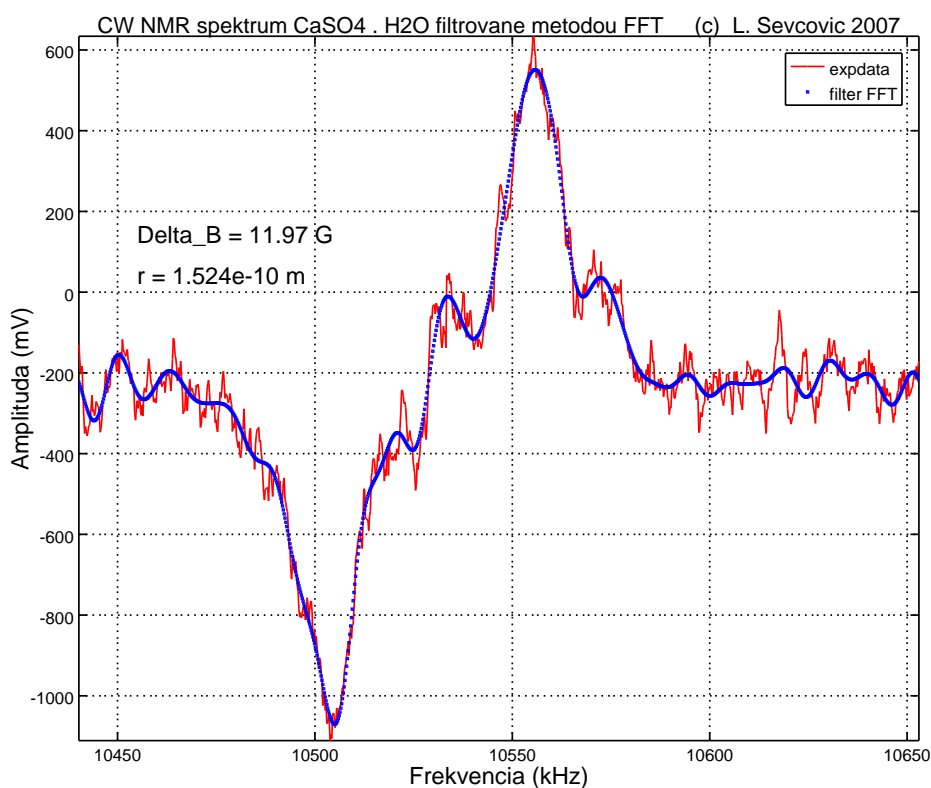




19. októbra 2007

- (4) Vytvorte *m*-súbor pre program MATLAB alebo Octave na určenie medziprotónovej vzdialenosti v molekule H₂O z derivačného záznamu čiary JMR polykryštalického CaSO₄ · 2H₂O. Preved'te diskusiu riešenia a výsledok znázornite graficky. Štúdijný materiál na riešenie tejto úlohy je v súbore TestSpectrometra.pdf.

Príklad riešenia programom Octave:



Obrázok 1: Na obrázku je znázornený jeden záznam spektra JMR CaSO₄ · 2H₂O (polykryštalický sadrovec) filtrovaný metódou rýchlej Fourierovej transformácie (FFT), modrá krivka. Hodnota dubletového štiepenia $\Delta B_{\text{exp}} = 11,97$ G a medziprotónová vzdialenosť v molekule vody $r_{\text{exp}} = 1,524 \cdot 10^{-10}$ m