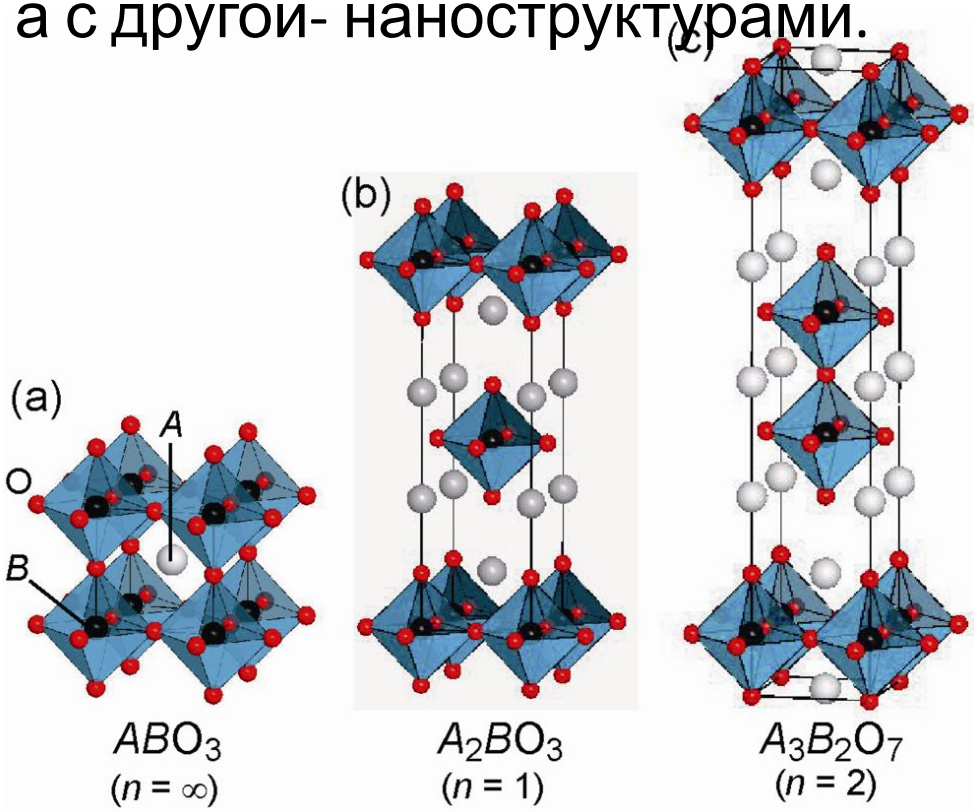
Температурная зависимость времени спин-решеточной релаксации протонов в $H_2La_2Ti_3O_{10}$

Выполнил: Костромин Артем Владимирович
Научный руководитель: Шеляпина Марина Германовна

