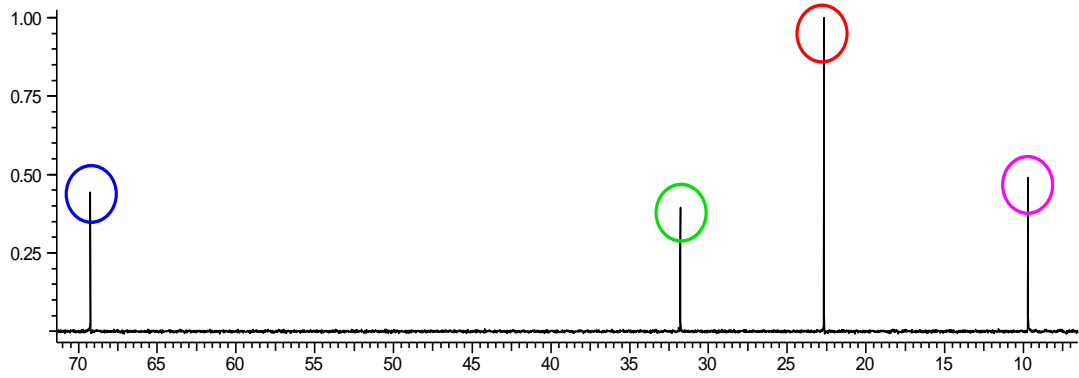
Ukážeme si to na molekule butan-2-olu, jejíž spektrum jsme určovali jako poslední.

¹³ Abychom odstranili štěpení uhlíků vodíky, tak během snímání dat aplikujeme ještě kromě klasických ^{13}C pulsů radiofrekvenční záření na frekvenci vodíků.

Obrázek 56: Spektrum butan-2-olu, nedekaplované



Obrázek 57: Spektrum butan-2-olu, dekaplované



Všechny signály nyní vidíme jako singlety.

Interakční konstanta J

Jednotlivé linie z jednoho signálu mají mezi sebou určitou vzdálenost. Této vzdálenosti se říká interakční konstanta, značí se písmenem J a měří se v hertzích.

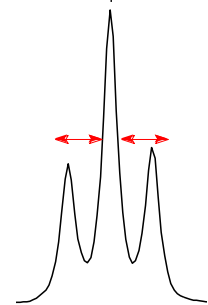
Velikost interakční konstanty můžeme změřit přímo ze spektra.

Je charakteristická pro každý typ štěpení v každé struktuře.

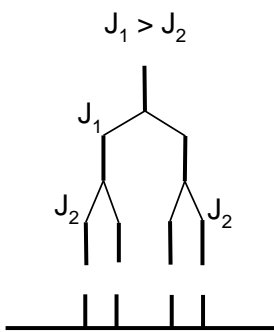
Například víme-li, že dané vodíky budou štěpeny z jedné i z druhé strany na dublety – tedy na dublet dubletů, tak očekáváme čtyři linie (2×2).

Nicméně čtyři linie uvidíme pouze tehdy, je-li interakční konstanta číslo jedna větší, než konstanta číslo dvě:

Obrázek 58:
Interakční konstanta



Obrázek 59

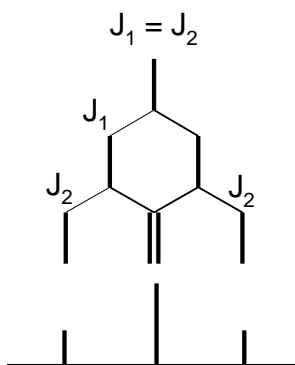


Popis obrázku: při štěpení prvním sousedním vodíkem na dublet

je interakční konstanta velká, takže při štěpení druhým sousedním vodíkem se dvě vzniklé prostřední linie nespojí do jedné a zůstanou zvlášť.

Pakliže je ale první interakční konstanta stejně velká jako druhá, tak prostřední dvě linie splynou a výsledkem je triplet:

Obrázek 60



Popis obrázku: štěpení prvním sousedním vodíkem na

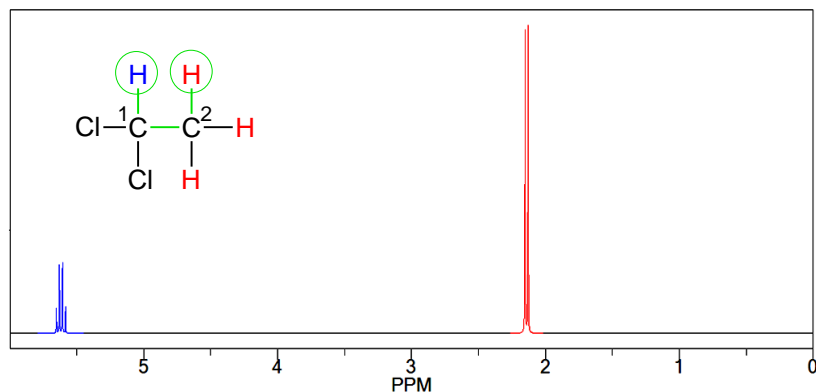
dublet vypadá takto. Při následném štěpení je interakční konstanta stejně velká, a proto prostřední dvě linie splývají v jednu.

Při vícenásobném štěpení nastává více situací, kdy podle velikosti interakční konstanty některé linie splývají a některé ne, ale tím se zde nebudeme zabývat.

Můžeme si ale ukázat, jak podle velikosti interakční konstanty poznáme, které skupiny vodíků jsou vedle sebe.

Znovu se podívejme na příklad 1,1-dichlorethanu.

Obrázek 61: Spektrum 1,1-dichlorethanu



Modrý vodík štěpí červené a červené vodíky štěpí modrý. Nyní, když víme, co je to Interakční konstanta, můžeme doplnit další informaci. Modrý vodík štěpí červené vodíky se stejnou interakční konstantou, jako červené vodíky štěpí modrý. Říkáme tomu, že štěpení je vzájemné. To znamená, že kdybychom vzali pravítko a změřili vzdálenosti mezi červenými liniemi signálu a modrými liniemi signálu, dostali bychom stejnou hodnotu. (Interakční konstanta samozřejmě nemá jednotku centimetr, ale hertz – viz výše.)

e) Rozpouštědla

Každý měřený vzorek musí být rozpuštěn v nějakém rozpouštědle. V NMR spektrometrii se používají speciální rozpouštědla – takzvaná deuterovaná rozpouštědla. To znamená, že místo klasického vodíku mají v molekule deuterium.

Připomeneme si, že vodík má tři izotopy: protium ^1H (lehký vodík – ten „klasický“), deuterium ^2H (těžký vodík, značka též D) a tritium ^3H (radioaktivní vodík, značka také T). Proč je třeba, aby rozpouštědla byla deuterovaná?

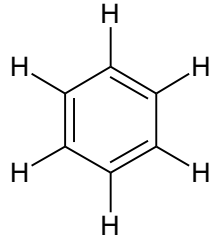
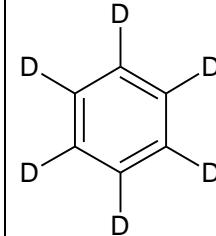
Rozpouštědlo je ve vzorku v nadbytku (měřené látky dáváme 1–2 kapky nebo pár miligramů) a „klasické“ (nedeuterované) rozpouštědlo by tudíž překrylo signál zkoumané molekuly – to znamená, že bychom přes celé spektrum měli obrovský signál rozpouštědla a z měřené látky bychom neviděli nic.

Kdežto ve spektru vzorku měřeného v deuterovaném rozpouštědle vidíme pouze signály vzorku.¹⁴

¹⁴ V rozpouštědle se nikdy nepodaří vyměnit 100 % všech lehkých vodíků za těžké vodíky, takže ve výsledku ve spektru pík rozpouštědla vidíme, ale je malý a nezastiňuje ostatní signály.

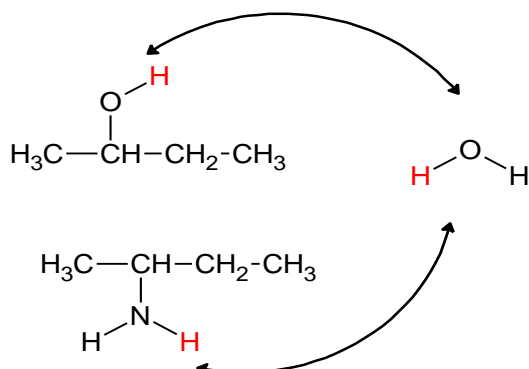
Důvodem je, že deuterium má jinou rezonanční frekvenci, než na jaké měříme. (V určitém rozmezí radiofrekvenčního záření mají signál všechny uhlíky, v určitém všechny vodíky, v určitém deuterium.)

Tabulka 4: Přehled rozpouštědel, která se používají v NMR spektrometrii

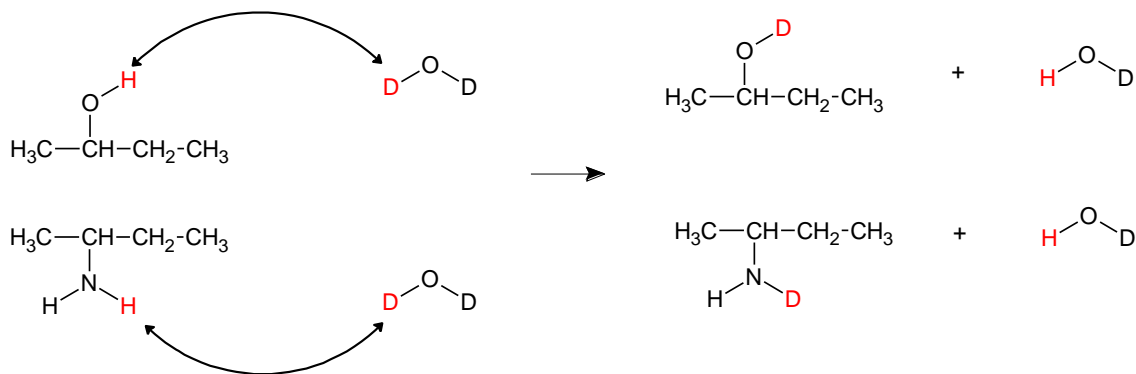
Rozpouštědlo	Vzorec rozpouštědla	Vzorec deuterovaného rozpouštědla
voda	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	$\text{D}-\text{O}-\text{D}$ = „těžká voda“
methanol (zkratka MeOH)	$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{H}$	$\text{D}_3\text{C}-\text{O}-\text{D}$
chloroform	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{Cl}-\text{C}-\text{Cl} \\ \\ \text{Cl} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{D} \\ \\ \text{Cl}-\text{C}-\text{Cl} \\ \\ \text{Cl} \end{array}$
aceton	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{C}-\text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{D}_3\text{C}-\text{C}-\text{CD}_3 \end{array}$
benzen		
dimethylsulfoxid (zkratka DMSO)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{S}-\text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{D}_3\text{C}-\text{S}-\text{CD}_3 \end{array}$

f) Vyměnitelné vodíky

Zvláštní postavení mezi vodíky mají takzvané vyměnitelné vodíky. Jsou to vodíky v amino ($-\text{NH}_2$), hydroxy ($-\text{OH}$) nebo thio ($-\text{SH}$) skupině. Vyměnitelné se nazývají proto, že se vyměňují za vodíky v rozpouštědle (musí se jednat o protické rozpouštědlo = má odštěpitelný proton – tedy například voda, methanol,...):



V deuterovaném protickém rozpouštědle se tudíž vyměňují za těžký vodík:

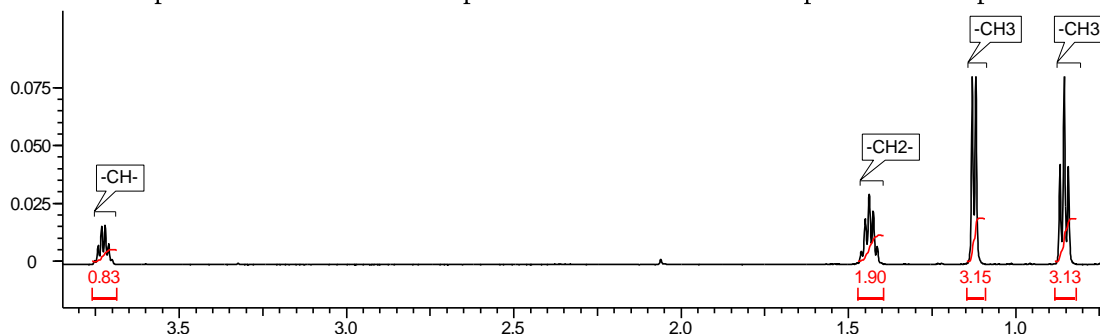


Z toho vyplývá, že ve spektru nebudou vidět. (Deuterium je v mnohonásobném nadbytku a tudíž lze statisticky říci, že se všechny lehké vodíky ve vzorku vymění za těžké vodíky z rozpouštědla).

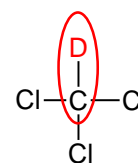
To znamená – rozpustíme-li látku obsahující hydroxy nebo amino skupinu v deuterovaném protickém rozpouštědle, tak vodíky z těchto skupin nebudou dávat žádný signál.

Na obrázku máme vzorec butan-2-olu. Kdybychom ho rozpustili v těžké vodě, tak ve vodíkovém spektru¹⁵ uvidíme pouze signály vodíků, které jsou navázány na uhlíky – uvidíme tedy čtyři signály:

Obrázek 62: Spektrum butan-2-olu rozpouštěného v deuterovaném protickém rozpouštědle



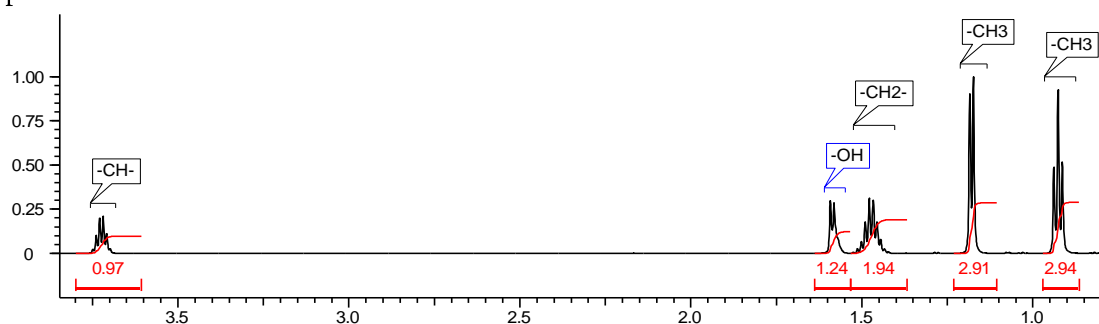
Kdežto když butan-2-ol rozpustíme v aprotickém¹⁶ deuterovaném rozpouštědle, například chloroformu, tak zde nemůže docházet k výměně vodíku v butan-2-olu za deuterium z rozpouštědla, a proto vodík v hydroxy skupině dává signál (modře) – vidíme tedy pět signálů:



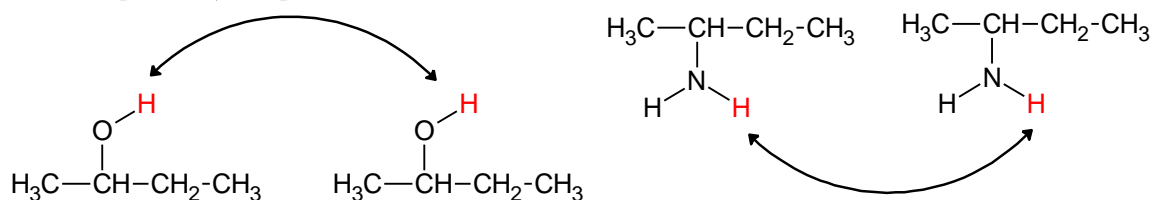
¹⁵ O vyměnitelných vodících hovoříme jenom v rámci vodíkového spektra.

¹⁶ = nemá odštěpitelný proton = proton se neuvolňuje z vazby uhlík vodík (zakroužkováno červeně).

Obrázek 63: Spektrum butan-2-olu rozpuštěného v deuterovaném aprotickém rozpouštědle

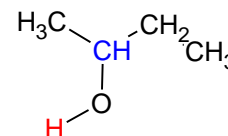


Vyměnitelné vodíky se můžou vyměňovat i mezi sebou – mezi dvěma molekulami jedné látky (nepotřebují rozpouštědlo).



Díky této výměně mizí J interakce, a proto se obvykle nepodílejí na multiplicitě signálu = neštěpí sousední vodíky.

Nicméně zrovna u butan-2-olu si můžeme všimnout, že je signál –OH skupiny rozštěpen na dva. Štěpí ho modrý vodík. Většinou toto štěpení nebývá vidět, protože se červený vodík rychle vyměňuje za jiný vodík z roztoku, a ten zase za jiný... V tomto případě je ale rychlost výměny malá, takže štěpení vidíme.



Vyměnitelné vodíky nemají ve spektru pevnou oblast, kde se vyskytují – mají různé chemické posuny podle toho, v jaké látce se nacházejí.

