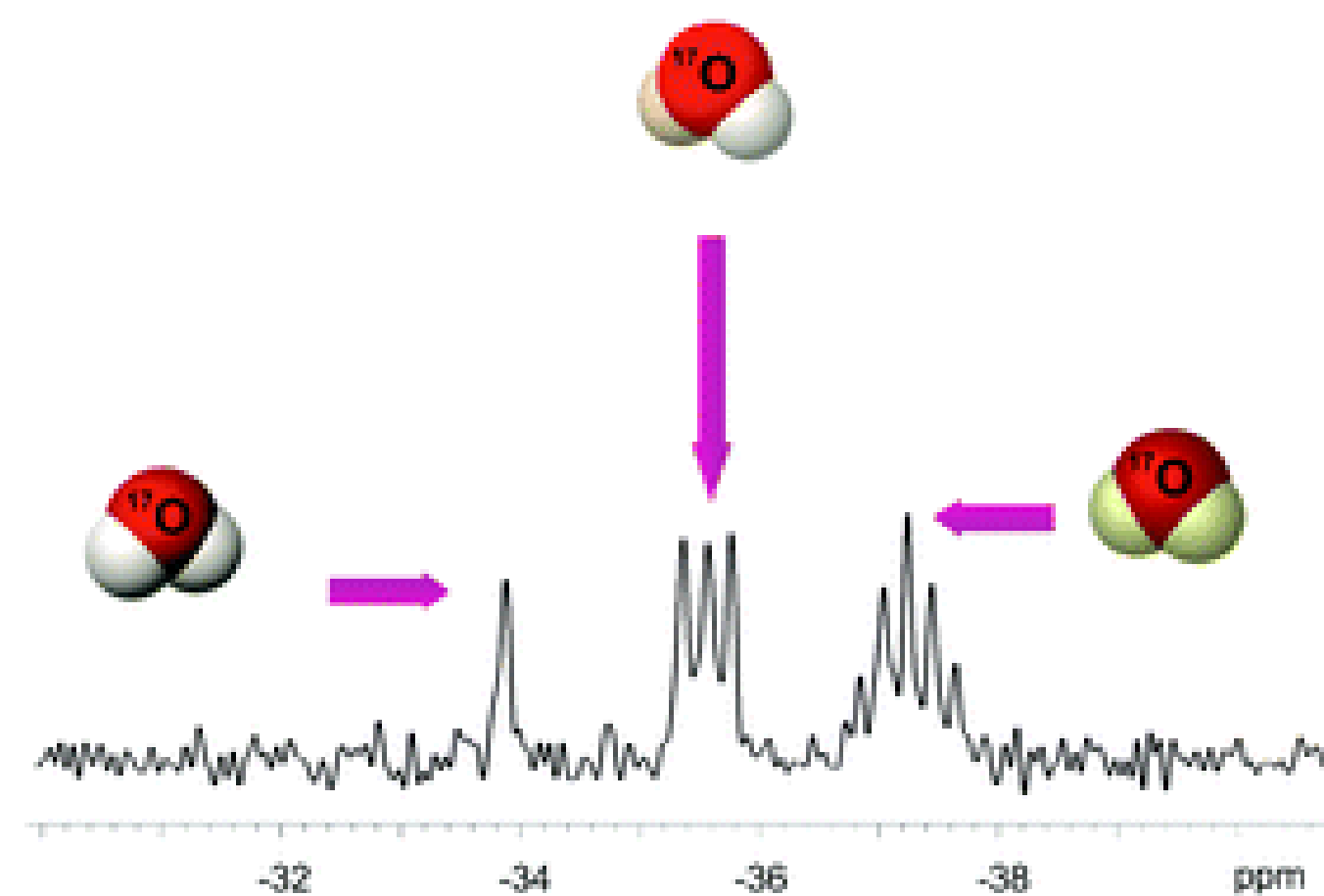


## Tematyka badawcza

### Oddziaływanie pola elektromagnetycznego z cząsteczkami chiralnymi



### Wyznaczanie parametrów jądrowych na podstawie badań próbek gazowych



## Finansowanie badań



European Research Council, Starting Grant, Piotr Garbacz, „Chirality-sensitive Nuclear Magnetolectric Resonance”, 2022-2027, 1 500 000 €



OPUS-16, Piotr Garbacz, „Wyznaczanie struktury cząsteczek za pomocą oddziaływań spinowo-spinowych w polu elektrycznym”, 2019-2023, 829 600 zł

## Wybrane publikacje

ChemComm

COMMUNICATION



### Direct enantiomeric discrimination through antisymmetric hyperfine coupling†‡

Cite this: DOI: 10.1039/d1cc02579a

Received 17th May 2021  
Accepted 23rd June 2021

DOI: 10.1039/d1cc02579a

rsc.li/chemcomm

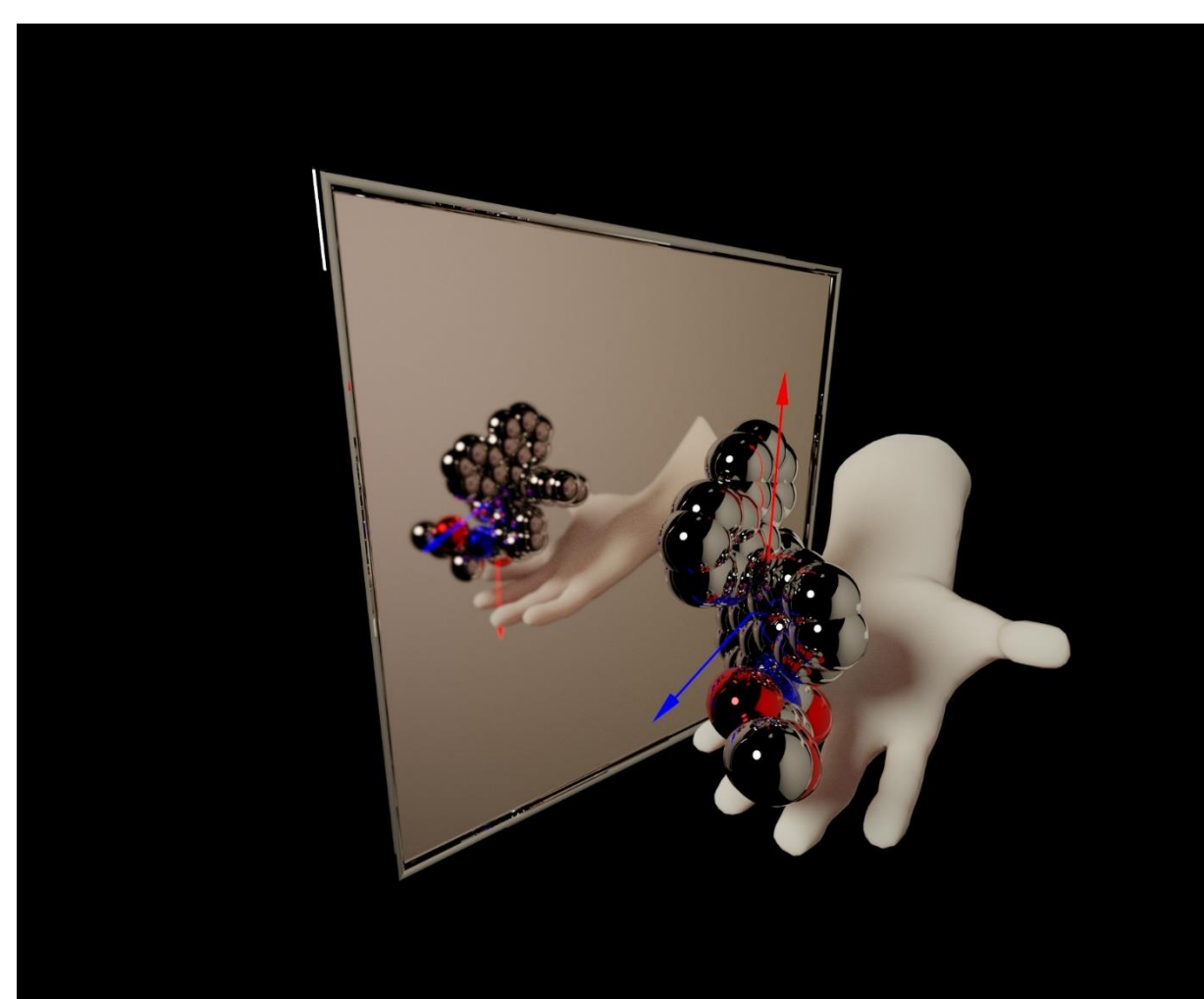
Chiral open-shell molecules possessing permanent electric dipole moments have an EPR signal at the difference frequency of the electron and nuclear resonances, allowing direct enantiomeric discrimination by signal phase. The effect depends on the vector antisymmetry of the hyperfine coupling. Quantum chemistry suggests chiral bisfluorene methyl radical derivatives as promising for experiments.

