

## Pracoviště „Laboratoř NMR pevného stavu“

*Společná laboratoř Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i. a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (v budově ÚMCH v Praze 6)*

**Mgr. Jiří Dědeček, CSc.** (oddělení struktury a dynamiky v katalýze)

T.: 266053767; jiri.dedecek@jh-inst.cas.cz

### **Přístrojové vybavení:**

NMR spektrometr pevné fáze Bruker Avance 500MHz WB/US s 4 a 2,5 mm CP/MAS a 4 mm CP/MAS X/Y/H sondou. CP/MAS sondy pro měření NMR spekter při rotaci pod magickým úhlem pro širokou řadu jader od  $^{15}\text{N}$  do  $^{31}\text{P}$ . CP/MAS X/Y/H sonda navrch umožňuje korelační experimenty mezi  $^{15}\text{N}$  a  $^{13}\text{C}$  a  $^{27}\text{Al}$  a  $^{29}\text{Si}$  jádry. 4 mm sondy umožňují maximální rotaci frekvencí ca. 18 kHz, 2,5 mm sonda ca. 32 kHz. Uvedené vybavení je vhodné pro realizaci řady experimentů NMR spektroskopie vysokého rozlišení v pevné fázi (např. korelační experimenty, dvojitá krosopolarizace), a to i pro kvadrupolární jádra.



### **Krátký popis zaměření laboratoře:**

NMR představuje velmi účinný nástroj lokální strukturní analýzy. Toho využívá výzkumný program laboratoře, který je v oblasti fyzikální chemie zaměřen třemi směry. Prvním je studium lokalizace a distribuce hliníku (a dalších heteroatomů) v zeolitických hlinitokřemičitanových maticích, kdy  $^{27}\text{Al}$  a  $^{29}\text{Si}$  MAS NMR spektroskopie představuje jednu z klíčových analytických metod. Zeolitické matrice představují vysoce uspořádané materiály s řadou aplikací od adsorpce a separace přes katalýzu až po optoelektroniku. Distribuce hliníku v těchto maticích představuje jeden z klíčových parametrů kontrolujících jejich vlastnosti. V laboratoři byly vyvinuty postupy pro řízení lokální hustoty hliníku v zeolitu umožňující např. optimalizaci katalyzátorů pro odstraňování oxidů dusíku ze spalin.

Druhým směrem, úzce propojeným s předchozím je studium lokalizace a distribuce kationtů zavedených do mikroporézních (zeolitických) a mezoporézních hlinitokřemičitanových matic. Tyto kationty hrají roli adsorpčních nebo katalytických center a jejich chování je dáno uspořádáním jejich blízkého okolí. MAS NMR spektroskopie představuje jeden z nástrojů umožňujících popsat koordinaci, polohu a distribuci řady kationtů v zeolitických maticích a studovat tak vztah mezi jejich koordinací, lokalizací a chováním na atomární úrovni.

Třetím směrem je strukturní analýza pevných anorganických látek, kdy laboratoř slouží jako servisní centrum využívané i jinými pracovišti.