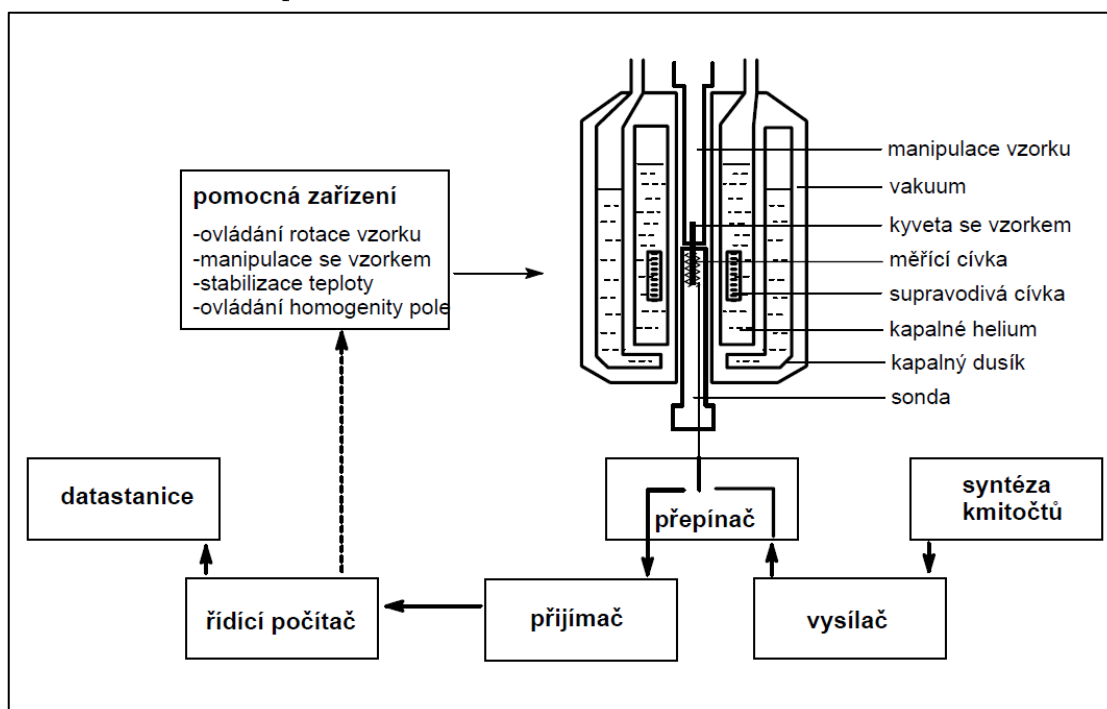
5. NMR spektrometr – přístroj

Na obrázcích jsou zobrazeny různé druhy NMR spektrometrů. Každý přístroj má na sobě číslo. Například 400, 900, 1000. Jedná se o rezonanční frekvenci vodíku v daném spektrometru. Čím vyšší číslo, tím větší citlivost přístroje a větší spektrální rozlišení.

Obrázek 64: NMR spektrometry [27, 28, 29]



Obrázek 65: Schéma spektrometru [30]



Popis jednotlivých součástí spektrometru:

NMR kyveta

Rozpouštědlo s pár kapkami měřené látky se umístí tenké skleněné trubičky, takzvané NMR kyvety¹⁷. Kyveta se uzavře víčkem a seshora se vloží do spektrometru.

Obrázek 66: Kyvety s víčky



Obrázek 67: Kyveta



Obrázek 68: Víčka na kyvety



Obrázek 69: Místo vložení kyvety



Supravodivý magnet¹⁸

Supravodivá cívka, která je nabita elektrickým proudem, je ponořena v kapalném heliu a vytváří magnetické pole. Magnetické pole musí být ve všech částech vzorku stejné = homogenní. Z toho důvodu je v NMR přístroji ještě sada různě prostorově orientovaných korekčních cívek, které magnetické pole vyladují. Kdyby pole nebylo homogenní, měl by vzorek v různé části kyvety různou rezonanční frekvenci.

¹⁷ Ještě existují kyvety pro jiné druhy spektrometrií, které vypadají jinak.

¹⁸ Supravodivé materiály jsou takové materiály, které při průchodu elektrického proudu nekladou žádný odpor. To znamená, že se v nich energie elektrického proudu nemění na teplo a tudíž nedochází k její ztrátě. Většina supravodivých materiálů takto funguje pouze při velmi nízkých teplotách. Takové teploty se udržují například umístěním supravodivého materiálu do kapalného helia, které má teplotu $-268,9\text{ °C}$. Ze supravodivého materiálu je možné vytvořit cívku a zapnout do ní proud. Po odpojení vnějšího zdroje proudu protéká dále cívkou proud, který byl do cívky na začátku zavedený. A to po velmi dlouhou dobu (několik let). Proud vytváří v cívce magnetické pole, a tak se cívka stává supravodivým magnetem.

[JIRSA, M. Supravodivost – naděje pro 21. století [online]. Akademie věd ČR, Fyzikální ústav. ©2008 – 2010. [cit. 2012-07-22]. Dostupné z: <http://www.fzu.cz/popularizace/supravodivost-nadeje-pro-21-stoleti>]

Měřicí cívka

Měřicí cívka funguje jako vysílač radiofrekvenčního záření i jako přijímač odezvy (signálu). V přijímači je signál zesílen a detekován a dále je zpracováván digitálně přes počítač.

Syntéza kmitočtů

Neboli generátor radiofrekvenčního záření.

Řídící počítač

Zpracovává signál, který dostal z přijímače. Jeden vzorek se měří vícekrát a počítač potom sčítá jednotlivá spektra, čímž dochází k potlačení šumu a zvýraznění jednotlivých signálů. Dále počítač provádí matematickou operaci zvanou Fourierova transformace a další zpracování spektra.

Kapalné helium, kapalný dusík, vakuum

Aby měla supravodivá cívka své vlastnosti, musí být udržována při velmi nízkých teplotách, a proto je umístěna do atmosféry kapalného helia (-268,9 °C). Helium tedy slouží jako chladivo a musí být tepelně izolováno (pomocí dusíku a vakua).

Měřicí cívka a zařízení ovládající přesné nastavení teploty se nazývá **sonda**. Nachází se ve spodu celého přístroje. Existují různé typy vhodné pro různá měření.

Praktické aspekty práce s NMR spektrometrem

- Z důvodu silného magnetického pole uvnitř přístroje se nesmí chodit do jeho blízkosti s kovovými předměty (např. se šroubovákem) a s předměty, které se zničí zmagnetizováním (např. hodinky, kreditní karty, disky).
- NMR spektrometr také nemůžou obsluhovat lidé s kardiostimulátorem, protože magnetické pole narušuje jeho činnost.
- Čím vyšší má spektrometr na sobě číslo, tím má vyšší citlivost, tím rychleji na něm změříme vzorek a tím je i dražší. Cena spektrometrů se pohybuje v desítkách miliónů korun.
- Vodíkové spektrum se měří několik minut, uhlíkové spektrum se měří od desítek minut do hodiny, záleží na přístroji a koncentraci vzorku. Důvodem je, že vodík ^1H má o mnoho vyšší přirozený výskyt než uhlík ^{13}C – vodík ^1H má přirozený výskyt 99,99 %, ^{13}C má přirozený výskyt jen 1,07 %.

6. MRI

Velkou roli hraje aplikace nukleární magnetické rezonance v lékařství – takzvané Zobrazování magnetickou rezonancí (MRI – magnetic resonance imaging).

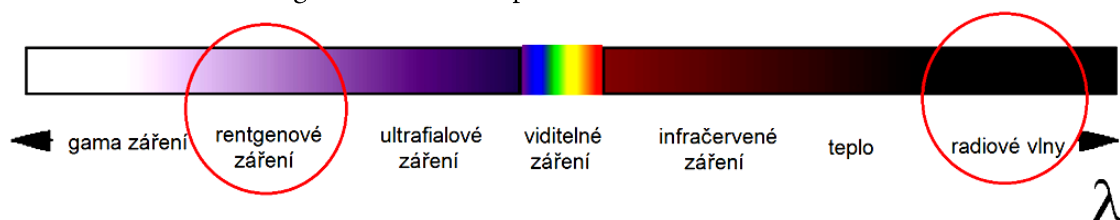
Metoda se nenazývá Zobrazování *nukleární* magnetickou rezonancí kvůli negativnímu významu asociovanému se slovem nukleární.

MRI umožňuje zobrazovat měkké tkáně a oblasti se zvýšenou koncentrací vody, jako jsou nádory.

Používané záření (radiofrekvenční záření neboli radiové vlny) není nebezpečné. Vyplývá to z jeho podstaty – má velkou vlnovou délku a tím pádem malou energii. (Ostatně stejné vlnové délky jsou používány pro rozhlasové vysílání.)

Jen pro zajímavost ho můžeme srovnat s jiným typem záření, které se také v lékařství využívá – s rentgenovým zářením. To má mnohem kratší vlnovou délku, tím pádem vyšší energii a z toho vyplývá i jeho škodlivost. Rentgenové záření způsobuje ionizaci a člověk by mu neměl být vystavován příliš často.

Obrázek 70: Elektromagnetické záření (upraveno dle [24])



Co má NMR a MRI společného a co je naopak rozdílné?

V NMR měříme signály různých jader – vodíku, uhlíku, fosforu, ... V MRI měříme signály pouze vodíků. Proč?

Měkké tkáně jsou z velké části tvořeny vodou. A z vody můžeme měřit právě vodíky. A navíc jsou ^1H vodíky ze všech prvků nejvíce citlivé na měření.

Při ^1H NMR spektrometrii měříme různé sloučeniny obsahující vodík, proto proměřujeme spektrum v určitém rozsahu. Při MRI měříme signály pouze jedné látky – vody.

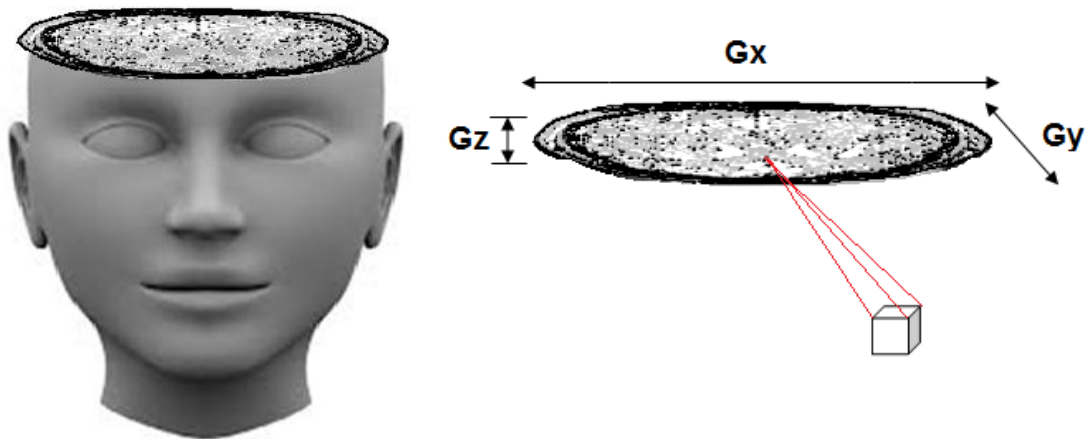
V NMR má látka ve vzorku jednu danou koncentraci. V MRI je koncentrace vody ve vzorku (v lidském těle) na různých místech různá. Což je podstatou této metody – zjišťují se vlastnosti vody v různých místech tkáně.

Při NMR máme vnější magnetické pole homogenní – a všemi silami se snažíme odstranit všechny vlivy, které homogenitu narušují (pomocí různých korekčních cívek, ...). Kdežto při MRI jsou jádra umístěna v nehomogenním magnetickém poli, které má nějaký gradient (což znamená, že se postupně – lineárně mění). Kdybychom vzorek umístili do

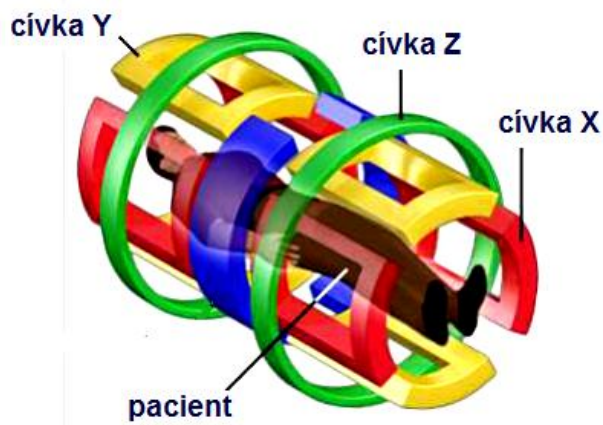
homogenního pole, dostali bychom pouze jeden signál – signál vody. My ovšem potřebujeme signály rozdělit podle toho, z kterého místa ve vzorku přicházejí.

K tomu slouží takzvané Poziční kódování. Poziční kódování se uskutečňuje pomocí tří cívek, které vytvářejí vlastní magnetická pole, a tím právě ve výsledku způsobují nehomogenitu celkového magnetického pole. Nazývají se gradientní cívky, protože budují gradient, a to ve směru osy x, y a z. Gradient G_z slouží k výběru řezu vzorkem, gradienty G_y a G_x potom určují konkrétní místo v rovině řezu (znázorněno krychličkou).

Obrázek 71: Nehomogenní magnetické pole [upraveno dle 31, 32]



Obrázek 72: Rozložení cívek v NMR tomografu [upraveno dle 33]



Výsledkem je tedy závislost intenzity signálu vody na poloze ve vzorku (v člověku).

Tabulka 5: Základní rozdíly mezi NMR a MRI

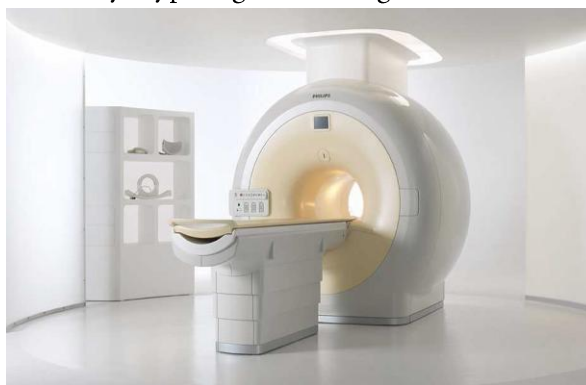
NMR	MRI
signály různých jader – vodíku, uhlíku, fosforu,...	signály vodíků
^1H spektrometrie – různé sloučeniny vodíku	^1H spektrometrie – voda
stálá koncentrace látky ve vzorku	různá koncentrace vody v rámci jednoho vzorku
homogenní magnetické pole	nehomogenní magnetické pole
výsledkem je graf – závislost intenzity signálu na frekvenci měřeného jádra ve vzorku	výsledkem je snímek – závislost intenzity signálu vody na poloze ve vzorku

Často je třeba zvýšit kontrast zobrazení. Jednou z metod je použití kontrastních činidel, která se podávají pacientovi. Kontrastní činidla jsou látky, které působí na intenzitu signálu – podle jejich chemické povahy signál vody zviditelní nebo naopak potlačí. Pokud se tyto látky distribuují různě ve zdravé a nemocné tkáni, je možné jich využít ke zviditelnění nádoru.

Pro vyšetření se používá přístroj, který se nazývá NMR tomograf („tunel“). K němu je připojen počítač, z kterého získáme snímky – řezy vyšetřovanou tkání.

Obrázek 73:

„uzavřený“ typ magnetu tomografu [34]



Obrázek 74:

„otevřený“ typ magnetu tomografu [35]



Přestože záření není nebezpečné, ne všichni pacienti mohou podstoupit MRI vyšetření. Důvodem je silné magnetické pole v tomografu. Pole může způsobit pohyb kovových implantátů či jiných kovových těles v těle a poškodit elektronické implantáty. Tudíž je tato metoda nevhodná pro pacienty s kardiostimulátory (zruší se frekvence, na kterou jsou naprogramovány) nebo středoušními protézami, pro pacienty, kteří mají v těle kovové předměty (kloubní protézy, insulinové pumpy, zubní implantáty, nitroděložní tělíška apod.), prodělali srdeční, cévní, mozkovou operaci (přítomnost cévních svorek) nebo měli úraz, který zanechal v těle kovové předměty (střepiny, projektily). Dále nesmí vyšetření podstoupit ženy v prvním trimestru těhotenství, lidé s klaustrofobií (z tunelu) a pacienti, kteří mají velká tetování na vyšetřovaném místě (tetovací barva obsahuje kovy).

Vyšetření na magnetické rezonanci trvá přibližně půl hodiny až hodinu. Celou dobu musí pacient klidně ležet. Nepříjemné mohou být poměrně hlasité zvuky („klepání“), které vydává tomograf při měření. Někteří pacienti vidí při vyšetření záblesky světla na sítnici v oku. Tyto vjemy jsou způsobeny indukovanými elektrickými proudy v sítnici.

Magnetické pole v tomografu je tak silné, že může do dutiny magnetu vtáhnout magnetické předměty až ze vzdálenosti několika metrů:

Obrázek 75: Síla magnetického pole v NMR tomografu [36, 37]



MRI má několik odvětví:

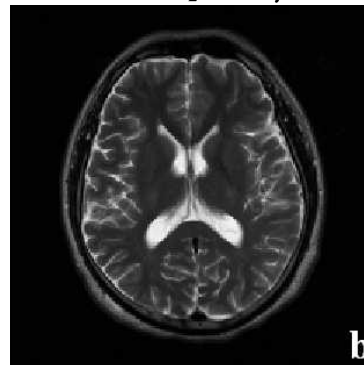
Standardní MRI

Tato metoda vychází z různého chování veličiny Magnetizace (viz kapitola 3) v různých tkáních po různých pulsech. Následkem těchto pulsů dochází k její relaxaci, kdy se buduje v jednom směru nebo ubývá ve směru (rovině) jiném. Vysvětlení tohoto principu není úplně jednoduché, a proto se jím zde nebudeme dále zabývat. Pouze si řekneme, že relaxace probíhají v tzv. relaxačních časech – kdy se může jednat o T_1 a T_2 relaxační čas.