includes the HFC of the corresponding spin operators  $\hat{S}$  and  $\hat{I}$ , and the Zeeman interactions with the magnetic field  $B_0$ :

$$\mathcal{H}'_A = \hbar S \cdot A \cdot I, \quad (2)$$

$$\mathcal{H}'_S = -\mu_B B_0 \cdot S, \quad (3)$$

$$\mathcal{H}'_I = -\mu_N B_0 \cdot I. \quad (4)$$



Received: 26 February 2020 | Revised: 8 April 2020 | Accepted: 9 April 2020  
DOI: 10.1002/nmr.5030

RESEARCH ARTICLE

WILEY

### NMR shielding in helium-3 atoms modified by gaseous nitrogen and oxygen

Piotr Garbacz | Maria Misiak | Karol Jackowski

PCCP

COMMUNICATION



### Deuterium isotope effects on $^{17}\text{O}$ nuclear shielding in a single water molecule from NMR gas phase measurements

Cite this: Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 12777

Received 8th June 2020  
Accepted 22nd July 2020

DOI: 10.1039/d0cp03085f

Journal of Molecular Structure 1254 (2022) 112335



Journal of Molecular Structure

journal homepage: www.elsevier.com/locate/molstr

Multinuclear NMR spectroscopy of ethanol isotopic forms in the liquid and gas phase

Włodzimierz Makulski<sup>a,\*</sup>, Mateusz Godlewski<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratory of NMR Spectroscopy, Faculty of Chemistry, University of Warsaw, L. Pasteura 1, Warszawa 02-093, Poland

Journal of Magnetic Resonance 313 (2020) 106716



Journal of Magnetic Resonance

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jmr

$^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and  $^{29}\text{Si}$  magnetic shielding in gaseous and liquid tetramethylsilane

Włodzimierz Makulski, Karol Jackowski\*



Review

### Explorations of Magnetic Properties of Noble Gases: The Past, Present, and Future

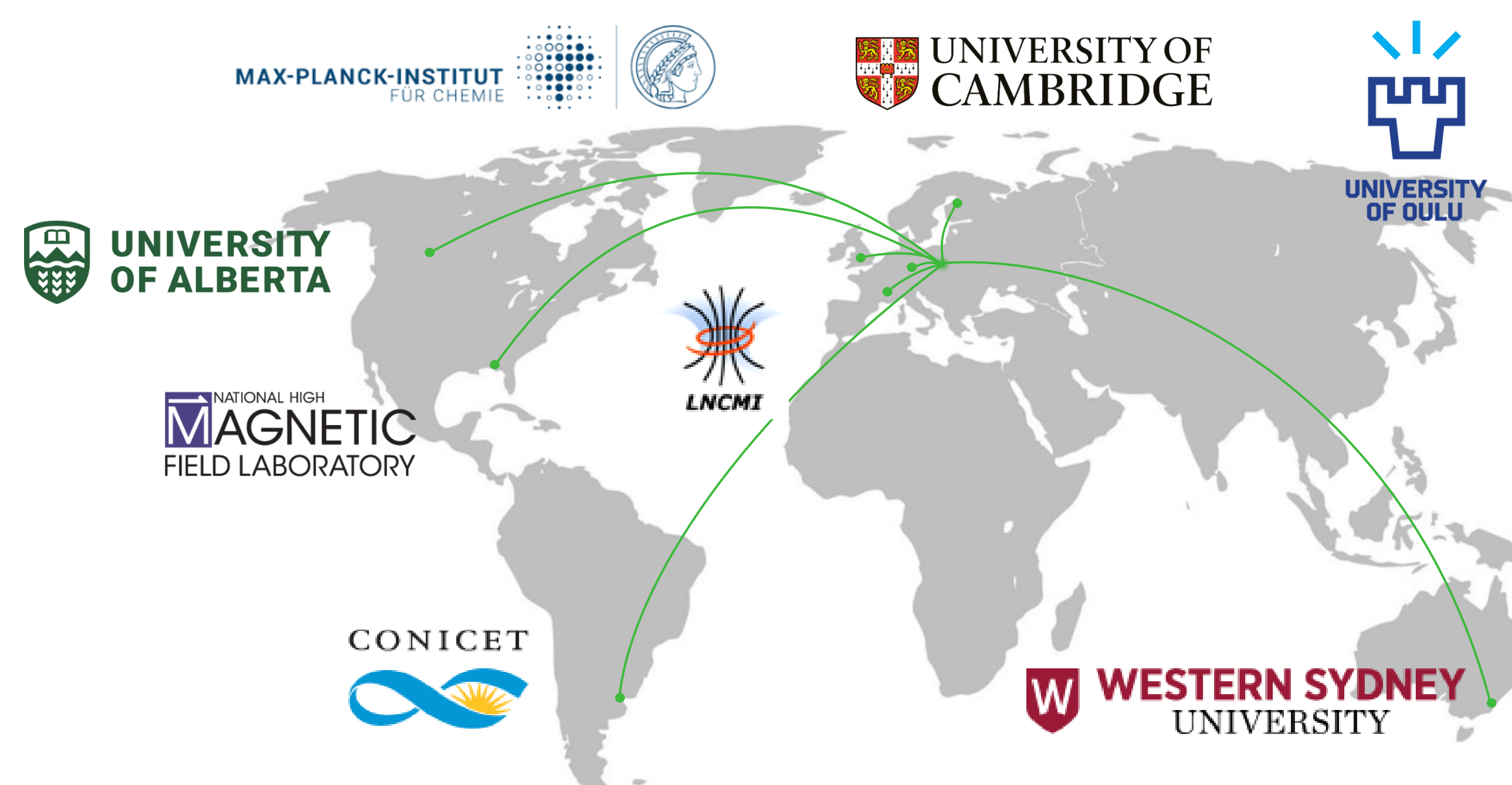
Włodzimierz Makulski

Faculty of Chemistry, University of Warsaw, 02-093 Warsaw, Poland; wmakul@chem.uw.edu.pl;

Tel.: +48-22-55-26-346

Received: 23 October 2020; Accepted: 19 November 2020; Published: 23 November 2020

