

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE PROJEKTU BADAWCZEGO

Katarzyna Jakubowska

Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) jest obecnie jednym z podstawowych narzędzi do badania struktury elektronowej i geometrii molekuł w chemii i biochemii. Ponadto wykorzystuje się ją w medycynie w jednej z technik obrazowych – obrazowaniu metodą rezonansu magnetycznego (MRI). Widma uzyskane w eksperymencie NMR interpretowane są głównie na podstawie dwóch parametrów: stałych ekranowania i jądrowych stałych sprzężenia spinowo-spinowego. Coraz częściej do analizy widm NMR wykorzystuje się kwantowochemiczne obliczenia tych parametrów. Niestety nie zostały jeszcze zbadane wszystkie czynniki, które wpływać mogą na dokładność otrzymanych wyników.

Celem projektu jest opracowanie metody bardziej dokładnego obliczania stałych sprzężenia spinowo-spinowego jąder o dużym ładunku, dla których ważne są zarówno efekty relatywistyczne (z powodu znacznej prędkości elektronów), jak i tak zwane efekty wibracyjne, wynikające z drgań molekuł (z powodu znacznej zależności stałych sprzężenia od geometrii molekuły). Do tej pory osobno były obliczane efekty relatywistyczne i osobno wibracyjne, a nasze badania wstępne dowodzą, że powinny być uwzględnione łącznie, jako że nierelatywistyczne obliczenia poprawek wibracyjnych mogą w przypadku stałych sprzężenia niektórych ciężkich jąder nawet błędnie oddać znak, czyli pogorszyć jakość obliczeń zamiast ją polepszyć. Zamierzamy zatem opracować metodę obliczenia poprawek wibracyjnych z użyciem relatywistycznego hamiltonianu Diraca-Coulomba i dołączyć ich do rozprowadzanego darmowo programu Dirac. Opracowana w ten sposób metoda zostanie przetestowana na kilku prostych przykładach molekuł zawierających jądra o dużym ładunku. Zagadnienie jest dość istotne, jako że jądrowe stałe sprzężenia spinowo-spinowego mają znaczenie w badaniach strukturalnych. Opracowana metoda pozwoli również na relatywistyczne obliczenia częstości drgań małych molekuł, które do tej pory nie były wykonywane.