

Modelování spektrální křivky NMR v případě nehomogenit magnetických polí

Vedoucí projektu: prof. RNDr. Helena Štěpánková, CSc.

stepanko@mbox.troja.mff.cuni.cz

Jaderná magnetická rezonance (NMR) je jednou z metod používaných ke studiu kondenzovaných látek na atomární úrovni. Jedná se o neradioaktivní metodu. Úkolem NMR experimentu je v první řadě nalezení rezonančních frekvencí jader měřeného izotopu ve vzorku umístěném ve vnějším statickém magnetickém poli. Tvar spektrálních křivek ovšem může být zkreslen nehomogenitou tohoto pole v objemu vzorku a také nehomogenitou vysokofrekvenčního pole použitého k excitaci jaderného spinového systému. Nehomogenitu základního statického pole je v moderních NMR spektrometrech možno kompenzovat pomocí korekčních cívek vytvářejících přídatná magnetická pole vhodných prostorových závislostí. Ne vždy však je možno nastavit tyto korekce dosti dobře.

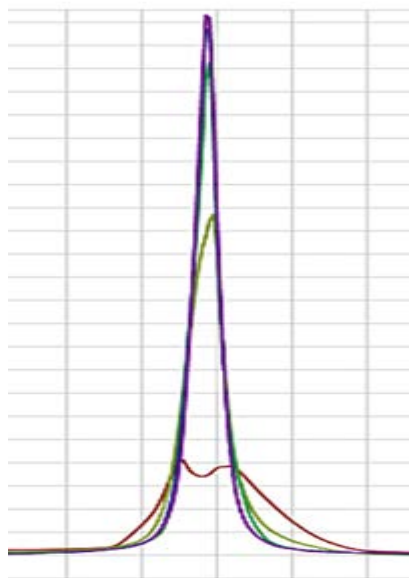
Obsah a cíl projektu:

Náplní projektu bude modelování tvaru spektrálních křivek pro různé případy prostorové závislosti statického magnetického pole a pro případné nehomogenity vysokofrekvenčního pole. Cílem bude určit, nakolik tyto nehomogenity mohou ovlivnit tvar a intenzitu změřené spektrální křivky a ovlivnit tak možnosti a korektnost interpretace spekter.

Postup prací:

1. Seznámení s principy metody jaderné magnetické rezonance (NMR).
2. Seznámení s experimentálními možnostmi korekcí nehomogenit statického magnetického pole a s postupy pro monitorování nehomogenity vysokofrekvenčního pole v objemu vzorku.
3. Provedení simulací tvarů spektrálních křivek pro různé případy nehomogenit statického pole, zejména pro široké distribuce a distribuce s více maximy.
4. Simulace rezonančních křivek pro případ nehomogenního vysokofrekvenčního pole pro různé délky vysokofrekvenčních pulsů.

Projekt je vhodný pro studenty studijního programu Fyzika a studijního programu Fyzika se zaměřením na vzdělávání.



Obr. Příklady zkreslení tvaru spektrální křivky v důsledku nehomogenity statického magnetického pole v objemu vzorku.

https://nmr.chem.ucsb.edu/protocols/sample_volume.html