Obrázek 76: T_1 vážený obraz [38]

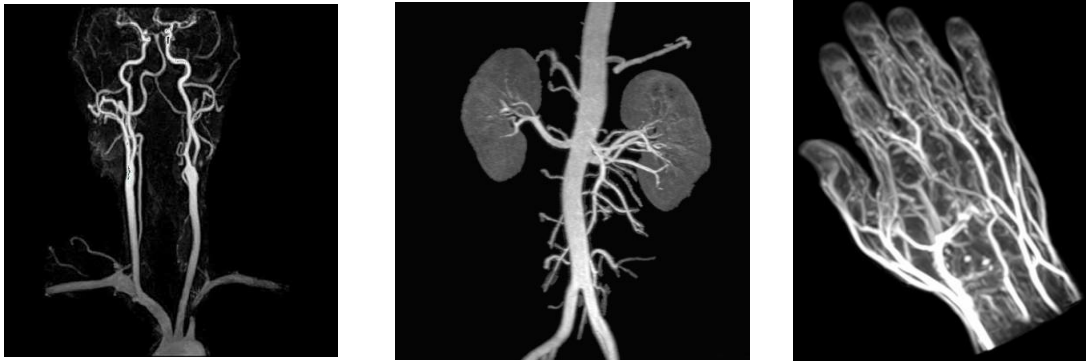


Obrázek 77: T_2 vážený obraz [38]



MR angiografie (MRA) je metoda zobrazující průtok krve cévami nebo tok mozkomíšního moku.

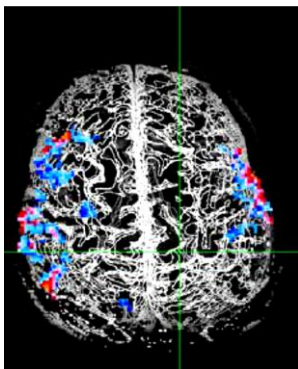
Obrázek 78: MR angiografie [39, 40, 41]



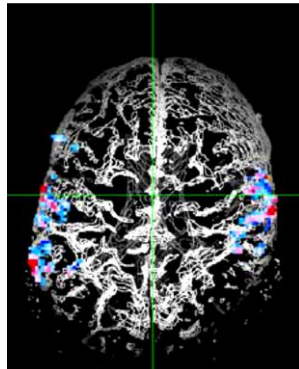
Funkční MRI (fMRI) – studuje průtok krve mozkem, čímž sleduje mentální aktivitu jedince. Vychází z toho, že aktivní částí mozku protéká větší množství krve (tzv. perfuzní fMRI) a také je založeno na rozdílných vlastnostech oxidovaného a neoxidovaného hemoglobinu (krevního barviva přenášejícího kyslík, tzv. BOLD fMRI – blood oxygen level-dependent).

Na obrázcích můžeme vidět činnost mozku při překladu slov, poslechu slov a poslechu hudby.

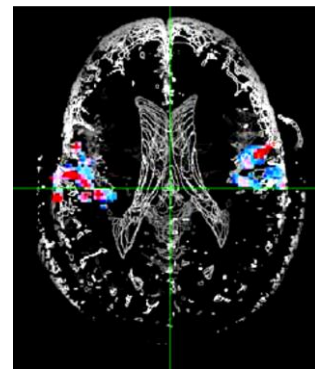
Obrázek 79: Překlad slov [42]



Obrázek 80: Poslech slov [42]



Obrázek 81: Poslech hudby [42]



Další vhodná literatura na téma NMR doporučená čtenářům (vhodná i pro studenty)

SEJBAL, J. *Úvod do jaderné magnetické resonance (NMR): příloha úloh školního kola chemické olympiády: studijní texty k úlohám pro kategorie a a E*. Praha: Institut dětí a mládeže Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, 2000.

ŘEZANKA, P. *Nukleární magnetická rezonance*, KSICHT [online], ročník 1., 2002/2003, série 4. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://ksicht.natur.cuni.cz/pdf/ksicht-1-4.a5.pdf>

McMURRY, J. *Organická chemie*. 1. vydání, Brno: VUTIUM, 2007. ISBN 978-80-214-3291-8.

Seznam použitých zdrojů

Zdroje pro textovou část:

- DRAČÍNSKÝ, M. *Spektrální metody NMR I* [online]. Přednáška PřF UK [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: <http://www.uochb.cz/web/structure/671.html?lang=cz>
- DRAČÍNSKÝ, M. *Jaderná magnetická rezonance* [online]. Skripta PřF UK [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://www.uochb.cz/web/document/cms_library/747.pdf
- ŘEZANKA, P. *Nukleární magnetická rezonance*, KSICHT [online], ročník 1., 2002/2003, série 4. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://ksicht.natur.cuni.cz/pdf/ksicht-1-4.a5.pdf>
- SEJBAL, J. *Úvod do jaderné magnetické rezonance (NMR): příloha úloh školního kola chemické olympiády: studijní texty k úlohám pro kategorie A a E*. Praha: Institut dětí a mládeže Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, 2000.
- HRABAL, R. a kol. *NMR spektroskopie pro studium přírodních látek* [online]. Přednáška VSCHT [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://www.vscht.cz/nmr/predmet/predmet-nmr.html#prednasky>
- KOPLIK, R. *Nukleární magnetická rezonanční spektrometrie* [online]. Skripta VSCHT. ©2012. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://web.vscht.cz/koplikr/NMR_%C4%8D%C3%A1st_1.pdf
- McMURRY, J. *Organická chemie*. 1. vydání, Brno: VUTIUM, 2007. ISBN 978-80-214-3291-8.
- SEDLÁŘ, M. *Magnetická rezonance* [online]. Prezentace Lékařské fakulty Masarykovy Univerzity. ©2011. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://www.med.muni.cz/biofyz/files/nutricnisppecialista/MRI_2011_Sedlar.pdf
- KAUT, C., WESTROOK, C. *MRI in Practice*. 2. vydání, United Kingdom: Blackwell, 1993. ISBN: 0-632-03587-0.

- CALLAGHAN, P., HALSE M. *Introductory NMR & MRI with Paul Callaghan* [DVD-ROM], CÁCHY, Wellington: Magritek, 2009.
- HORNAK, J. *The basics of MRI* [online]. Center for Imaging Science. ©1996-2011. [cit. 2013-05-13]. Dostupné z: <http://www.cis.rit.edu/htbooks/mri/index.html>
- PASCHKE, B. *Soukromé materiály z přednášky Introduction to Spectroscopy*. University of Glasgow, Department of Chemistry, 2011.
- JIRSA, M. *Supravodivost – naděje pro 21. století* [online]. Akademie věd ČR, Fyzikální ústav. ©2008 – 2010. [cit. 2012-07-22]. Dostupné z: <http://www.fzu.cz/popularizace/supravodivost-nadeje-pro-21-stoleti>

Zdroje obrázků:

- [1] Metanolové otravy roku 2012 v Česku [online]. Wikipedie, otevřená encyklopedie. Poslední změna 31. 7. 2013 [cit. 2013-08-18]. Dostupné z: http://cs.wikipedia.org/wiki/Metanolov%C3%A9_otravy_roku_2012_v_%C4%8Cesku
- [2] NMR spektrometr [online 2013-07-22] dostupné z http://www.bruker.com/fileadmin/user_upload/4-News/2013/14-DNP527.JPG
- [3] NMR Spektrometr [online 2013-02-22] dostupné z http://www.uochb.cz/web/document/cms_library/1319.jpg
- [4] Lebka [online 2012-11-20] dostupné z http://rtg.misto.cz/_MAIL_/hlava/03.jpg
- [5] MR mozku [online 2012-11-20] dostupné z http://hotink.theorem.ca/system/muse/images/000/014/544/MRI_head_side_BW_Wiki_Commons_medium.jpg?1284581990
- [6] MR tomograf [online 2012-07-27] dostupné z <http://brainimaging.waisman.wisc.edu/facilities/images/MRIright.jpg>
- [7] MR mozku, nádor [online 2012-11-20] dostupné z http://medsavailable.com/files/brainMRI_1.jpg

- [8] Tomograf s pacientem [online 2013-03-17] dostupné z http://1.bp.blogspot.com/-lF__JVSfLM/T9Fyn43yZmI/AAAAAAAAAD4E/Sgbcyl4swv8/s400/mri-scanner.jpg
- [9] Tomograf s pacientem [online 2013-03-17] dostupné z <http://0.tqn.com/d/lungcancer/1/0/l/4/-/-/adamctscan.jpg>
- [10] Otto Stern [online 2013-01-05] dostupné z http://en.wikipedia.org/wiki/File:Otto_Stern.jpg
- [11] Isaac Rabi [online 2013-01-05] dostupné z http://en.wikipedia.org/wiki/File:II_Rabi.jpg
- [12] Felix Bloch [online 2013-01-05] dostupné z http://en.wikipedia.org/wiki/File:Felix_Bloch,_Stanford_University.jpg
- [13] Mills Purcell [online 2013-01-05] dostupné z http://en.wikipedia.org/wiki/File:Edward_Purcell.jpg
- [14] Richard Robert Ernst [online 2013-01-05] dostupné z http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1991/ernst.jpg
- [15] Kurt Wüthrich [online 2013-01-05] dostupné z http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2002/wuthrich.jpg
- [16] Paul Christian Lauterbur [online 2013-01-05] dostupné z <http://www.nndb.com/people/326/000129936/paul-c-lauterbur.jpg>
- [17] Peter Mansfield [online 2013-01-05] dostupné z http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/medicine/laureates/2003/mansfield_postcard.jpg
- [18] Jádru jako kolo [online 2013-01-22] dostupné z <http://www.superiormartialarts.com/images5/50720.jpg>
- [19] Ruka [online 2013-01-22] dostupné z <http://www.colourbox.com/preview/2667140-926102-female-hands-counting-fist.jpg>

- [20] Precese [online 2012-08-02] dostupné z <http://www.shiftoftheage.com/wp-content/uploads/2009/10/precession-earth-spintop.jpg>
- [21] Káča [online 2013-10-06] dostupné z <http://www.elastoform.cz/produkty/sport-hry/hry-hracky/kaca/kaca-classic>
- [22] Magnetické momenty [online 2013-03-23] dostupné z <http://eprints.drcmr.dk/22/2/MagSpherical2crop.jpg>
- [23] Magnetické momenty [online 2013-03-23] dostupné z <http://www.drcmr.dk/images/stories/BasicMR/MagEquilib2.jpg>
- [24] Elektromagnetické záření [online 2013-01-05] dostupné z http://www.lpi.usra.edu/education/fieldtrips/2005/activities/ir_spectrum/images/em_spectrum.jpg
- [25] Ladička [online 2013-01-06] dostupné z <http://www.nastroje-hudebni.cz/data/sortiment/96/1.jpg>
- [26] Kompas [online 2013-04-15] dostupné z <http://www.vandrshop.cz/zbozi/obrazky/6799.jpg>
- [27] NMR spektrometr [online 2011-12-14] dostupné z http://www.rsc.org/images/MARKETPLACE-275_tcm18-158406.jpg
- [28] NMR spektrometr [online 2013-02-25] dostupné z <http://www.nature.com/nmeth/journal/v4/n1/images/nmeth0107-95-15.jpg>
- [29] NMR spektrometr [online 2013-02-25] dostupné z <http://img.geocaching.com/user/0a3d57ab-e49a-40d2-90a5-559cbfc4d641.jpg>
- [30] ÚOCHB AV ČR [online 2013-07-20] dostupné z http://www.uochb.cz/web/document/cms_library/747.pdf
- [31] Voxel [online 2013-07-23] dostupné z http://ffden-2.phys.uaf.edu/212_fall2003.web.dir/Eva_Burk/pics/voxel.gif
- [32] Hlava [online 2013-04-20] dostupné z http://s1057.photobucket.com/user/Spudgun17/media/ran43_zps06ab67ea.jpg.html

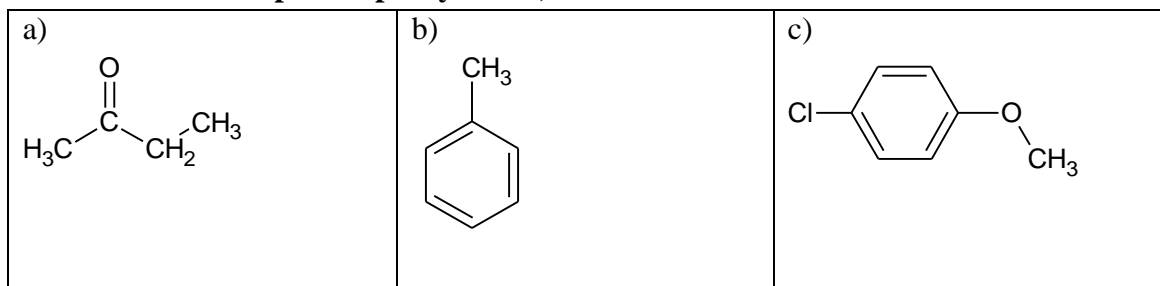
- [33] Cívky v MRI tomografu [online 2013-07-20] dostupné z
<http://www.magnet.fsu.edu/education/tutorials/magnetacademy/mri/images/mri-scannercoils.jpg>
- [34] MRI tomograf – uzavřený typ magnetu [online 2013-07-20] dostupné z
http://schools.medphys.ucl.ac.uk/images/mri/mri_phillips_scanner.png
- [35] MRI tomograf – otevřený typ magnetu [online 2013-07-20] dostupné z
http://www.siemens.com/press/pool/de/pp_med/2007/sc_upload_file_medmr200309082_09_72dpi_1431762.jpg
- [36] MRI fail [online 2013-05-19] dostupné z
<https://i.chzbgr.com/maxW500/3615466752/h30A4FBD1/>
- [37] Masarykova Univerzita, Lékařská fakulta [online 2013-07-20] dostupné z
http://www.med.muni.cz/biofyz/files/nutricnisppecialista/MRI_2011_Sedlar.pdf
- [38] E.L. Wong and E. of Maryland Baltimore County. Engineering, *Linear spectral unmixing approaches to magnetic resonance image classification*, University of Maryland, Baltimore County, 2008.
- [39] MR angiografie [online 2013-07-23] dostupné z <http://www.cedars-sinai.edu/Medical-Professionals/Imaging-Center/Neuroradiology/Images/MRA-Spine-9229.jpg>
- [40] MR angiografie [online 2013-07-23] dostupné z
http://www.cottageadvancedimaging.com/Portals/1/Skins/CottageHealth/images/3T_1.jpg
- [41] MR angiografie [online 2013-07-23] dostupné z
<http://medical.toshiba.com/resources/images/mr/titan-15t/clinical-applications/non-contrast/Titan-15T-Non-Contrast-FBI.jpg>
- [42] Materiál VSCHT [online 2013-05-15] dostupné z
www.vscht.cz/nmr/predmet/lekce/NMR-lekce13b.pdf

5.3. Testové otázky

Vytvořeno s pomocí [50]

5.3.1. TEST A

1. Kolik skupin ekvivalentních vodíků má daná sloučenina? (= kolik signálů bude v ^1H spektru poskytovat?)



2. Které z následujících rozpouštědel je vhodné použít pro ^1H spektrometrii?

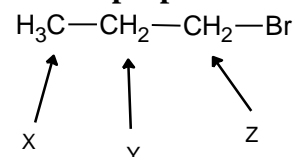
- a) chloroform (CHCl_3)
- b) voda
- c) těžká voda (D_2O)
- d) deuterovaný aceton (CD_3COCD_3)

3. Vyberte z následujících příkladů takové izotopy, které jsou v NMR spektrometrii pozorovatelné:

^1H , ^2H , ^{12}C , ^{13}C , ^{16}O , ^{17}O

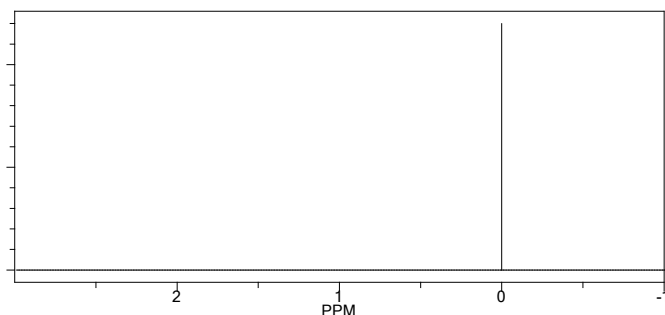
4. Určete pořadí chemických posunů (jako první nejvyšší posun) signálů z ^1H spektra

1-brompropanu:



- a) $X > Y > Z$
- b) $Y > X > Z$
- c) $Z > Y > X$
- d) $Z > X > Y$
- e) žádná z variant

5. Ve vodíkovém i uhlíkovém spektru často pozorujeme tento pík:



- Jaká látka poskytuje tento pík?
- Proč se tato látka přidává do měřených vzorků?

6. Podívejte se na následující posuny v ^1H spektru a vysvětlete pozorovaný vzrůstající trend.

Sloučenina	CH_4	CH_3Br	CH_3Cl
Chemický posun, δ , ppm	0,2	2,7	3,0

7. Která oblast elektromagnetického záření se využívá v NMR spektrometrii? (jedna odpověď je správná)

- rentgen
- ultrafialové záření
- infračervené záření
- radiofrekvenční záření
- žádná z variant

8. U následujících látek určete, která ze skupin vodíků (1 nebo 2) bude mít vyšší chemický posun. U látky b) poté předpovězte její ^1H NMR spektrum (stačí přibližně).



