

# Modelování spektrální křivky NMR v případě nehomogenit magnetických polí

Vedoucí projektu: prof. RNDr. Helena Štěpánková, CSc.  
[stepanko@mbox.troja.mff.cuni.cz](mailto:stepanko@mbox.troja.mff.cuni.cz)

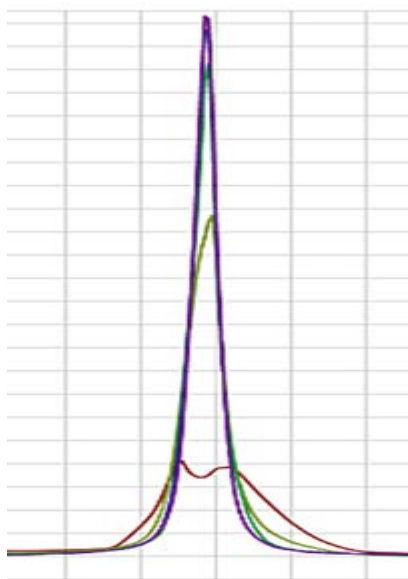
Jaderná magnetická rezonance (NMR) představuje jednu z metod používaných ke studiu kondenzovaných látek na atomární úrovni. Jedná se o neradioaktivní metodu. Úkolem NMR experimentu je v první řadě nalezení rezonančních frekvencí měřeného izotopu ve vzorku umístěném ve vnějším statickém magnetickém poli. Tvar spektrálních křivek ovšem může být zkreslen nehomogenitou tohoto pole v objemu vzorku a také nehomogenitou vysokofrekvenčního pole použitého k excitaci jaderného spinového systému. Nehomogenitu základního statického pole je v moderních NMR spektrometrech možno kompenzovat pomocí korekčních cívek vytvářejících přídavná magnetická pole vhodných prostorových závislostí, korigujících tyto nehomogenity. Ne vždy však je možno nastavit tyto korekce dosti dobře.

## Obsah a cíl projektu:

Náplní projektu bude modelování tvaru spektrálních křivek pro různé případy prostorové závislosti statického magnetického pole a pro případné nehomogenity vysokofrekvenčního pole. Cílem bude určit, nakolik tyto nehomogenity mohou ovlivnit tvar a intenzitu změřené spektrální křivky a ovlivnit tak možnosti a korektnost interpretace spekter.

## Postup prací:

1. Seznámení s principy metody jaderné magnetické rezonance (NMR).
2. Seznámení s experimentálními možnostmi korekcí nehomogenit statického magnetického pole a s postupy pro monitorování nehomogenity vysokofrekvenčního pole v objemu vzorku.
3. Provedení simulací tvarů spektrálních křivek pro různé případy nehomogenit statického pole, zejména pro široké distribuce a distribuce s více maximy.
4. Simulace rezonančních křivek pro případ nehomogenního vysokofrekvenčního pole pro různé délky vysokofrekvenčních pulsů.



Obr. Příklady zkreslení tvaru spektrální křivky  
v důsledku nehomogenity statického  
magnetického pole v objemu vzorku,  
podle

[https://nmr.chem.ucsb.edu/protocols/sample\\_volume.html](https://nmr.chem.ucsb.edu/protocols/sample_volume.html)