## Współpraca międzynarodowa



Kierownik



dr hab. Piotr Garbacz

Zespół



dr hab. Włodzimierz Makulski



prof. dr hab. Karol Jackowski



dr Marcin Wilczek



dr Bożena Adrjan



mgr Artur Brzezicki



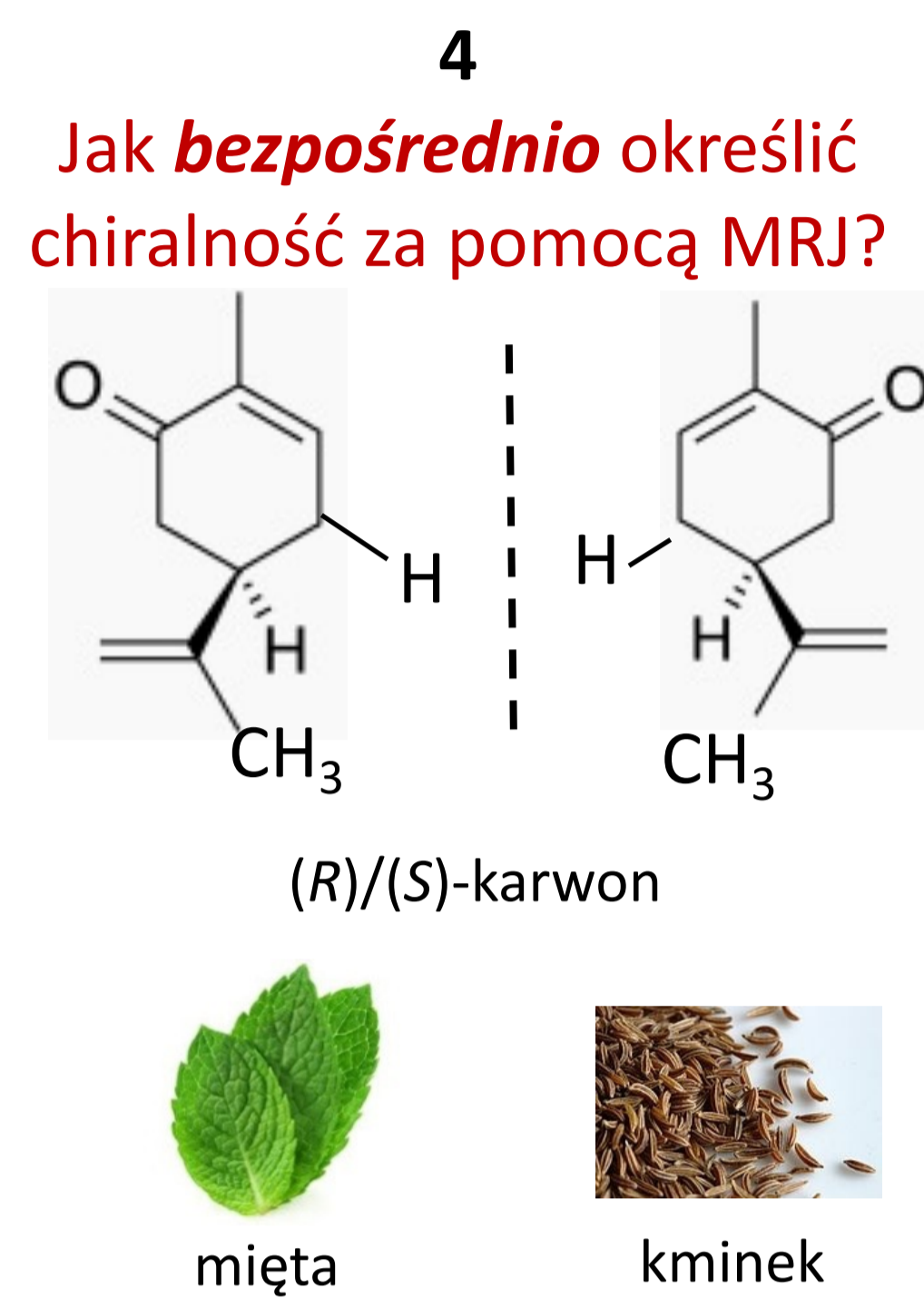
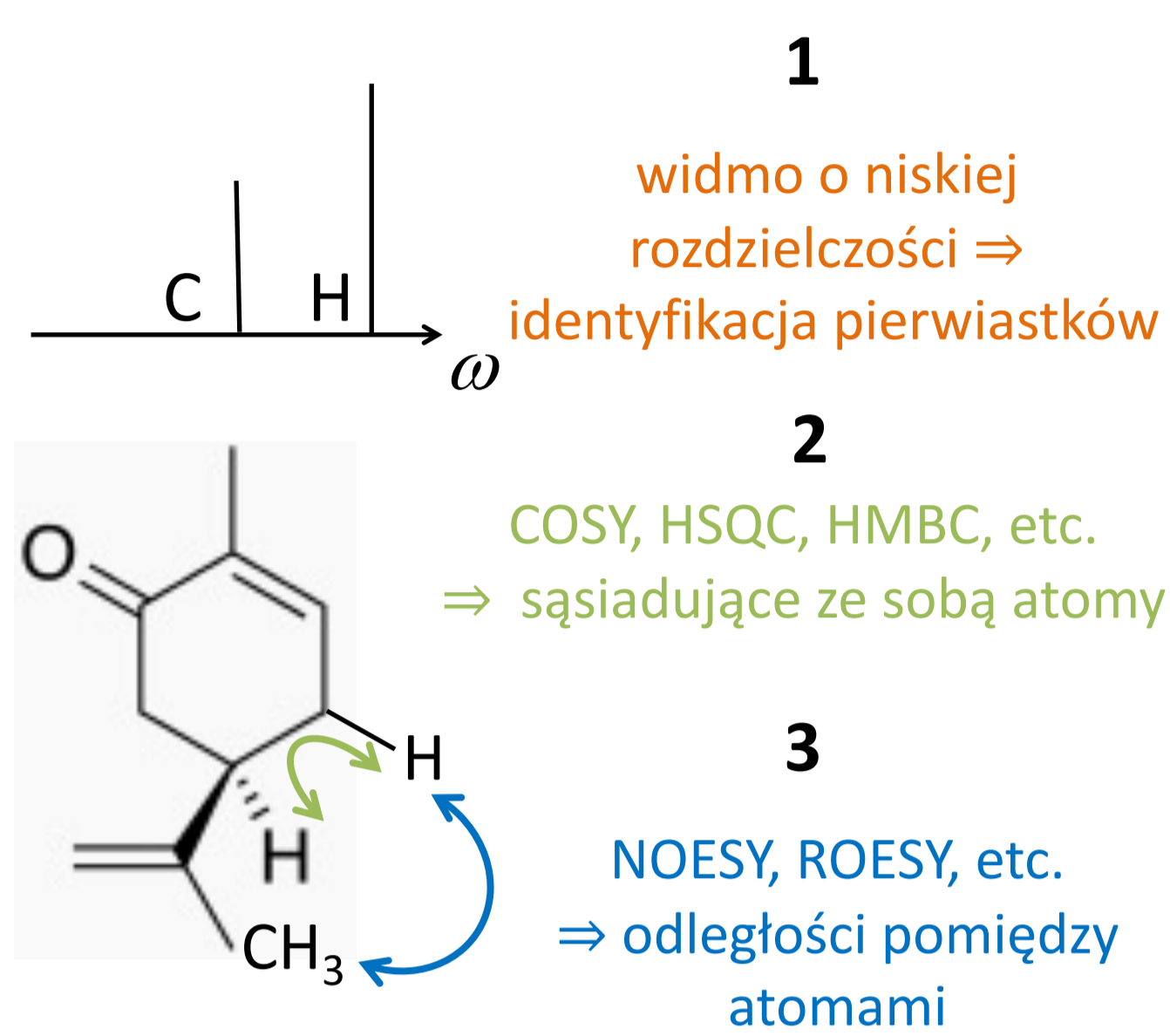
mgr Mateusz Słowiński





## Rezonans magnetyczny chiralnych cząsteczek w polu elektrycznym

Obecnie badania cząsteczek chiralnych (np. leków) za pomocą spektroskopii jądrowego rezonansu magnetycznego mogą być prowadzone tylko w ograniczonym zakresie. Zastosowanie dodatkowego pola elektrycznego w eksperymencie NMR umożliwiłoby różniczenie enancjomerów i określenie ich konfiguracji absolutnej.



