

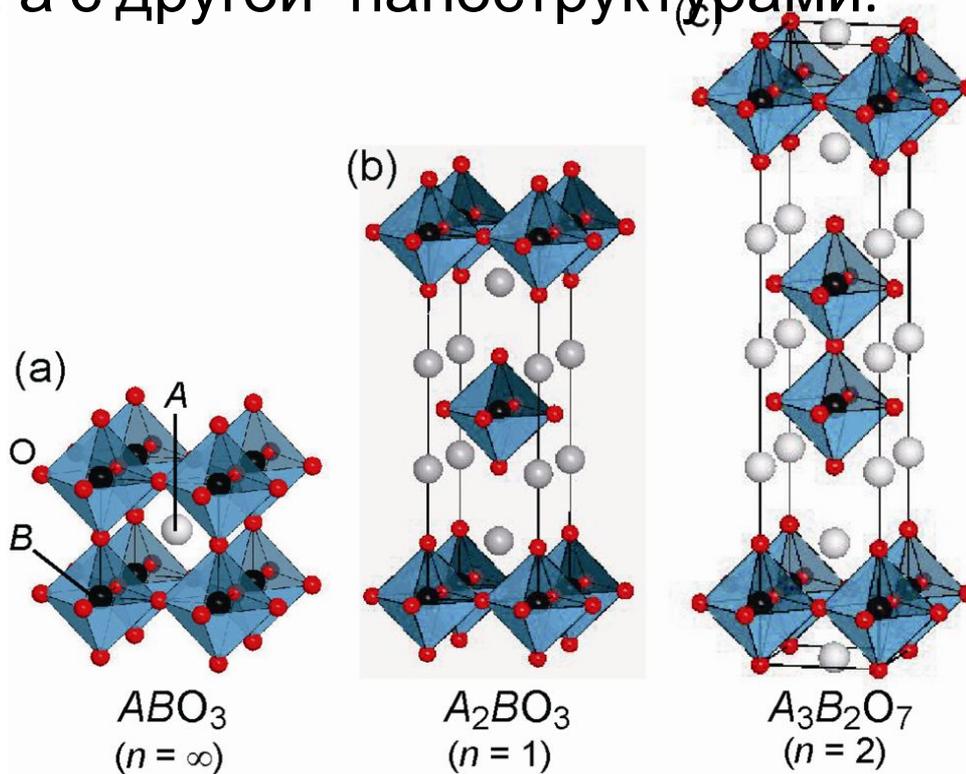
Температурная зависимость времени спин-решеточной релаксации протонов в



Выполнил: Костромин Артем Владимирович
Научный руководитель: Шеляпина Марина
Германовна

Объект исследования

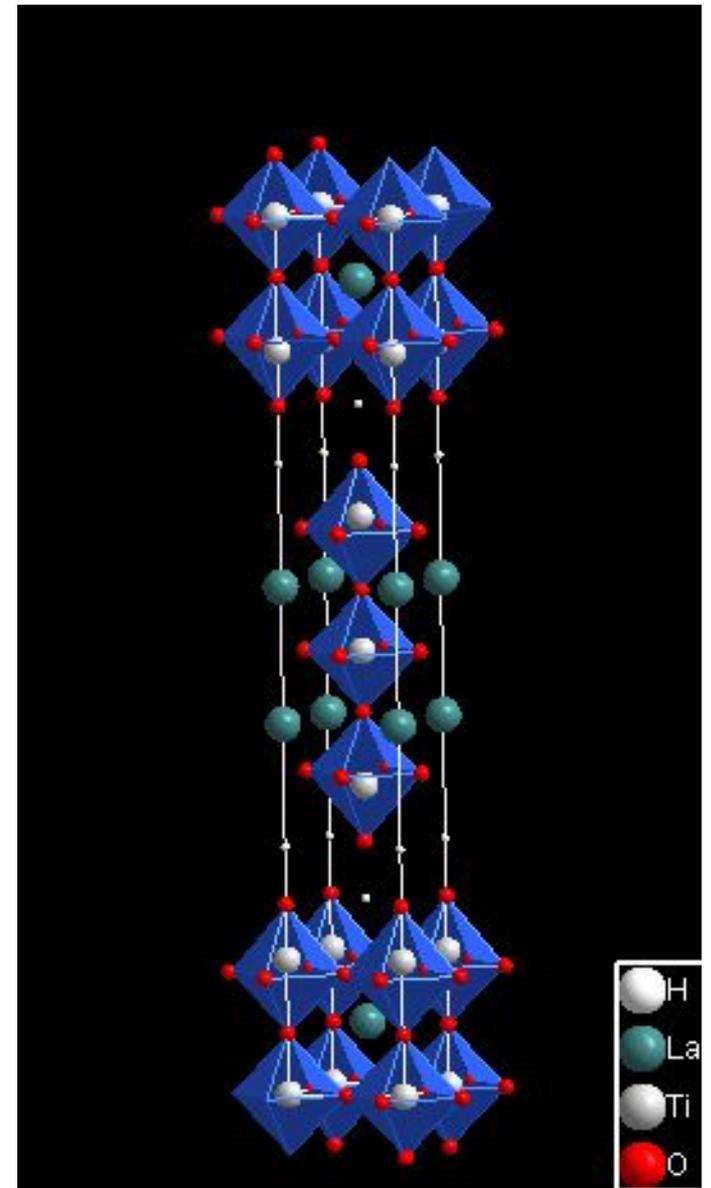
Слоистые перовскитоподобные структуры с одной стороны являются трехмерными упорядоченными объектами, а с другой- наноструктурами.



