

Nuklearna magnetska rezonancija u kalijevom tantalatu

NMR u KTO

Uvod

Plan za danas

Kalijev tantalat

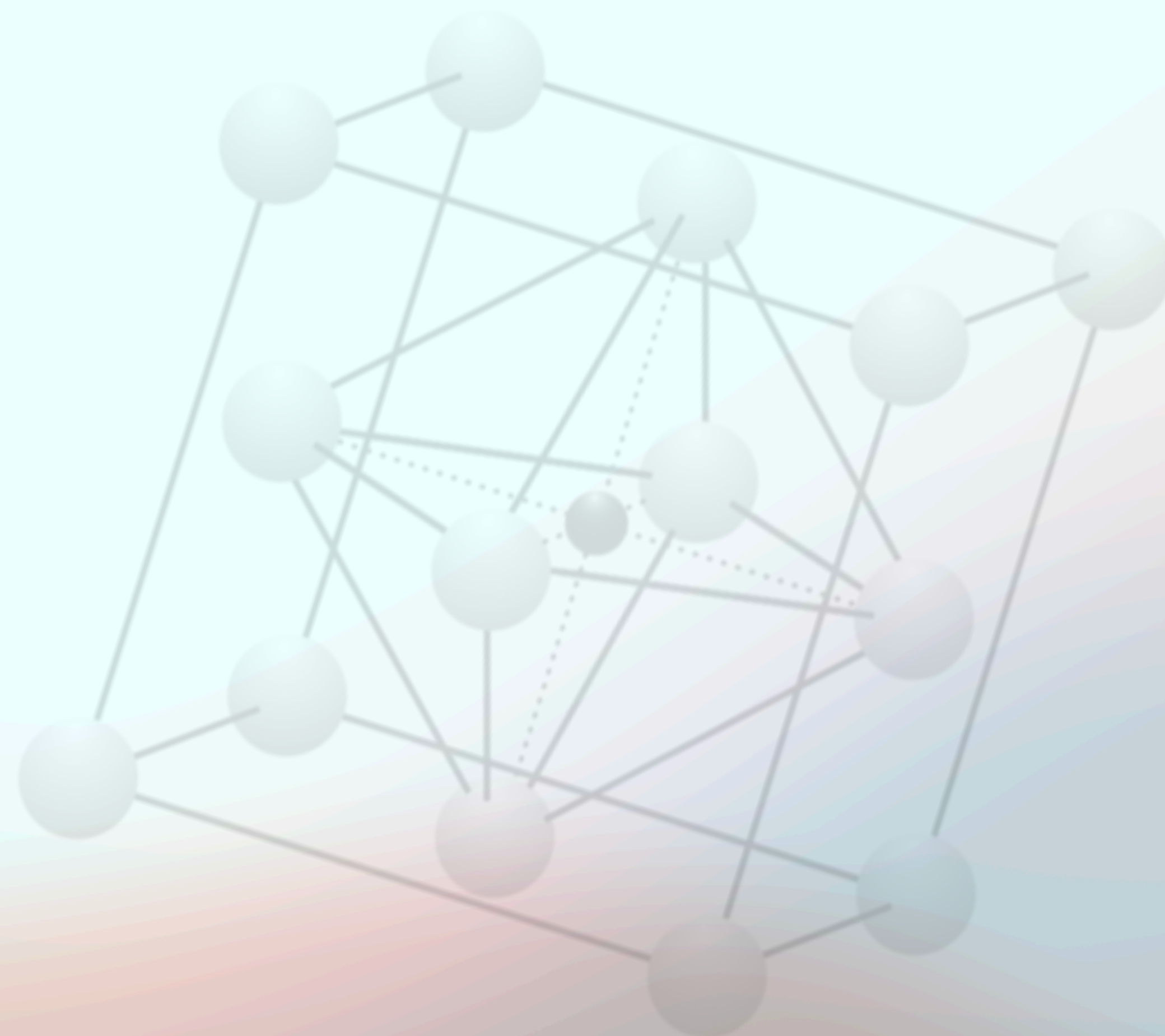
Deformacije u kristalima

Nuklearna magnetska rezonancija

Numerika i rezultati

Zaključak

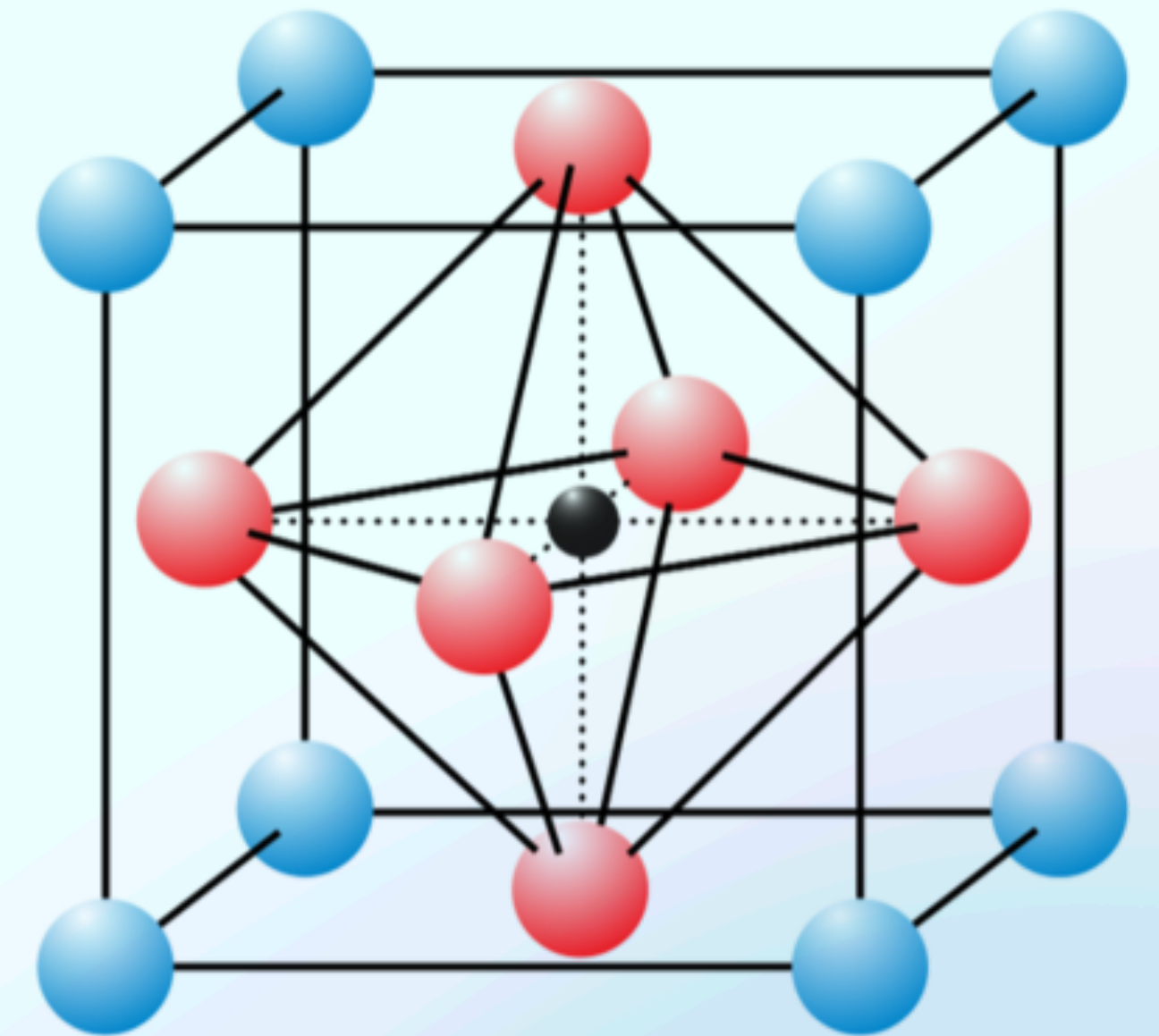
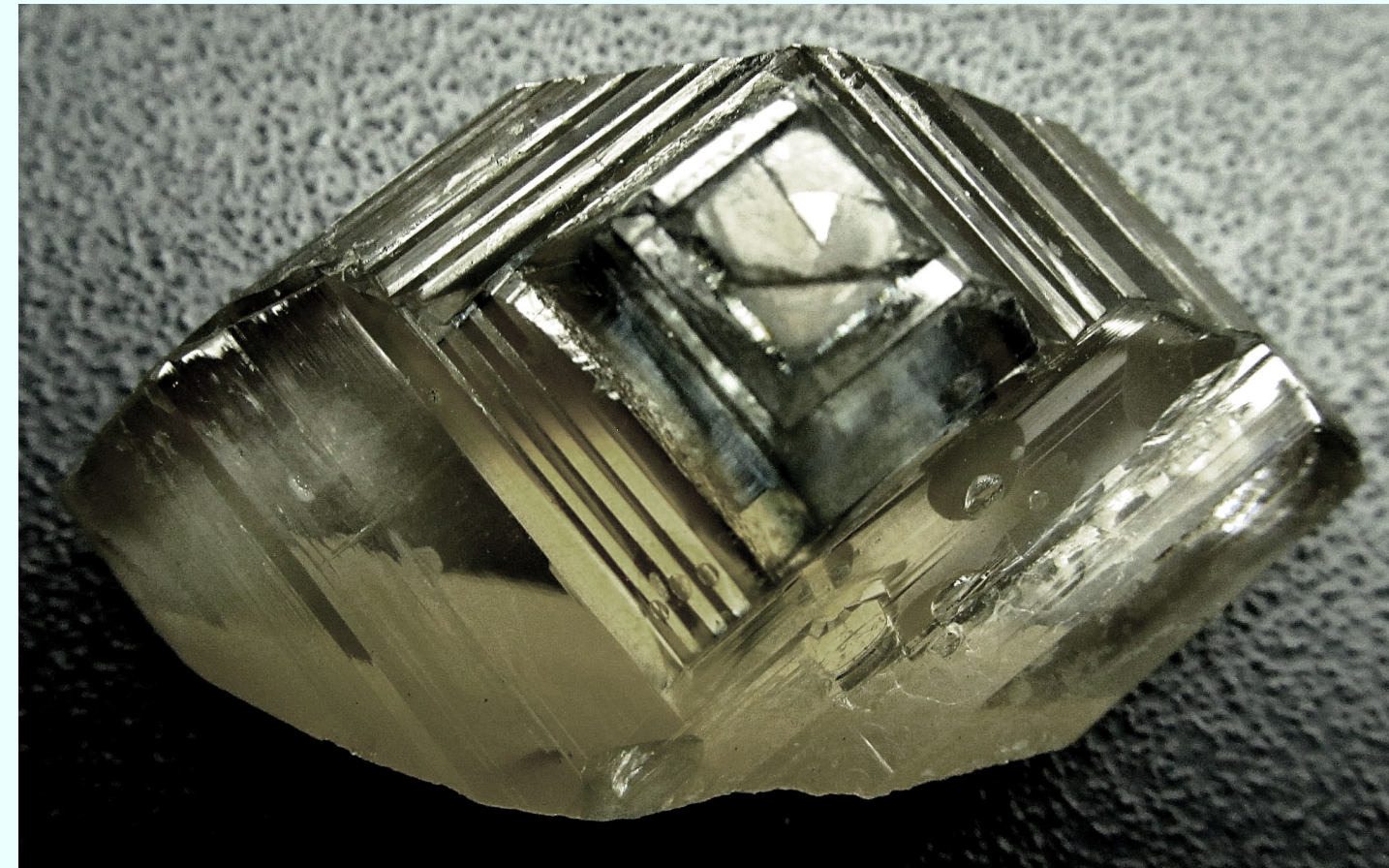
Kalijev tantalat KTaO_3



Kalijev tantalat

STRUKTURA

- Kristalinična keramika
- Perovskit
- Visoka čistoća



Kalijev tantalat

STRUKTURA I SVOJSTVA

- Kristalinična keramika
- Perovskit
- Visoka čistoća
- Tantal - jezgra spina 7/2
- Supravodič II. vrste