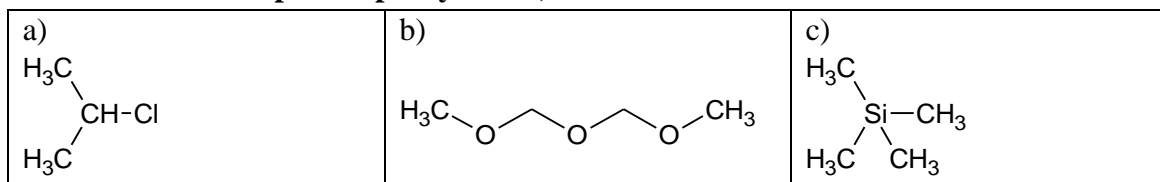
9. Dekaplované ^{13}C NMR spektrum anhydridu kyseliny propanové má tři signály:

	8,4 ppm 28,7 ppm 170,3 ppm
--	----------------------------------

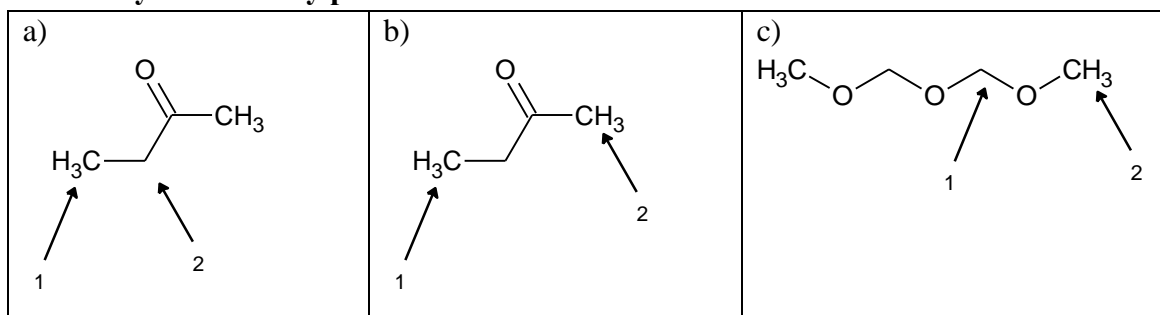
- Vysvětlete, proč má ^{13}C NMR spektrum anhydridu kyseliny propanové pouze tři signály, přestože ve struktuře je šest atomů uhlíku.
- Ke každému uhlíku v molekule anhydridu kyseliny propanové přiřaďte chemický posun. Své rozhodnutí odůvodněte.
- Předpovězte ^1H NMR spektrum pro anhydrid kyseliny propanové (posuny přibližně).

5.3.2. TEST B

1. Kolik skupin ekvivalentních vodíků má daná sloučenina? (= kolik signálů bude v ^1H spektru poskytovat?)

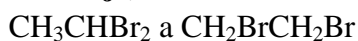


2. U následujících látek určete, která ze skupin vodíků (1 nebo 2) bude mít vyšší chemický posun.



3. Proč se v NMR spektrometrii používají deuterovaná rozpouštědla?

4. Jak můžete pomocí ^1H NMR spektrometrie popsat tyto izomery (rozlišit je)?

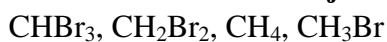


5. TMS se v NMR spektrometrii používá jako referenční sloučenina.

O zkratku jaké sloučeniny se jedná?

- a) trimethyl sulfoxid
- b) tetramethyl sulfon
- c) tetramethylammonium sulfát
- d) trimethyl sulfit
- e) žádná z variant

6. Seřad'te následující látky za sebou podle vzrůstajícího chemického posunu:



7. Atomy mohou mít všeobecně tyto kombinace protonového a nukleonového čísla:

- a) sudé protonové číslo a sudé nukleonové číslo
- b) sudé protonové číslo a liché nukleonové číslo
- c) liché protonové číslo a sudé nukleonové číslo
- d) liché protonové číslo a liché nukleonové číslo

Z nich pouze některé jsou pozorovatelné pomocí NMR spektrometrie. Které? (jedna odpověď je správná)

- 1) pouze a)
- 2) pouze b)
- 3) a) a b)
- 4) b), c) a d)
- 5) žádná z variant

8. U molekuly jodpropanu C₃H₇I

a) Nakreslete a pojmenujte dva možné izomery (A, B)

b) V ¹H NMR spektru jednoho z těchto izomerů byly pozorovány tyto tři signály:

1,06 ppm (triplet), počet vodíků zjištěných integrací: 3

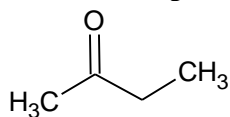
1,81 ppm (multiplet), počet vodíků zjištěných integrací: 2

3,47 ppm, (triplet), počet vodíků zjištěných integrací: 2

O který z izomerů se jedná?

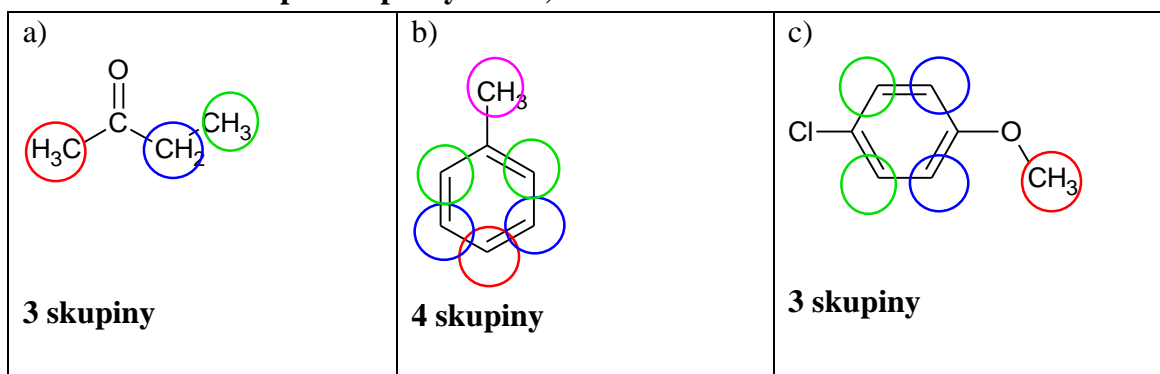
c) Předpovězte, jak bude vypadat spektrum druhého z izomerů (chemické posuny pouze přibližně).

9. Předpovězte ¹H NMR spektrum ethyl(methyl)ketonu:



5.3.3. ODPOVĚDI – TEST A

1. Kolik skupin ekvivalentních vodíků má daná sloučenina? (= kolik signálů bude v ^1H spektru poskytovat?)



2. Které z následujících rozpouštědel je vhodné použít pro ^1H spektrometrii?
c) a d) – tyto rozpouštědla neobsahují lehký vodík (^1H) který by ve spektru interferoval s vodíky ve vzorku.

3. Vyberte z následujících příkladů takové izotopy, které jsou v NMR spektrometrii pozorovatelná:

Pozorovatelné izotopy musí mít liché protonové (Z) nebo liché nukleonové (A) číslo. Izotopy, které mají sudé protonové a zároveň i sudé neutronové (N) číslo, pozorovatelné nejsou. $A=Z+N$.

izotop	A	Z	N	pozorovatelná
^1H	1	1	0	ano
^2H	2	1	1	ano
^{12}C	12	6	6	ne
^{13}C	13	6	7	ano
^{16}O	16	8	8	ne
^{17}O	17	8	9	ano

4. Určete pořadí chemických posunů (jako první nejvyšší posun) signálů z ^1H spektra 1-brompropanu:
správná odpověď: c)

5. Ve vodíkovém i uhlíkovém spektru často pozorujeme pík na 0 ppm.

- a) tetramethylsilan
- b) pro referenci chemického posunu

6. Podívejte se na následující posuny v ^1H spektru a vysvětlete pozorovaný vzrůstající trend.

Čím elektronegativnější je atom nahrazující vodík v methanu, tím vyšší má sloučenina chemický posun.

Čím elektronegativnější atom, tím více si přitahuje elektrony z molekuly a tím méně jsou jádra vodíků stíněná. Tomu odpovídá větší B_{ef} – tudíž větší rozdíl mezi energetickými hladinami – tím pádem je třeba více energie na přeskočení – to znamená, že vodíky rezonují při vyšší frekvenci = vyšší chemický posun.

7. Která oblast elektromagnetického záření se využívá v NMR spektrometrii? (jedna odpověď je správná)

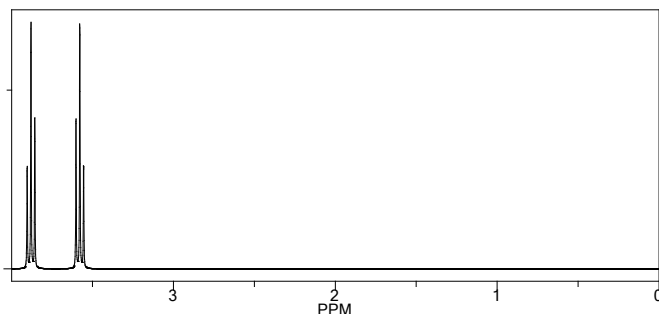
správná odpověď: d)

8. U následujících látek určete, která ze skupin vodíků (1 nebo 2) bude mít vyšší chemický posun. U látky b) poté předpovězte její ^1H NMR spektrum.

a) Vyšší chemický posun bude mít methylová skupina na benzenu. Aromatické sloučeniny mají vyšší chemický posun, protože π -elektrony vytvářejí vlastní magnetické pole (více viz 4. kapitola).

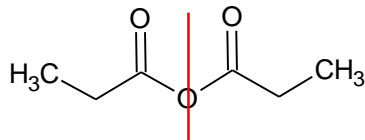
b) Vyšší chemický posun bude mít skupina číslo 2. Chlor má vyšší elektronegativitu než brom.

1-brom-2-chlorethan má dvě různé skupiny vodíků, očekáváme tedy dva signály. Každý z nich bude triplet.



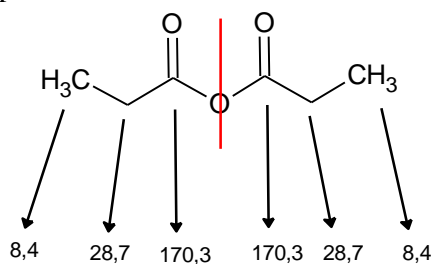
9. Dekaplované ^{13}C NMR spektrum anhydridu kyseliny propanové má tři signály:

a) Vysvětlete, proč má ^{13}C NMR spektrum anhydridu kyseliny propanové pouze tři signály, přestože ve struktuře je šest atomů uhlíku.



Molekula je symetrická

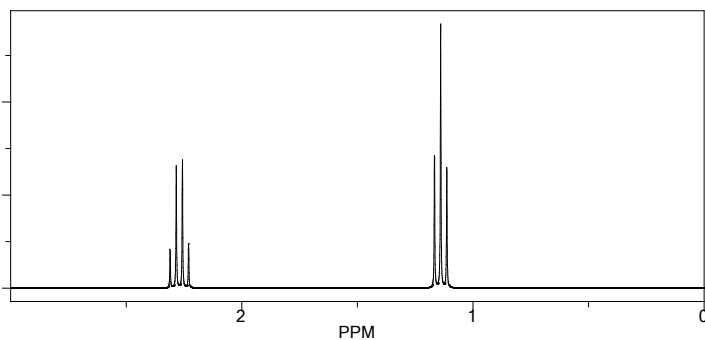
b) Ke každému uhlíku v molekule anhydridu kyseliny propanové přiřaďte chemický posun. Své rozhodnutí odůvodněte.



Čím blíže je uhlík elektronegativnímu kyslíku, tím vyšší má chemický posun.

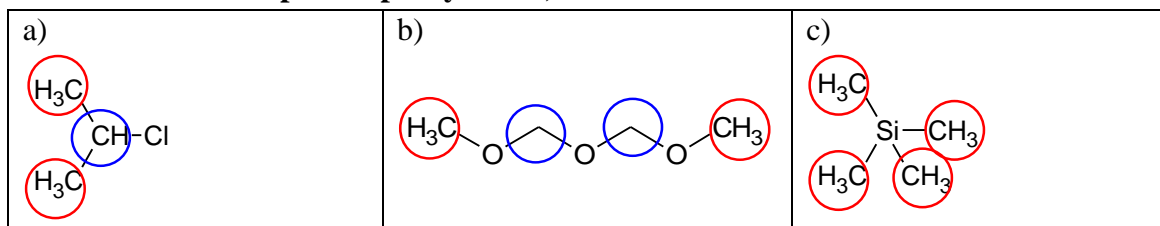
c) Předpovězte ^1H NMR spektrum pro anhydrid kyseliny propanové.

Protože je molekula symetrická, má pouze dvě skupiny vodíků. Nižší posun bude mít methylová skupina, která bude štěpená na triplet, vyšší posun má methylenová skupina, která je štěpená na kvartet.



5.3.4. ODPOVĚDI – TEST B

1. Kolik skupin ekvivalentních vodíků má daná sloučenina? (= kolik signálů bude v ^1H spektru poskytovat?)



2. U následujících látek určete, která ze skupin vodíků (1 nebo 2) bude mít vyšší chemický posun.

Čím blíže je daný atom elektronegativnímu kyslíku, tím vyšší bude mít chemický posun

a) 2	b) 2	c) 1
------	------	------

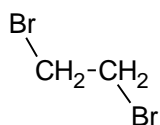
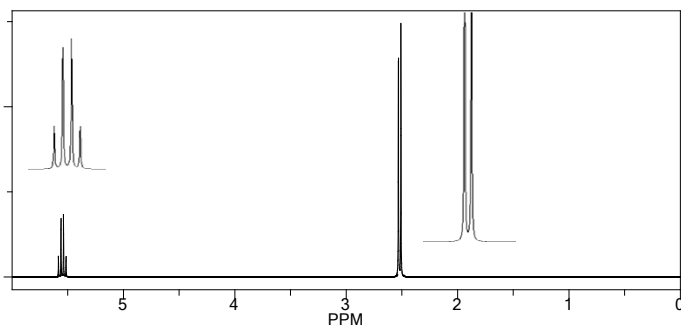
3. Proč se v NMR spektrometrii používají deuterovaná rozpouštědla?

Protože deuterium má signál v jiném rozmezí frekvence, než lehké vodíky, a proto jeho signál ve spektru vůbec nevidíme. Díky tomu rozpouštědlo, které je v nadbytku, nepřekryje signál měřené látky.

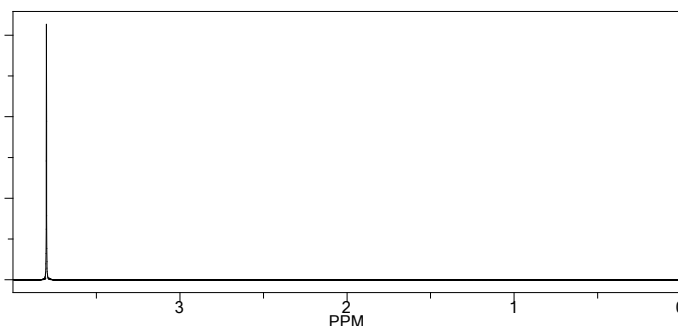
4. Jak můžete pomocí ^1H NMR spektrometrie rozlišit mezi těmito izomery?

CH_3CHBr_2 a $\text{CH}_2\text{BrCH}_2\text{Br}$

CH_3CHBr_2 má dvě různé skupiny vodíků, bude poskytovat dva signály. Signál vodíků na uhlíku číslo jedna bude štěpen na dublet a bude mít nižší chemický posun, signál vodíku na uhlíku číslo dva bude štěpen na kvartet a bude mít vyšší chemický posun.



je symetrická molekula. Má proto jenom jednu skupinu vodíků, bude poskytovat jeden signál. Signál tudíž nebude ani štěpen. Bróm zvyšuje chemický posun.



5. TMS se v NMR spektrometrii používá jako referenční sloučenina.

O zkratku jaké sloučeniny se jedná?

správná odpověď: e), jedná se o sloučenina tetramethylsilan

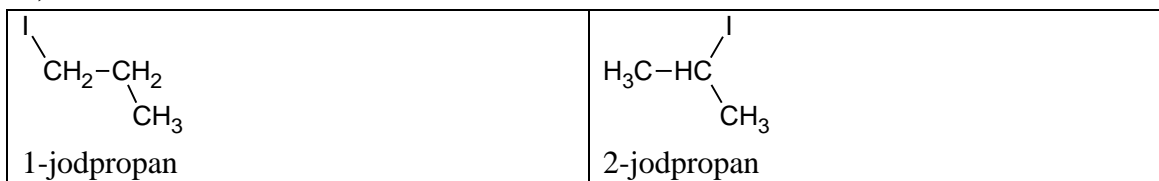
6. Seřad'te následující látky za sebou podle vzrůstajícího chemického posunu:
 CH_4 , CH_3Br , CH_2Br_2 , CHBr_3

7. Atomy pozorovatelné pomocí NMR spektrometrie mají:

správná odpověď: 4)

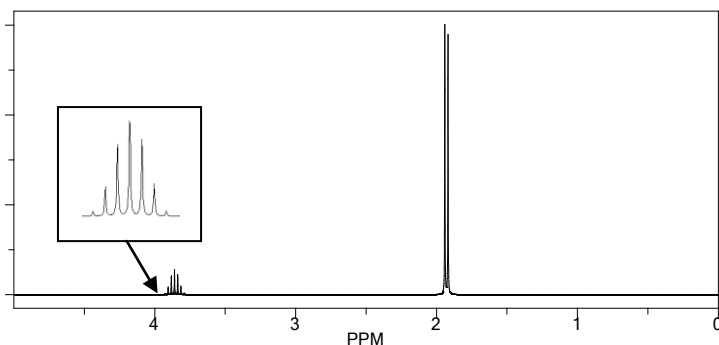
8. Nakreslete a pojmenujte dva možné izomery jodpropanu $\text{C}_3\text{H}_7\text{I}$ (A, B)

a)

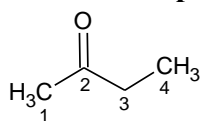


b) O který z izomerů se jedná? – 1-jodpropan

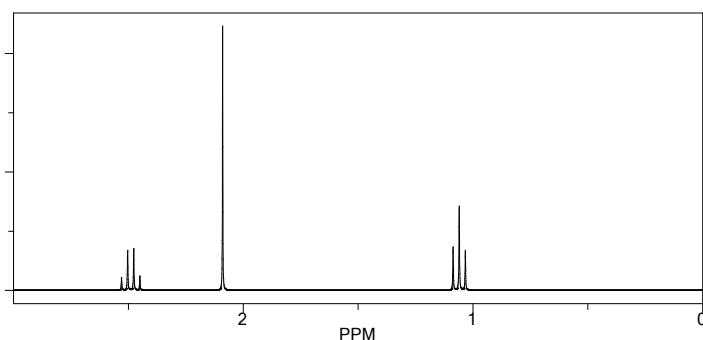
c) Předpovězte, jak bude vypadat spektrum druhého z izomerů (chemické posuny pouze přibližně).