Объект исследования

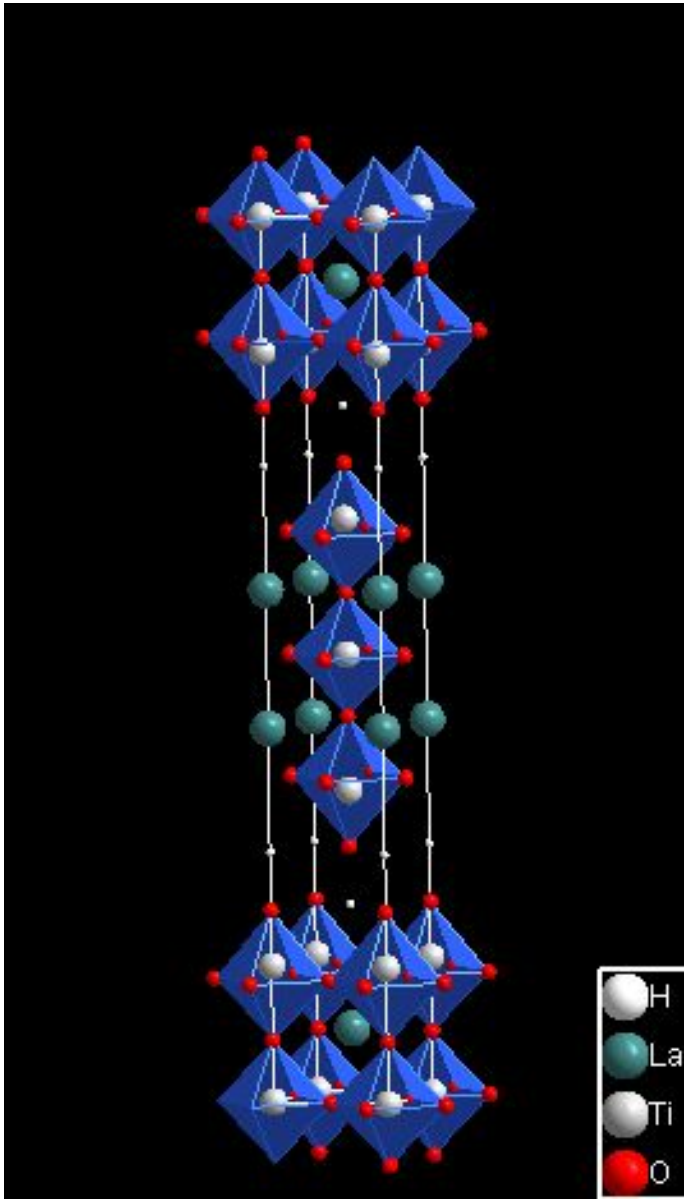
Слоистые перовскитоподобные структуры с одной стороны являются трехмерными упорядоченными объектами, а с другой- наноструктурами.



Для слоистых перовскитоподобных структур характерно:

- Высокая подвижность катионов в межслоевом пространстве
- Возможность встраивания в межслоевое пространство различных атомов и молекул, как, например, H_2O

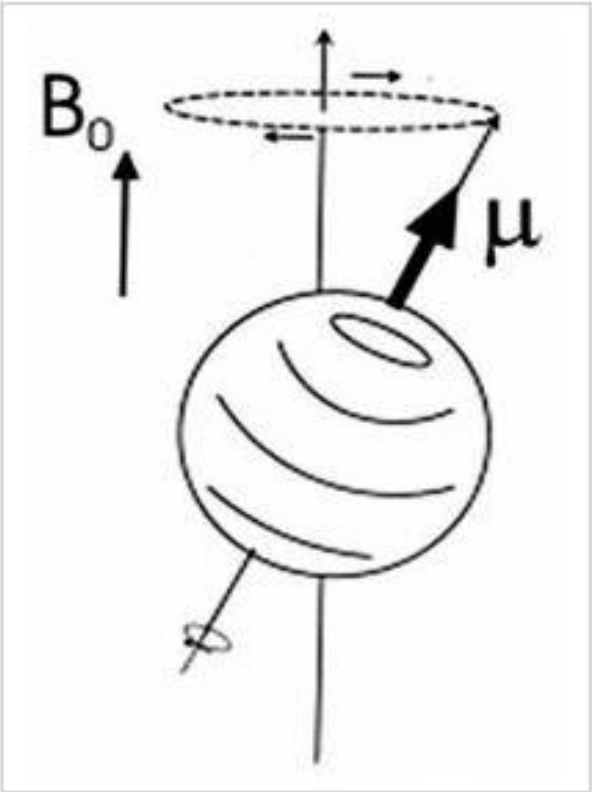
В данной работе исследовался перовскит $H_2La_2Ti_3O_{10}$, в межслоевом пространстве которого находится водород.