1 I. A.	2 II. A.											13 III. A.	14 IV. A.	15 V. A.	16 VI. A.	17 VII. A.	18 VIII. A.												
1 1,008* H hidrogén												5 10,81* B bór	6 12,01* C szén	7 14,01* N nitrogén	8 16,00* O oxigén	9 19,00 F fluor	10 20,18 Ne neon												
3 6,94* Li lítium	4 9,012 Be berillium											13 26,98 Al alumínium	14 28,09* Si szilícium	15 30,97 P foszfor	16 32,06* S kén	17 35,45* Cl klór	18 39,95 Ar argon												
11 22,99 Na nátrium	12 24,31* Mg magnézium	3 III. B.	4 IV. B.	5 V. B.	6 VI. B.	7 VII. B.	8 VIII. B.	9 VIII. B.	10 VIII. B.	11 I. B.	12 II. B.	19 39,10 K kárium	20 40,08 Ca kalcium	21 44,96 Sc szkandium	22 47,87 Ti titán	23 50,94 V vanádium	24 52,00 Cr króm	25 54,94 Mn mangán	26 55,85 Fe vas	27 58,93 Co kobalt	28 58,69 Ni nikkel	29 63,55 Cu réz	30 65,38* Zn cink	31 69,72 Ga gallium	32 72,63 Ge germánium	33 74,92 As arzén	34 78,97* Se szelén	35 79,90* Br bróm	36 83,80 Kr kripton
37 85,47 Rb rubídium	38 87,62 Sr stroncium	39 88,91 Y ittrium	40 91,22 Zr cirkónium	41 92,91 Nb nióbium	42 95,95* Mo molibdén	43 [98] Tc technécium	44 101,1 Ru ruténium	45 102,9 Rh ródium	46 106,4 Pd palládium	47 107,9 Ag ezüst	48 112,4 Cd kadmium	49 114,8 In indium	50 118,7 Sn ón	51 121,8 Sb antimon	52 127,6 Te tellúr	53 126,9 I jód	54 131,3 Xe xenon												
55 132,9 Cs cézium	56 137,3 Ba bárium	57-71 f	72 180,9 Hf hafnium	73 180,9 Ta tantál	74 183,8 W volfrám	75 186,2 Re rénium	76 190,2 Os ozmium	77 192,2 Ir irídium	78 195,1 Pt platina	79 197,0 Au arany	80 200,6 Hg higany	81 204,4* Tl tallium	82 207,2 Pb ólom	83 209,0 Bi bizmut	84 [209] Po polónium	85 [210] At asztácium	86 [222] Rn radon												
87 [223] Fr francium	88 [226] Ra rádium	89-103 f	104 [267] Rf radzerfordium	105 [268] Db dubnium	106 [269] Sg sziborgium	107 [270] Bh borium	108 [277] Hs hasszium	109 [278] Mt meitnerium	110 [281] Ds darmstadtium	111 [282] Rg röntgenium	112 [285] Cn kopernícium	113 [286] Nh nihonium	114 [289] Fl flerovium	115 [290] Mc moszkovium	116 [293] Lv livemorium	117 [294] Ts tennesszin	118 [294] Og oganeszson												
				57 138,9 La lantán	58 140,1 Ce cérium	59 140,9 Pr praezodímium	60 144,2 Nd neodímium	61 [145] Pm prométium	62 150,4 Sm szamárium	63 152,0 Eu európium	64 157,3 Gd gadolínium	65 158,9 Tb terbium	66 162,5 Dy diszprózium	67 164,9 Ho holmium	68 167,3 Er erbio	69 168,9 Tm túlium	70 173,0 Yb itterbio	71 175,0 Lu lutécium											
				89 [227] Ac aktínium	90 232,0 Th tórium	91 231,0 Pa protaktínium	92 238,0 U urán	93 [237] Np neptúnium	94 [244] Pu plutónium	95 [243] Am amerícium	96 [247] Cm kúrium	97 [247] Bk berkéium	98 [251] Cf kalifornium	99 [252] Es einsteinium	100 [257] Fm fermium	101 [258] Md mendelévium	102 [259] No nobélium	103 [266] Lr laurencium											

*H: [1,00784, 1,00811]
Li: [6,938, 6,997]
B: [10,806, 10,821]
C: [12,0096, 12,0116]
N: [14,00643, 14,00728]
O: [15,99903, 15,99977]
Mg: [24,304, 24,307]
Si: [26,084, 26,086]
S: [32,059, 32,076]
Cl: [35,446, 35,457]
Br: [79,901, 79,907]
Ti: [204,382, 204,385]
Zn: 65,38(2)
Se: 78,96(3)
Mo: 95,96(2)

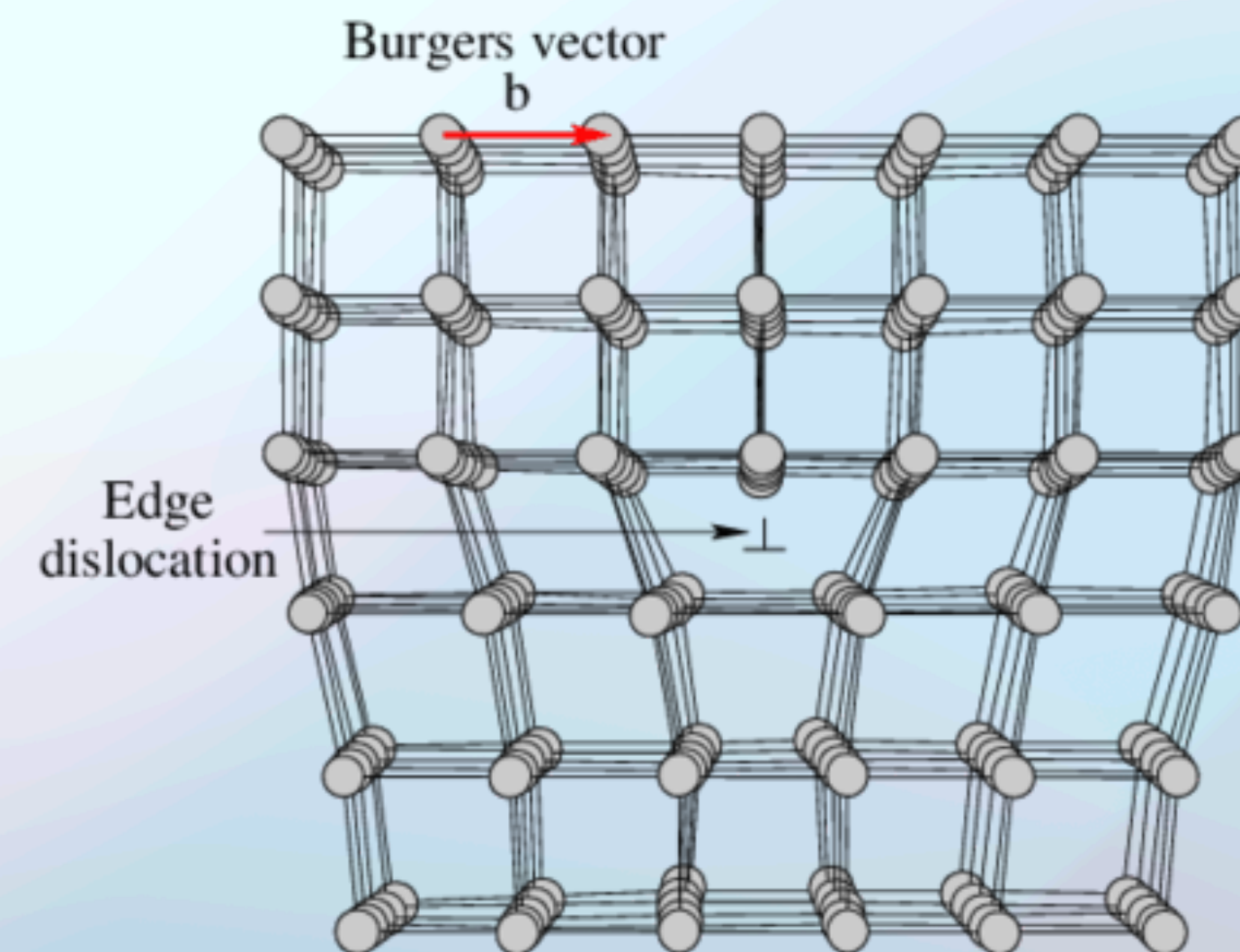
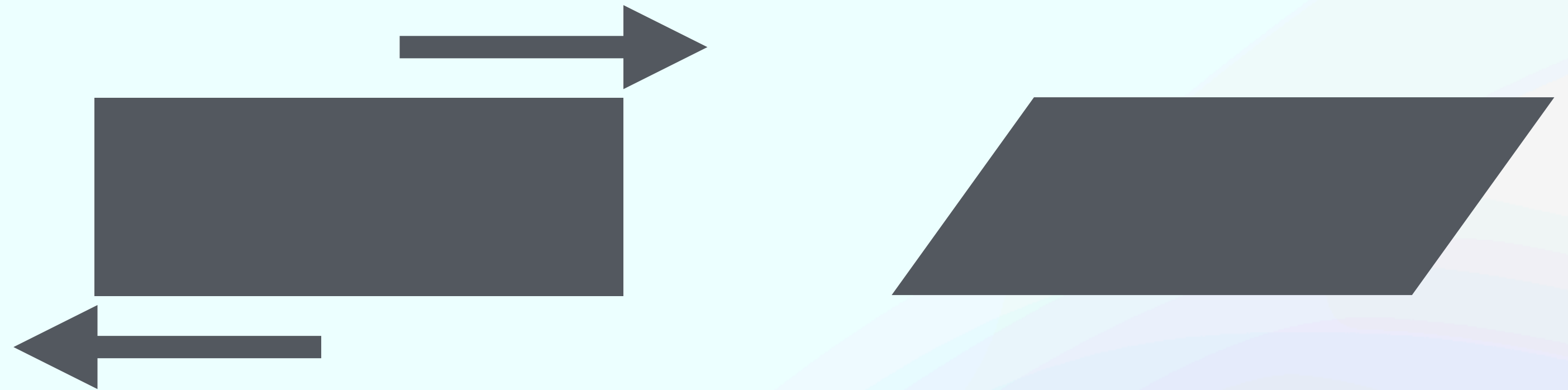
Deformacije u kristalima



Deformacije u kristalima

SMICANJE

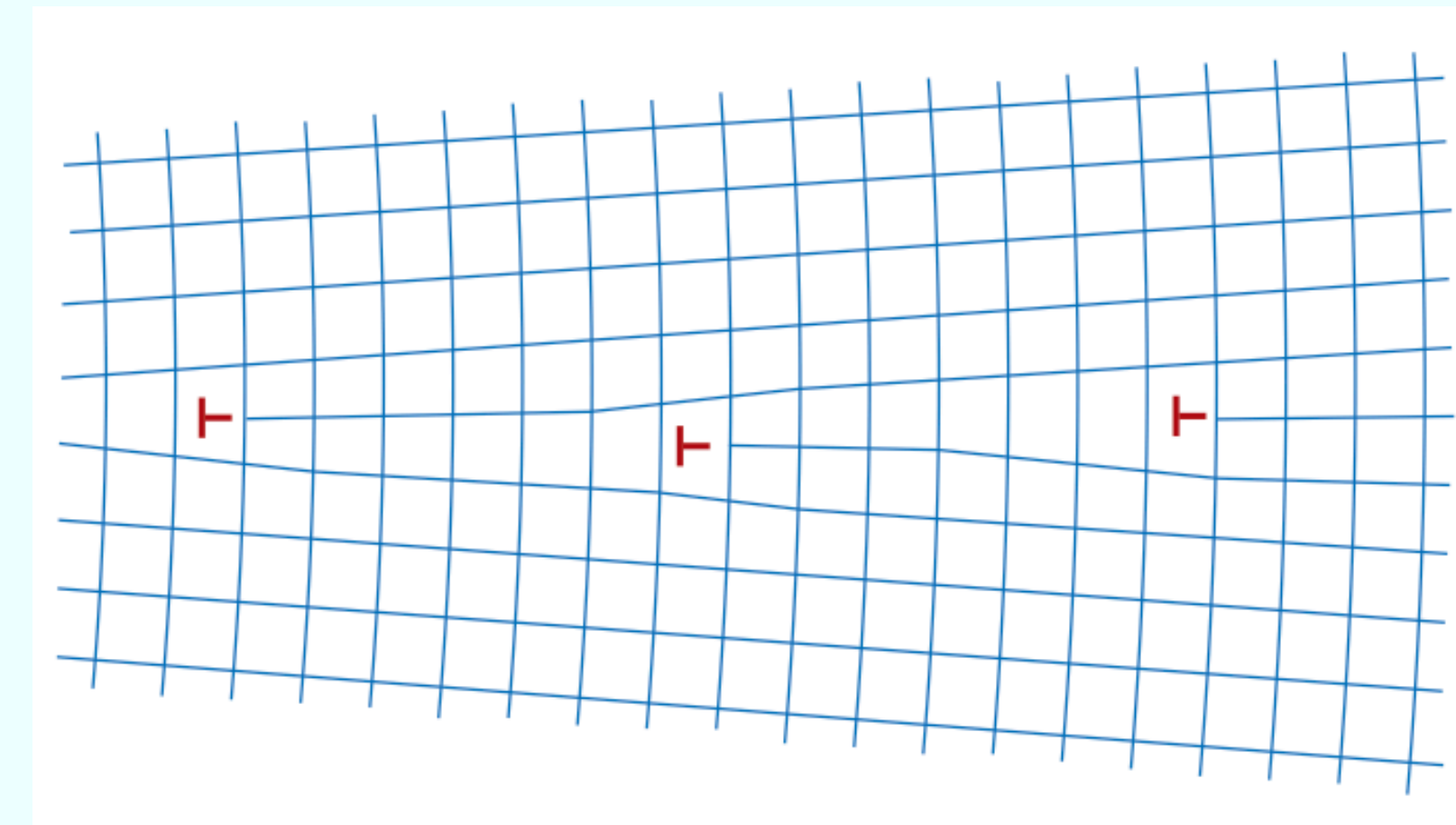
- Pomicanje slojeva
- Plastično ili elastično
- Neporavnati atomi u kristalnoj rešetki



Dislokacije

MEHANIZAM NASTAJANJA DEFORMACIJA

- Linearni ili jednodimenzionalni defekti
- Postoje i u nedeformiranim kristalima
- Preraspodjela dislokacija - **dislokacijski zidovi**

