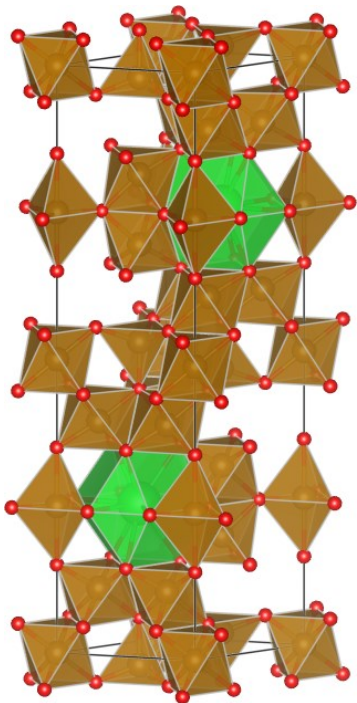


Modelování NMR spekter z *ab initio* výpočtů

Vedoucí projektu: Vojtěch Chlan, chlan@mbox.troja.mff.cuni.cz
Katedra fyziky nízkých teplot, laboratoř NMR spektroskopie



Výpočty elektronové struktury pevných látek metodou teorie funkcionálu hustoty (DFT) hrají nezastupitelnou roli ve zkoumání pevných látek. V kombinaci s fyzikálními experimenty usnadňuje teoretické modelování interpretaci výsledků měření, dává lepší pochopení struktury a probíhajících fyzikálních dějů, a mnohdy umožňuje dokonce predikci experimentů nebo získání takových dat, která by šlo naměřit jen obtížně. DFT výpočty se vhodně doplňují se spektroskopií jaderné magnetické rezonance (NMR), neboť obě metody výhodně spojuje lokální charakter jejich zkoumání: hodnoty polí na jádrech v NMR jsou pro DFT snáze dostupné než například kolektivní nebo delokalizované děje na větších rozměrových škálách.

Náplní projektu je naučit se základy DFT výpočtů v různých typech jednoduchých pevných látek a pro vybrané reálnější systémy spočítat relevantní spektroskopické parametry. Cílem projektu je potom tato data srovnat s experimenty NMR.