$H_2La_2Ti_3O_{10}$

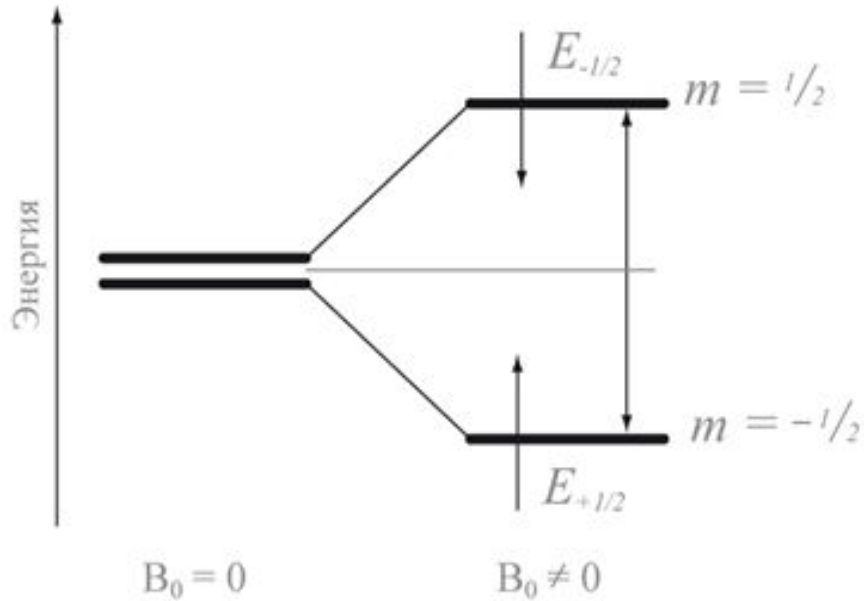
Целью данной работы является исследование подвижности водорода в $H_2La_2Ti_3O_{10}$

Информацию о подвижности водорода можно получить из метода Ядерного Магнитного Резонанса (ЯМР), а именно из анализа температурной зависимости времени спин-решеточной релаксации (T_1) протонов (^1H).



В случае, когда спин ядра $\mathrm{I} \neq 0$, ядро обладает магнитным моментом. Для ядра ^{1}H спин ядра равен $\frac{1}{2}$.

При помещении образца в магнитное поле B_0, энергетический уровень ядер со спином $\frac{1}{2}$ расщепляется на два с разными ориентациями спинов (по полю и против поля).



Разница энергии между этими уровнями:

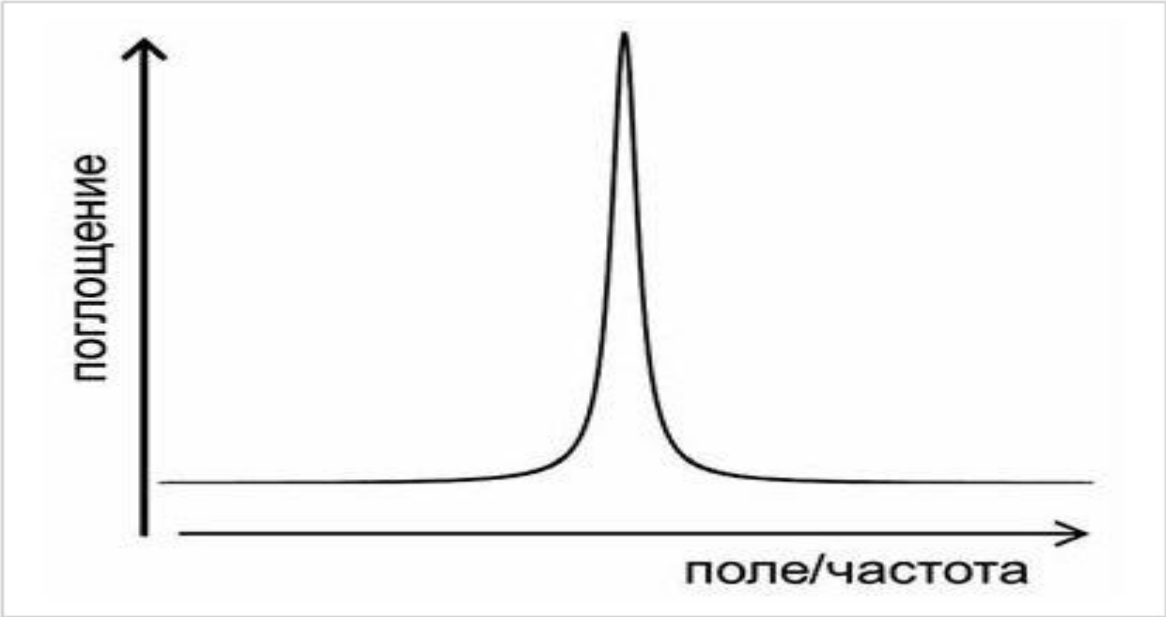
$$\Delta\omega = \gamma B_0$$

где γ-гиромагнитное отношение (отношение магнитного момента к механическому).

