

DOKTORSKÉ STUDIUM

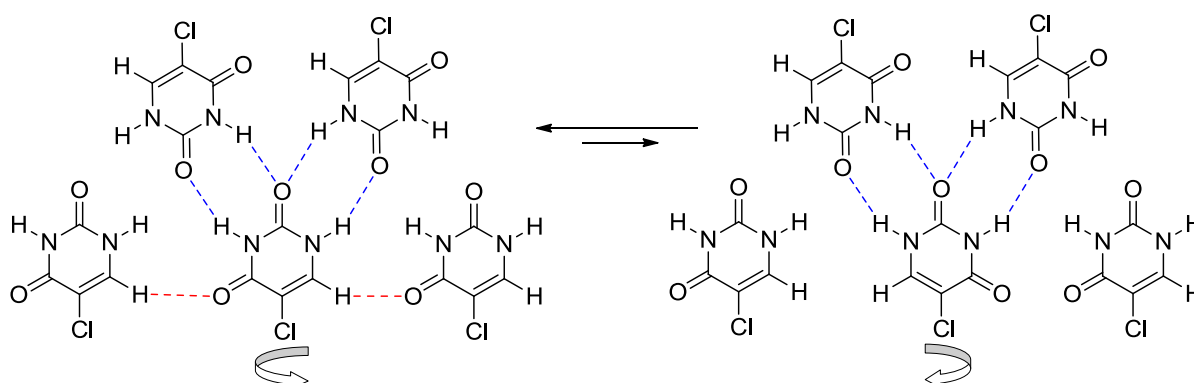
Studium dynamických procesů v pevných látkách pomocí NMR spektroskopie a teoretických výpočtů

Školitel: RNDr. Martin Dračínský, PhD, Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Molekuly v pevných látkách nejsou statické, ale vykazují celou škálu pohybů od vibrací přes reorientace jednotlivých funkčních skupin (například methylu), reorientaci celých molekul až po difusi v pevném stavu. Dynamické procesy v pevných látkách jsou mimořádně důležité například v materiálech uchovávajících energii (baterie). Nukleární magnetická rezonance (NMR) je spektroskopická metoda, která je velmi citlivá na lokální strukturu v okolí měřených jader, a dynamické procesy výrazně ovlivňují NMR spektra.

V minulých přibližně deseti letech se etablovala nová metoda, takzvaná NMR krystalografie, která pomocí kombinace kvantově chemických výpočtů a experimentálních NMR spekter dokáže úspěšně řešit strukturu pevných látek. NMR krystalografie využívá především výpočtů založených na teorii funkcionálů hustoty (DFT) a úspěch NMR krystalografie je dán neuvěřitelnou přesností, s jakou jsou moderní výpočetní metody schopné predikovat NMR parametry.

Navrhovaná doktorská práce se bude zabývat studiem dynamických procesů v pevných látkách pomocí NMR krystalografie. Předmětem studia budou vybrané organické případně i anorganické látky, které vykazují zajímavé dynamické chování. Doktorand bude provádět jak měření experimentálních NMR spekter tak kvantově chemické výpočty. Příkladem jednoho ze studovaných problémů jsou 5-chloruracil a 5-bromuracil. Obě látky mají velmi podobnou krystalovou vrstevnatou strukturu, kde molekuly v jedné vrstvě vytvářejí systém vodíkových vazeb, který připomíná systém vodíkových vazeb v nukleových kyselinách. Obě látky také vykazují určitý podíl neuspořádanosti v pevné fázi (disorder). Experimentální NMR spektra měřená při různých teplotách by měla prokázat, zda se jedná o statickou neuspořádanost (danou krystalizačními podmínkami) nebo dynamickou neuspořádanost, kde jednotlivé molekuly mohou vykonávat rotační pohyb kolem jedné osy. Kombinací s teoretickými výpočty budou určeny například kinetické parametry molekulových pohybů a také význam vodíkových vazeb a slabých vodíkových vazeb (kde donorem je vodík CH skupiny) pro stabilitu dané krystalové struktury.



Reorientace molekul 5-chloruracilu v krystalové struktuře s klasickými (modře) a slabými (červeně) vodíkovými vazbami.