

## Výpočet tvarů spekter s chemickou výměnou v NMR

Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) detekuje jádra atomů s magnetickým momentem. Sledované jádro může díky tzv. chemické výměně přecházet tam a zpět mezi dvěma či více stavy chemickými okolími. Chemická výměna nastává při vratné chemické reakci, přechodu mezi konformacemi molekuly, atd.

Rychlost chemické výměny (tj. kolikrát v průměru přejde dané jádro mezi stavy za sekundu) a další parametry chemické výměny ovlivňují tvar spektra NMR (viz **obr.**). Proto lze fitováním naměřených spektrálních tvarů získat podrobné informace o probíhajících dějích. Výpočet spektrálních tvarů je založen na kvantové mechanice, v některých případech však lze použít i přístupy klasické fyziky.

Cílem tohoto studentského projektu je analyticky spočítat nebo nasimulovat spektrum chemické výměny dvoustavového systému s nepřímou spin-spinovou interakcí (tzv. J-coupling). Student se seznámí se spektroskopií NMR se zaměřením na chemickou výměnu. Osvojí si postupy, které se používají u charakterizace např. enzymatických reakcí, komplexů typu host-guest nebo konformační dynamiky.

**Práce bude zahrnovat analytické výpočty a numerickou simulaci na počítači.**

**Vedoucí projektu:** Václav Březina, Ph.D., *e-mail:* [vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz](mailto:vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz)  
**Pracoviště:** Katedra makromolekulární fyziky

**obr. spektrum v NMR**