Если на эту систему подействовать радиоимпульсом с частотой равной разности энергий ($\omega_0 = \gamma B_0$), то ядра, находящиеся на более низком уровне получат достаточно энергии, чтобы перейти на верхний.

В итоге все ядра будут иметь одинаково направленный спин.

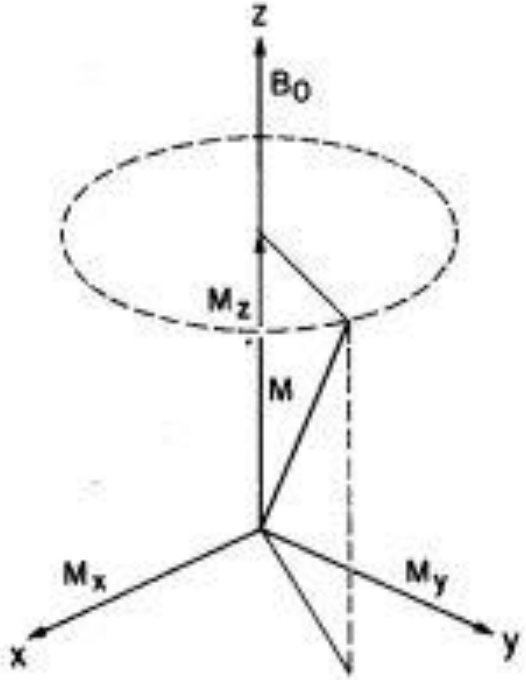
Это синхронное поглощение энергии ансамблем ядерных магнитных моментов носит название Ядерный Магнитный Резонанс.



Время спин-решеточной релаксации

После воздействия радиоимпульсом, вектор макроскопической намагниченности *M* отклоняется от направления оси Z (внешнего поля B_0) и начинает прецессировать вокруг нее, постепенно возвращаясь к своему равновесному значению M_0.
Изменение продольной компоненты вектора намагниченности M_z описывается формулой

$$M_z = M_0\left(1 - e^{\frac{-t}{T_1}}\right)$$



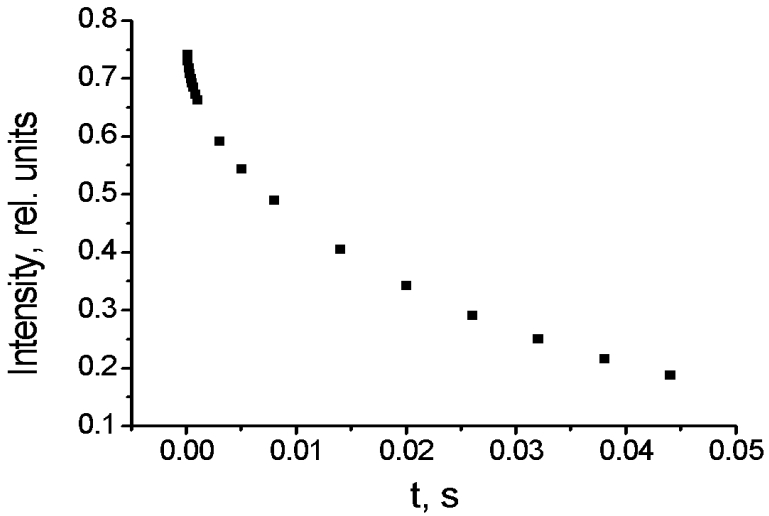
Время T_1, за которое устанавливается равновесное значение продольной компоненты макроскопической намагниченности, называют временем спин-решеточной релаксации.

Оно характеризует систему и дает информацию о подвижности ^{1}H.

