

Vilniaus universitetas  
Fizinių ir technologijos mokslų centras  
Kauno technologijos universitetas  
Vilniaus Gedimino technikos universitetas (VILNIUS TECH)  
Lietuvos fizikų draugija

# 45-oji LIETUVOS NACIONALINĖ FIZIKOS KONFERENCIJA

*2023 m. spalio 25-27 d., Vilnius*

## **PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS**



VILNIAUS  
UNIVERSITETO  
LEIDYKLA

2023

Bibliografinė informacija pateikiama

Lietuvos integralios bibliotekų informacinės sistemos (LIBIS) portale [ibiblioteka.lt](http://ibiblioteka.lt).

**ISBN 978-609-07-0981-8** (skaitmeninis PDF)

**DOI:** <https://doi.org/10.15388/LNPC.2023>

Leidinį rengė

LNFK45 organizacinis komitetas

Vilniaus universiteto leidykla, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

[info@leidykla.vu.lt](mailto:info@leidykla.vu.lt), [www.leidykla.vu.lt](http://www.leidykla.vu.lt)

Knygos internete [knygynas.vu.lt](http://knygynas.vu.lt)

Mokslo periodikos žurnalai [zurnalai.vu.lt](http://zurnalai.vu.lt)

© 2023 LNFK45 Organizacinis komitetas. Published by Vilnius University Press <https://www.vu.lt/leidyba/>

This is an Open Access article distributed under the terms of the <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/> Creative Commons Attribution Licence, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

## Funkcinių medžiagų kietojo kūno BMR spektroskopija

### Solid state NMR of functional materials

Vytautas Klimavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas,  
Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, Lietuva  
[vytautas.klimavicius@ff.vu.lt](mailto:vytautas.klimavicius@ff.vu.lt)

Kietojo kūno Branduolių Magnetinis Rezonansas (BMR) yra informatyvus eksperimentinis metodas, paremtas sukinių šuolių tarp energijos lygmenų, atsirandančių esant stipriam magnetiniam laukui, detektavimu. Kartu su magiškojo kampo sukimu (MAS) ir įvairiomis impulsų sekomis kietojo kūno BMR suteikia informacijos apie įvairius tiriamų sistemų aspektus molekulinio lygmeniu, tokius kaip: cheminę aplinką, chemines jungtis, tarpatominius atstumus, kvadrupolinius parametrus ir kt. Dėl viso to kietojo kūno BMR yra galingas eksperimentinis metodas tiriant funkcines medžiagas, specialiai sukurtas kaulų inžinerijai, šviesos, sensorių technologijoms, energiją kaupiantiems prietaisams, išmaniosioms bei funkcinėms polimerinėms medžiagoms ir kt.

Pranešimo metu bus pristatyti naujausi tyrimai atliekami VU Cheminės fizikos instituto BMR laboratorijoje. Kad tenkintų platesnės auditorijos interesus, pranešimo pradžioje bus pristatytas trumpas kietojo kūno BMR įvadas, pagrindinės BMR stebimos sąveikos ir eksperimentiniai metodai, plačiai taikomi funkcinių medžiagų tyrimuose. Vėliau bus pristatyti kietojo kūno BMR taikymai tiriant įvairias organines, neorganines ir hibridines funkcines medžiagas.

Kietojo kūno BMR tyrimai yra plačiai taikomi neorganinių funkcinių medžiagų tyrimuose. Kaip pavyzdžiai bus pristatyti kalcio fosfatų, būtent Mg- ir Zn-vitlokity ( $\text{Ca}_{18}\text{Mg}_2(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_{12}$ ) naujausi  $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$  1D ir 2D BMR tyrimai [1, 2]. Minėtos medžiagos yra perspektyvios kaulų inžinerijoje kaip kaulų regeneracijai taikomi užpildai. Taip pat bus pristatyti naujos struktūros granatų, kur dalis itrio ir aliuminio kristalinėje struktūroje yra pakeista natriu ir vanadžiu ( $\text{Y}_{3-x}\text{Na}_x\text{Al}_5\text{V}_y\text{O}_{12}$ ) BMR tyrimai. Granatų tyrimuose labai vertingos informacijos suteikė kvadrupolinių branduolių, tokių kaip:  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{51}\text{V}$ ,  $^{23}\text{Na}$  1D MAS BMR bei  $^{27}\text{Al}$  2D MQMAS (diaugiakvantinis metodas) tyrimai. Šio tipo medžiagos gali būti pritaikytos šviesos ir sensorių technologijose.

