

# Nanodeimantų su papildoma –N=N-Ph-COOH grupe įmagnetėjimo tyrimai ab initio metodais

## Ab initio study of the suspensibility of nanodiamonds with additional groups

Jelena Tamulienė<sup>1</sup>, Jonas Šarlauskas<sup>2</sup>, Audrius Šileikis<sup>3</sup>, Rimas Vaišnoras<sup>4</sup>, Nerijus Karalius<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

<sup>2</sup>Vilniaus universitetas, Gyvybės mokslų centras, Saulėtekio al. 7, LT-10222 Vilnius

<sup>3</sup>Vilniaus universitetas, Medicinos fakultetas, M.K. Čiurlionio g. 21, LT-03101 Vilnius

<sup>4</sup>Lietuvos edukologijos universitetas, Studentų g. 39, LT-08106 Vilnius

<sup>5</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

[Jelena.Tamulienė@tfai.vu.lt](mailto:Jelena.Tamulienė@tfai.vu.lt)

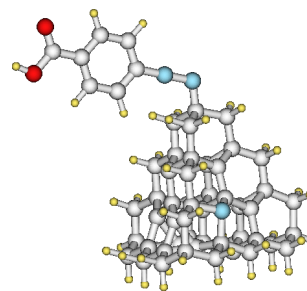
Pastaraisiais dešimtmečiais didelis dėmesys yra skiriamas įvairių anglies darinių, tokių kaip anglies nanovamzdeliai, grafenas, fulerenai, nanodeimantai ir kt., tyrimams. Minėtuose dariniuose, nepaisant to kad jie yra sudaryti iš tokių pačių atomų, susidaro  $sp^2$  (pvz. grafito dariniai),  $sp^3$  (pvz. deimantai) ar abi šios jungtys. Tai viena iš priežasčių, kodėl anglies darinių savybės yra skirtingos ir, kaip pasekmė, juos galima panaudoti įvairiose srityse, tokiose kaip biomedicina, elektronika, energetika, vaizdinimas ir t.t. Nanodeimantai, kaip tyrimo objektai, yra įdomūs dar ir tuo, kad jie netoksiški, gali būti/yra panaudojami kaip vaistų nešėjai ir tuo pačiu metu jie yra aukšto biostabilumo fluorescenciniai žymekliai, skirti ląstelių stebėjimui. Tačiau jų panaudojimas vaizdinimui neinvaziniu būdu šiuo metu yra ribotas.

Mūsų ankstesni tyrimai, parodė, kad nanodeimantų su defektais, inkorporuotais N atomais, ir be įmagnetėjimas priklauso nuo išorinio elektrinio lauko stiprio: kai išorinio elektrinio lauko nėra, tirti nanodeimantai yra diamagnetikai, o juos „patalpinus“ į išorinį elektrinį lauką, kurio stipris didėja – šios dalelės tampa paramagnetikais, o jų įmagnetėjimas didėja. Šių rezultatų pagrindu buvo padaryta prielaida, kad nanodeimantai gali būti naudojami kaip kontrastų agentai magnetinio rezonanso vaizdinimo įrenginiuose (MRI).

Neseniai David E.J. Waddington ir kt. atliko 4-125 nm dydžio nanodeimantų tyrimus tam, kad nustatyti, ar nanodeimantai gali būti panaudoti vaizdinimui [1]. Gauti rezultatai parodė, kad 125 nm nanodeimantai nesiagreguoja dejonizuotame vandenyje maždaug 30 dienų, ir, kas yra ypatingai svarbu, gali būti naudojami vaizdinimui. Vaizdo kontrastas, minėto darbo autorių nuomone, nanodeimantų – vandens tirpaluose atsiranda dėl *Overhauser* efekto: dalinai poliarizuoti nanodeimantų elektronų sukinių yra veikiami magnetiniu lauku; rezonansas įvyksta tada, kai nanodeimantų elektronų sukinių ir aplinkos  $^1\text{H}$  atomų svyravimo dažniai sutampa.

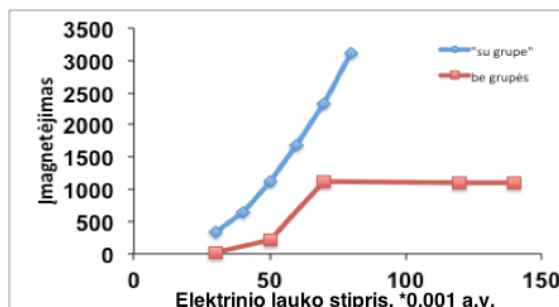
Tad kyla klausimas, ar *Overhauser* efektas bus stebimas ir tada, kai nanodeimantai bus funkcionalizuoti specifinėmis grupėmis, pavyzdžiui, savitai reguojančios į auglius, t.y. kyla klausimas ar funkcionalizuotuose nanodeimantuose bus dalinai poliarizuotų elektronų sukinių. Norėdami atsakyti į šį klausimą atlikome nanodeimanto su –N=N-Ph-COOH grupe preliminarius

įmagnetėjimo tyrimus taikant B3LYP/6-31G metodą (Pav. 1).



1 pav. Tiriama nanodeimanto su papildoma grupe vaizdas. C atomai – pilkos spalvos, O- raudonos, N- mėlynos, H – gelsvos.

Atliktuose preliminariuose tyrimuose papildomos grupės padėtis nanodeimante yra parinkta atsižvelgus į erdvinis efektus ir nėra atsižvelgta į galimus struktūros pakitimus dėl elektrinio lauko poveikio.



2 pav. Tiriama nanodeimanto su ir be papildomos grupės įmagnetėjimo priklausomybė nuo išorinio elektrinio lauko.

Remiantis gautais rezultatais (Pav. 2) galime teigti, kad ir funkcionalizuotuose nanodeimantuose bus pakankamai poliarizuotų elektronų sukinių, tad jie taip pat galės būti naudojami kaip kontrastų agentai MRI.

*Reikšminiai žodžiai:* nanodeimantas, įmagnetėjimas, ab initio

### Literatūra

[1] D. E. J. Waddington et al. *Nanoscale Physics (cond-mat.mes-hall)* arXiv:1611.05167v1 [cond-mat.mes-hall]