Для слоистых перовскитоподобных структур характерно:

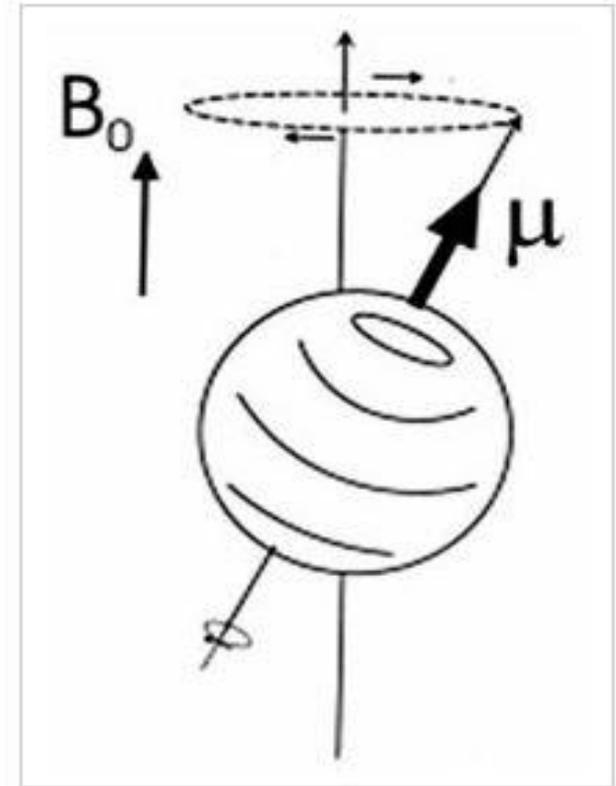
- Высокая подвижность катионов в межслоевом пространстве
- Возможность встраивания в межслоевое пространство различных атомов и молекул, как, например, H_2O

В данной работе **исследовался** перовскит $\text{H}_2\text{La}_2\text{Ti}_3\text{O}_{10}$, в межслоевом пространстве которого находится водород.



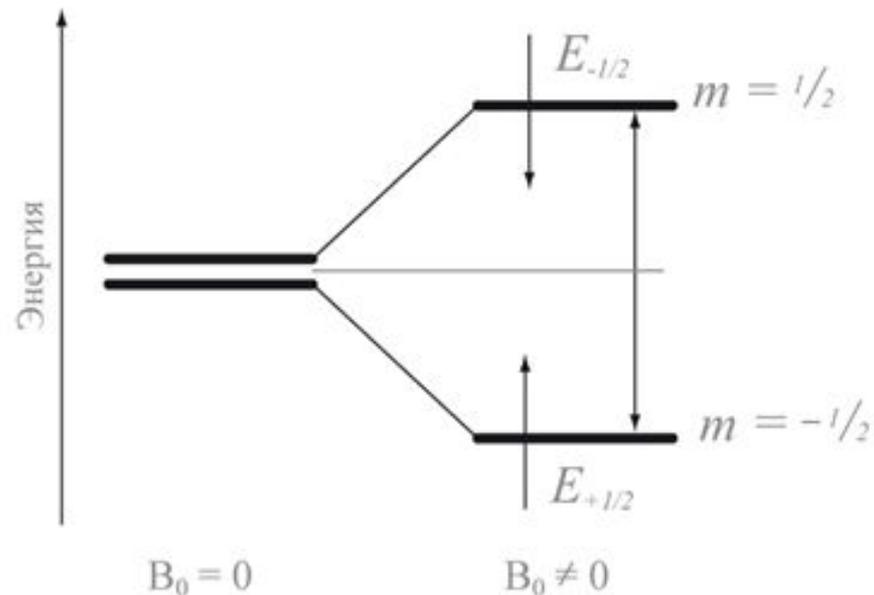
Целью данной работы является исследование подвижности водорода в $\text{H}_2\text{La}_2\text{Ti}_3\text{O}_{10}$