Zastosowanie pola elektrycznego wymaga zbudowania układu rezonansowego, którego głównym elementem jest kondensator zamiast cewki.

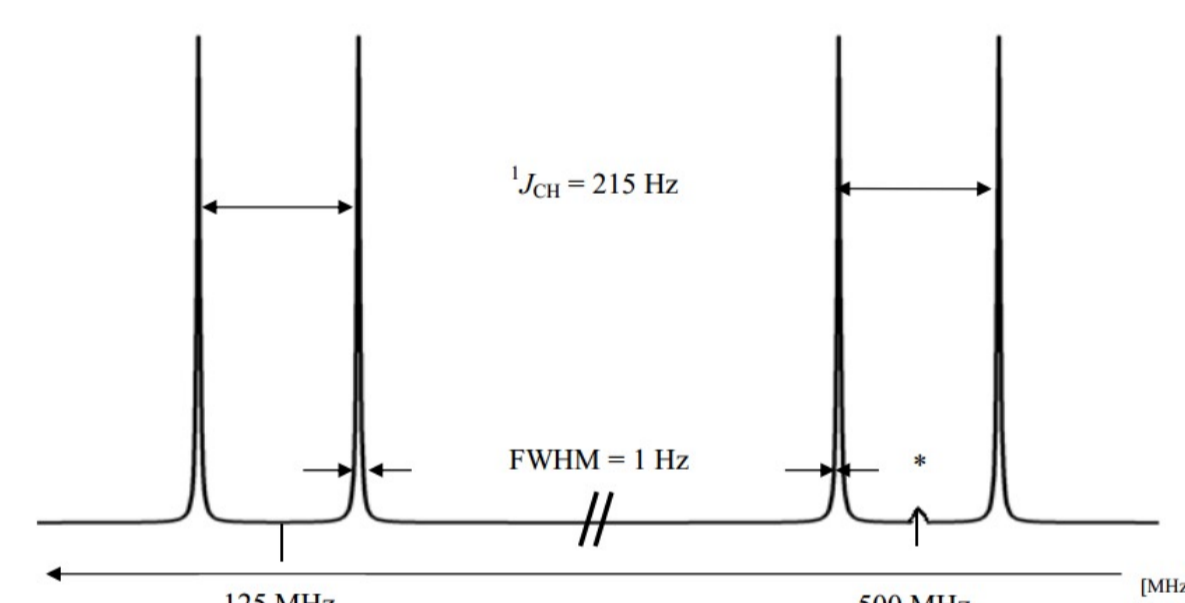
proponowany temat pracy dyplomowej  
**Sonda pomiarowa do bezpośredniego rozróżnienia enancjomerów za pomocą spektroskopii MRJ**

Praca eksperymentalna; projektowanie układów elektronicznych działających na częstościach bliskich tym które są stosowane w telefonii komórkowej i Wi-Fi.

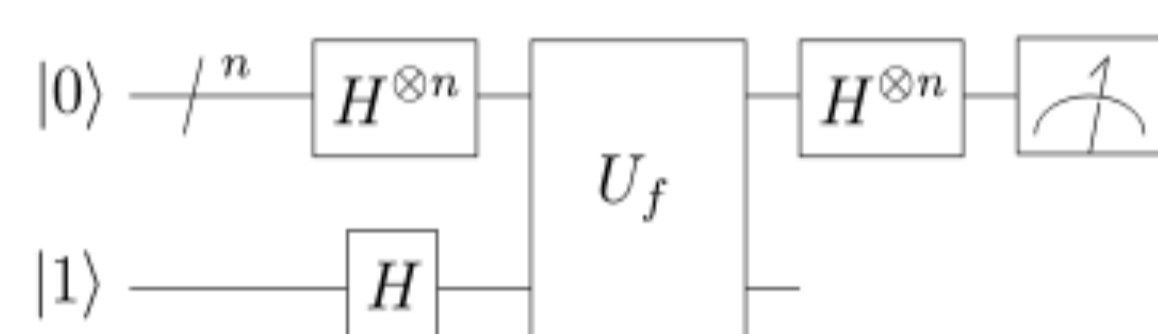
[pgarbac@uw.edu.pl](mailto:pgarbac@uw.edu.pl)

## Informatyka kwantowa

Spiny jądrowe można wykorzystać jako kubity (kwantowe bity) w algorytmach, które pozwalają rozwiązywać zagadnienie nierozwiązywalne za pomocą komputera klasycznego. Np. do tego celu można użyć pary jąder  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  w cząsteczce chloroformu  $^{13}\text{CHCl}_3$ .



Pokonanie jednej z poważnych trudności w budowaniu komputerów kwantowych, utraty spójności stanu kwantowego kubitów, wymaga dokładnego zbadania niespójnej ewolucji jądrowych stanów kwantowych w czasie.



