

Číslo grantu / Number of project:

UK/3097/2024

Názov projektu:

Relativistické výpočty NMR tienenia - od beta-NMR spektier k presným jadrovým magnetickým momentom

Name of the project:

Relativistic calculations of NMR shielding - from beta-NMR spectra to accurate nuclear magnetic moments

Kľúčové slová:

NMR shielding, nuclear magnetic moments, NMR spectra, beta-decay

Keywords:

NMR tienenie, jadrové magnetické momenty, NMR spektrá, beta rozpad

Abstrakt:

β -NMR spektroskopia tradične slúži ako výkonný nástroj na presné merania jadrových magnetických dipólových momentov. Nedávne zavedenie kvapalných terčov však umožnilo rozšíriť aplikácie tejto spektroskopie do chémie, biochémie a biológie. V snahe výpočtovo interpretovať namerané spektrá na pracovisku CERN-ISOLDE sa projekt zameriava na vývoj výpočtových postupov a protokolov pre výpočet NMR tienenia vybraných nestabilných izotopov v iónových kvapalinách použitím molekulovo-dynamických simulácií a presných ab initio metód kvantovej chémie. Vďaka vyvinutým protokolom bude možné v budúcnosti efektívne interpretovať namerané NMR spektrá rôznej zložitosti.

Abstract:

β -NMR spectroscopy traditionally serves as a powerful tool for precise measurements of nuclear magnetic dipole moments. The recent introduction of liquid targets has allowed expanding the applications of this spectroscopy into chemistry, biochemistry, and biology. In an effort to computationally interpret the measured spectra at the CERN-ISOLDE facility, the project focuses on the development of computational procedures and protocols for calculating NMR shifts of selected unstable isotopes in ionic liquids using molecular dynamics simulations and accurate ab initio quantum chemistry methods. Thanks to the developed protocols, it will be possible in the future to effectively interpret measured NMR spectra of varying complexity.

Hodnotenie v % / Evaluation in %:

100