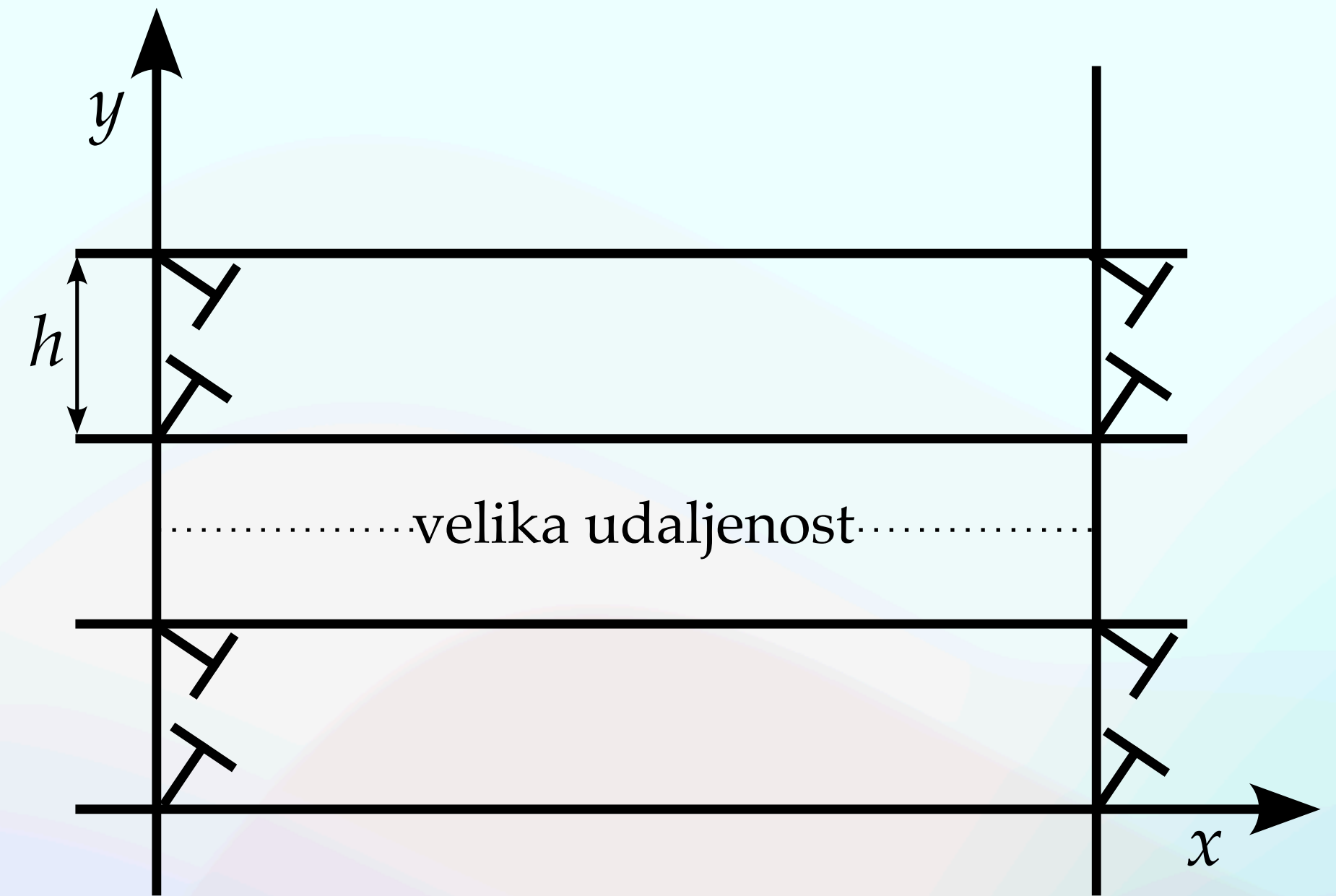


Polje naprezanja

KVANTITATIVNI OPIS

MAKROSKOPSKIH DEFORMACIJA

- Tenzor ranga 2
- Dislokacijski zid u yz ravnini



$$\varepsilon_{xx} \approx \frac{b_0}{4(1-\sigma)h} \left[2 \sin \left(\frac{2\pi y}{h} \right) \left(1 - 2\sigma + 4\pi \frac{x}{h} \right) e^{-2\pi \frac{x}{h}} + 4\pi\sigma \sin \left(\frac{\pi y}{h} \right) \frac{x}{h} e^{-\pi \frac{x}{h}} \right]$$

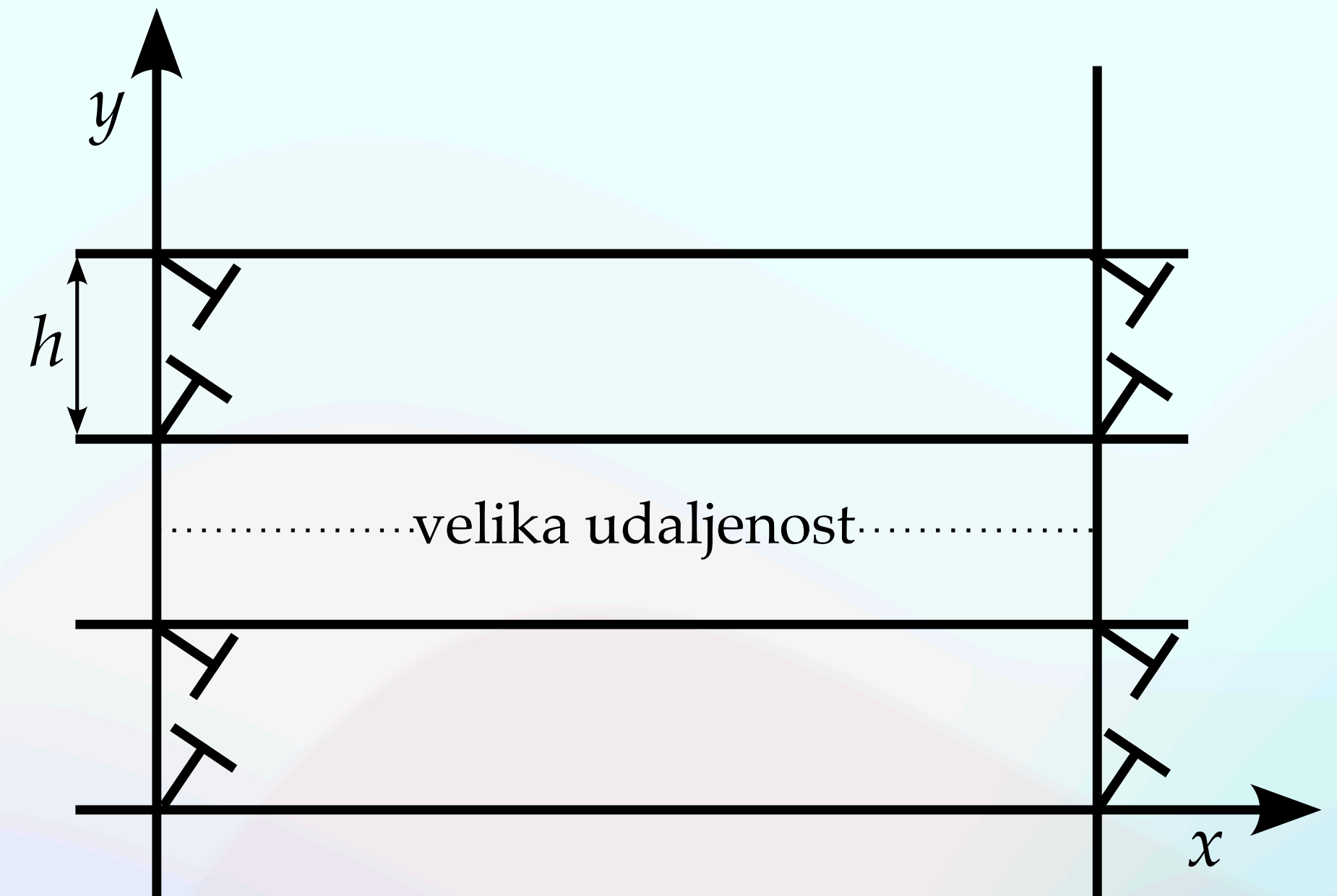
$$\varepsilon_{yy} \approx \frac{b_0}{4(1-\sigma)h} \left[2 \sin \left(\frac{2\pi y}{h} \right) \left(1 + 2\sigma - 4\pi \frac{x}{h} \right) e^{-2\pi \frac{x}{h}} + 4\pi \sin \left(\frac{\pi y}{h} \right) \frac{x}{h} e^{-\pi \frac{x}{h}} \right]$$

Polje naprezanja

KVANTITATIVNI OPIS

MAKROSKOPSKIH DEFORMACIJA

- Tenzor ranga 2
- Dislokacijski zid u yz ravnini



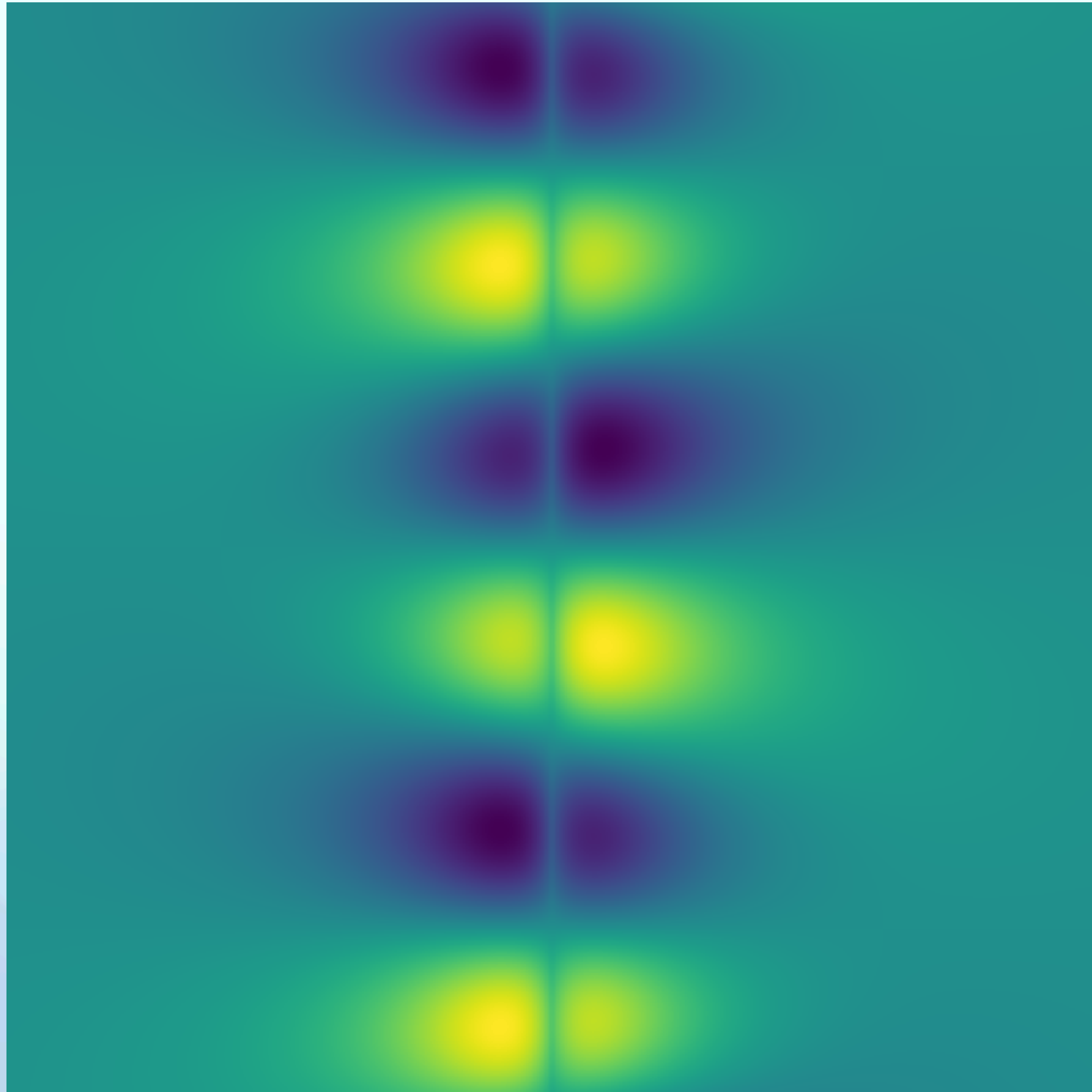
$$\varepsilon_{xx} \approx \frac{b_0}{4(1-\sigma)h} \left[2 \sin\left(\frac{2\pi y}{h}\right) \left(1 - 2\sigma + 4\pi \frac{x}{h}\right) e^{-2\pi \frac{x}{h}} + 4\pi\sigma \sin\left(\frac{\pi y}{h}\right) e^{-\pi \frac{x}{h}} \right]$$

$$\varepsilon_{yy} \approx \frac{b_0}{4(1-\sigma)h} \left[2 \sin\left(\frac{2\pi y}{h}\right) \left(1 + 2\sigma - 4\pi \frac{x}{h}\right) e^{-2\pi \frac{x}{h}} + 4\pi \sin\left(\frac{\pi y}{h}\right) e^{-\pi \frac{x}{h}} \right]$$