proponowany temat pracy dyplomowej

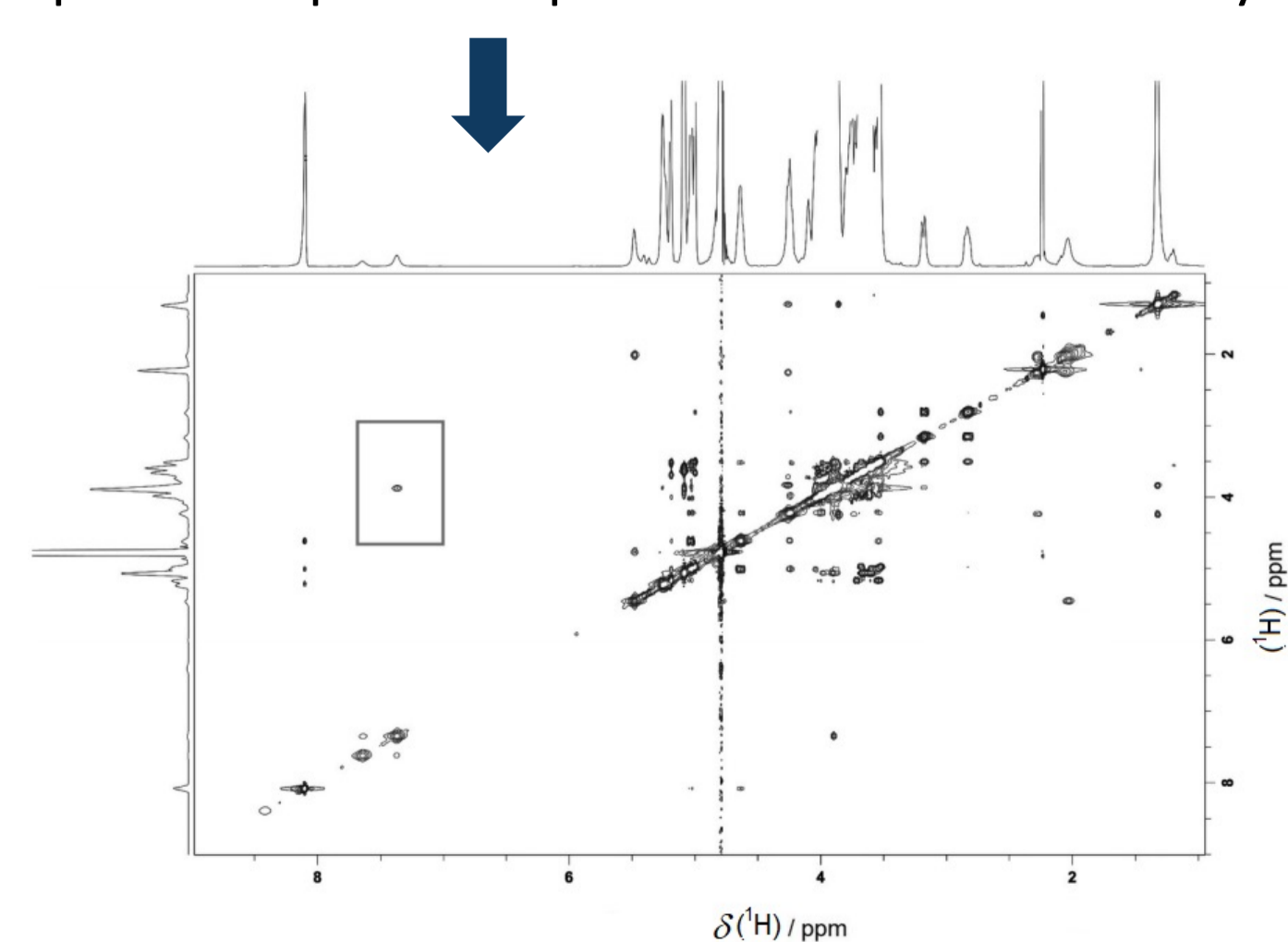
**Niespójna ewolucja stanu kwantowego układu dwóch spinów jądrowych**

Praca eksperymentalna;  
kurs obsługi spektrometru NMR w ramach projektu

[pgarbac@uw.edu.pl](mailto:pgarbac@uw.edu.pl)

## NMR chiralnych związków o działaniu farmakologicznym

Aktywność biologiczna enancjomerów danej substancji może znacząco różnić się. Np. enancjomer S penicylaminy stosowanej w leczeniu choroby Wilsona, w której dochodzi do osadzenia się miedzi w organizmie, jest toksyczny dlatego jako leku używa się wyłącznie (R)-penicylaminy. Spektroskopia NMR pozwala na badanie oddziaływań pomiędzy substancjami chiralnymi.



proponowane tematy prac dyplomowych

**Analiza spektroskopowa kompleksów  $\beta$ -cyklodekstryny (nośniki leków)**

**Analiza składu chiralnych leków**

Praca eksperymentalna; kurs obsługi spektrometru NMR w ramach projektu, analiza widm NMR (jedno/dwuwymiarowych)

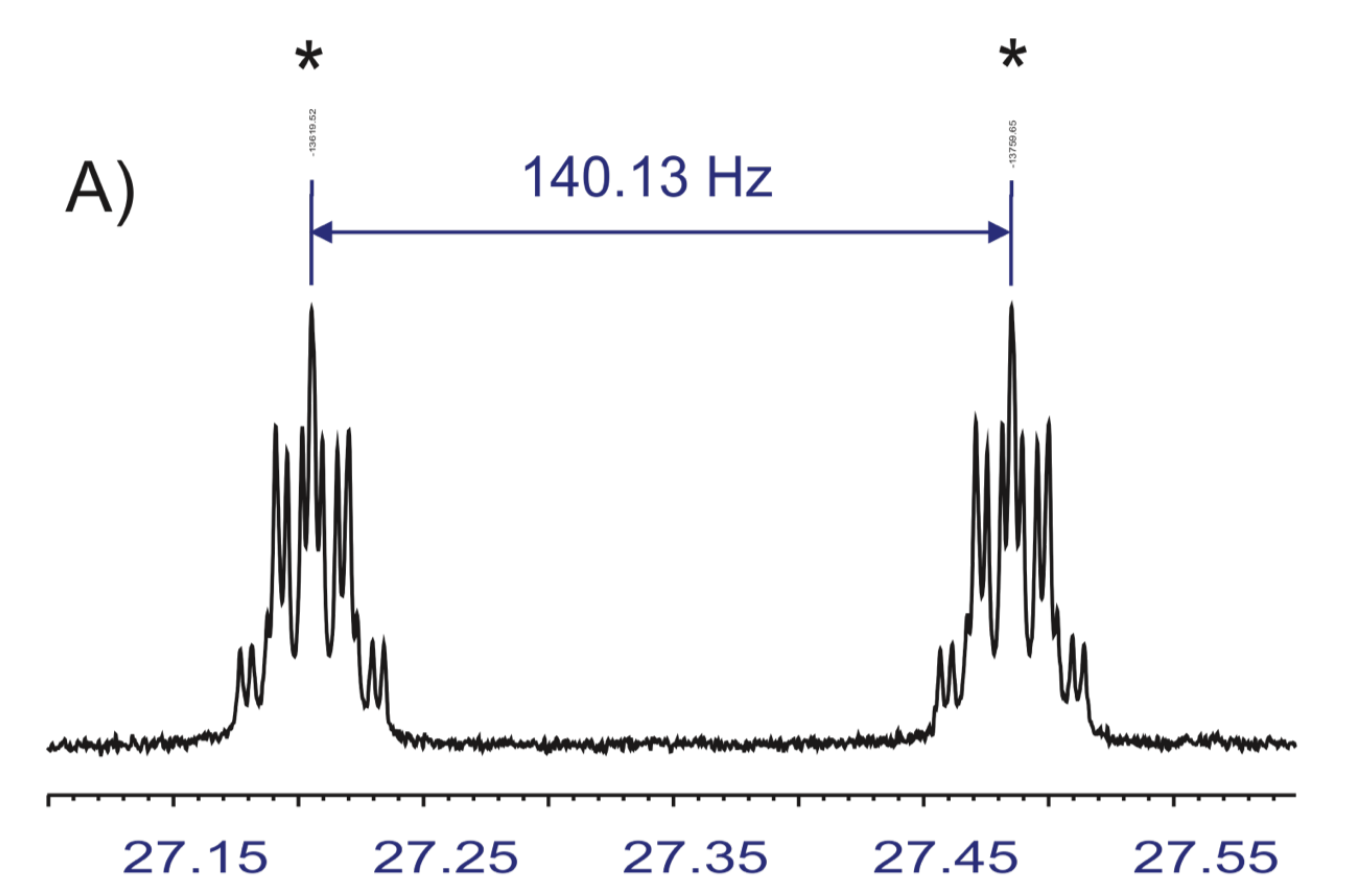
Widmo  $^1\text{H}$  NOESY doksorubicyny oddziałującej z nośnikiem.