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 $I \neq 0$, ядро обладает магнитным моментом. Для ядра ${}^1\text{H}$ 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:

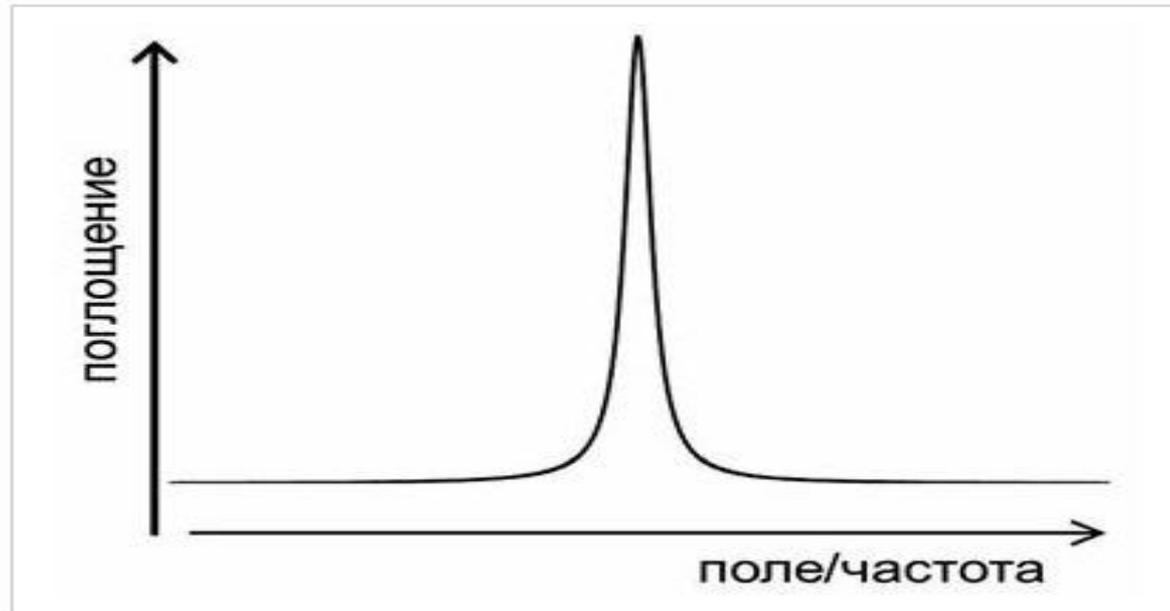
$$\Delta\omega = \gamma B_0$$

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.

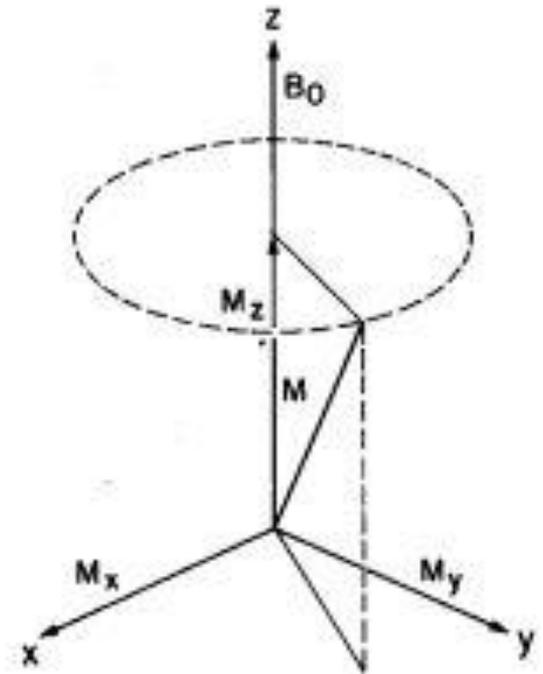


Время спин-решеточной релаксации

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.