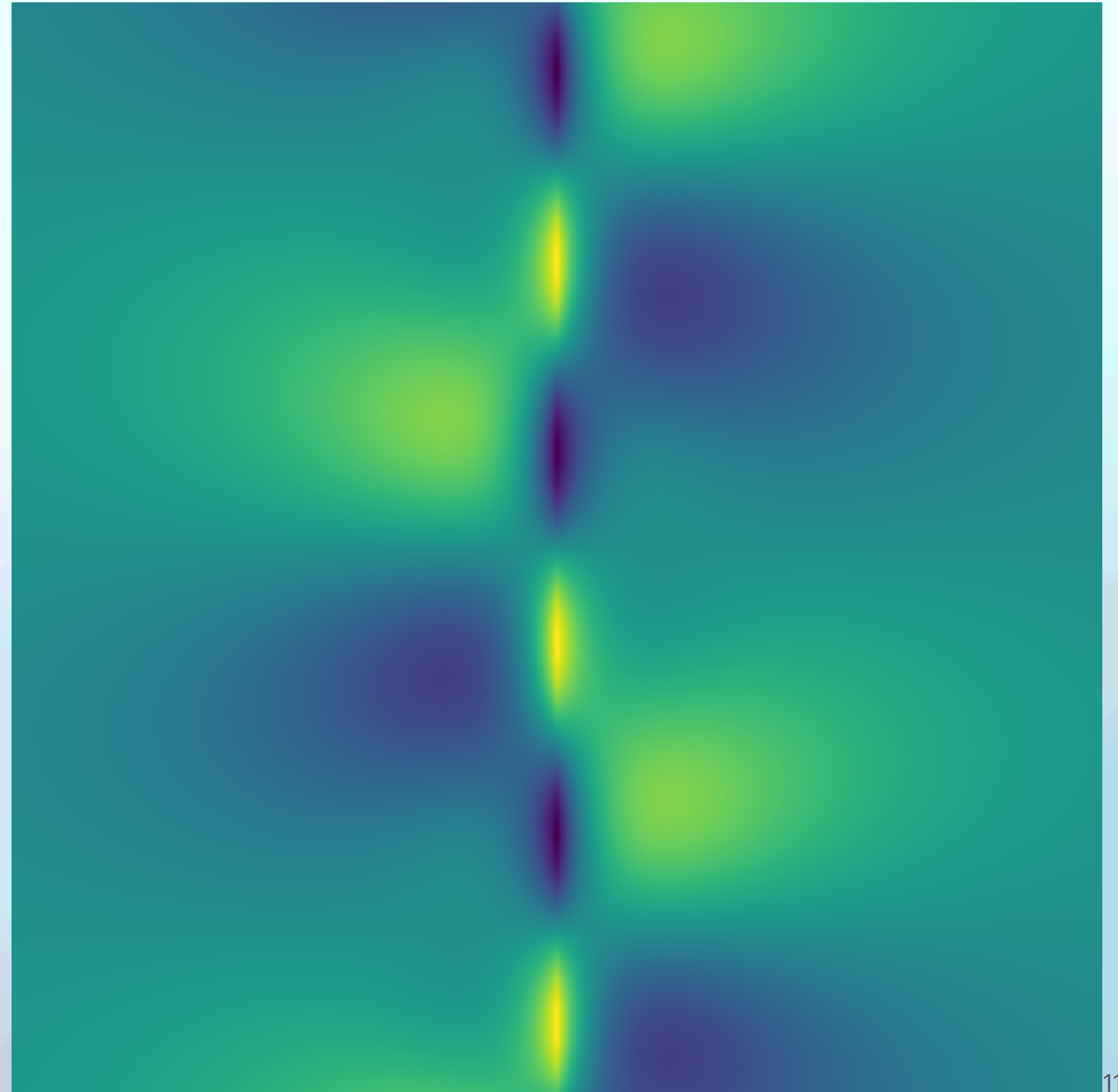
eksponencijalni pad

pad

$$\varepsilon_{xx}(x, y)$$



$$\varepsilon_{yy}(x, y)$$

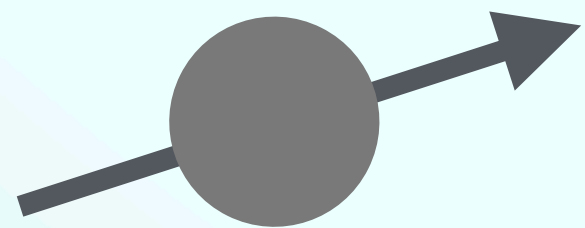


Nuklearna magnetska rezonancija

Osnovni princip

LARMOROVA FREKVENCIJA

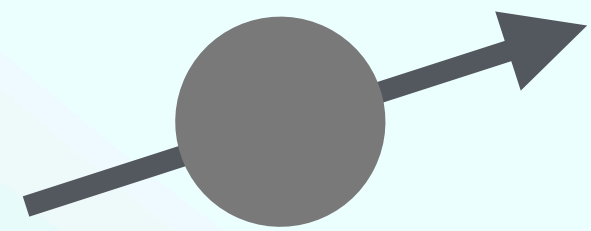
Magnetski moment
jezgre



$$\mu = \gamma \hbar I$$

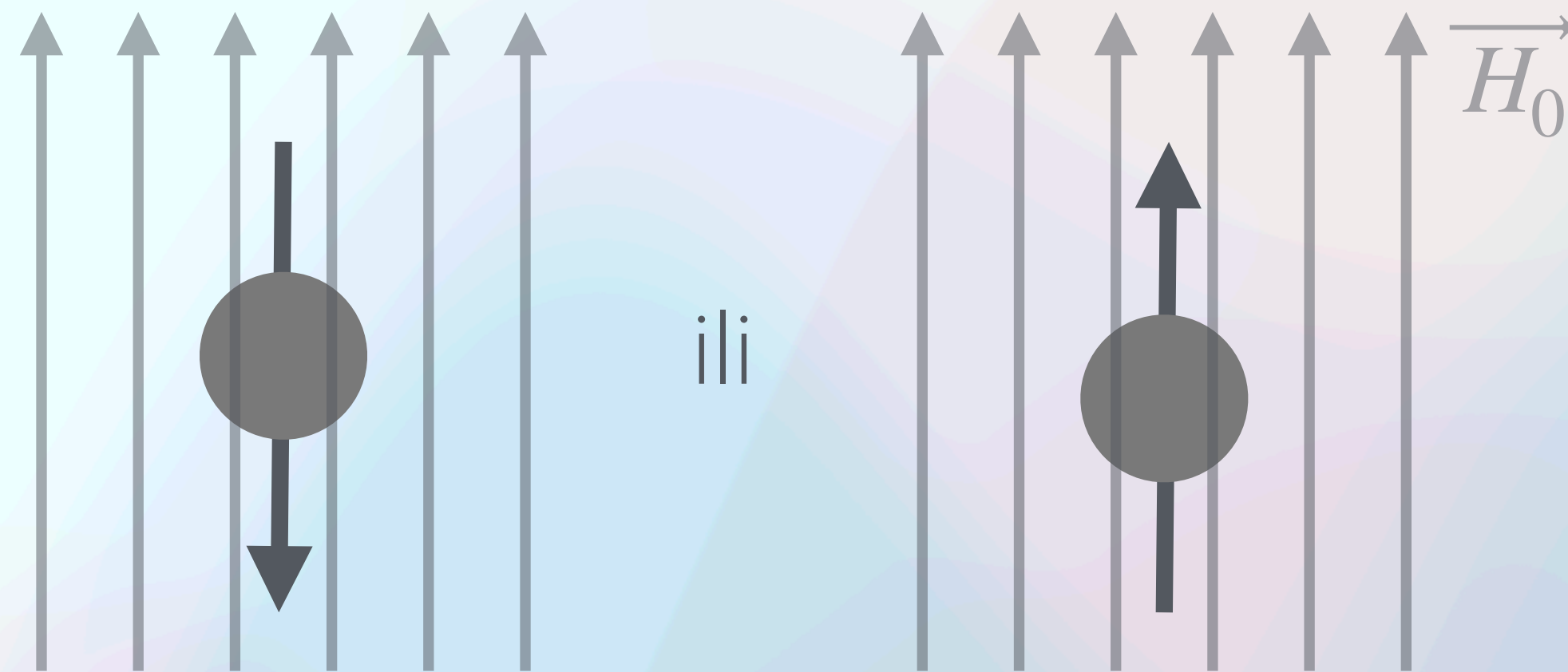
Osnovni princip LARMOROVA FREKVENCIJA

Magnetski moment
jezgre



$$\mu = \gamma \hbar I$$

Uključivanje magnetskog
polja

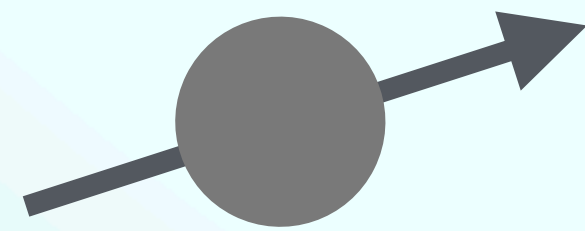


Zeemanovo cijepanje

Osnovni princip

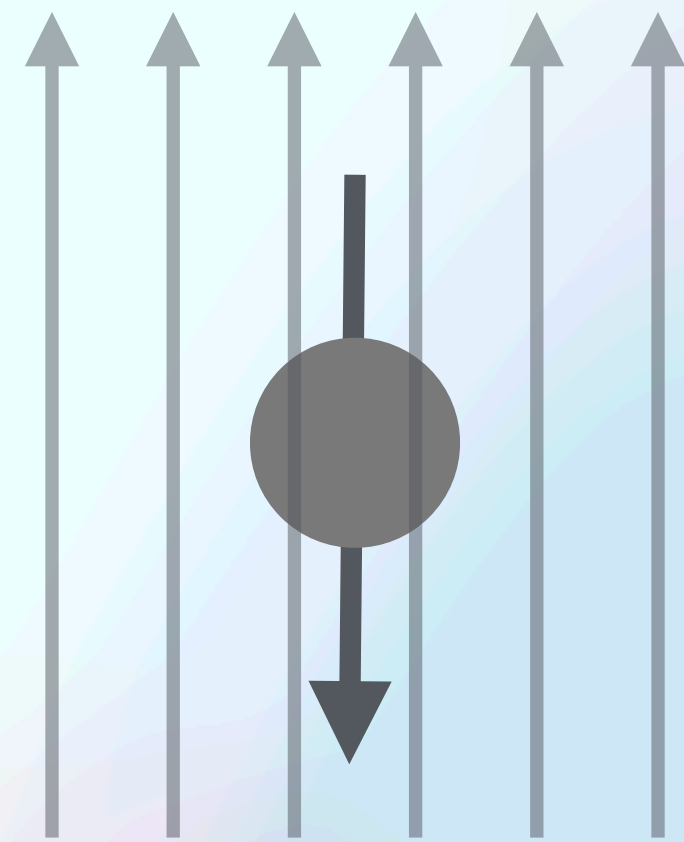
LARMOROVA FREKVENCIJA

Magnetski moment
jezgre

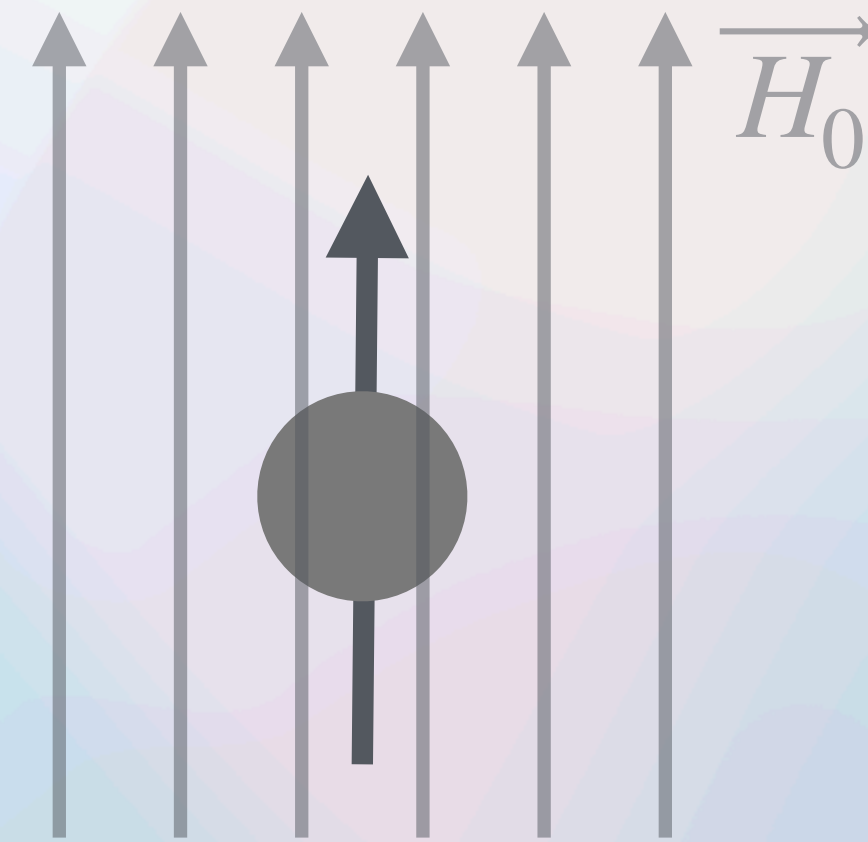


