

Streszczenie

Badanie struktury i dynamiki natrolitu metodami magnetycznego rezonansu jądrowego

Mateusz Wojciech Paczwa

Zakład Fizyki Ciała Stałego, Instytut Fizyki, Wydział Matematyczno - Fizyczny,
Uniwersytet Szczeciński, ul. Wielkopolska 15, 70 - 451 Szczecin

Niniejsza praca doktorska przedstawia wyniki strukturalnych badań zeolitów na przykładzie natrolitu oraz dynamiki wewnętrznej znajdujących się w kanałach molekuł wody i kationów sodu. Badania zostały przeprowadzone przy pomocy różnych metod magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR z ang. Nuclear Magnetic Resonance).

Rozdział 1 stanowi wprowadzenie teoretyczne i dotyczy opisu zeolitów - struktury, sposobów klasyfikacji, mikroporowatych właściwości i ich zastosowania. Zeolity są minerałami z rodziny glinokrzemianów i stanowią jedną z najważniejszych grup materiałów porowatych. Zeolity są krystalicznymi materiałami o regularnej strukturze mikroporowatej, którą tworzy karkas zbudowany z tetraedrów krzemowych i glinowych z występującymi wewnątrz komorami i kanałami, w których mogą znajdować się cząsteczki wody i kationy. Te mikroporowate struktury wykazują interesujące właściwości fizyczne i chemiczne tj. wymiana jonowa, kataliza, adsorpcja i sorpcja.

W rozdziale 2, 3 i 4, które stanowią główną część pracy, przedstawiono analizę i interpretację wyników eksperymentalnych badań natrolitu różnymi metodami magnetycznego rezonansu jądrowego. Praca skupia się głównie na badaniach spektroskopowych NMR natrolitu ($\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$), którego struktura w porównaniu do pozostałych znanych zeolitów zawiera najmniejsze pod względem rozmiarów kanały. Ponadto istotną cechą natrolitu, ze względu na możliwości praktycznego zastosowania, jest to, że jako minerał występujący naturalnie, może być stosunkowo łatwo wytwarzany oraz modyfikowany. W części doświadczalnej przedstawione są widma doświadczalne absorpcji NMR jąder ^1H , ^{23}Na , ^{27}Al , ^{29}Si statycznych próbek i widma absorpcji MAS NMR próbek wirujących pod kątem magicznym ($54,74^\circ$) dla różnych częstotliwości wirowania w szerokim zakresie temperatur od 180 K do 400 K, temperaturowe zależności czasów relaksacji spin -

sieć jąder ^1H , ^{23}Na , ^{27}Al w laboratoryjnym T_1 i wirującym $T_{1\rho}$ układzie odniesienia oraz temperaturowe zależności czasów dipolowej relaksacji T_{1D} jąder ^1H . Do pomiarów wykorzystano między innymi następujące metody spektroskopii NMR: metoda solid - echo, metoda spinowego rozprężania i bez spinowego rozprężania, metoda impulsowa z "ujarzmianiem" spinowym itp.

W pracy dość szczegółowo jest przedstawiona teoretyczna interpretacja otrzymanych doświadczalnych wyników. Obliczone na podstawie widm parametry strukturalne zostały porównane z teoretycznymi parametrami uzyskanymi na podstawie różnych modeli teoretycznych oraz z danymi literaturowymi. Również, na podstawie zależności temperaturowych procesów relaksacji, wyznaczone i przedstawione są parametry ruchu odpowiednich jąder magnetycznych – energie aktywacji i ich dyspersje, mające kluczowe znaczenie w analizie mikroskopowych mechanizmów molekularnej dynamiki jonów i molekuł wody. Interesującym aspektem pracy jest badanie ruchów molekuł wody w nanokanałach natrolitu i zrozumienie procesów dynamicznych tj. dyfuzja i reorientacja molekuł wody.

Pacrose