9. Předpovězte ^1H NMR spektrum ethyl(methyl)ketonu:



Ehyl(methyl)keton má tři různé skupiny vodíků, očekáváme tedy tři signály. Methylové vodíky budou dávat singlet. Největší posun budou mít vodíky na uhlíku číslo tři, signál bude rozštěpen na



kvartet. Nejnižší posun budou mít vodíky na uhlíku číslo čtyři, jejich signál bude triplet.

5.4. Určování reálných spekter

Následující úlohy se skládají z naměřených vodíkových a uhlíkových spekter pro různé látky. Pro každou sloučeninu jsou naměřeny oba druhy – vodíkové i uhlíkové spektrum. Vaším úkolem bude pomocí těchto spekter a se znalostí sumárního vzorce dané látky určit její strukturní vzorec – tedy určit, o jakou sloučeninu se konkrétně jedná. Úlohy jsou řazeny (přibližně) podle vzrůstající obtížnosti.

Jak postupovat při řešení těchto úloh?

Nejprve je třeba si uvědomit, že určování spekter je nutné natrénovat. Musejí nás napadat různé molekuly, které by splňovaly daný sumární vzorec a kterým by odpovídala spektra. Proto je třeba všechny nápady nakreslit a spočítat atomy, jestli opravdu odpovídají.

Vezmeme si k ruce tabulky chemických posunů pro ^1H a ^{13}C spektra.

Z rozmezí hodnot ppm ve spektru poznáme, zdali je vodíkové či uhlíkové.

Začneme u vodíkového spektra, protože udává více informací, než uhlíkové spektrum.

Nejprve si budeme všimnout hodnot integrálů. Podle nich si rozdělíme vodíky do skupin. Poté se podíváme na štěpení – z něho se (ideálně) dozvíme počet vodíků na sousedícím uhlíku (uhlících). V této chvíli začínáme jednotlivé skupiny vzájemně spojovat. Nakonec budeme určovat funkční skupiny (resp. typy skupin) podle jejich chemických posunů.

Podíváme se na uhlíkové spektrum. Kolik uhlíků je uvedeno v sumárním vzorci a kolik píků je ve spektru? Pakliže je ve spektru méně píků než uhlíků ve vzorci, bude mít molekula některé části symetrické.

Zaměříme se na posuny píků – jestli se nacházejí v aromatické oblasti, jestli mají velmi malé posuny (\rightarrow alkany) nebo naopak velké posuny (\rightarrow aldehydy a ketony). Uhlíková spektra bývají většinou dekaplovaná, to znamená, že nevidíme štěpení.

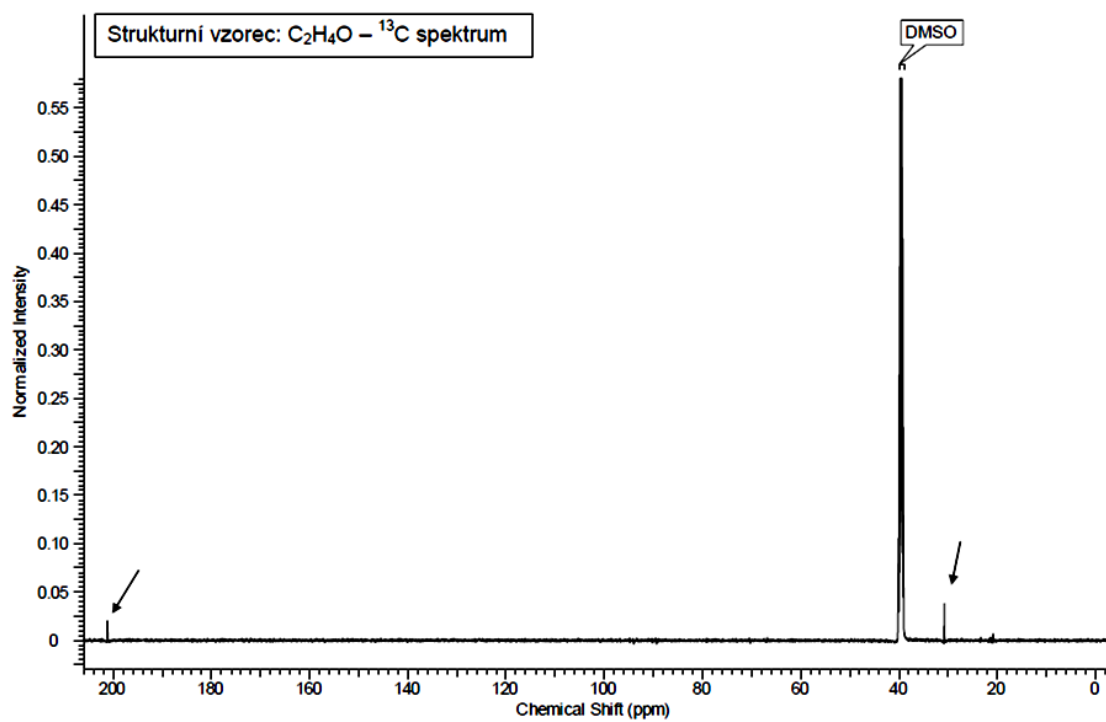
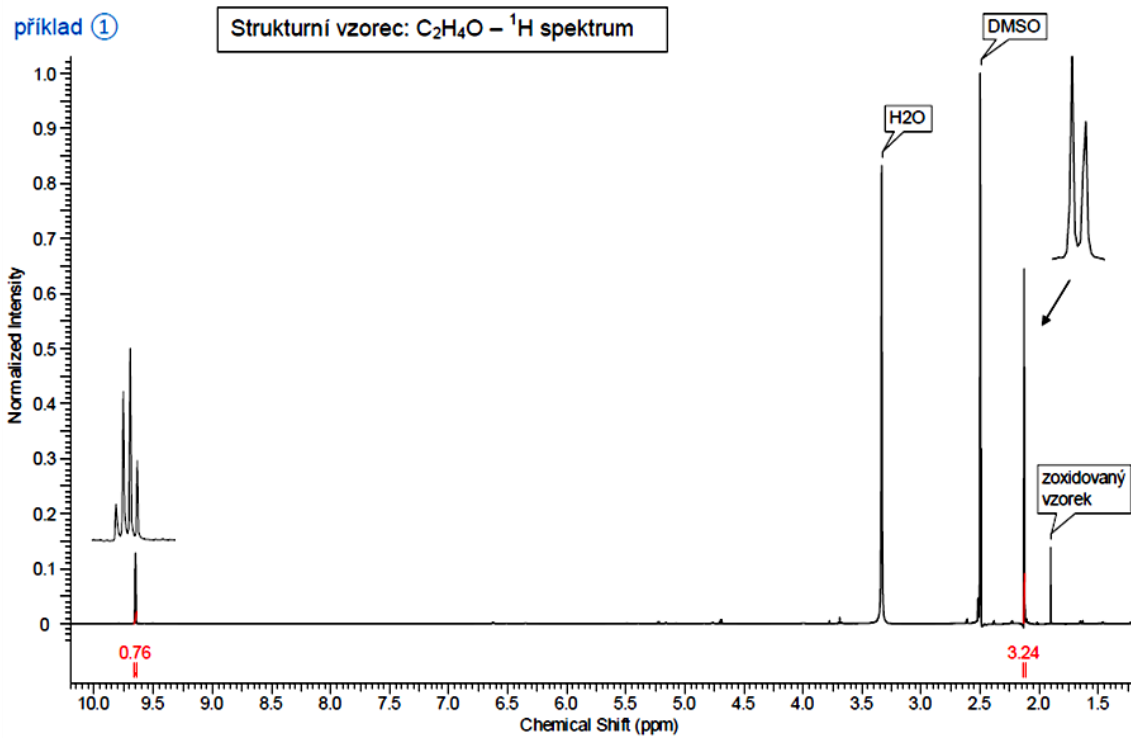
Jsou ve vzorci nějaké atomy kyslíku nebo dusíku? Potřebujeme zjistit, v jaké funkční skupině jsou tyto atomy přítomny. Podíváme se na vodíkové spektrum. V jakém

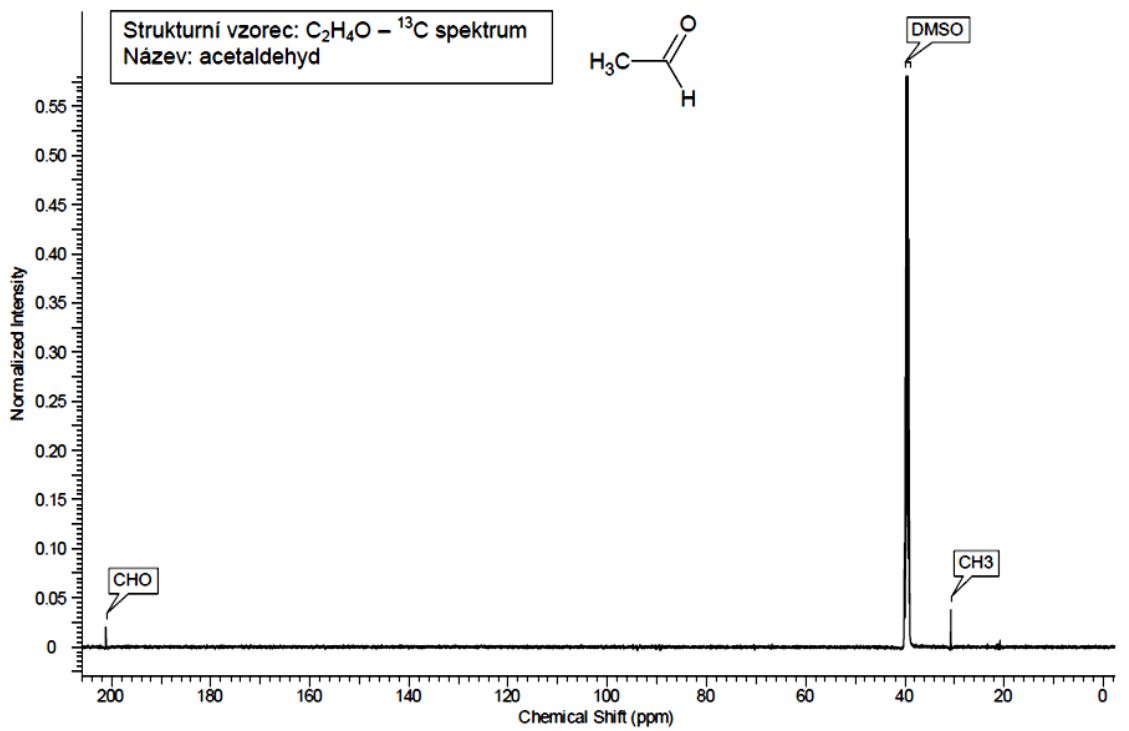
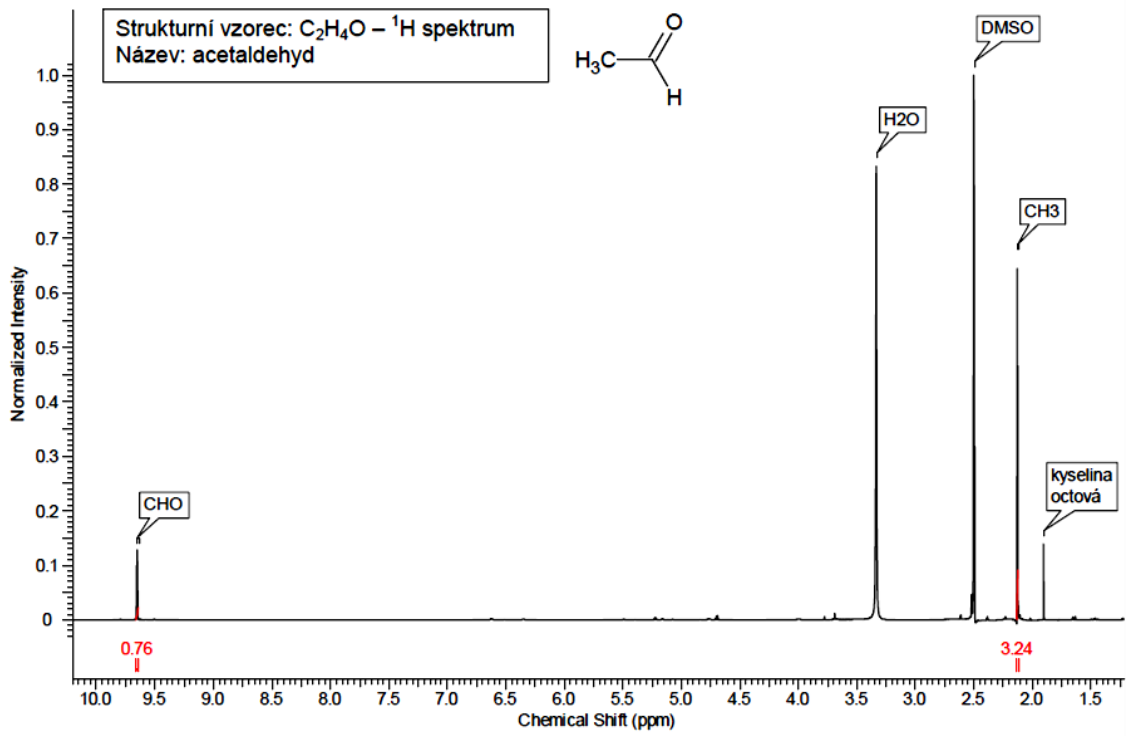
rozpouštědlo je daná látka rozpuštěna? Pokud se jedná o aprotické rozpouštědlo a kyslík či dusík je přítomen ve formě hydroxy či amino skupině, pak bychom měli jejich signál vidět. Pokud je látka rozpuštěna v protickém rozpouštědle (a vyměnitelné vodíky nejsou ve spektru zviditelněny jinak), tak tuto informaci nezjistíme. Pokud je kyslík ve formě aldehydu, tak má pík s velmi vysokým posunem (9–10 ppm). Dusík může být kromě amino skupiny přítomen ve formě nitro skupiny (ve vzorci musí být kyslík) nebo může být heteroatomem v aromatické sloučenině či v kyano skupině. Dále se zaměříme na štěpení a na hodnotu integrálů.

Ještě jedna poznámka týkající se rozpouštědel. Říkali jsme si, že při NMR používáme deuterovaná rozpouštědla. Ta se vyrábí z „klasických“ rozpouštědel – ale nikdy se je nepodaří nadeuterovat úplně. To znamená, že v těžké vodě vždycky zůstane trochu lehké, že v deuterovaném chloroformu vždycky zůstane trochu nedeuterovaného, a tak dále. A právě signály těchto „zbytkových“ lehkých rozpouštědel ve spektru vidíme. (V následujících spektrech jsou jejich signály označeny, takže Vám nebudou komplikovat interpretaci.)

Hodnoty integrálů v předešlém textu byly vždy celočíselné. Reálná spektra nejsou dokonalá, a proto také integrály ne vždy vycházejí jako celé číslo. Pro určování spekter si je proto zaokrouhlíme. Má-li signál intenzitu 2,89, znamená to, že je to signál tří vodíků.

Následuje ukázka dvou příkladů z třinácti. Všechny příklady jsou umístěné na CD jako příloha.