[pgarbac@uw.edu.pl](mailto:pgarbac@uw.edu.pl) & [oswiech@uw.edu.pl](mailto:oswiech@uw.edu.pl)

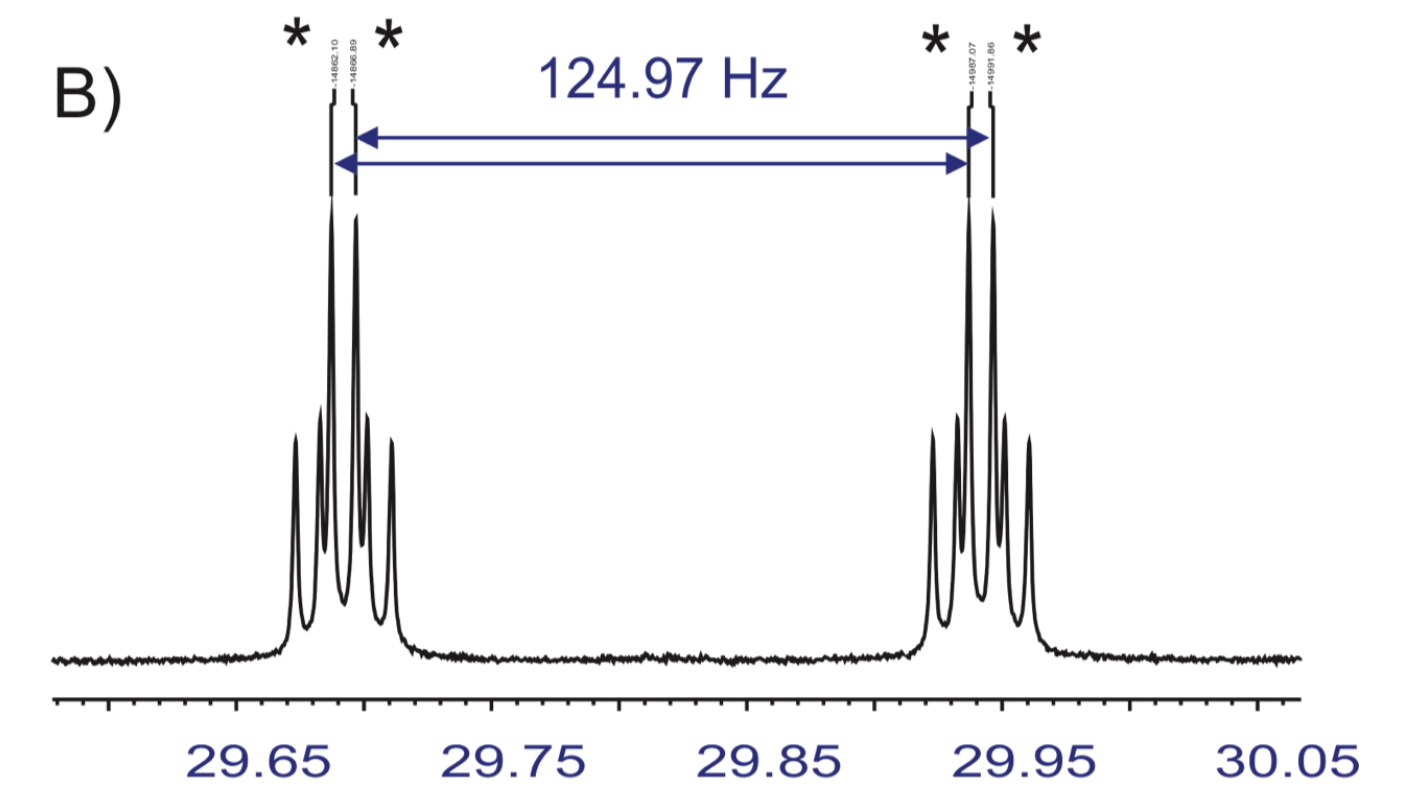
## Prace z zakresu badań w fazie gazowej – wyznaczenie ekranowania jąder

W Pracowni Spektroskopii NMR wykonujemy prace z zakresu badań w fazie gazowej. Jednym z przykładów są badania różnych form izotopowych alkoholu etylowego.