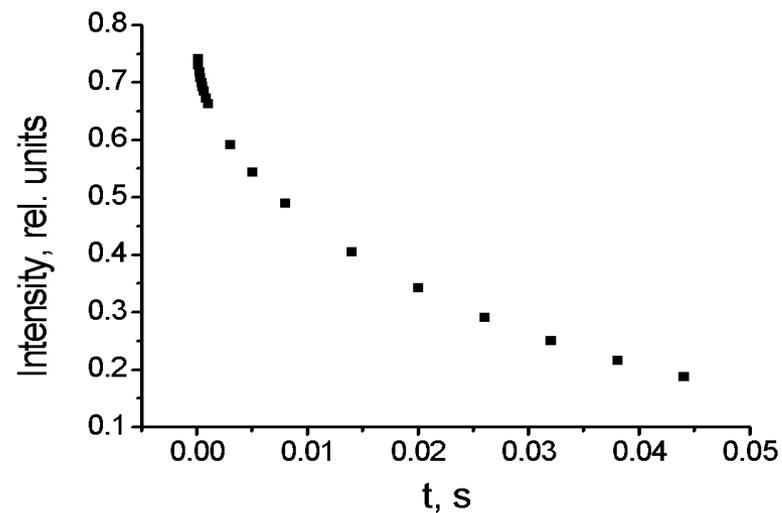
Оно характеризует систему и дает информацию о подвижности ^1H .

Порядок обработки данных

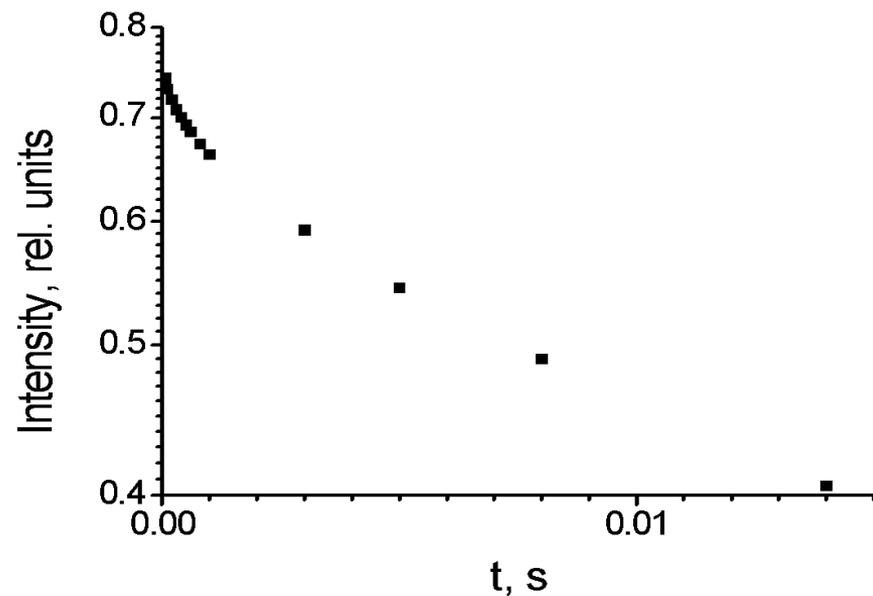
Измерения времени спин-решеточной релаксации ядер ^1H были выполнены в РЦ СПбГУ «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и наноэлектроники» на ЯМР-спектрометре Bruker AVANCE III TM 400 МГц, в температурном диапазоне 130 - 293 К.



