Projekt nr 3.1

Przejawy katalitycznej konwersji orto- i para-wodoru w spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego oraz jej wpływ na kształt linii

Promotor / promotor pomocniczy

dr hab. Piotr Bernatowicz / dr Tomasz Ratajczyk

Zespół IChF PAN

Zespół 30. Hiperpolaryzacja jądrowa układów molekularnych i nanomateriałów / Research group No. 30. Nuclear Hyperpolarization of Molecular Systems and Nanomaterials - dr Tomasz Ratajczyk
www: https://applied-nmr.pl/

Opis

Magnetyczny rezonans jądrowy (NMR), jedna z najważniejszych metod pozwalających na ustalanie dokładnej struktury cząsteczek oraz badanie procesów chemicznych, jednak należy jednocześnie do najmniej czułych technik spektroskopowych. Z tego powodu prowadzone są intensywne prace nad wzmocnieniem sygnału NMR, a jedną z najbardziej obiecujących metod jest zastosowanie technik opartych na unikatowych właściwościach parawodoru, który może występować w dwóch izomerycznych formach spinowych: orto- i parawodoru.
Celem projektu jest badanie metod wzmacniania sygnału NMR z wykorzystaniem unikatowych właściwości mieszaniny orto- i parawodoru. Projekt koncentruje się na procesach konwersji parawodoru do ortowodoru oraz ich przejawach w widmach NMR, z uwzględnieniem efektu częściowo negatywnej linii PNL (ang. Partially Negative Line). W szczególności badany będzie wpływ układu katalitycznego, rozpuszczalnika oraz natężenia pola magnetycznego na konwersję para–orto wodoru oraz na występowanie, intensywność i charakter efektu PNL -co pozwoli na lepsze jego zrozumienie.
Uzyskane wyniki przyczynią się do rozwoju metod hiperpolaryzacji NMR opartych na parawodorze. Dokładne poznanie procesów konwersji orto–para, zarówno pod względem fizyki spinów, jak i mechanizmów reakcji chemicznych pozwoli zrozumieć naturę efektu PNL oraz będzie cennym źródłem informacji o interakcjach wodoru z katalizatorami również tych biokatalitycznych np. hydrogenazy.

Cel projektu

Głównym celem projektu jest zbadanie metod wzmacniania sygnału NMR z wykorzystaniem parawodoru. W szczególności cele naukowe obejmują badania procesów konwersji parawodoru do ortowodoru z uwzględnieniem efektu częściowo negatywnej linii PNL oraz zrozumienia wpływu układu katalitycznego, rozpuszczalnika i natężenia pola magnetycznego na ten efekt. Uzyskane wyniki przyczynią się do rozwoju metod hiperpolaryzacji NMR oraz dostarczą cennych informacji o interakcjach wodoru z centrami katalitycznymi.

Wymagania wobec kandydatów

Magister chemii lub fizyki (lub pokrewnych dziedzin)