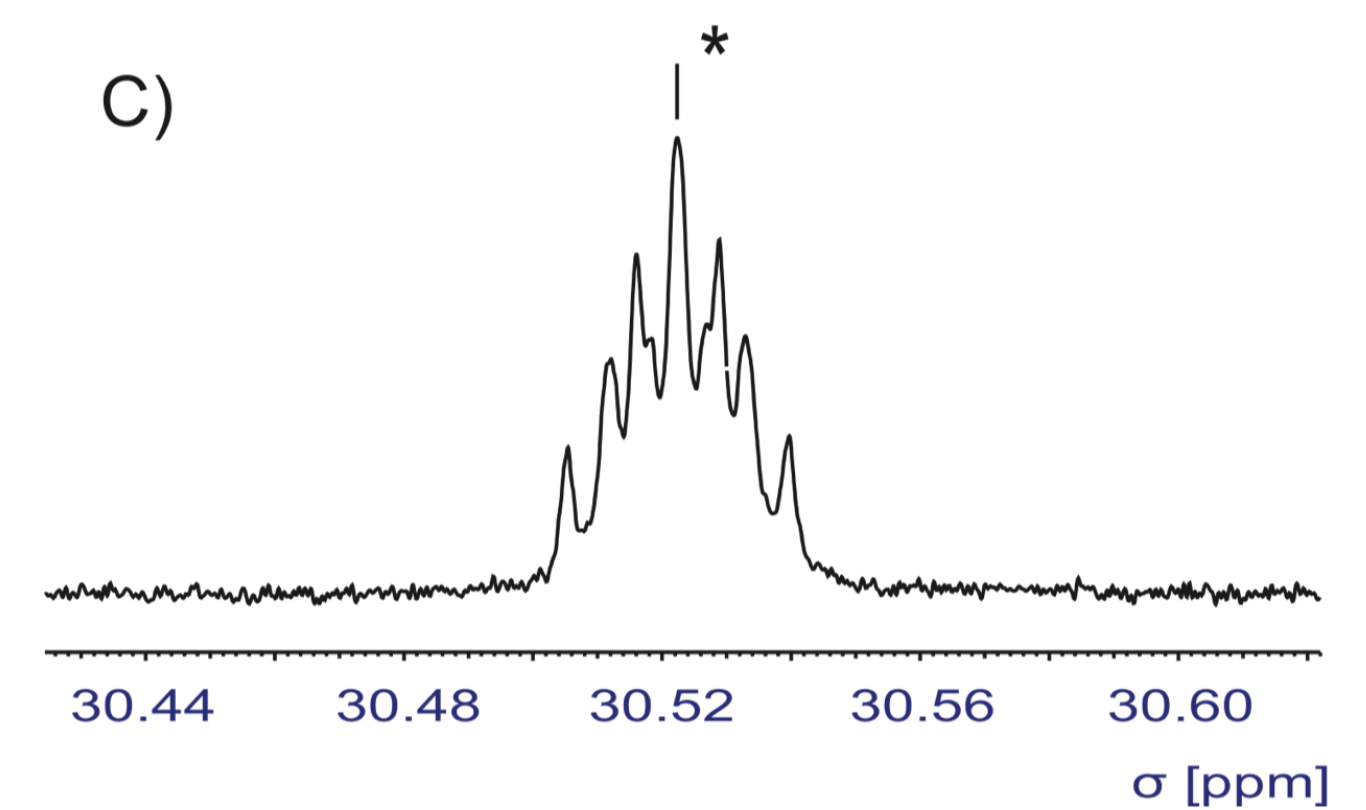
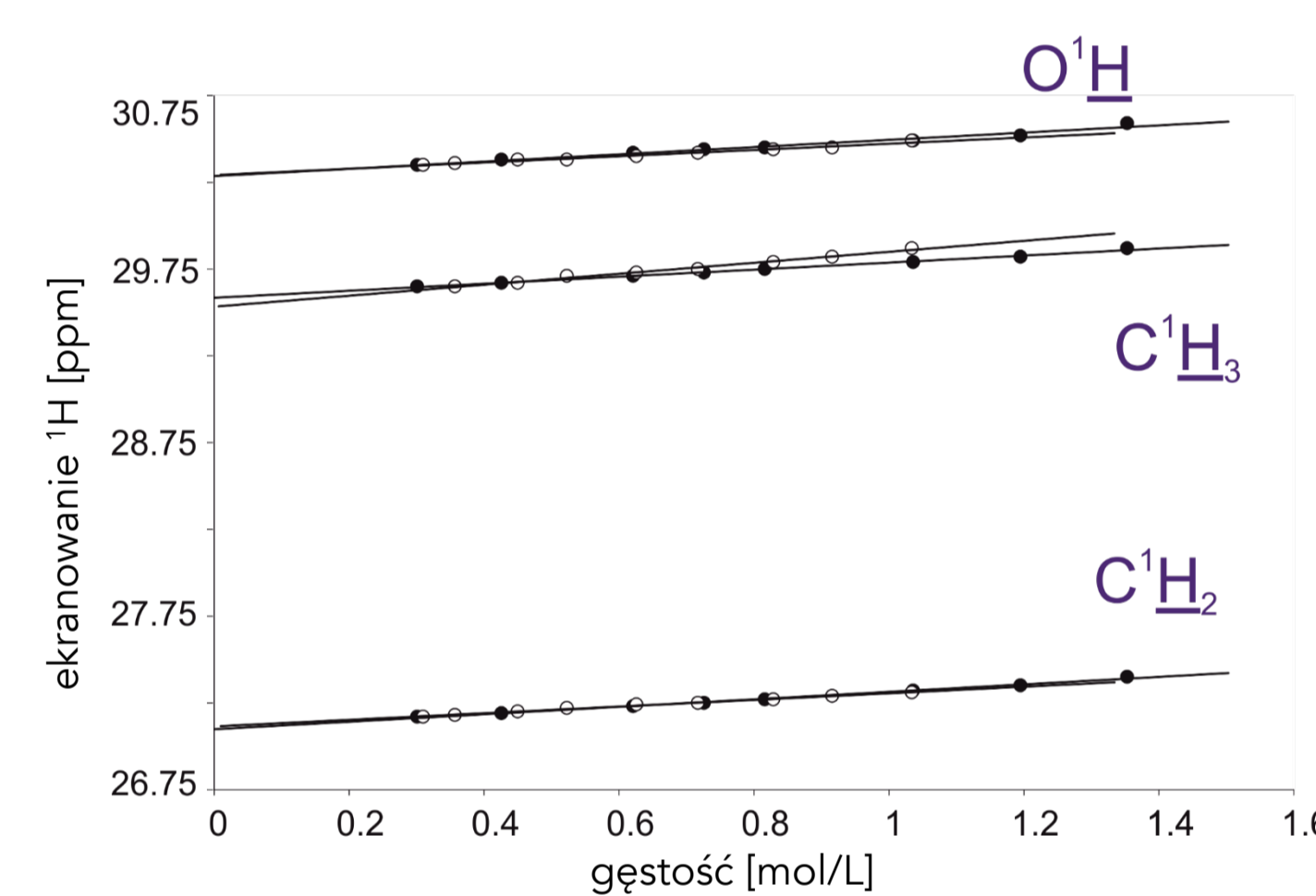
Etanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) ma trzy różne grupy protonów, zatem jego widmo  $^1\text{H}$  NMR składa się z trzech sygnałów. Widmo ciekłego etanolu zawiera tryplet i kwartet sprzężonych protonów metylowych i etylowych, a także singlet grupy hydroksylowej. Tryplet pochodzący od grupy hydroksylowej można zobaczyć, gdy badany jest suchy alkohol. Podobne multiplety obserwuje się w widmie zarejestrowanym w fazie gazowej. Zastąpienie dwóch atomów węgla izotopami  $^{13}\text{C}$  powoduje, że obserwowane sygnały stają się bardziej złożone.



Gazowy etanol został rozpuszczony (w próżniowej aparaturze szklanej) w gazach obojętnych: Xe i  $\text{SF}_6$ . Ponieważ czułość analizy NMR próbek gazowych jest ograniczona zastosowano substancje wzbogacone izotopowo:  $^{13}\text{CH}_3^{13}\text{CH}_2\text{OH}$  i  $\text{CH}_3\text{CH}_2^{17}\text{OH}$ . Przykładowe widmo protonowe etanolu wzbogaconego w węgiel-13.