Vysvětlení:

Vodíkové spektrum

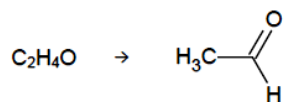
- vzorek je rozpuštěn v DMSO, to znamená, že kdyby tam kyslík byl přítomen ve formě OH, tak by to bylo vidět → bude přítomen v jiné formě

intenzita	1	3
to znamená – počet vodíků	CH	CH ₃
štěpení – z toho vyplývá, co je vedle	kvartet → vedle je CH ₃	dublet → vedle je CH
posun	v oblasti aldehydických vodíků	

Uhlíkové spektrum

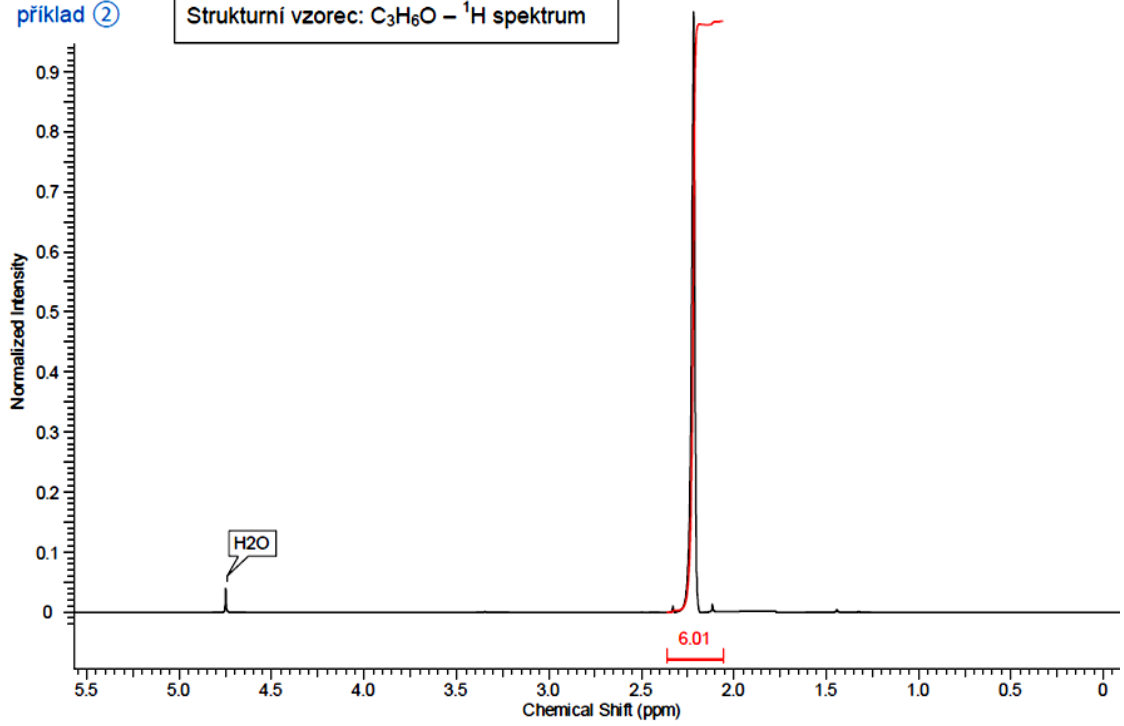
- jeden signál – posun 200 ppm → aldehydy, ketony

- druhý signál – posun 30 ppm → alkany

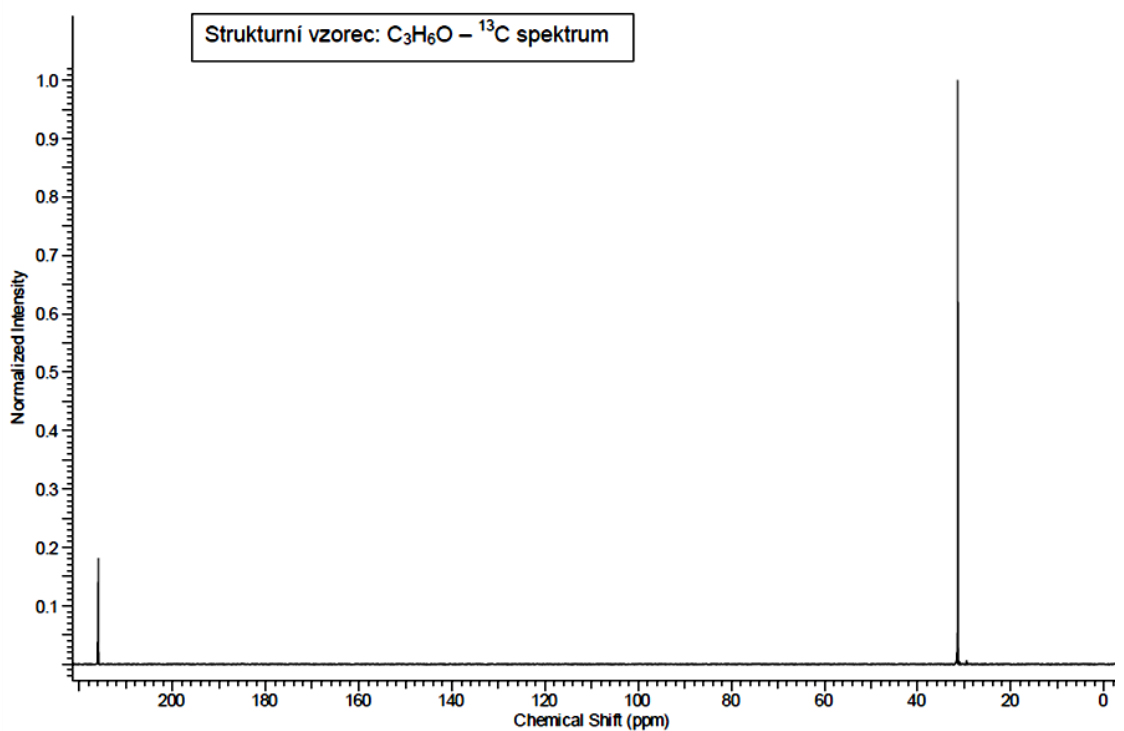


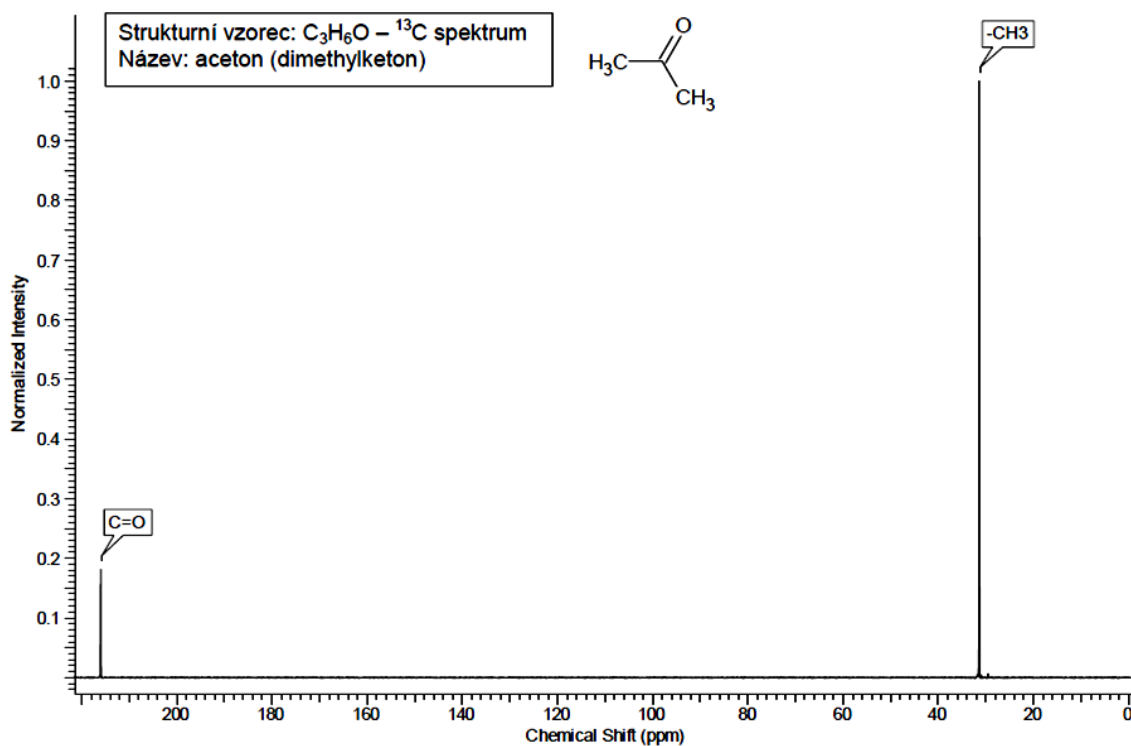
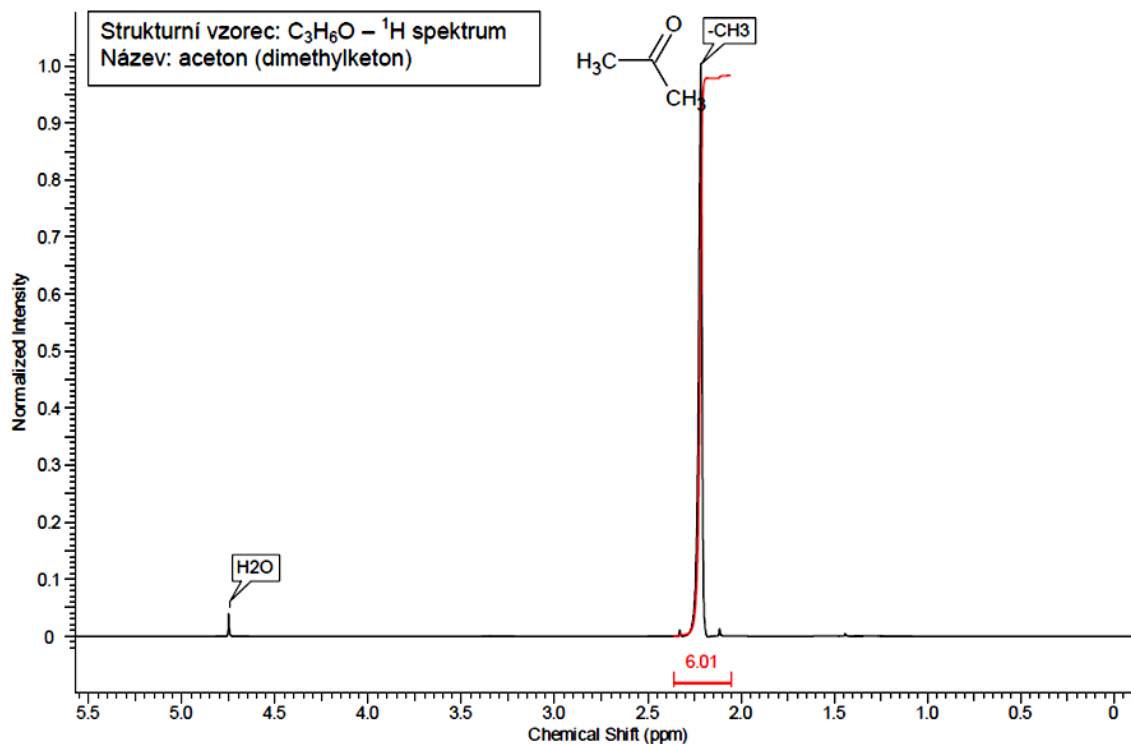
příklad ②

Strukturní vzorec: C_3H_6O – 1H spektrum



Strukturní vzorec: C_3H_6O – ^{13}C spektrum

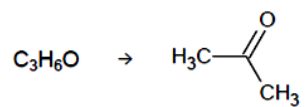




Vysvětlení:

Ve vodíkovém spektru je pouze jeden signál. Je to signál všech vodíků v molekule nebo je jeden z nich vázaný na kyslíku? V uhlíkovém spektru vidíme signál s posunem odpovídajícím ketonům, kyslík tedy bude přítomen ve formě ketonu, a proto bude daný jeden signál ve vodíkovém spektru tvořen všemi šesti vodíky (počet dán sumárním vzorcem), čemuž by odpovídala i jeho intenzita – šest. Z toho vyplývá ještě další fakt – že molekula bude symetrická. Zároveň je tento signál pouze singlet → to znamená, že v okolí těchto vodíků musí být uhlík bez vodíků.

Počet uhlíků v sumárním vzorci je tři, ale signály vidíme dva → symetrická molekula. Jeden ze signálů v uhlíkovém spektru má posun odpovídající ketonům.



6. EVALUACE

6.1. Úvod

Optimální metodou evaluace je zahrnout téma NMR do výuky v semináři posledního ročníku na některé střední škole nebo gymnáziu a poté vhodnou metodou šetření (např. pomocí dotazníkového šetření) zpracovat a vyhodnotit. Ukázalo se, že není moc reálné, vzhledem k obecně nízké návratnosti dotazníků, nalézt dostatečný počet pedagogů, kteří by materiál nastudovali a poté našli prostor ve svých výukových plánech a věnovali mu alespoň dva dvouhodinové semináře.

Proto byla zvolena evaluace formou rozhovoru s menším počtem respondentů, kteří si text podrobně prostudovali a okomentovali.

Kritérii a jakousi systematizací pro evaluaci byly u hodnoceného materiálu srozumitelnost a motivační efekt, neboť jejich prozkoumání bylo považováno za nejdůležitější. S tímto cílem byly stanoveny další evaluační dotazy (viz dále).

Následně byli vybráni hodnotitelé, reprezentující v podstatě čtyři kategorie čtenářů – dva odborní chemici, dva studenti učitelství chemie, dva čtenáři představující širší veřejnost s přírodovědným zaměřením a jeden student posledního ročníku gymnázia. Přirozeně by pro hodnověrnější výsledek evaluace bylo žádoucí získat ke spolupráci větší počet respondentů, ale nepodařilo se jich sehnat více, byť jich byl osloven zhruba dvojnásobek. Zjevně se projevila nechuť případných respondentů prostudovat dobrovolně 50 stránek textu a shlédnout dalších 70 stránek se spektry.

Uvedení hodnotitelé dostali čas si vytvořený materiál nastudovat (řádově týdny až měsíc) a jejich odpovědi na zvolené evaluační dotazy, názory a připomínky byly v rámci ústního rozhovoru zaznamenány. V závěru jsou potom výsledky vyplývající z jejich odpovědí diskutovány.

6.2. Otázky pro evaluační rozhovor

Srozumitelnost a motivační efekt

- 1) Uveďte, o kolik se zlepšily Vaše znalosti o NMR.
- 2) Je text srozumitelný? Byla nějaká část náročná na pochopení? Jaká? Domníváte se, že je princip metody vysvětlovaný příliš složitě?
- 3)
 - a. Jsem učitel/studuji učitelství chemie
Jaký je Váš názor na vyučování NMR? Změnil se nějak po přečtení tohoto textu? Učili byste NMR vy sami např. v rámci semináře (kdyby na to byl časový prostor)? Považujete za důležité/užitečné seznámit žáky s některými náročnějšími přístrojovými analytickými metodami, jako je tato?
 - b. Nejsem učitel/nestuduji učitelství
Jaký je Váš názor na vyučování NMR např. v rámci semináře? Byl/a byste rád/a pokud byste se o tomto tématu ve škole něco dozvěděl/a?
- 4) Líbil se Vám text? Jaký je Váš celkový dojem? Která část byla nejzajímavější? Která naopak nejnudnější?
- 5) Znali jste po přečtení textu odpověď na testové otázky (resp. poskytuje na ně text odpovědi)? Domníváte se, že jsou náročné?
- 6) Šla Vám interpretovat spektra? Pomohl vám případně vysvětlující text? Domníváte se, že je to náročné?
- 7) Jaký se Vám zdál používaný jazyk textu – vědecký, neosobní, osobní, snažící se udržet pozornost, vlezlý, příjemný, divný...
- 8) Věnovali jste se někdy materiálům, které vám učitel chemie doporučil, ale jejichž nastudování nebylo povinné? Přečetli byste si případně tento text?
- 9) Další poznámky.

6.3. Seznam hodnotitelů

studující učitelé chemie

- Hodnotitel I: Lucie Hlavová (studentka magisterského oboru Učitelství chemie a matematiky na PřF UK)
- Hodnotitel II: Jiřina Laburdová (studentka magisterského oboru Učitelství chemie a matematiky na PřF UK)

odborní chemici

- Hodnotitel III: Jan Blahut (absolvent magisterského oboru Organická chemie na PřF UK)
- Hodnotitel IV: Luděk Míka (absolvent magisterského oboru Anorganická chemie na PřF UK)

zástupci širší veřejnosti s přírodovědným zaměřením

- Hodnotitel V: Veronika Firlová (studentka bakalářského oboru Biologie a zeměpis se zaměřením na vzdělávání na PřF UK)
- Hodnotitel VI: Jitka Laburdová (absolventka magisterského oboru Systematická biologie a ekologie směr botanika, PřF Masarykova Univerzita)

student posledního ročníku gymnázia, účastník chemického semináře

- Hodnotitel VII: Zuzana Míková (Gymnázium Strakonice)

6.4. Vyhodnocení

Hodnotitel I – studující učitel chemie

- 1) Hodnotitel uvádí, že se jeho znalosti o NMR zlepšily téměř o 100 %, neboť na SŠ o NMR nedozvěděl nic a na VŠ bylo téma probíráno v rámci Organické chemie – pamatuje si pouze, že se ve spektru určovala výška a šířka.
- 2) Hodnotitel by v pozici studenta přskočil princip metody a zajímal se hlavně o určování spekter. Vysvětlení mu nepřipadá složité, nicméně je pár míst, které si musel přečíst dvakrát – například kontinuální a pulsní metodu.
- 3) Na semináři v chemii by se mělo prokládat opakování k maturitě s učením něčeho nového. Hodnotitel je pro, aby byli studenti seznámeni s vybranými analytickými metody, aby se poukázalo na jejich praktické využití. Na druhou

stranu nesouhlasí s uváděním fyzikálních principů těchto metod (pokud nejsou opravdu jednoduché) – k tomu se zájemci dopracují na VŠ. Názor hodnotitele na NMR se po přečtení výukového textu rozhodně změnil (předtím téma považoval za příliš a zbytečně odborné) a rád by ho zahrnul do vyučování, i kdyby to měla být jen jedna, nebo dvě vyučovací hodiny.

