

LuK/FM-aiheita

NMR-spektroskopia/teoriaryhmä

professori Juha Vaara

dosentti Perttu Lantto

PhD Jiri Mares

FT Teemu Pennanen

6 jatko-opiskelijaa

2 perustutkinto-opiskelijaa

Ryhmän kiinnostuksen kohteet:

- Magneettisen resonanssin (NMR, ESR, pNMR) teoria ja parametrien laskeminen
 - Suhteellisuusteoreettiset ilmiöt *(raskaat atomit, esim. Xe)*
 - Dynamiikka *(molekyylien sisäinen ja välinen, lämpöliike)*
 - Molekyylien väliset vuorovaikutukset *(nesteet, nestekiteet, kiinteä aine)*
 - Paramagneettinen NMR *(siirtymät, kytkennät, relaksaatio)*
 - Ydinmagneto-optinen spektroskopia *(NSOR, NSCM, NSCD)*
 - Jalokaasujen NMR-parametrit *(materiaalitutkimus vierasatomeilla)*
- Laskennalliset menetelmät
 - Elektronirakenne *(kvanttikemia, jaksolliset menetelmät)*
 - Molekyyliominaisuudet *(staattiset, dynaamiset, magneettiset, sähköiset, optiset)*
 - Molekyyli-simulaatiot *(molekyyli-dynamiikka, Monte Carlo-simulointi, DFT-pohjaisesta AIMD:stä karkeistettuihin malleihin)*

Paramagneettisen NMR:n teoria

[Physical Review Letters **100**, 133002:1-4 \(2008\)](#)

- Ohjaaja prof. **Juha Vaara** (juha.vaara@oulu.fi)
- Parittomien elektronien ja ytimen spinin vuorovaikutus!
- NMR-”suurennuslasi”
- LuK/FM-projektiksi sopivia laajennuksia:
 - ✓ elektronisten viritystilojen huomioiminen (sama/eri spin kuin perustilalla)
 - ✓ yhteys kokeelliseen spin-suskeptibiliteettiin (magnetoituvuuteen)
 - ✓ pNMR:n spin-spin –kytkentä
 - ✓ Sovelluksia materiaali- ja nanosysteemeihin

Ydinmagneto-optisen spektroskopian teoria

[Physical Review Letters 105, 153001:1-4 \(2010\)](#)

- Ohjaaja prof. **Juha Vaara**
- NMR:n optinen detektointi? → herkkyys, paikkaresoluutio
- Magneto-optisten ilmiöiden avulla: ytimen magneettinen momentti pyörittää laservalon polarisaatiotasoa
- LuK/FM-projektiksi sopivia laajennuksia:
 - ✓ ydinmagnetoituman aiheuttama Cotton-Mouton –ilmiö (NSCM)
 - ✓ ydinspinin aiheuttama kahtaistaitavuus (NSCD)
 - ✓ magneto-optinen rotaatio kiraalisissa systeemeissä
 - ✓ optinen rotaatio kiinteissä aineissa kidepotentiaaliin sovitetuilla klusterimalleilla

NMR-parametrien magneettikenttäriippuvuus

[Physical Review Letters 86, 3268-3271 \(2001\)](#)

- Ohjaaja prof. **Juha Vaara**
- Tärkeä uusien NMR-instrumenttien voimakkaissa magneettikentissä
- Uusia informaationlähteitä molekyyli- ja materiaalitieteisiin
- LuK/FM-projekti:
 - ✓ ^{131}Xe -ytimen kenttäriippuva kvadrupolikytkentä täysin relativistisesti

Universaalit täydellisysoptimoidut kantajoukot ylihienoille molekyyliminaisuuksille

[Journal of Computational Chemistry 27, 434-445 \(2006\)](#)

- Ohjaaja: Dos. **Perttu Lantto** (perttu.lantto@oulu.fi)
- Yksielektronikantajoukot määrittävät kvanttikemiallisten laskujen tarkkuuden
- Tavoitteena on saavuttaa ominaisuuden “täydellinen kantajoukkoraja” mahdollisimman ekonomisesti
- Ylihienot spektriparametrit (NMR, ESR, NMOS) ovat erityisen vaativia kantajoukoille
- Täydellisysoptimoidut (CO, completeness-optimized) kannat ovat osoittautuneet systemaattisiksi ja tehokkaiksi
- LuK/FM-aiheita:
 - ✓ Jaksokohtaiset CO-kannat NMR-, pNMR-, EPR- ja NMOS-parametreille pääryhmien keveille alkuaineille
 - ✓ Kontraktoidut CO-kannat pääryhmien keveille alkuaineille: energeettiset ominaisuudet
 - ✓ Relativistiset kantajoukot raskaille atomeille: sekä 1- ”täydet” 2- ja 4-komponenttiset teorit
 - ✓ Siirtymämetallien ja lantanidien kantajoukot
 - ✓ Periodisten gaussilaisten kantajoukkojen kehitys CO-menetelmällä