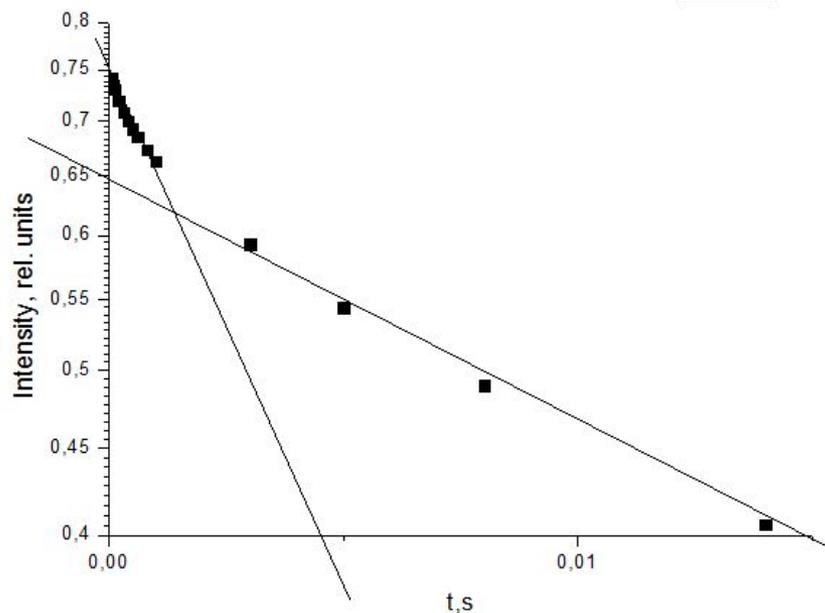
Исходные данные: зависимости
величины компоненты
макроскопической намагниченности
от времени.



Поскольку необходима
качественная аппроксимация,
перейдем в полулогарифмический
масштаб.



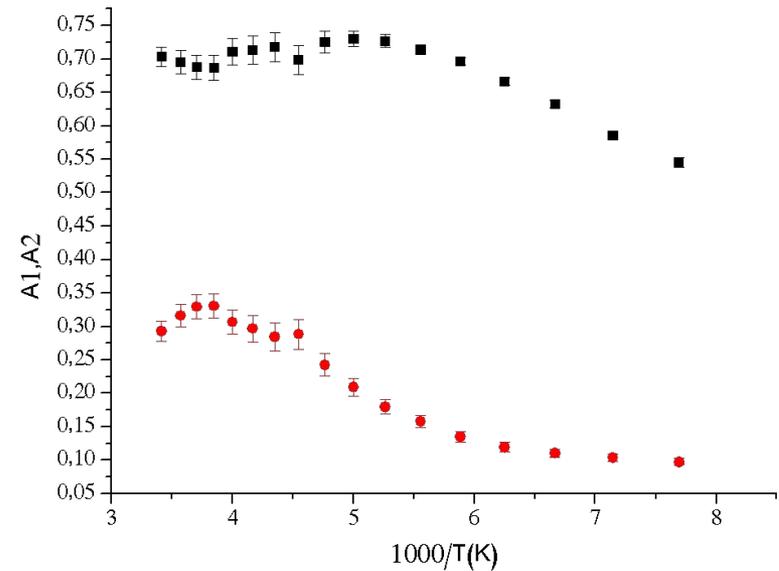
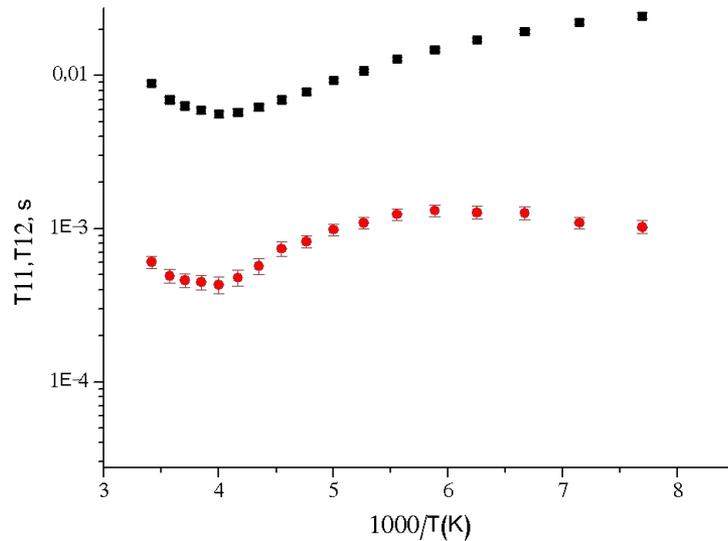
На графике нанесены линии, которые дают понять, что, т.к. все точки графика располагаются вблизи двух прямых, стоит производить аппроксимацию двумя экспонентами.



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)

Заключени

е

- В программном пакете Origin выполнена обработка полученных в РЦ СПбГУ данных для восстановления сигнала продольной намагниченности ядер ^1H в $\text{H}_2\text{La}_2\text{Ti}_3\text{O}_{10}$.
- 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