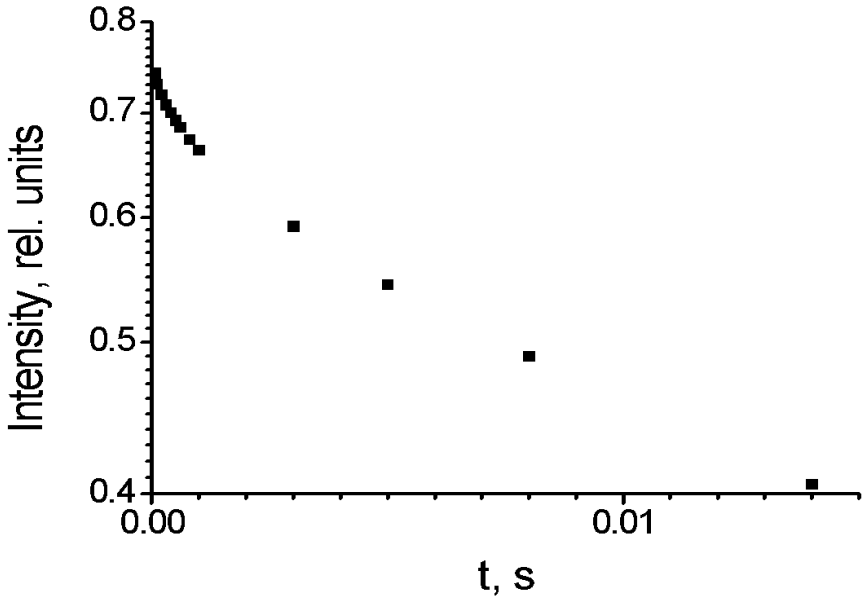
Порядок обработки данных

Измерения времени спин-решеточной релаксации ядер ^{1}H были выполнены в РЦ СПбГУ «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники» на ЯМР-спектрометре Bruker AVANCE IIITM 400 МГц, в температурном диапазоне 130 - 293 К.

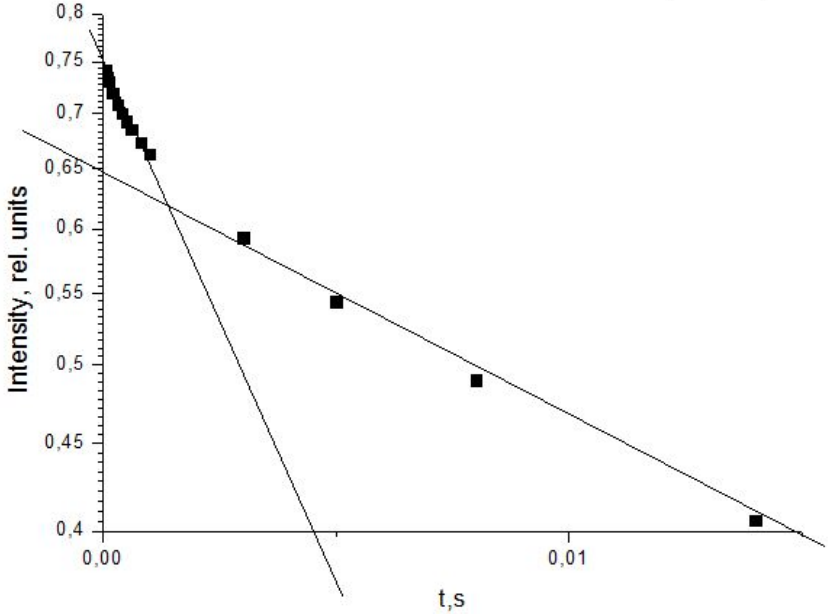
Исходные данные: зависимости величины компоненты макроскопической намагниченности от времени.



Поскольку необходима качественная аппроксимация, перейдем в полулогарифмический масштаб.



