

Projekt 3.7 Zastosowanie szybkich metod Laplace'owskiego NMR w monitorowaniu reakcji

Promotor: dr hab. Piotr Bernatowicz / dr Mateusz Urbańczyk

Instytut: Chemii Fizycznej

Zespół: Zespół 30: Hiperpolaryzacja jądrowa układów molekularnych i nanomateriałów

www: <http://groups.ichf.edu.pl/ratajczyk>

Opis:

Laplace'owskie metody NMR od wielu lat są powszechnie wykorzystywane w przemyśle jak i w badaniach naukowych. Technologia ta opiera się na wykorzystaniu zjawisk relaksacji podłużnej i poprzecznej jąder atomowych oraz dyfuzji do badania procesów w materiałach zarówno homo jak i heterogenicznych. Dzięki uniezależnieniu od przesunięcia chemicznego (w przeciwieństwie do klasycznego NMR) pozwala nie tylko badać materiały o bardzo zróżnicowanej strukturze (np. beton, skały, polimery, żywność, tkanki) ale także umożliwia zastosowanie prostych analizatorów NMR, które nie mają jednorodnego pola magnetycznego. Pozwala to na znaczne obniżenie kosztów pomiaru jak i mobilność takich urządzeń (W przemyśle petrochemicznym urządzenia takie są wykorzystywane do badania odwiertów). Do tej pory głównym ograniczeniem dla tych metod był czas pomiaru w przypadku wielowymiarowych technik, który znacznie ograniczał zastosowanie Laplace'owskiego NMR w badaniach czasozależnych procesów. Jednakże, niedawno powstały dwie szybkie metody oparte na tej technice:

1. Ultra-Fast Laplace NMR
2. Time-resolved Laplace NMR

Techniki te po raz pierwszy umożliwiły badanie szybkich procesów wykorzystując wielowymiarowy Laplace'owski NMR z rozdzielczością czasową mierzoną w sekundach a nie w dziesiątkach minut, lub godzin. Jako, że techniki te są młode zostały do tej pory głównie użyte w prostych układach pokazowych, a nie do badania reakcji.

Cel projektu:

Celem projektu jest wykorzystanie szybkich technik Laplace'owskiego NMR do badania ważnych procesów czasozależnych. W ramach badań skupimy się na 3 zagadnieniach:

1. Reakcja uwodornienia parawodorem (Hiperpolaryzacja metodami PHiP i SABRE)
2. Fotopolimeryzacji
3. Produkcja produktów mlecznych.

Zjawiska te będą badane zarówno na wysoko i niskopolowych spektrometrach NMR. Projekt będzie realizowany we współpracy z Uniwersytetem w Oulu (Finlandia) jak i Instytutem Innowacji Przemysłu Mleczarskiego.

Wymagania:

- Stopień magistra z chemii, fizyki, biologii, farmacji, technologii żywności, inżynierii materiałowej, lub podobnej dyscypliny,
- podstawowe umiejętności programistyczne (optymalnie Python lub/i Matlab), lub chęć nauki,
- podstawowa wiedza z zakresu NMR mile widziana,
- doświadczenie w pracy w laboratorium chemicznym