Hibridiniai funkciniai dariniai tokie kaip: N-legiruota mezoporėta anglis [3] ar NASICON (*Na Super Ionic CONductor*) tipo hibridinės medžiagos yra pritaikomi naujos kartos prietaisuose, tokiuose kaip: superkondensatoriai ar vandens pagrindo Na-jonų baterijos, elektros energijai kaupti, kurie yra būtini norint pereiti prie atsinaujinačios energetikos. N-legiruotos anglies tyrimams buvo pasitelkta žemųjų temperatūrų  $^{15}\text{N}$  MAS tyrimai, kurie leido susieti superkondensatoriaus talpos padidėjimą su molekuline elektrodo struktūra [3]. NASICON tipo hibridinių

medžiagų, vystomų kaip vandeninių natrio baterijų elektrodai, tyrimams daugiausiai taikoma  $^{23}\text{Na}$  ir  $^{31}\text{P}$  MAS BMR *ex-situ* metodas, kuris leidžia įvertinti elektrodų degradaciją molekulinio lygmeniu. Taip pat siekiama pritaikyti ir *in-situ* plačiąjuostį BMR metoda stebėti elektrocheminio prietaiso degradacijos dinamiką realiuoju laiku.

Kaip organinių funkcinių medžiagų pavyzdžiai bus aptariami supramolekulinių agregatų, kurie pagrįsti biklo[3.3.1]nonano karkaso geometrija ir vandeniliniiais ryšiais [4]. Bus aptartos  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$  MAS 1D ir 2D, taip pat DNP sustiprintų metodų taikymai šiuose tyrimuose. Supramolekuliniai agregatai gali būti pritaikyti molekulinėje elektronikoje, nano-katalizėje ar kaip molekuliniai varikliai. Kitas funkcinių polimerų BMR tyrimų pavyzdys bus yra  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{31}\text{P}$  pMPC (poly(2-methacryloyloxyethyl phosphorylcholine) BMR tyrimai [5]. Šio tipo polimeras yra vienas labiausiai biosuderinamų sintetinių polimerų ir gali būti pritaikytas medicininių prietaisų gamyboje.

Dėkojame Vilniaus universiteto Mokslo rėmimo fondui (MSF-JM-5/2022) ir Lietuvos mokslo tarybai (S-MIP-23-47) už dalies tyrimų finansavimą.

*Reikšminiai žodžiai: kietojo kūno BMR, funkcinės medžiagos, kaulų inžinerija, polimerai, granatai, energijos medžiagos.*

#### Literatūra

- [1] A. Kizalaite, V. Klimavičius, V. Balevicius, G. Niaura, A.N. Salak, J.C. Yang, S.H. Cho, T. Goto, T. Sekino, A. Zarkov, *CrystEngComm*, 25 (30), 4370-4379 (2023)
- [2] A. Kizalaite, V. Klimavičius, J. Versockiene, E. Lastauskiene, T. Murauskas, R. Skaudzius, T. Yokoi, M. Kawashita, T. Goto, T. Sekino, A. Zarkov, *CrystEngComm*, 24(28), 5068-5079 (2022)
- [3] E. Zhang, Y.C. Wu, H. Shao, V. Klimavičius, H. Zhang, P.L. Taberna, J. Grothe, G. Buntkowsky, F. Xu, P. Simon, S. Kaskel, *JACS*, 144(31), 14217-14225 (2022)
- [4] A. Jozeliūnaitė, T. Javorskis, V. Vaitkevičius, V. Klimavičius, E. Orentas, *JACS*, 144(18), 8231-8241 (2022)
- [5] V. Klimavičius, V. Klimkevičius, K. Aidis, S. Balčiūnas, J. Banys, R. Makuska, V. Balevicius, *React.Funct.Pol.*, DOI: 10.1016/j.reactfunctpolym.2023.105727 (2023)