- 4) Výukový text považuje hodnotitel za hezky zpracovaný, většina je srozumitelná hned po prvním přečtení. Jako nejzajímavější hodnotí úvodní kapitolu a kapitolu o MRI. Naopak nejméně zábavná je úvodní část k principu.
- 5) Hodnotitel nepovažuje testy A a B za rovnocenné – nedoporučuje zadávat je ve třídě jako dvě varianty při jedné písemné práci. První varianta má více uzavřených otázek (výběr z možností), druhá má naopak často otázky otevřené. Odpovědi na otázky jsou probírány v textu.
- 6) U prvního příkladu si hodnotitel ujasňoval informace, další spektra šla poté určit snadněji. Až v rámci těchto příkladů si hodnotitel ujasnil multiplicitu signálu, z výukového textu mu nebyla příliš jasná.
- 7) Jazyk používaný v textu je hodnocen kladně. Hodnotitel se pozastavuje nad otázkami v textu. Pokud nejsou myšleny pouze řečnický, měly by dávat šanci se zamyslet – odpovědi proto doporučuje oddělit alespoň odstavcem.
- 8) Ve škole se nesetkal s tím, že by byl doporučen nějaký materiál čistě pro zajímavost. Vytvořený text by si doma přečetl.
- 9) Další poznámky
Jako učitel matematiky hodnotiteli vadilo, že není vysvětlené, proč je u spekter na ose x obrácený směr. Úvodní kapitola a kapitola o MRI by se dala zařadit do výuky i mimo seminář.

Hodnotitel II – studující učitel chemie

- 1) Hodnotitel uvádí, že se jeho znalosti o NMR zlepšily především ohledně teoretického principu metody. Na SŠ se hodnotitel s NMR nesetkal, na PřF UK pak jen velmi zběžně v rámci Organické chemie. Většinu svých znalostí na toto téma získal na Univerzitě v Glasgow (výměnný program Erasmus), a to v rámci semestrálního předmětu věnovanému NMR, IR a hmotnostní spektrometrii, kde se zabýval se především interpretací spekter.

- 2) Na to, o jak složitou látku se jedná, považuje hodnotitel metodu NMR za dobře vysvětlenou. Hodně se mu líbila různá přirovnání (ladička). Naopak některé části v rámci fyzikálního principu musel číst vícekrát – hodně cizích slov (magnetický moment, moment hybnosti, spin).
- 3) Hodnotitel je pro, aby se vybrané instrumentální analytické metody učily v rámci semináře. Je ale potřeba mít dostatek času. Téma NMR by co nejvíce zjednodušil – méně principu, více určování spekter. Tuto metodu by zmínil i v rámci běžných hodin chemie – odlišení MRI a rentgenu je důležité zařadit do SŠ učiva.
- 4) Celkově se text líbil. Nejzajímavější byly ty části, kde se něco vysvětlovalo trochu jinak – například ladička („aha moment“). Na druhou stranu ale na začátku celého textu chyběl nějaký přehled toho, co se v které kapitole čtenář dozví a jak moc do hloubky. Z toho důvodu měl hodnotitel problém s vysvětlováním principu – čekal, jak mu to pomůže v určování spekter.
- 5) Jedna z testových otázek se ptá, která jádra jsou/nejsou měřitelná. Zpracování tohoto tématu ve výukovém textu by mohlo studenty zmást. Na první pohled to totiž vypadá, že jádra bez magnetického momentu jsou pouze taková, která mají sudé nukleonové číslo a jádra s magnetickým momentem ho mají naopak pouze liché. Proto doporučuje hodnotitel uvádět jednotlivé izotopy i s protonovým číslem.
- 6) Spektra šla hodnotiteli interpretovat, souhlasí i jejich řazení dle vzrůstající obtížnosti.
- 7) Použitý jazyk působil dobře – nebyl vlezlý ani nemístný.
- 8) Ve škole nedostávali žádné materiály k dobrovolnému nastudování. Nicméně hodnotitel si doma sám pročítal různé učebnice z chemie. Vytvořený materiál na téma NMR by si určitě přečetl.
- 9) Další poznámky. Hodnotitel doporučil položit několik otázek na začátek každé kapitoly (v jejím průběhu by se čtenář dozvěděl odpověď). Zamýšlel se nad správností odstavce o intenzitě signálu. Upravoval stylistiku.

Hodnotitel III – odborný chemik

- 1) Hodnotitel o NMR na SŠ neslyšel. Na PřF UK absolvoval dvě semestrální přednášky na toto téma, NMR aktivně využíval při své diplomové práci. V tomto textu se nedozvěděl nic nového.
- 2) Text hodnotí jako srozumitelný, princip považuje za dobře vysvětlený. Nicméně ze své současné pozice se mu již těžko posuzuje, jestli by text pochopil jako středoškolák. Jelikož se ale tehdy učil například z Organické chemie od McMurryho [47], předpokládá, že by výukový text pochopil.
- 3) Hodnotitel by velmi ocenil, kdyby se o NMR dozvěděl již na střední škole.
- 4) Jelikož hodnotitel celé téma dobře zná, nebyla v textu část, která by ho zaujala nebo vysloveně bavila.
- 5) Hodnotitel znal odpovědi na testové otázky, nicméně vzhledem ke svým znalostem si nebyl stoprocentně jistý, jestli zná odpovědi z výukového textu nebo odjinud.
- 6) Ze své strany považuje hodnotitel spektra za jednoduchá, bohužel si již nedokáže představit, jak by mu šla interpretovat jako středoškolákovi.
- 7) Jazyk textu považuje hodnotitel za velmi žoviální, ale protože se nejedná o učebnici, tak se dá akceptovat. Myslí si, že by tento druh jazyka na SŠ ocenil. Na druhou stranu texty psané tímto jazykem ztrácí (především pro chemiky) odbornou důvěryhodnost.
- 8) Hodnotitel na SŠ často studoval materiály, které nebyly povinné, proto by si i tento text přečetl. Nicméně výklad učitele považuje za nezbytný.
- 9) Další poznámky. Hodnotitel nesouhlasil s některými zjednodušenými definicemi, upravoval stylistiku, logické pořadí některých vět, upozornil na anglické popisky os u dvou grafů a upřesnil odstavec o intenzitě signálu a o funkci MRI.

Hodnotitel IV – odborný chemik

- 1) Hodnotitel se na střední škole o NMR neučil, nicméně setkal se s tímto tématem při řešení úloh v KSICHTu. Vzpomíná si, že mu tehdy seriál na toto téma [13] nepřipadal úplně jednoduchý a že ho musel přečíst několikrát, aby ho pochopil. Na vysoké škole absolvoval dvě semestrální přednášky na toto téma. Jeho znalosti se proto přečtením tohoto výukového materiálu nezlepšily.
- 2) Text hodnotí jako srozumitelný, někdy až příliš jednoduchý. Protože občas je něco v textu vysvětleno zjednodušeně a pak je dále řečeno, že to ale takto vůbec není. Je si jist, že jako středoškolák by text pochopil.
- 3) Hodnotitel je toho názoru, že by bylo vhodné učit na školách moderní metody v chemii, NMR respektive MRI, protože je to metoda natolik rozšířená, že by se o ní vyplatilo mluvit (minimálně na semináři). Sám by velmi ocenil, kdyby se o NMR dozvěděl v rámci střední školy.
- 4) Text se mu velmi líbil, přečetl ho na jeden záťah. Nemůže specifikovat, která část byla nejzajímavější a která nejnudnější, ale vyjadřuje se negativně k použitému fontu Calibri a celkovému formátování, které mu připomíná spíš rozpracovanou verzi než hotový dokument.
- 5) Hodnotitel se domnívá, že odpovědi na testové otázky jsou dohledatelné ve výukovém textu a že obtížnost otázek je odpovídající. Je toho názoru, že pokud bude text číst sám student, tak testové otázky dobře ukážou, jestli čtenář rozumí tomu, co čte.
- 6) Obtížnost spekter hodnotí jako odpovídající. S interpretací spekter má velké zkušenosti, proto s těmito neměl problém. U uhlíkových spekter doporučuje zvětšit signály vzorku a popsat, jaký mají posun.
- 7) Jazyk textu hodnotí jako „místy příliš blbuvzdorný“, líbí se mu věty typu: podívejme se, zopakujme si, vzpomeňte si,...
- 8) Hodnotitel si dobrovolně četl materiály, které mu byly doporučeny ve škole, pokud byly zajímavé. Tento text by si tehdy určitě přečetl.
- 9) Další poznámky: Jen tak dál :-)
Hodnotitel opravil několik chyb ve stylistice a doporučil v několika případech běžnější názvosloví, než bylo v textu. Upozornil na matoucí úsek u podkapitoly Intenzita signálu.

Hodnotitel V – zástupce širší veřejnosti s přírodovědným zaměřením

- 1) Hodnotitel o NMR neslyšel ani na SŠ, ani na VŠ, takže se jeho znalosti zvětšily o 100 %.
- 2) Hodnotitel považuje text za srozumitelný. Za snadněji pochopitelnou pokládá první část, kde je hodně detailně vysvětlených příkladů a také shrnutí informací. Podkapitoly o multiplicitě signálu, vyměnitelných vodících a rozpouštědlech považuje za složitější, mimo jiné také proto, že vyžadují předchozí znalosti z chemie.
- 3) Hodnotitel považuje NMR za metodu pro žáky středních škol příliš složitou. Sám nebyl během SŠ na žádném chemickém semináři zapsán, špatně se posuzuje, jestli by toto téma ocenil.
- 4) Hodnotitel nejvíce oceňuje poslední část výukového textu – MRI – neboť uvádí praktické využití v medicíně. Naopak nejméně ho zaujala část pojednávající o vyměnitelných vodících, neboť vyžadovala větší chemické znalosti. Jako člověk se zájmem o přírodní vědy, avšak bez větších znalostí chemie, oceňuje hodnotitel, že velké části textu – ke svému překvapení – rozuměl.
- 5) Text poskytuje odpovědi na testové otázky.
- 6) Hodnotitel uvádí, že mu spektra interpretovat nešla. Text je vodítkem k tomu, kde začít, ale ani to nepomohlo. Podotýká, že na interpretaci je třeba dalších chemických znalostí.
- 7) Hodnotitel uvádí, že se celý text četl příjemně, je psaný se zaujetím a je z něj patrná snaha něco vysvětlit, shrnout a na to navázat.
- 8) Na gymnáziu se hodnotitel nesetkal s tím, že by učitel doporučoval nějaké dobrovolné čtení nad rámec školního učiva. Nicméně kdyby měl příležitost si tento text přečíst, četl by pouze začátek a konec – praktické použití.

Hodnotitel VI – zástupce širší veřejnosti s přírodovědným zaměřením

- 1) Hodnotitel se s NMR nesetkal ani na SŠ, ani na VŠ. Jeho znalosti se tedy po přečtení výukového textu velmi zlepšily.
- 2) Hodnotitel považuje text za srozumitelný po odborné stránce, avšak po stránce formální k němu má mnoho výhrad. Všímá si velkého množství „vycpávkových slov“ – jako jsou například: také, nedokážou, jenže, takže, ostatně, takhle, tak, tedy, a navíc, totiž, akorát, takto, kdežto, zrovna. Pasáže o metodách by podle něj mohly být kratší.
- 3) Hodnotitel není proti vyučování NMR v rámci chemického semináře. Považuje ho za zajímavé téma.
- 4) Po odborné stránce se text hodnotiteli líbil. Zajímavé to bylo celkově vše, méně pasáže o principu metody (hodnotitel však poukazuje na svůj subjektivní pocit – záporný vztah k technickým věcem a obecně vzorečkům).
- 5) Odpovědi na testové otázky hodnotitel víceméně znal, text nepovažuje za složitý na pochopení a je to v něm dobře vysvětleno.
- 6) Hodnotitel ví, jak postupovat při interpretaci spekter, nicméně opírá se o vysvětlující text, který mu velmi pomáhá a bez nějž by k výsledku nedošel.
- 7) K jazyku textu má hodnotitel výhrady (viz bod 2). Celkově se mu zdá text dobře napsaný, místy možná až příliš odborný pro středoškolského studenta (zvláště pasáže o metodách). Hodnotitel je zvyklý na odborné texty a předložený materiál mu připadá jako přepis mluveného slova, což hodnotí záporně.
- 8) Učitel chemie žádné nadstandardní učivo nedoporučoval. Kdyby se však vytvořený text hodnotiteli dostal do ruky, přečetl by jej celý.
- 9) Další poznámky. Hodnotitel navrhuje zmínit po úvodu stručnou osnovu toho, o čem se bude v textu psát. Na konci textu doporučuje vložit seznam literatury pro další zájemce o dané téma. Na zvážení nechává prohození kapitoly 4 a 5 (nejdříve popisovat přístroj a pak výsledek jeho činnosti).

Hodnotitel VII – student posledního ročníku gymnázia

- 1) Hodnotitel se na SŠ o NMR neučil, nicméně díky svému bratrovi (hodnotitel IV) má o této metodě jisté povědomí. Věděl, že se dá NMR použít v lékařství, že obsahuje silný magnet, a že se na něm určují látky. Jeho znalosti se po přečtení výukového textu zlepšily.
- 2) Text je podle názoru hodnotitele napsán velice srozumitelně.
- 3) Hodnotitel by velmi ocenil, kdyby se o NMR dozvěděl něco na gymnáziu.
- 4) Nejlépe se hodnotiteli četla část, kde se uvádí, jak se co určuje (to se mu velmi líbilo). Navíc se těšil, že se konečně dozví, jak číst ty pro něj zatím nesrozumitelné čárky ve spektrech. Závěr výukového textu považuje hodnotitel za velice povedený, oceňuje hezké a trefné obrázky.
- 5) Testy nejsou příliš složité, všechny odpovědi je možné se dozvědět ve výukovém textu.
- 6) Co se týče určování spekter, tak hodnotitel sám zvládl jen to nejjednodušší, ale myslí si, že při větším soustředění by jeho výsledky byly lepší – protože po přečtení řešení nechápal, že na to nepřišel již před tím sám.
- 7) Text se četl dobře, jeho jazyk ale hodnotitel nějak výrazně nevnímal.
- 8) Učitelé na gymnázium doporučovali málokdy něco k přečtení, ale když něco, tak si to hodnotitel přečetl. Text o NMR by si přečetl také.
- 9) Další poznámky. Hodnotitel upozornil na chybu v číslování u testů.

6.5. Výsledky hodnocení

Odpovědi jednotlivých hodnotitelů byly pro přehlednost kvantifikovány a výsledky shrnuty do následující Tabulka 28.

Kladná odpověď hodnotitele na danou otázku je označena slovem „ano“, záporná slovem „ne“. Částečná kladná/záporná odpověď slovem „částečně“.

Vysvětlivky k tabulce: písmenko „H“ je zkratkou pro Hodnotitele.

Tabulka 28: Odpovědi hodnotitelů na zadané otázky

	otázka1	otázka2	otázka3	otázka4	otázka5	otázka6	otázka7	otázka8
	zlepšení znalostí	srozumitelnost	výuka NMR	motivační efekt	kvalita testů	obtížnost spekter	jazyk textu	samo-studium
H1	ano	částečně	ano	ano	ano	částečně	ano	ano
H2	částečně	částečně	ano	ano	ano	ano	ano	ano
H3	ne	ano	ano	ano	ano	ano	částečně	ano
H4	ne	ano	ano	ano	ano	ano	částečně	ano
H5	ano	částečně	ano	ano	ano	ne	ano	částečně
H6	ano	ano	ano	ano	ano	ne	ne	ano
H7	ano	ano	ano	ano	ano	částečně	ano	ano

6.6. Diskuse k výsledkům hodnocení

Z výsledků hodnocení vyplývá, že u studentů učitelství chemie, zástupců širší veřejnosti i středoškolských studentů došlo po přečtení výukového textu k velkému zlepšení znalostí o NMR. Výjimkou je Hodnotitel II, který měl o tomto tématu znalosti z University v Glasgow. U odborných chemiků ke zlepšení znalostí nedošlo. Odpovědi na tuto otázku dopadly podle očekávání.

Jako velmi srozumitelný hodnotí text odborní chemici. Také studenti učitelství chemie hodnotí text jako srozumitelný, nicméně pasáže o principu metody museli číst několikrát. Stejný názor má i jeden ze zástupců širší veřejnosti, druhý hodnotitel z této skupiny naopak považuje text za srozumitelný dostatečně. Stejně stanovisko má i středoškolský student.

Všichni hodnotitelé by se rádi o NMR dozvěděli na střední škole, studenti učitelství chemie by toto téma chtěli zahrnout do své budoucí výuky.

Všem odpovídajícím se vytvořený text velmi líbil, hodnotí jej jako velmi motivační.

Hodnotitelé se domnívají, že obtížnosti otázek v testech je odpovídající a že odpovědi na tyto otázky jsou součástí výukového textu.

Pro odborné chemiky interpretace spekter není problém, stejný názor má i Hodnotitel II – student učitelství chemie, který interpretaci nacvičenou z Univerzity v Glasgow. Velký problém dělá interpretace těm, kteří se chemii přímo nevěnují – zástupcům širší veřejnosti. Pro středoškolského studenta a druhého ze studentů učitelství chemie nebyla interpretace spekter jednoduchá, ale byla zvládnutelná.

Jazyk textu se velmi líbil studentům učitelství chemie a také středoškolskému studentovi. Drobné výhrady k němu měli odborní chemici, místy se jim zdál příliš „blbuvzdorný“, žoviální, ... Nevyhovoval Hodnotiteli VI – zástupci širší veřejnosti.

Všichni hodnotitelé se shodují v tom, že pokud by jim jejich učitel tento text na SŠ doporučil, tak by si jej přečetli. Výjimkou je Hodnotitel V, který by si přečetl pouze první (motivační) a poslední (MRI) kapitolu.

Celkové zhodnocení

Z výsledků hodnocení vyplývá, že vytvořený materiál víceméně splňuje požadavky na srozumitelnost a motivační efekt textu.

Práce jako celek je hodnocena kladně, žádná část není považována za nesrozumitelnou či příliš složitě vysvětlovanou, téma všechny hodnotící zaujalo a rádi by se o něm něco na střední škole dozvěděli.