$$\mu = \gamma \hbar I$$

Uključivanje magnetskog
polja

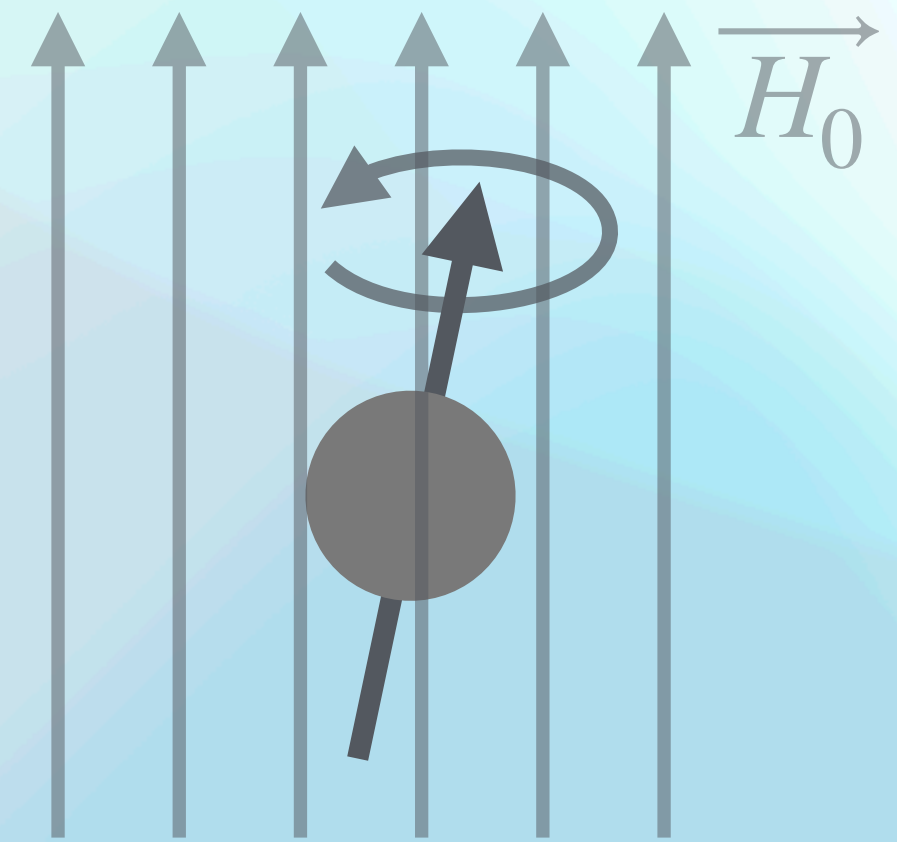


ili



Zeemanovo cijepanje

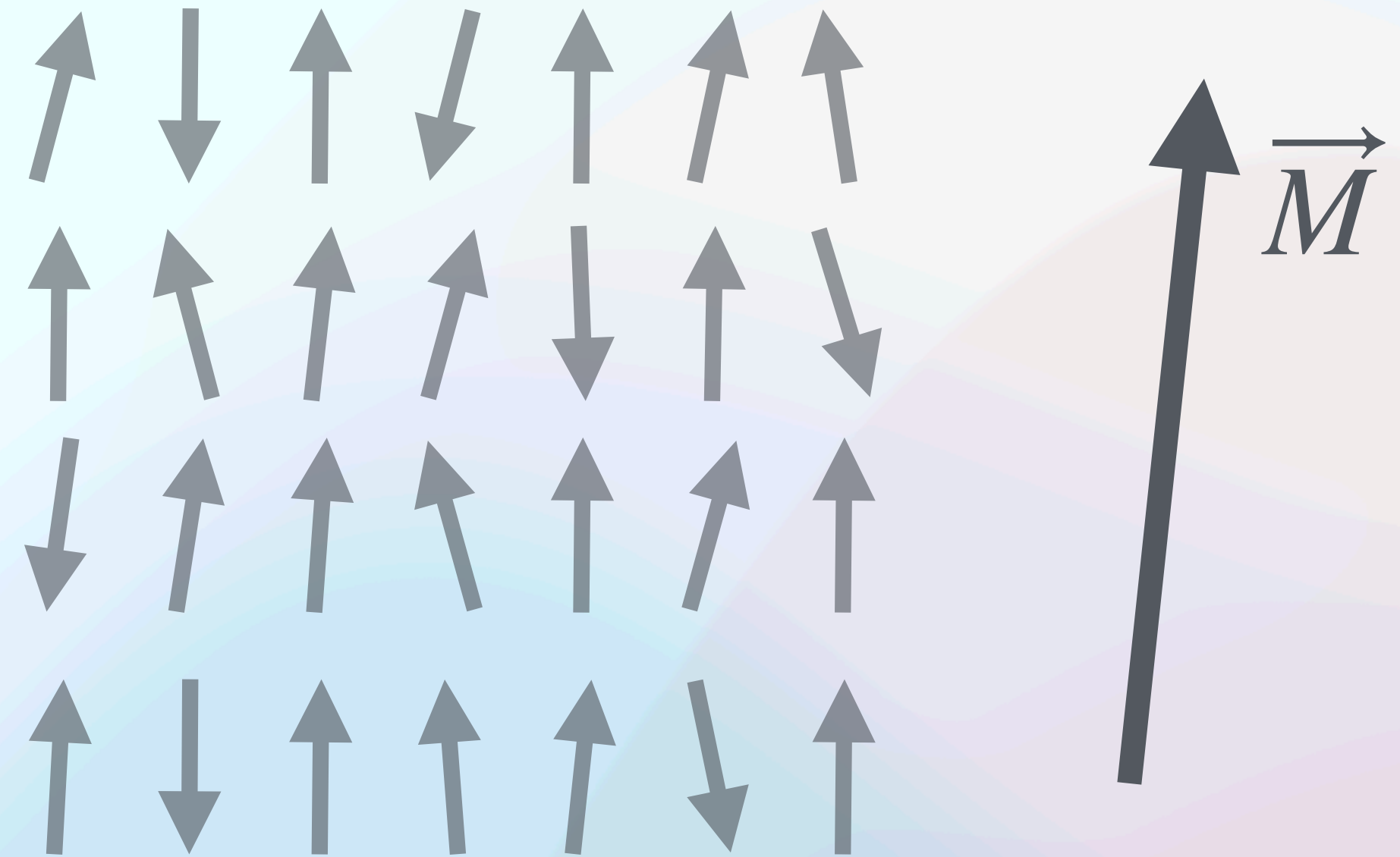
Precesija Larmorovom
frekvencijom



$$\nu_L = \frac{1}{2\pi} \gamma H_0$$

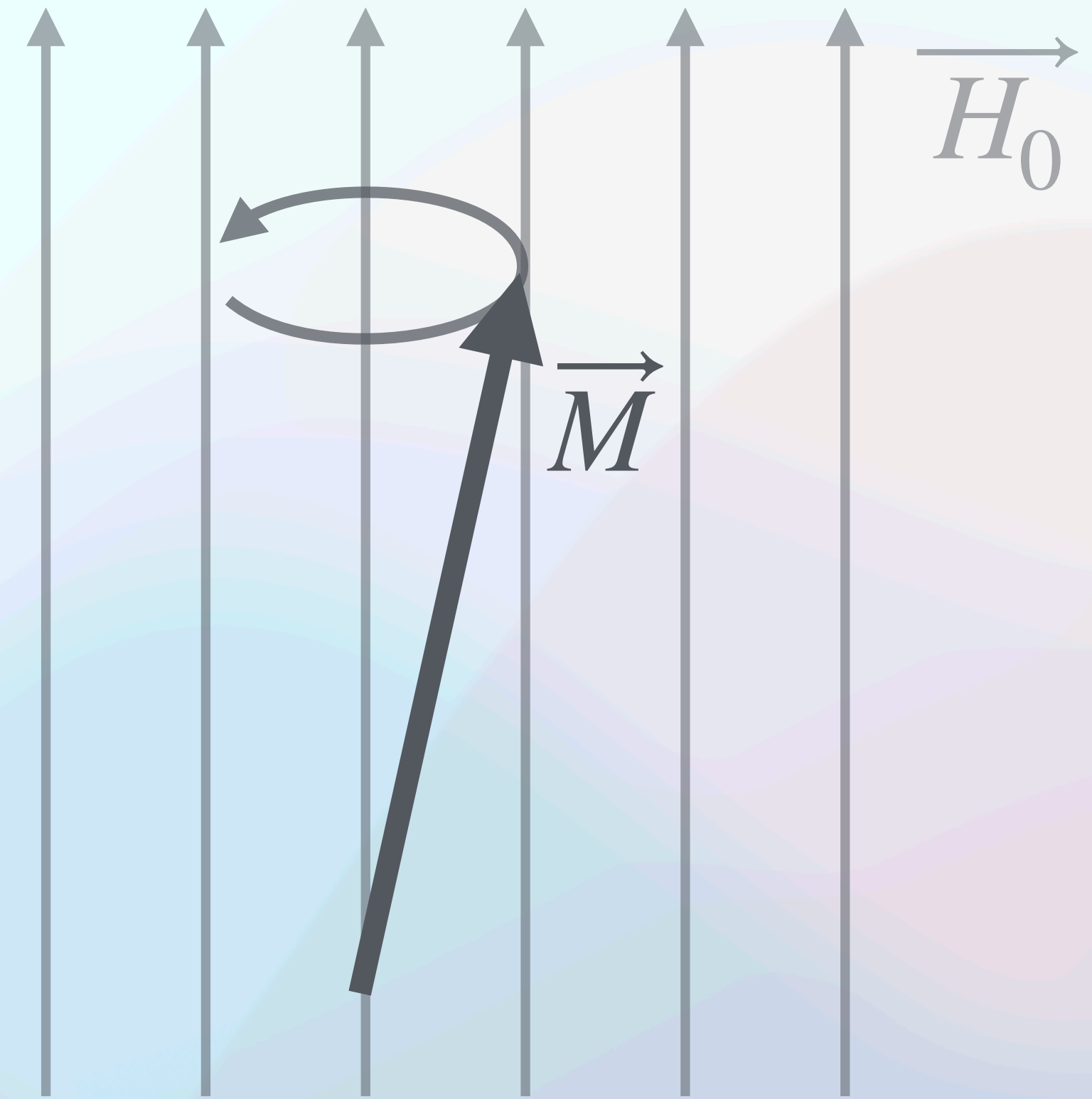
Makroskopska magnetizacija

- Reda 10^{23} nuklearnih spinova
- moguća proizvoljna orijentacija magnetizacije
- Vanjsko magnetsko polje
- termalna ravnoteža



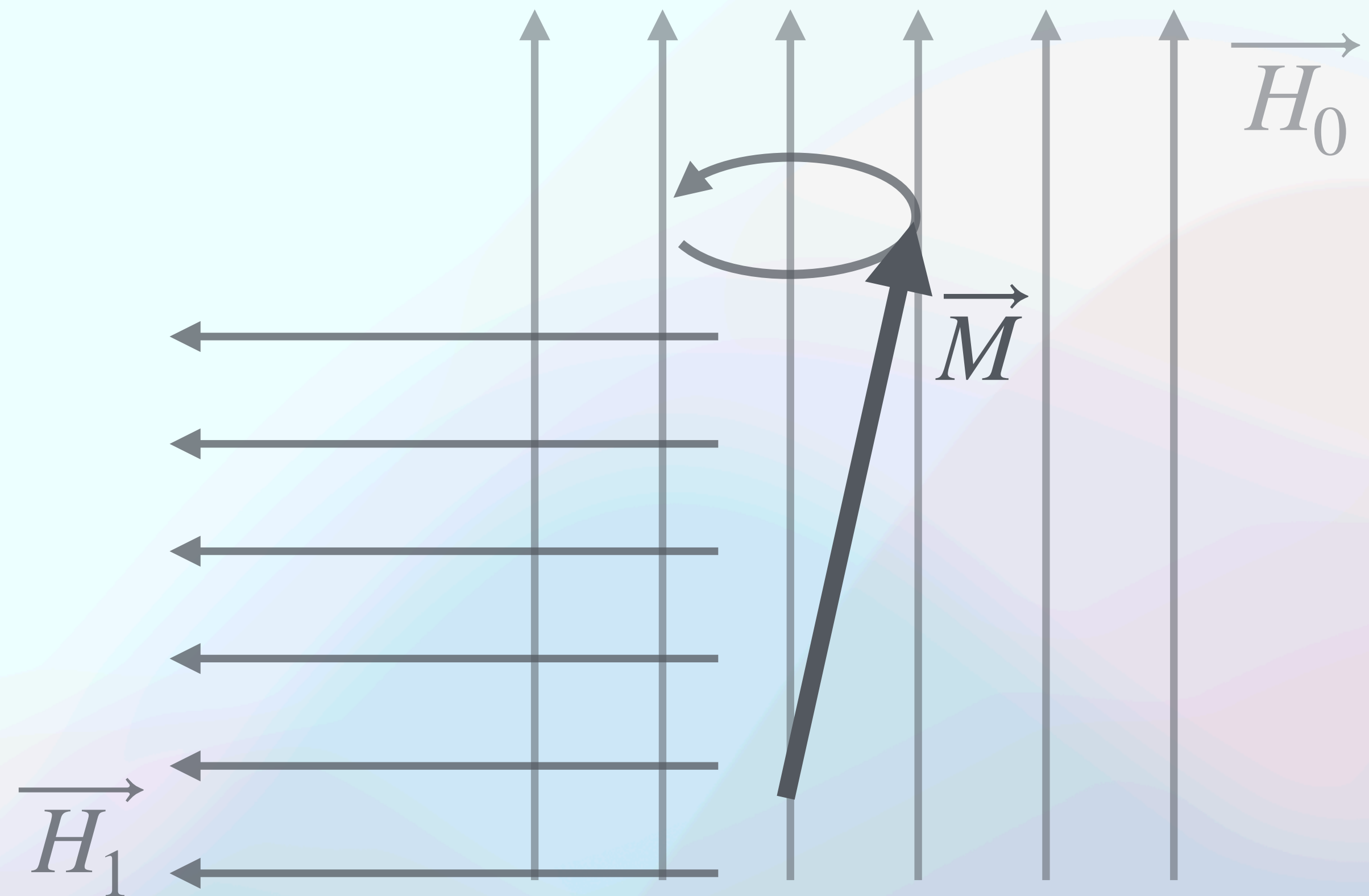
Makroskopska magnetizacija

- Reda 10^{23} nuklearnih spinova
- moguća proizvoljna orijentacija magnetizacije
- Vanjsko magnetsko polje
- termalna ravnoteža
- precesija Larmorovom frekvencijom