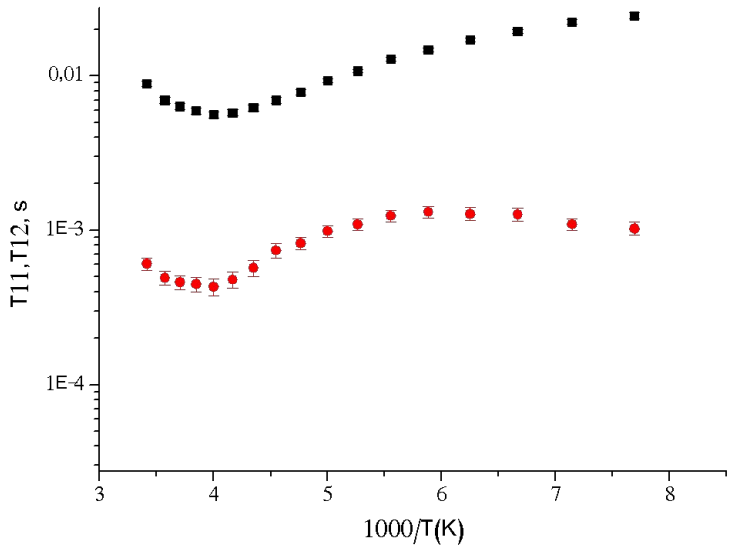
На графике нанесены линии, которые дают понять, что, т.к. все точки графика располагаются вблизи двух прямых, стоит производить аппроксимацию двумя экспонентами.

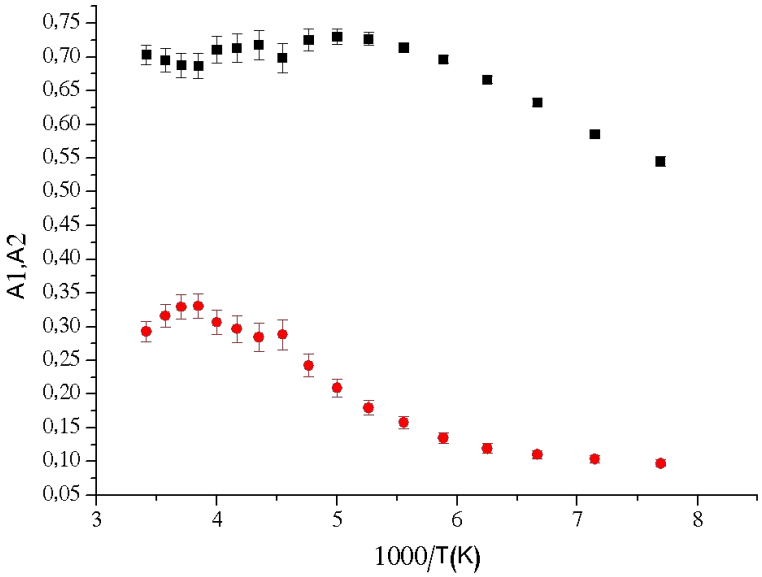


После аппроксимации двумя экспонентами по формуле:

$$y = A_1 e^{\frac{-x}{T_{1,1}}} + A_2 e^{\frac{-x}{T_{1,2}}} + y_0$$

Получаем значения A_1, A_2, T_1, T_2. Значения T_1, T_2-компоненты времени спин-решеточной релаксации, A_1, A_2-их вклады. Используя полученные значения строим графики температурной зависимости спин-решеточной релаксации и амплитуды компонент времен с изображением погрешностей измерений.





Из анализа полученной температурной зависимости можно получить параметры, характеризующие подвижность водорода:

1) энергию активации (величину потенциального барьера, который нужно преодолеть частице при движении в периодическом потенциале)
2) частоту корреляции (частота перескоков частиц)

Заключение

- В программном пакете Origin выполнена обработка полученных в РЦ СПбГУ данных для восстановления сигнала продольной намагниченности ядер ^{1}H в $H_2La_2Ti_3O_{10}$.

- Получено, что в исследуемом температурном диапазоне 130 - 293 К система характеризуется двумя временами T1, различающимися на порядок.

- В следующем семестре планируется выполнить обработку температурной зависимости и определить параметры подвижности водорода в исследуемой системе, а также провести обработку спектров ЯМР

Список литературы

- Чижик В.И.. Практикум по магнитному резонансу, Издательство С.-Петербургского университета, 2003
- Levitt M.. Spin Dynamics – Basics of Nuclear Magnetic Resonance , 2000
- Алексей Крушельницкий. Десять основных фактов о ядерном магнитном резонансе, 2013