

Funkcinių Ca, Sr, Ba fosfatų kietojo-kūno BMR spektroskopija

Dr. Vytautas Klimavičius

Funkciniai kalcio, stroncio, bario fosfatai, kurie sudaro apatito (pvz, $A_{10}(PO_4)_6B_2$, kur $A = Ca, Sr, Ba, \dots$, $B = OH, Cl, Br, \dots$ ar $Sr_5(PO_4)_{3-x}(VO_4)_xCl$) ar kitas kristalines struktūras (pvz, $Sr_2V_{1-x}P_xO_4Cl$) yra itin perspektyvios medžiagos vystant šviesos technologijas, nes, jas legiruojuojant, pasižymi aukštu kvantiniu našumu. Siekiant paaiškinti procesus vykstančius šiose medžiagose, reikia suprasti jų struktūrą molekuliniam lygmenyje. Tam galima panaudoti įvairius spektroskopinius metodus, iš kurių kietojo-kūno BMR spektroskopija yra vienas tinkamiausių, nes yra jautrus net menkiausiems pokyčiams medžiagų struktūroje molekuliniam lygmenyje, medžiagų kristališkumui, jų morfologijai ar legiravimo lygiui. Doktorantūros metu bus atliekami pažangūs 1H , ^{19}F , ^{31}P , $^{35,37}Cl$, $^{79,81}Br$, ^{51}V ir kt. vienadimensiniai ir daugiadimensiniai kietojo-kūno BMR spektroskopiniai tyrimai. Taip pat bus siekiama užregistruoti „egzotinių“ branduolių, tokių kaip: ^{87}Sr , ^{43}Ca , ^{137}Ba ir kt., BMR signalus. Šie eksperimentiniai duomenys leis charakterizuoti šias naujas funkcines medžiagas molekuliniam lygmenyje. Lyginant molekulinę struktūrą su makroskopinėmis medžiagų savybėmis, bus prisidedama prie procesų paaiškinimo, vykstančių jose.

Solid state NMR spectroscopy of functional Ca, Sr, Ba phosphates

Functional calcium, strontium, and barium phosphates that form apatite-type structures (e.g., $A_{10}(PO_4)_6B_2$, where $A = Ca, Sr, Ba, \dots$ and $B = OH, Cl, Br, \dots$, or $Sr_5(PO_4)_{3-x}(VO_4)_xCl$) or other crystalline structures (e.g., $Sr_2V_{1-x}P_xO_4Cl$) are highly promising materials for the development of light technologies because, upon doping, exhibit high quantum efficiency. To explain the processes occurring in these materials, it is necessary to understand their molecular structure. This can be achieved using various spectroscopic methods, among which solid-state NMR spectroscopy is one of the most powerful, as it is sensitive to slight changes in materials' structure at the molecular level, crystallinity, morphology, or degree of doping. During doctoral studies, advanced 1H , ^{19}F , ^{31}P , $^{35,37}Cl$, $^{79,81}Br$, ^{51}V , etc., one-dimensional and multidimensional solid-state NMR spectroscopic investigations will be carried out. NMR signals of “exotic” nuclei such as ^{87}Sr , ^{43}Ca , ^{137}Ba , etc., will also be tried to obtain. These experimental data will enable the characterization of these new functional materials at the molecular level. By correlating molecular structure with macroscopic material properties, the dissertation will contribute to explaining the processes occurring within these materials.