Rotacija magnetizacije

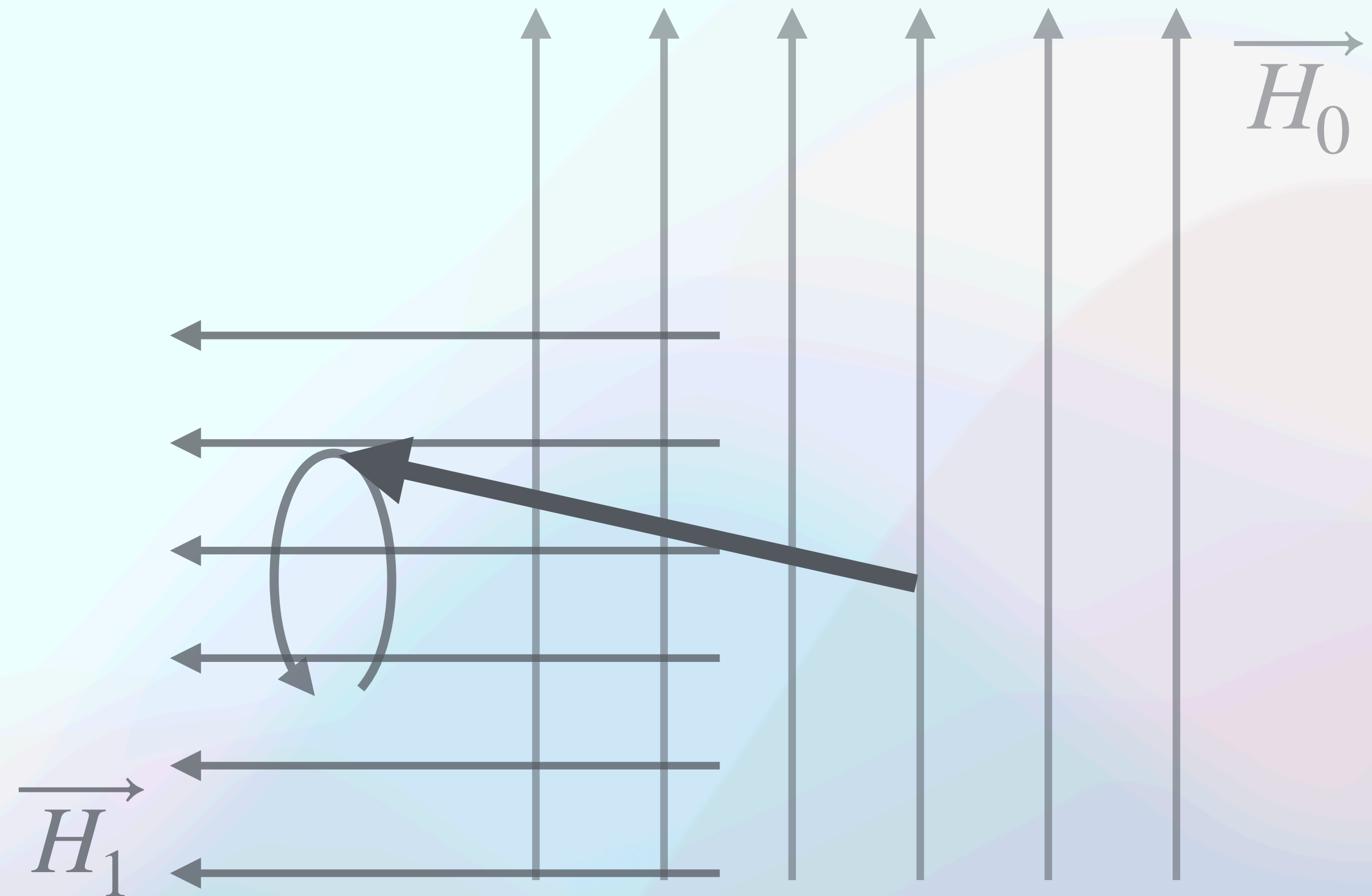
PULSEVI



Rotacija magnetizacije

PULSEVI

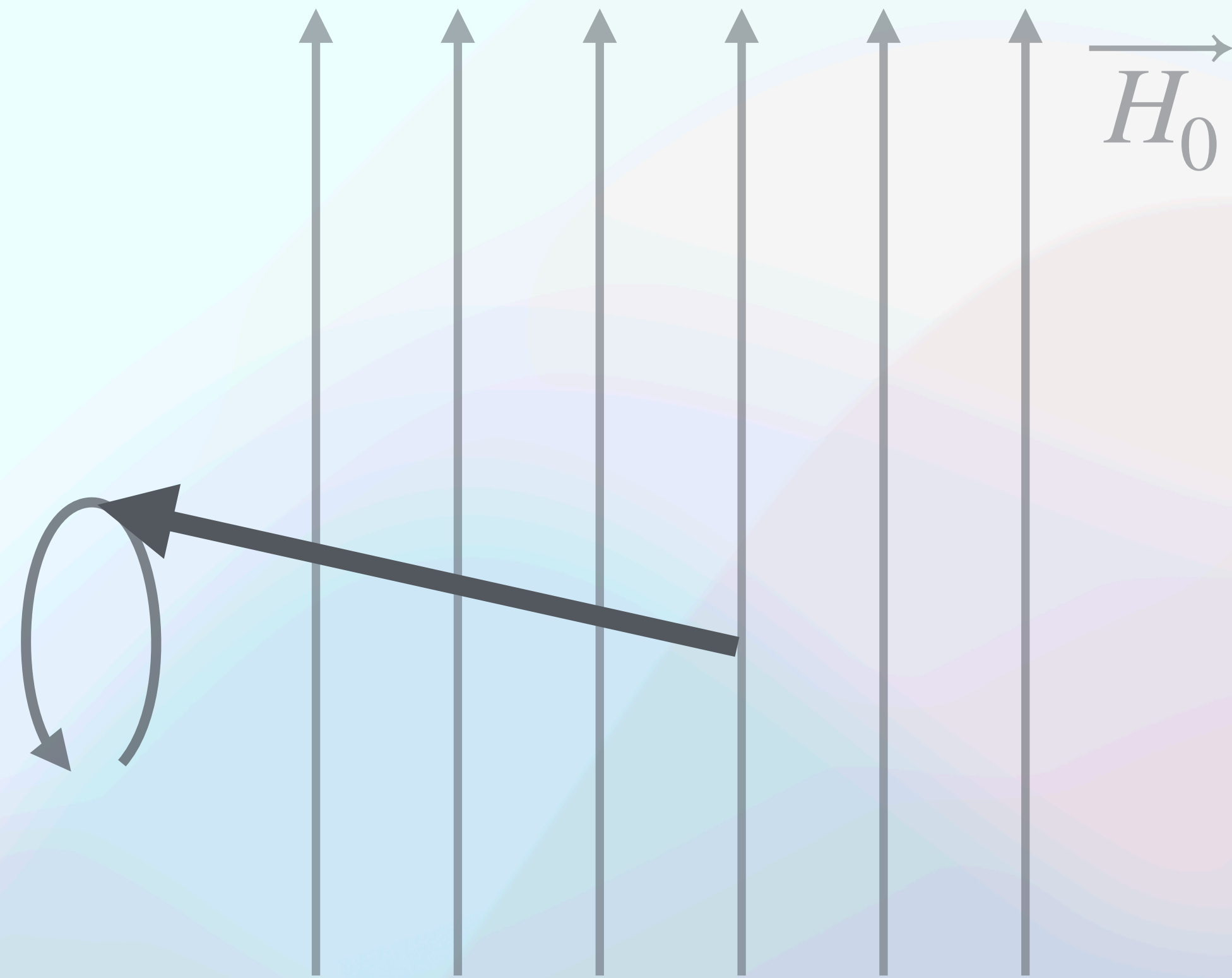
- Moguće zakretanje za bilo koji kut (npr. 90° ili 180°)



Rotacija magnetizacije

PULSEVI

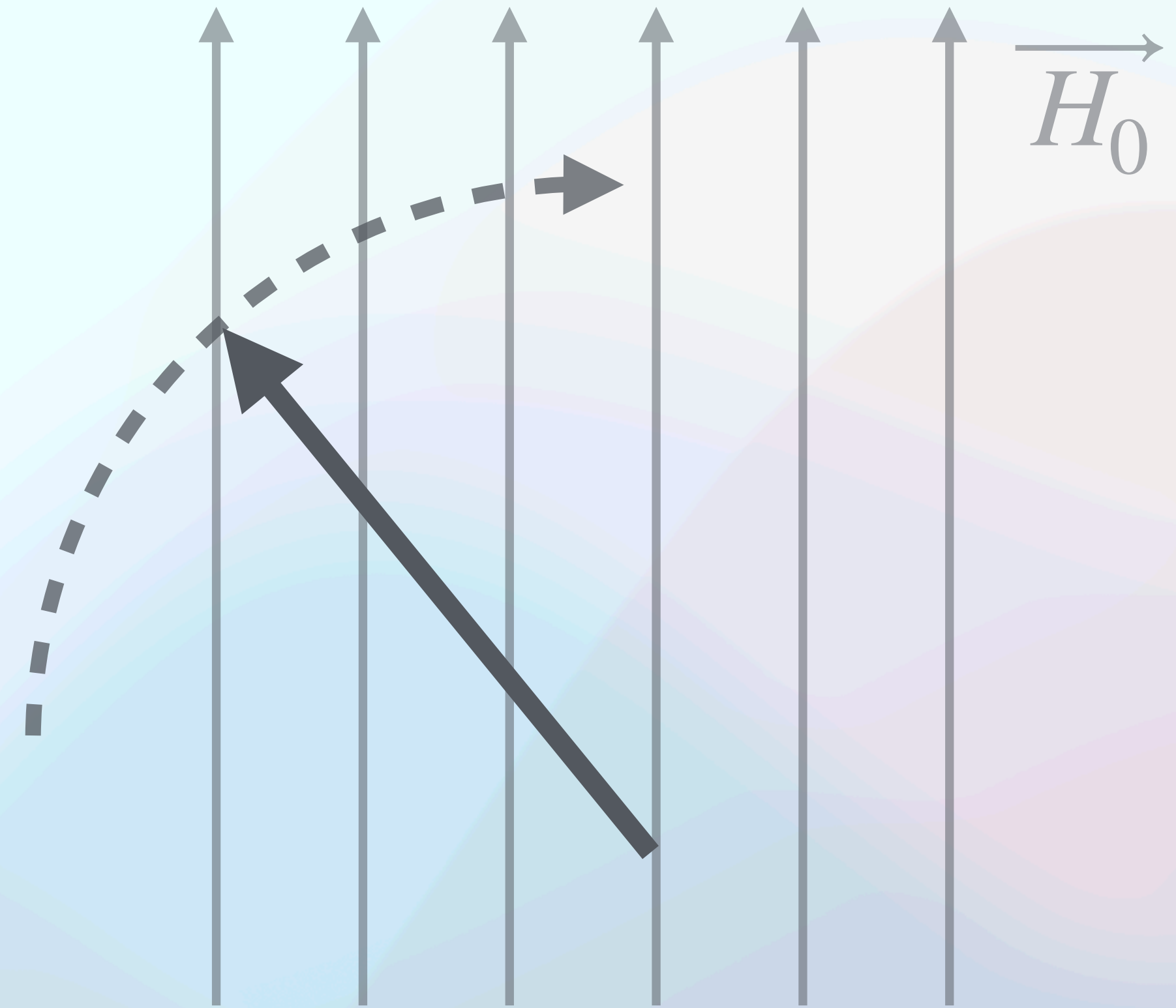
- Moguće zakretanje za bilo koji kut (npr. 90° ili 180°)
- Elektromagnetska indukcija - detekcija signala



Rotacija magnetizacije

PULSEVI

- Moguće zakretanje za bilo koji kut (npr. 90° ili 180°)
- Elektromagnetska indukcija - detekcija signala
- Vrijeme relaksacije T_1