Nejlépe jsou hodnoceny části věnující se praktickému využití – jak interpretovat spektra a aplikace NMR v medicíně. Nejméně zajímavý je fyzikální princip metody. Pro čtenáře, kteří se nevěnují chemii, bude interpretace spekter pravděpodobně náročná, protože přes všechno vysvětlování – je na to třeba „chemický cit“. Naopak testové otázky jsou svou obtížností přístupné pro všechny.

Výsledkem této práce je, že studenti učitelství chemie, kteří se zúčastnili hodnocení textu, změnili svůj názor na výuku tohoto tématu – ať již dříve považovali NMR za metodu příliš složitou nebo o tom jednoduše neuvažovali – a rádi by s tímto tématem seznámili své budoucí žáky. Nicméně soustředili by se především na interpretaci spekter a princip metody by z větší části přenechali až studiu na vysokých školách.

Pozitivním zjištěním je, že text je pochopitelný i pro čtenáře, kteří se chemií nezabývají. Bohužel, interpretace spekter je pro ně náročná. Velkou roli však jistě hraje to, že o NMR pouze četli a neměli možnost ústního podání učitele.

Důležitým faktem, vyplývajícím z hodnocení, je, že by hodnotitelé byli ochotni vytvořený materiál sami ve volném čase přečíst, kdyby jim je učitel doporučil nebo někdo zprostředkoval.

Názor na jazyk textu je u hodnotitelů rozporuplný. Cílem bylo přiblížit se středoškolskému čtenáři a pomocí různých otázek a přirozeného, ne odborného jazyka udržovat jeho pozornost. Pro hodnotitele, kteří jsou zvyklí číst odborné texty, byl jazyk příliš neoficiální, uvolněný a nevhodný. Přirovnávali ho k přepisu mluveného slova. Nicméně je třeba podotknout, že právě tyto aspekty byly cílem.

V průběhu čtení vytvořeného materiálu bylo hodnotiteli navrženo mnoho úprav. Přípomínky byly zváženy a podle některých z nich byl text upraven.

Na začátek textu byla doplněna krátká osnova toho, co se v které kapitole čtenář dozví. V úvodu většiny kapitol byly vzneseny otázky, na které se pak v jejím průběhu odpovědělo. Otázky byly od následujícího textu odsazeny odstavcem, aby měl čtenář možnost zamyslet se nad odpovědí. Bylo doplněno vysvětlení nezvyklého směru osy x u chemického posunu. Pro větší názornost bylo k izotopům měřitelných i neměřitelných jader připsáno kromě nukleonového i protonové číslo. Byl pozměněn odstavec pojednávající o intenzitě signálu a upraveny dva grafy s anglickými popisky. Na závěr byl doplněn seznam další literatury s tématem NMR vhodné pro střední školy. Došlo ke změně umístění tabulky vysvětlující vliv substituentů na chemický posun. Byl změněn font používaný v textu – na Adobe Garamond Pro.

Naopak nebylo přihlédnuto k návrhu prohodit kapitolu 4 (Interpretace NMR spektra) a kapitolu 5 (NMR spektrometr), neboť obě možnosti měly své výhody i nevýhody. Jazyk textu byl ponechán ve své původní podobě, protože jeho forma je záměrem. Testy A a B jsou míněny jako dva různé testy – ne jako dvě rovnocenné verze, a proto byly ponechány ve své původní podobě. Ve spektrech nebyl zvětšen signál vzorku, neboť vznikuvší useknutý pík rozpouštědla byl považován za matoucí.

7. ZÁVĚR

Nukleární magnetická rezonance je metoda často používaná v chemii i v medicíně. V českém jazyce však chybí zdroje, které by tuto metody jednoduše vysvětlovaly.

Byl vytvořen komplexní materiál, který zprostředkuje nukleární magnetickou rezonanci učitelům na středních školách, ale i středoškolským studentům či studentům učitelství chemie.

Pro splnění cílů diplomové práce byla vytvořena rešerše materiálů v českém a anglickém jazyce na téma NMR, které jsou dostupné na internetu. Na základě těchto poznatků byl vytvořen nový materiál, který byl doplněn testovými otázkami. Výukový text tvoří 35 normostran textu a 90 obrázků (47 vlastních, 43 převzatých z internetu). Ve spolupráci se školitelem byla naměřena spektra od třinácti různých organických látek. Spektra byla upravena a sestavena ve třináct příkladů k interpretaci.

Na základě výsledků evaluace je možné konstatovat, že materiál svým pojetím splňuje požadavky na srozumitelnost a má motivační efekt. Dále z výsledků vyplývá, že znalosti studentů učitelství chemie o NMR jsou minimální, což může být pro vyučování tohoto tématu značným omezením. Na druhou stranu však evaluace ukázala, že jak ze strany budoucích pedagogů, tak ze strany studentů je po přečtení vytvořeného materiálu o vyučování tohoto tématu zájem. A to je prvním krokem k úspěšné implementaci NMR do výuky.

8. POUŽITÉ ZDROJE

- [1] VACÍK, J. a kol. *Přehled středoškolské chemie*. 2. vydání, Praha: SPN, a. s., 1990. ISBN 80-85937-08-5.
- [2] KOLÁŘ, K., KODÍČEK, M., POSPÍŠIL, J. *Chemie (organická a biochemie) II pro gymnázia*. 1. vydání, Praha: SPN, a. s., 1997. ISBN 80-85937-49-2.
- [3] BANÝR J., BENEŠ P. a kol. *Chemie pro SŠ*. 2. vydání, Praha: SPN a. s., 1999. ISBN 80-85937-46-8.
- [4] KRATOCHVÍL, B., SVOBODA, J. *Chemie pro střední školy 2a*. 1. vydání, Praha: Scientia, 2000. ISBN 80-7183-078-X.
- [5] KRATOCHVÍL, B., SVOBODA, J. *Chemie pro střední školy 2b*. 1. vydání, Praha: Scientia, 2000. ISBN 80-7183-079-8.
- [6] BENEŠOVÁ, M., SATRAPOVÁ, H. *Odmaturuj z chemie*. 1. vydání, Brno: Didaktis, 2002. ISBN 80-86285-56-1.
- [7] PUMPR V., ADAMEC M., BENEŠ P., SCHEUEROVÁ V. *Základy přírodovědného vzdělávání pro SOŠ a SOU, chemie*. Praha: Fortuna, 2008. ISBN: 978-80-7373-081-9.
- [8] KOTLÍK, B., RŮŽIČKOVÁ, K. *Chemie II v kostce pro střední školy*. 3. vydání, Havlíčkův Brod: Fragment, 2004. ISBN 80-7200-761-0.
- [9] *Rámcový vzdělávací program pro gymnázia*. [online]. Praha: Výzkumný ústav pedagogický v Praze, 2007. 100 s. [cit. 2013-08-18]. Dostupné z: http://www.vuppraha.cz/wp-content/uploads/2009/12/RVPG-2007-07_final.pdf. ISBN 978-80-87000-11-3.
- [10] *NMR spektroskopie* [online]. Wikipedie, otevřená encyklopedie. Poslední změna 17. 5. 2013 [cit. 2013-08-14]. Dostupné z: http://cs.wikipedia.org/wiki/NMR_spektroskopie
- [11] Meditorial. *Magnetická rezonance* [online]. © 2013 [cit. 2013-08-17]. Dostupné z: <http://www.multiscan.cz/mr>

- [12] *Seznam vysokých škol v Česku* [online]. Wikipedie, otevřená encyklopedie. Poslední aktualizace 17. 5. 2013 [cit. 2013-08-14]. Dostupné z: http://cs.wikipedia.org/wiki/Seznam_vysok%C3%BDch_%C5%A1kol_v_%C4%8Cesku
- [13] ŘEZANKA, P. *Nukleární magnetická rezonance*, KSICHT [online], ročník 1., 2002/2003, série 4. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://ksicht.natur.cuni.cz/pdf/ksicht-1-4.a5.pdf>
- [14] SEJBAL, J. *Úvod do jaderné magnetické resonance (NMR): příloha úloh školního kola chemické olympiády: studijní texty k úlohám pro kategorie A a E*. Praha: Institut dětí a mládeže Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, 2000.
- [15] KOLLÁTOROVÁ, H. *Nukleární magnetická rezonance* [online]. Střední zdravotnická a vyšší odborná škola zdravotnická Mladá Boleslav, ©2011 [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: http://www.szsemb.cz/admin/upload/sekce_materialy/MRI.pdf
- [16] MACHALA, O. *Nejčastější diagnostické metody* [online]. Webové stránky Střední zdravotnické školy Šumperk, ©2009, poslední změna 7. dubna 2011 [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: <http://www.szssumperk.cz/SOC/mri.html>
- [17] TOŠNER, Z. *Základy spektroskopie molekul: Část NMR* [online]. Přednáška PřF UK [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: <http://web.natur.cuni.cz/sekce-ch/nmr/vyuka.html>
- [18] TOŠNER, Z. *Spektrální metody NMR II* [online]. Přednáška PřF UK [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: <http://web.natur.cuni.cz/sekce-ch/nmr/vyuka.html>
- [19] OPEKAR, F. *Analytická chemie I, II* [online]. Přednáška PřF UK. ©2011. [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: web.natur.cuni.cz/~opekar/analchem/anchem4.doc
- [20] DRAČÍNSKÝ, M. *Spektrální metody NMR I* [online]. Přednáška PřF UK [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: <http://www.uochb.cz/web/structure/671.html?lang=cz>
- [21] DRAČÍNSKÝ, M. *Spektrální metody NMR II* [online]. Přednáška PřF UK [cit. 2013-07-21]. Dostupné z: <http://www.uochb.cz/web/structure/671.html?lang=cz>
- [22] DRAČÍNSKÝ, M. *Jaderná magnetická rezonance* [online]. Skripta PřF UK [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://www.uochb.cz/web/document/cms_library/747.pdf

- [23] VANĚČKOVÁ, M. *Základy magnetické rezonance - MR technika. Multimediální podpora výuky klinických a zdravotnických oborů: Portál 1. lékařské fakulty Karlovy Univerzity v Praze* [online] 6. 11. 2006, poslední změny 26. 4. 2012 [cit. 2013-08-18]. Dostupné z: <http://portal.lf1.cuni.cz/clanek-444-zaklady-magneticke-rezonance-mr-technika/>
- [24] LISÝ, J. *Magnetická rezonance* [online]. Prezentace 2. LF UK, Klinika zobrazovacích metod. ©2010. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://www.lf2.cuni.cz/info2lf/ustavy/kzm/predn/mr.pdf>
- [25] HVIŽDA, T. *MRS – Magnetická rezonanční spektroskopie* [online]. Prezentace LF UK v Hradci Králové [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: www.lfhk.cuni.cz/patfyz/edu/Neurosciences2008-9/MRS%20E%80%93%20magnetick%C3%A1%20rezonan%C4%8Dn%C3%AD%20spektroskopie.ppt
- [26] HRABAL, R. a kol. *NMR spektroskopie pro studium přírodních látek* [online]. Přednáška VSCHT [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://www.vscht.cz/nmr/predmet/predmet-nmr.html#prednasky>
- [27] KOPLIK, R. *Nukleární magnetická rezonanční spektrometrie* [online]. Skripta VSCHT. ©2012. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://web.vscht.cz/koplikr/NMR_%C4%8D%C3%A1st_1.pdf
- [28] FRIEDL, Z. *NMR spektroskopie: Instrumentální a strukturní analýza* [online]. Prezentace Vysokého učení technického v Brně. ©2005. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://www.fch.vutbr.cz/ictep/studijni_materialy/ISA-NMR/NMR%20spektroskopie.pdf
- [29] ZABADAL, M. *Organická chemie I: Organická strukturní analýza* [online]. Prezentace Vysokého učení technického v Brně. ©2006. [cit. 2013-07-20] dostupné z http://www.fch.vutbr.cz/ictep/studijni_materialy/Organicka_chemie_1_pr/05%20Org%20strukturni%20analyza.pdf
- [30] NEZVAL, J. *Nukleární magnetická rezonance* [online]. Prezentace Univerzity v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, katedra fyziky [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://artemis.osu.cz/biofyzika/Studium/Studmat/material/NMR.pptx>
- [31] KUBÁČEK, P., MICHALIČKOVÁ, Z. *Základy fyzikální chemie* [online], webové stránky z Přírodovědecké fakulty Masarykovy Univerzity, Ústavu chemie. ©2011, poslední změny 13. února 2011 [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://cheminfo.chemi.muni.cz/ianua/ZFCh/fotony/NMR.htm>

- [32] SEDLÁŘ, M. *Magnetická rezonance* [online]. Prezentace Lékařské fakulty Masarykovy Univerzity. ©2011. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://www.med.muni.cz/biofyz/files/nutricnispecialista/MRI_2011_Sedlar.pdf
- [33] MILDE, D. *Nukleární magnetická rezonance* [online]. Prezentace Univerzity Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta. ©2006. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://ach.upol.cz/user-files/intranet/08-im-nmr-1351625774.pdf>
- [34] PROCHÁZKA, V. *Základy nukleární magnetické rezonance* [online]. Materiál Univerzity Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta. ©2011. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://fyzika.upol.cz/cs/system/files/download/vujtek/rcptm/NMR.pdf>
- [35] ROSINA, J. *Biofyzika tkání a orgánů* [online]. Materiál Jihočeské univerzity v Českých Budějovicích, Zdravotně sociální fakulta. ©2007. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: www.zsf.jcu.cz/cs/katedra/katedra-radiologie-toxikologie-a-ochrany-obyvательства/kra/informace-pro-studenty/ucebni_texty/studijni-obor-radiologicky-asistent/rosina_biofyzika-tkani-a-organu.doc/at_download/file
- [36] KRYSTIÁN, D. *Neinvazivní zobrazování cév* [online]. Prezentace 2. LF UK, Klinika zobrazovacích metod [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: www.lf2.cuni.cz/info2lf/ustavy/kzm/predn/cevy.ppt
- [37] MAZÁKOVÁ, A. *Zobrazovací metody kloubů* [online]. Prezentace 2. LF UK, Klinika zobrazovacích metod. ©2013. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: <http://www.lf2.cuni.cz/info2lf/ustavy/kzm/predn/klouby.pdf>
- [38] HANZAL, V. a kol. *Nukleární magnetická rezonance* [online]. Praktická fyzika IV - atomová a jaderná fyzika, praktika MFF UK. ©2009. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://physics.mff.cuni.cz/vyuka/zfp/txt_410.pdf
- [39] SULOVSÝ, P. *Spektroskopie magnetické rezonance* [online]. Prezentace Přírodovědecké fakulty Masarykovy Univerzity. ©2002. [cit. 2013-07-20]. Dostupné z: http://www.sci.muni.cz/~sulovsky/Vyuka/Mod_metody/Modmetody5.pdf
- [40] ELAD, A., NAN, M., HENDERSON Z. *Nuclear Magnetic Resonance Spectrometer* [online]. University of Massachusetts Amherst. ©2012. [cit. 2013-01-13]. Dostupné z: <http://www.ecs.umass.edu/ece/sdp/sdp12/salthouse/SDP%20Final%20Paper.pdf>

- [41] ROVNYAK, D., STOCKLAND, R. *Modern NMR Spectroscopy in Education*. Washington, DC: American Chemical Society, 2007. ISBN: 978-0-8412-3995-1. Kapitola 7, stránky 77 – 90.
Abstrakt [online] [cit. 2013-03-7]. Dostupné z:
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/bk-2007-0969.ch007>
- [42] Authors of National Science Foundation NMR Project [online], University of Colorado, poslední změna 25. dubna 2013 [cit. 2013-04-10]. Dostupné z:
<http://www.uccs.edu/chemistry/about-us/nsf-nmr-project.html>
- [43] HORNAK, J. *The basics of NMR* [online]. Center for Imaging Science. ©1996-2011. [cit. 2013-05-13]. Dostupné z:
<http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/inside.htm>
- [44] HORNAK, J. *The basics of MRI* [online]. Center for Imaging Science. ©1996-2011. [cit. 2013-05-13]. Dostupné z:
<http://www.cis.rit.edu/htbooks/mri/index.html>
- [45] REUSCH, W. *Virtual Textbook of Organic Chemistry, Spectroscopy, Nuclear magnetic resonance spectroscopy* [online]. Michigan State University. ©1999, poslední změny červen 2010. [cit. 2013-07-14]. Dostupné z:
<http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/Spectrpy/nmr/nmr1.htm>
- [46] BRADLEY, J.-C., LANG, A., WILLIAMS, A. *Spectral games* [online]. ©2009. [cit. 2013-05-13]. Dostupné z: <http://spectralgame.com/>
- [47] McMURRY, J. *Organická chemie*. 1. vydání, Brno: VUTIUM, 2007. ISBN 978-80-214-3291-8.
- [48] KAUT, C., WESTROOK, C. *MRI in Practice*. 2. vydání, United Kingdom: Blackwell, 1993. ISBN: 0-632-03587-0.
- [49] CALLAGHAN, P., HALSE M. *Introductory NMR & MRI with Paul Callaghan* [DVD-ROM], CÁCHY, Wellington: Magritek, 2009.
- [50] PASCHKE, B. *Soukromé materiály z přednášky Introduction to Spectroscopy*. University of Glasgow, Department of Chemistry, 2011.
- [51] Google [online]. [cit. 2013-09-01]. Dostupné z: <http://www.google.cz/>
- [52] Oční klinika JL Praha. *Magnetická rezonance: Často kladené otázky* [online]. [cit. 2013-09-02]. Dostupné z: http://www.eyecentrum.cz/mr_faq.html
- [53] Vitalion. *Magnetická rezonance: Zkušenosti s vyšetřením* [online]. © 2012 [cit. 2013-09-02]. Dostupné z: <http://vysetreni.vitalion.cz/magneticka-rezonance/>

9. PŘÍLOHY

CD – Určování reálných spekter