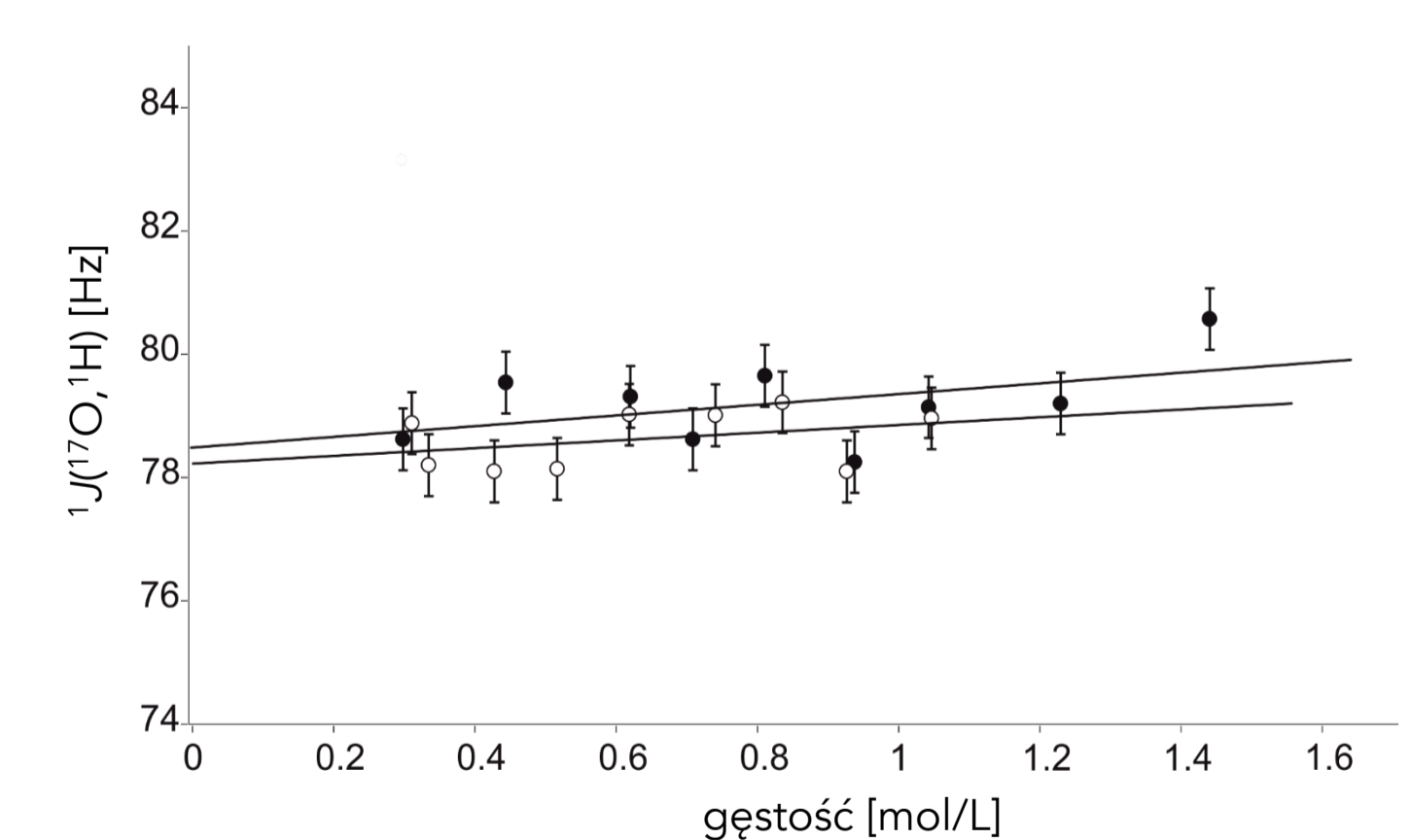
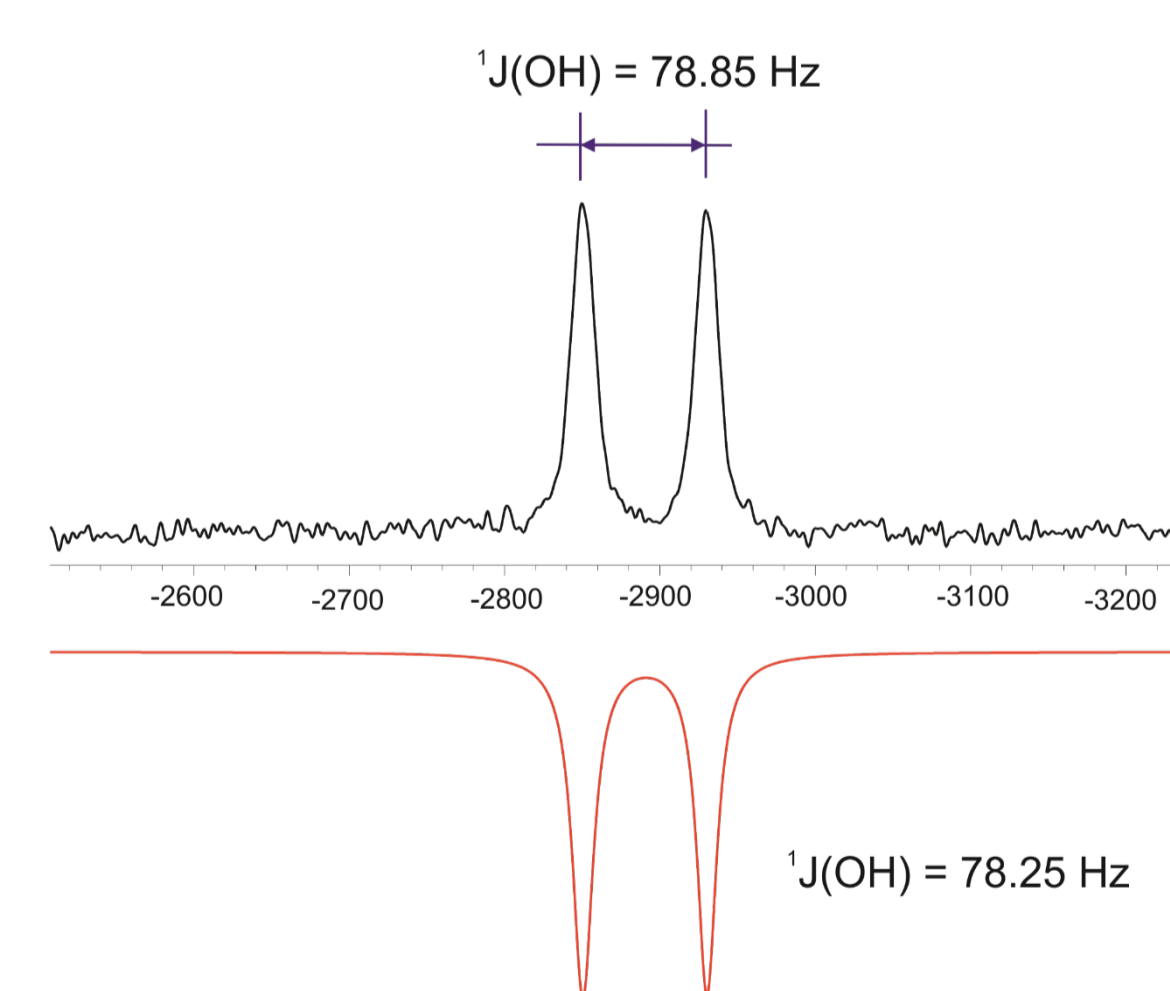
Zmierzono widma  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  i  $^{17}\text{O}$  NMR etanolu, z których określono wartości ekranowania  $\sigma$  poszczególnych jąder w funkcji gęstości ośrodka (ciśnienia całkowitego).



Widmo  $^1\text{H}$  NMR w fazie gazowej  $^{13}\text{CH}_3^{13}\text{CH}_2\text{OH}$  w Xe pod ciśnieniem 28,80 atm: A) grupa  $\text{CH}_3$ , B) grupa  $\text{CH}_2$  C) grupa OH. Sygnały oznaczone gwiazdkami zostały wybrane do obliczenia ekranowania protonów.

## Prace z zakresu badań w fazie gazowej – stałe sprzężenia spinowo-spinowego

Oprócz wartości przesunięć chemicznych, z widm NMR można również wyznaczyć stałe pośredniego sprzężenia spinowo-spinowego. W szczególności wyznaczono stałą  $^1J(^{17}\text{O}, ^1\text{H})$  w gazie w funkcji gęstości próbki co jest niemożliwe dla próbek ciekłego alkoholu ze względu na obecność wiązań wodorowych. Ostateczne wyniki eksperymentalne zostały porównane z wynikami obliczeń kwantowochemicznych.



Widmo  $^{17}\text{O}$  NMR gazowego  $\text{CH}_3\text{CH}_2^{17}\text{OH}$  w Xe pod ciśnieniem 22,92 atm: zarejestrowany sygnał (krzywa górna) i dopasowanie krzywej (krzywa dolna).

Sprężenie spinowo-spinowe  $^1J(^{17}\text{O}, ^1\text{H})$  w cząsteczce etanolu w temperaturze 300 K.

- - Xe, ° -  $\text{SF}_6$

Badania w gazowym ośrodku są nieocenione dla chemików teoretyków, którzy obliczają parametry spektralne NMR cząsteczek izolowanych. Nasze wyniki pozwalają weryfikować jakość obliczeń kwantowo-chemicznych. Trzeba zaznaczyć, że obecnie jesteśmy jedynym zespołem badawczym na świecie, który prowadzi regularnie badania w tej dziedzinie.

proponowany temat pracy dyplomowej

**Momenty magnetyczne jąder atomowych  $^{47}\text{Ti}$  i  $^{49}\text{Ti}$ : pomiary metodą NMR ciekłego  $\text{TiCl}_4$ .**

Praca eksperymentalna; kurs obsługi spektrometru NMR w ramach projektu

[wmakul@chem.uw.edu.pl](mailto:wmakul@chem.uw.edu.pl)