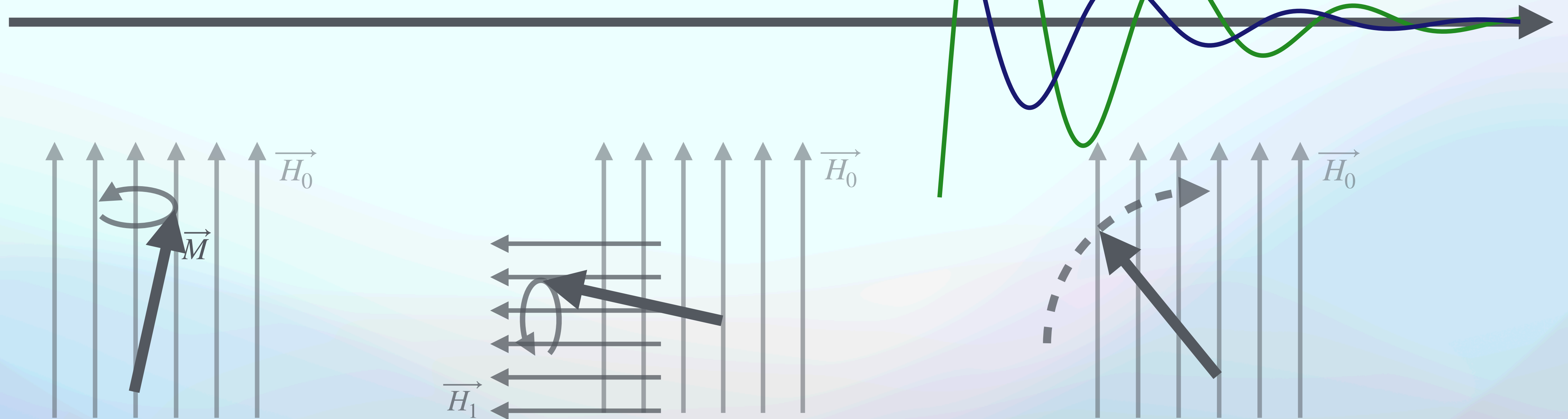


Proces mjerenja

Ravnotežno stanje

Okomito magnetsko polje: $\pi/2$ i π pulsevi

Akvizicija signala i relaksacija

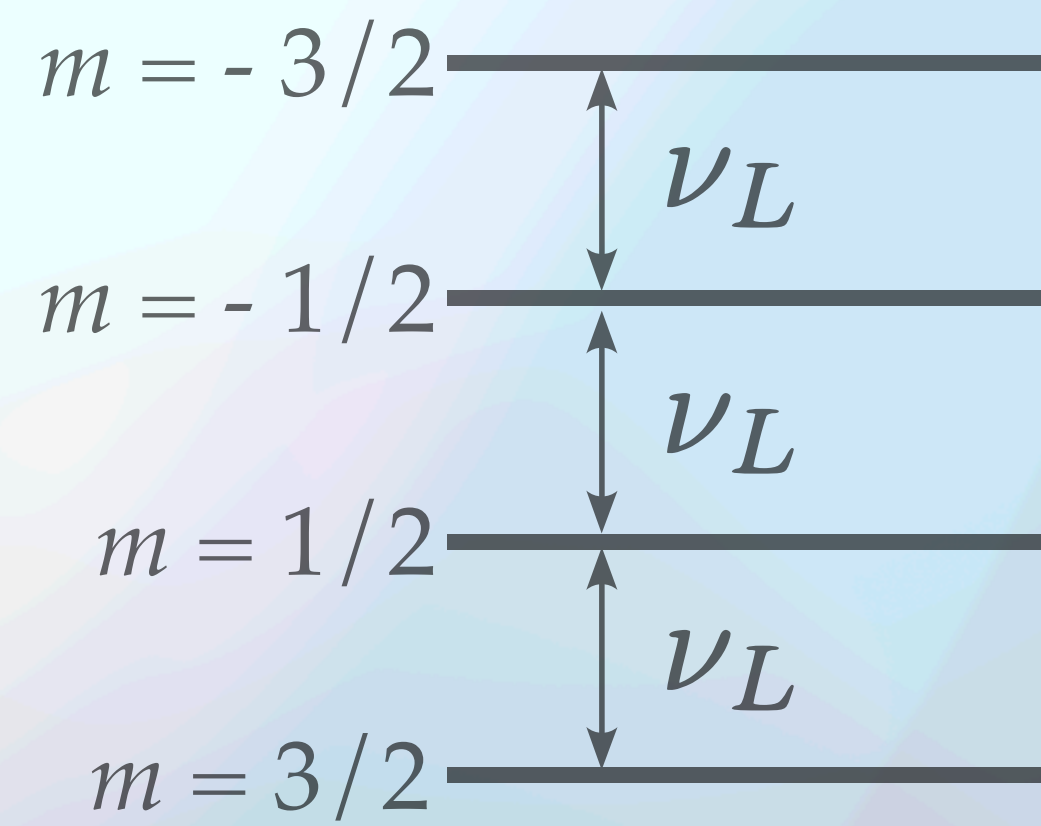


Struktura NMR spektra

HAMILTONIJAN

$$\mathcal{H} = -\gamma\hbar\vec{I} \cdot (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{K}}) \cdot \vec{H} + \frac{e^2qQ}{4I(2I-1)} \left[3I_z^2 - I(I+1) + \frac{\eta}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right]$$

Zeeman



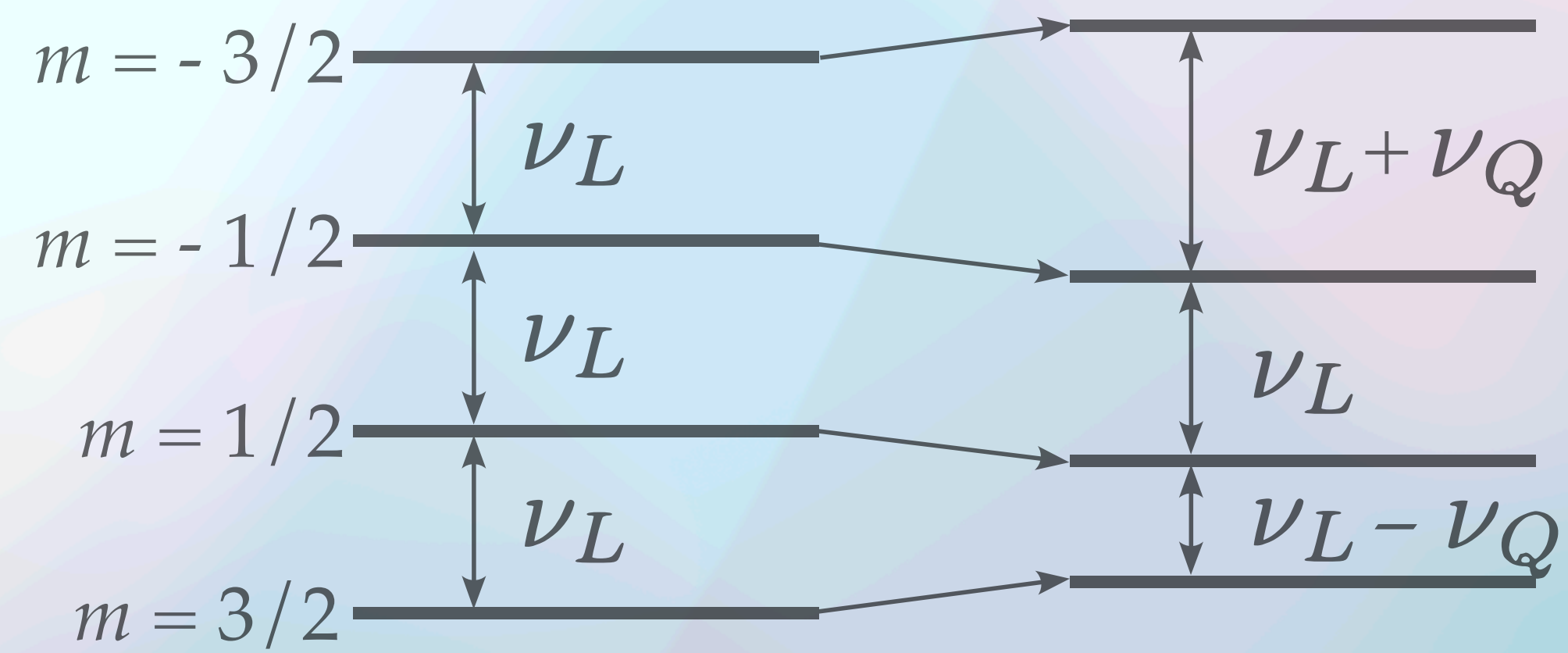
Struktura NMR spektra

HAMILTONIJAN

$$\mathcal{H} = -\gamma\hbar\vec{I} \cdot (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{K}}) \cdot \vec{H} + \frac{e^2qQ}{4I(2I-1)} \left[3I_z^2 - I(I+1) + \frac{\eta}{2}(I_+^2 + I_-^2) \right]$$

Zeeman

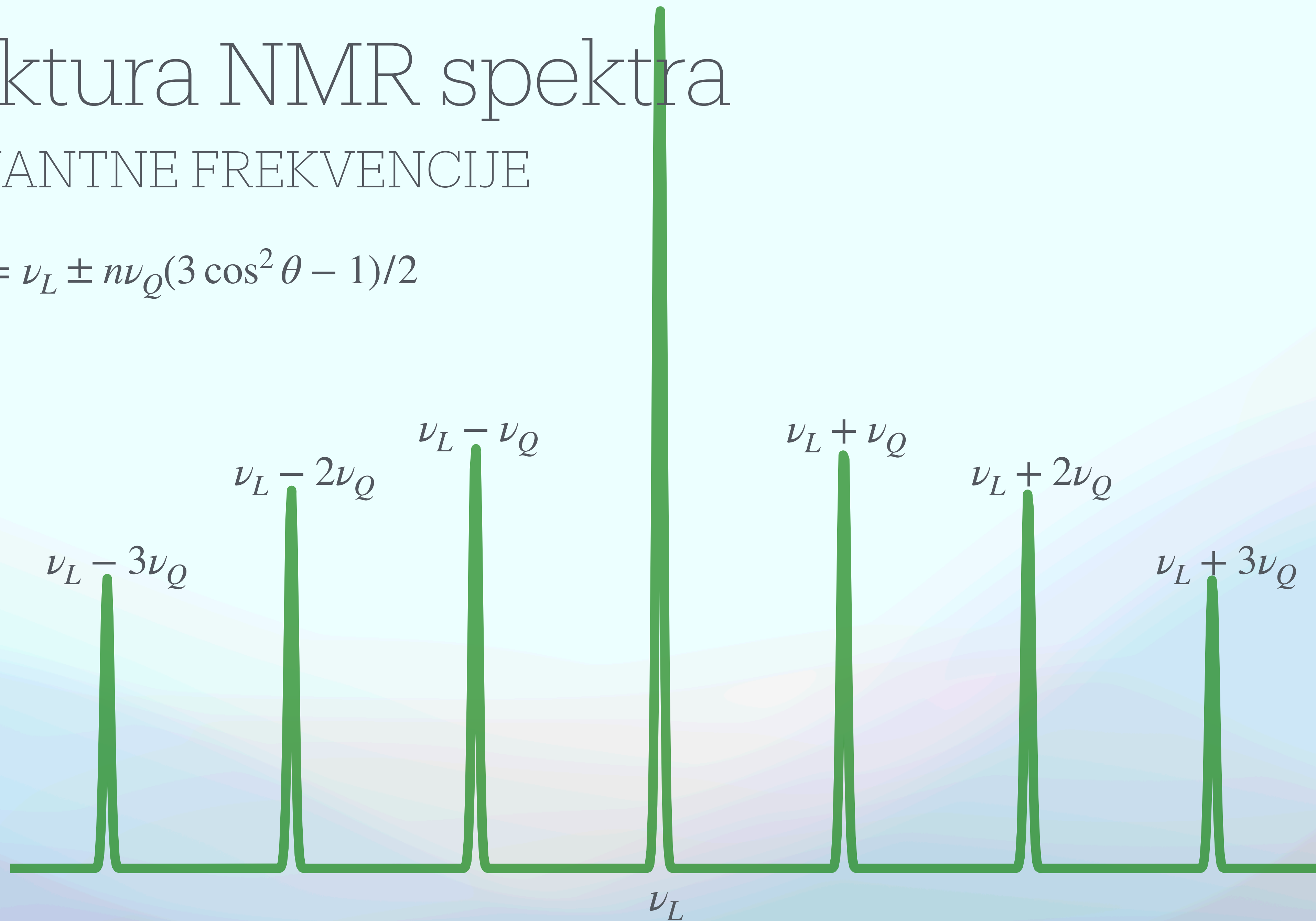
Zeeman + kvadrupol



Struktura NMR spektra

REZONANTNE FREKVENCIIJE

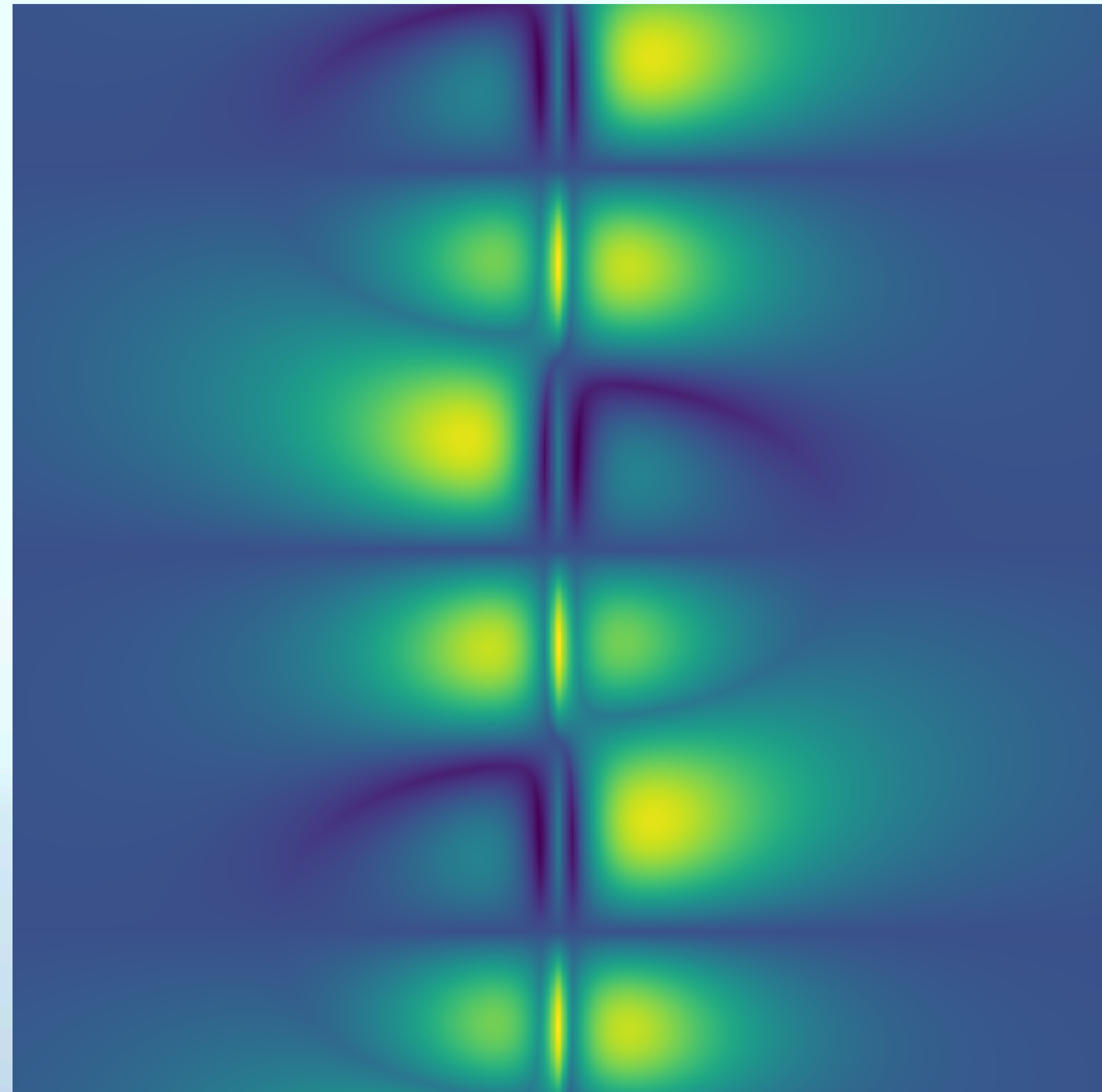
$$\nu_{NMR} = \nu_L \pm n\nu_Q(3 \cos^2 \theta - 1)/2$$



