

# STOLNÍ NMR – MALÝ KAŠPÁREK PRO VELKÉ DIVADLO

Využívat sílu spektroskopie NMR mohli vždy jen ti vyvolení, to si přiznejme. Extrémně drahé stroje vyžadovali a stále vyžadují nejen špičkovou obsluhu, ale též nákladné a na manipulaci komplikované provozní chladicí kapaliny (kapalné helium a dusík) pro dosažení supravodivosti magnetů. Ano, vynaložené úsilí a peníze nám poskytnou excelentní informace o poloze atomů v molekule a jejich vzájemných interakcích, ale zamysleli jste se někdy nad tím, jak užitečný nám může být NMR spektrometr bez helia a dusíku a s takovými parametry, aby mohl být umístěn na pracovní stůl vedle monitoru? Pojďme se na něj podívat, jmenuje se picoSpin.

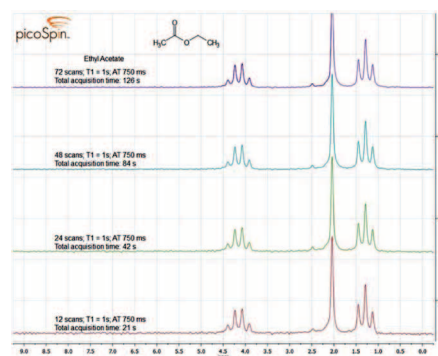
Klíčové zjednodušení je v srdci spektrometru – magnetu, ten byl u picoSpinu nahrazen permanentním odpovídající pracovní frekvenci 45 MHz. Odpadá tím použití kryokapalin a redukuje se tak hmotnost a rozměry stroje. Zavádění vzorku je řešeno formou průtočné kapiláry s objemem 20  $\mu$ l, celý kapilární prostor je vyjimatelný (obr. 1).

**Obr. 1 –** Miniaturní NMR spektrometr picoSpin s vyměnitelnou kapilárou (produkt oceněn 2011 Edison Awards)



A jak kvalitní spektra v tomto uspořádání dostaneme? Posuďte sami na jednoduchém příkladu ethylacetátu – viz obr. 2 – kdy již za pár vteřin měření jsou patrné dobře rozlišené signály (ethylové multiplety i methylový singlet s chemickým posunem 2 ppm).

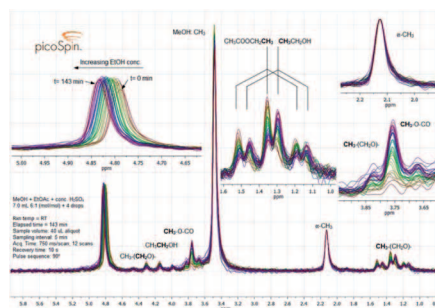
**Obr. 2 –** H-NMR spektra ethylacetátu s dobou akvizice 21 s (dole) až 126 s (nahore)



Nelze samozřejmě tvrdit, že s pomocí stolního NMR picoSpin identifikujeme jakkoliv

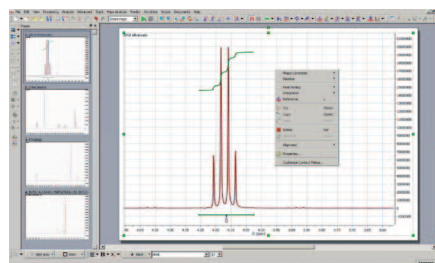
složitou molekulu, ale nízké pořizovací a provozní náklady spolu s prostorovou nenáročností zařízení nám dovolí i takové experimentální kousky, které by nám byly zaručeně na drahých vysoko rozlišujících spektrometrech zapovězeny. Jde např. o on-line monitoring chemických reakcí (obr. 3), kvantifikaci komponent ve směsích či charakterizaci velmi komplikovaných matic cestou „finger print“, kterou známe z vibračních spekter. PicoSpin může též bezesporu zvýšit kvalitu výuky na školách – jak jinak popularizovat tak klíčovou analytickou techniku než ji učinit dostupnou?

**Obr. 3 –** Monitoring transesterifikační reakce;  $^1\text{H}$ -NMR spektra vzorkována v 5 min intervalech, doba akvizice jednoho spektra 10 s



Neméně zajímavé je softwarové řešení: data akvizice program je součástí vnitřní paměti přístroje – propojení s jakýmkoliv PC se uskutečňuje buď přímo pomocí ethernetového kabelu nebo přes LAN a picoSpin je pak možné ovládat přes webový prohlížeč. Následné zpracování a úprava spekter ve standardním formátu JCAMP-DX je již v díci uživatele, přesto je v dodávaném balíčku též roční licence softwaru MNOva (obr. 4).

**Obr. 4 –** Prostředí vyhodnocovacího softwaru MNOva v. 7.0



Konečně můžeme i v menších laboratořích hrát velké divadlo a vytěžit z techniky NMR maximum. A cena? Napište nám, vyrazí Vám dech!

Lukáš PLÁČEK, PRAGOLAB,  
placek@pragolab.cz,  
více informací na [www.picospin.com](http://www.picospin.com)