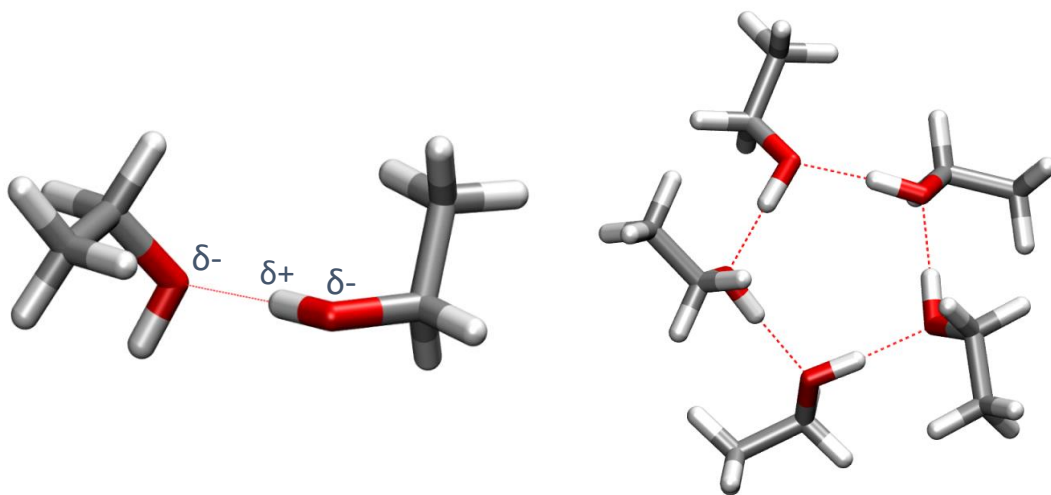


Studium vodíkových vazeb v roztocích ethanolu pomocí nukleární magnetické rezonance

studentský projekt, který lze rozšířit na bakalářskou anebo diplomovou práci

vedoucí: RNDr. Mária Šoltéssová, Ph.D., KFNT, MFF UK, Trója, Kryopavilón, C132,
tel. 95155 2887, e-mail: maria.soltesova@gmail.com



Vodíkové vazby jsou jednou z nejvýznamnějších nekovalentních interakcí. Určují důležité vlastnosti biologických systémů a podílejí se ve značné míře na jejich struktuře a funkci. Mnohé fyzikální a chemické vlastnosti vodíkových vazeb nejsou v současné době pořád ještě dostatečně prozkoumány.

Roztok ethanolu v nepolárním rozpouštědle se jeví jako realistický, zároveň však dostatečně jednoduchý modelový systém na zkoumání některých vlastností vodíkových vazeb. Ethanol v roztocích s nízkou koncentrací tvoří tzv. **molekulární klastry** – vodíkově vázané struktury několika molekul s relativně jednoduchou topologií. **Nukleární magnetická rezonance (NMR)** je jedinečná metoda, pomocí které lze získat informace o struktuře a dynamice kapalin v rovnovážném stavu.

Práce je zaměřená na využití metod NMR na určení vlastností molekulárních klastrů ethanolu, jako je počet molekul, struktura a distribuce, v závislosti na teplotě a koncentraci. Tyhle informace je možné získat z **chemických posunů** v NMR spektrech a experimentů **translační difuze** v kombinaci s výpočetními metodami, jako například **hydrodynamickými simulacemi** nebo **kvantově-chemickými výpočty**.