Vežanje naprežanja na magnetizam

ODSTUPANJE OD KOCKE

$$\nu_Q = A \cdot \left(\varepsilon_a - \frac{1}{2} \varepsilon_b \right)$$



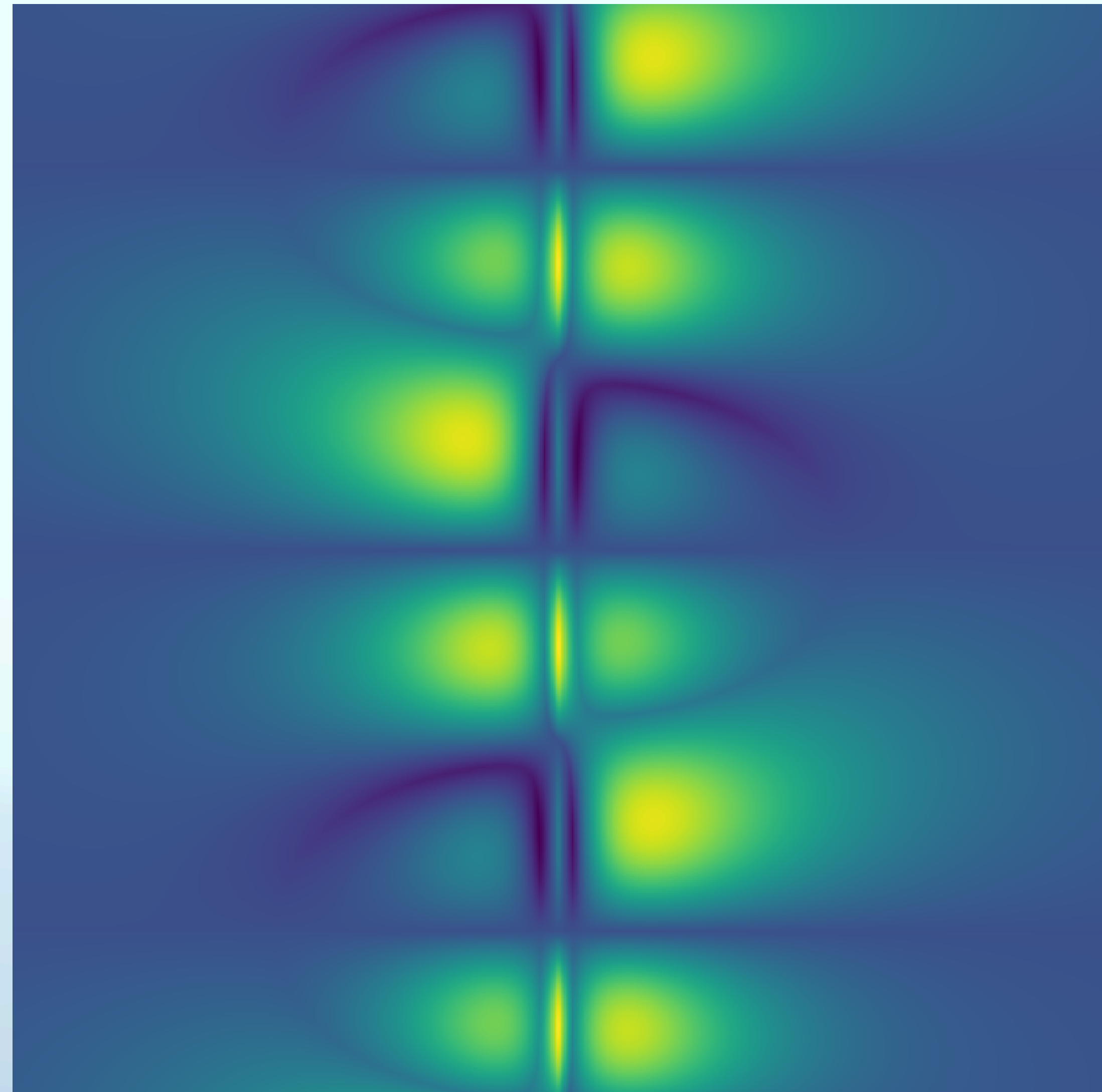
Vežanje naprežanja na magnetizam

ODSTUPANJE OD KOCKE

$$\nu_Q = A \cdot \left(\varepsilon_a - \frac{1}{2} \varepsilon_b \right)$$



konstanta proporcionalnosti

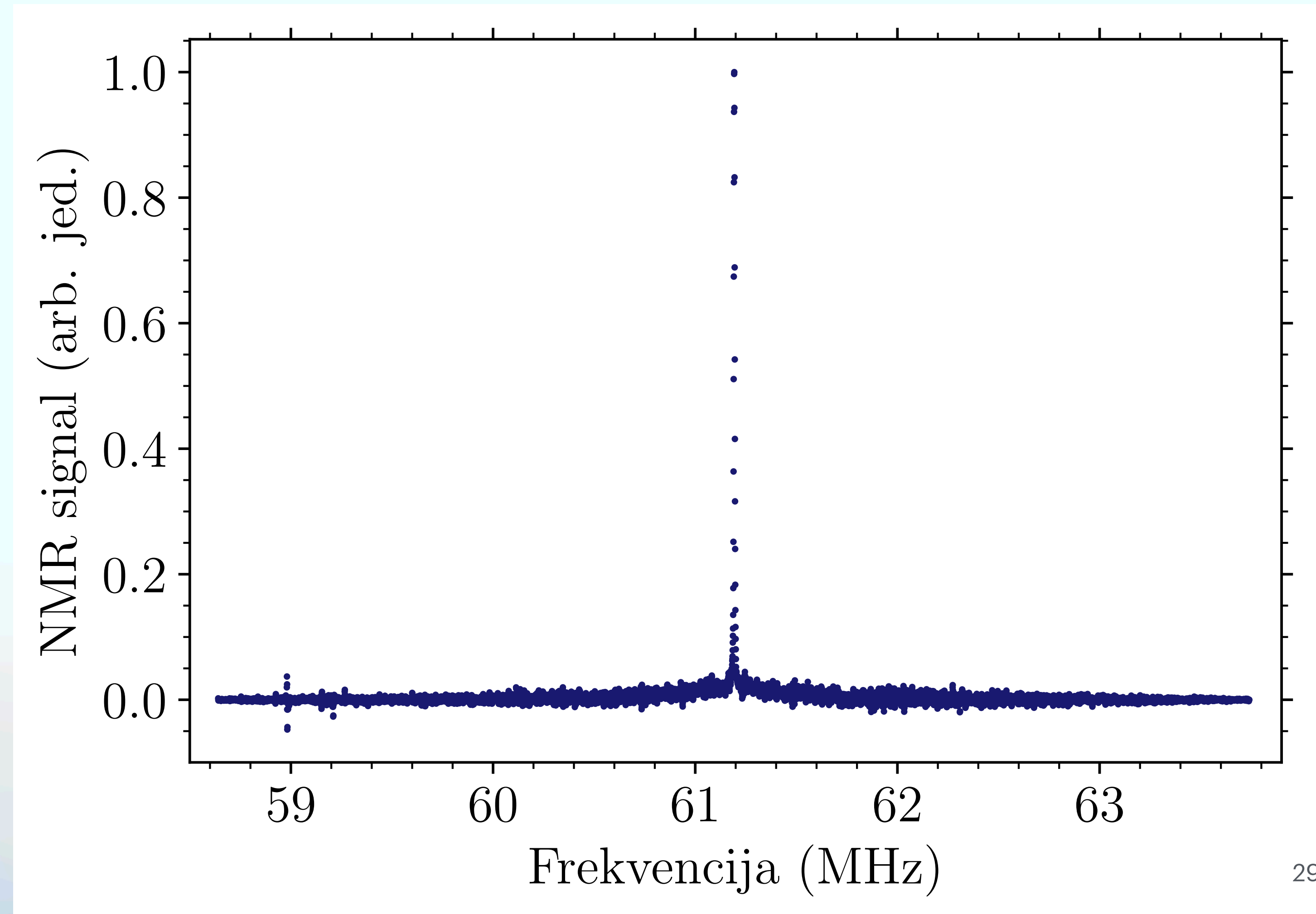


Numerički račun i rezultati

Rezultati

NEDEFORMIRANI UZORAK

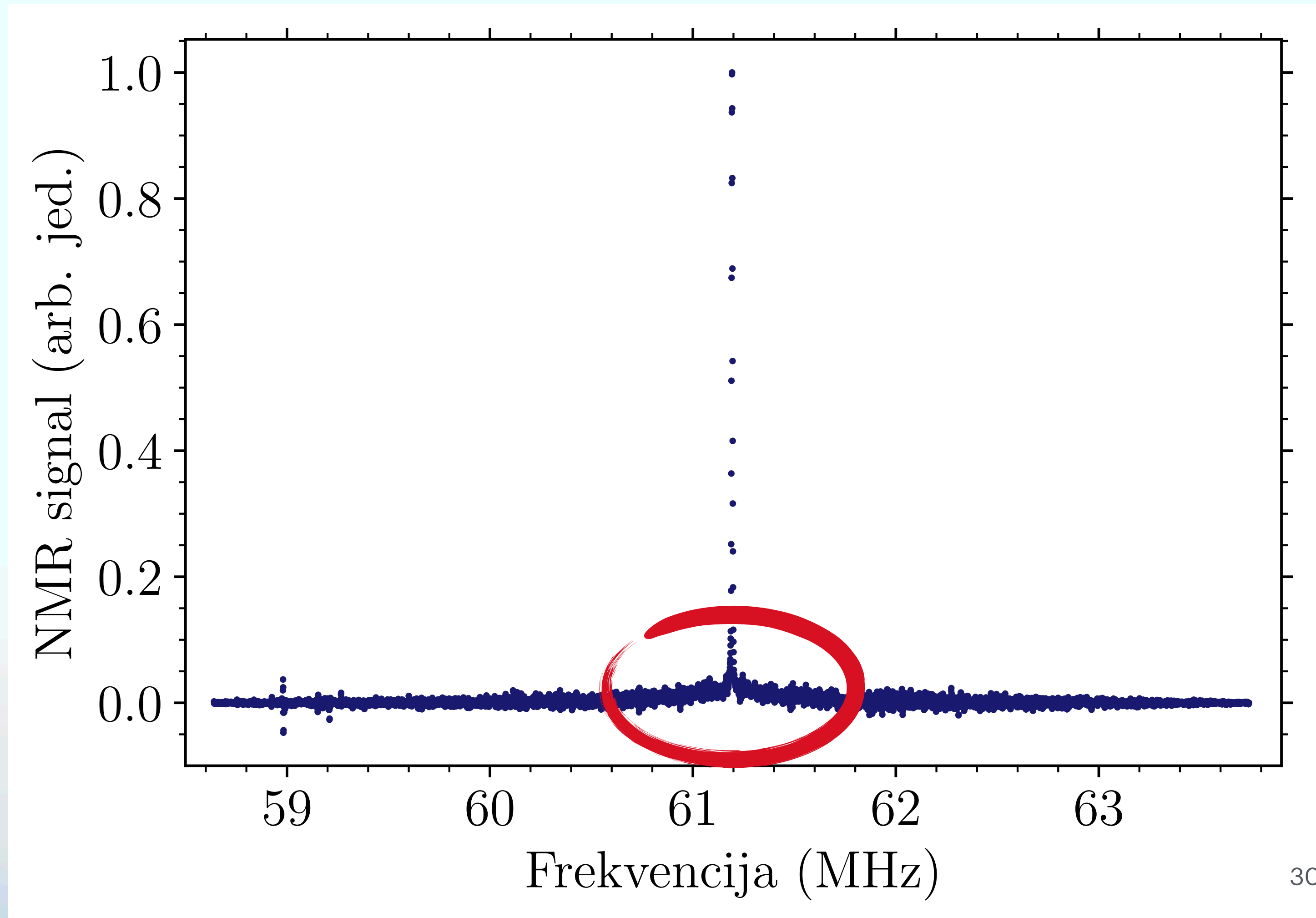
- Jasna centralna linija
 $\nu_L = 61,17 \text{ MHz}$
- Gotovo nema satelita
- nema deformacija, pa nema kvadrupolnih momenata



Rezultati

NEDEFORMIRANI UZORAK

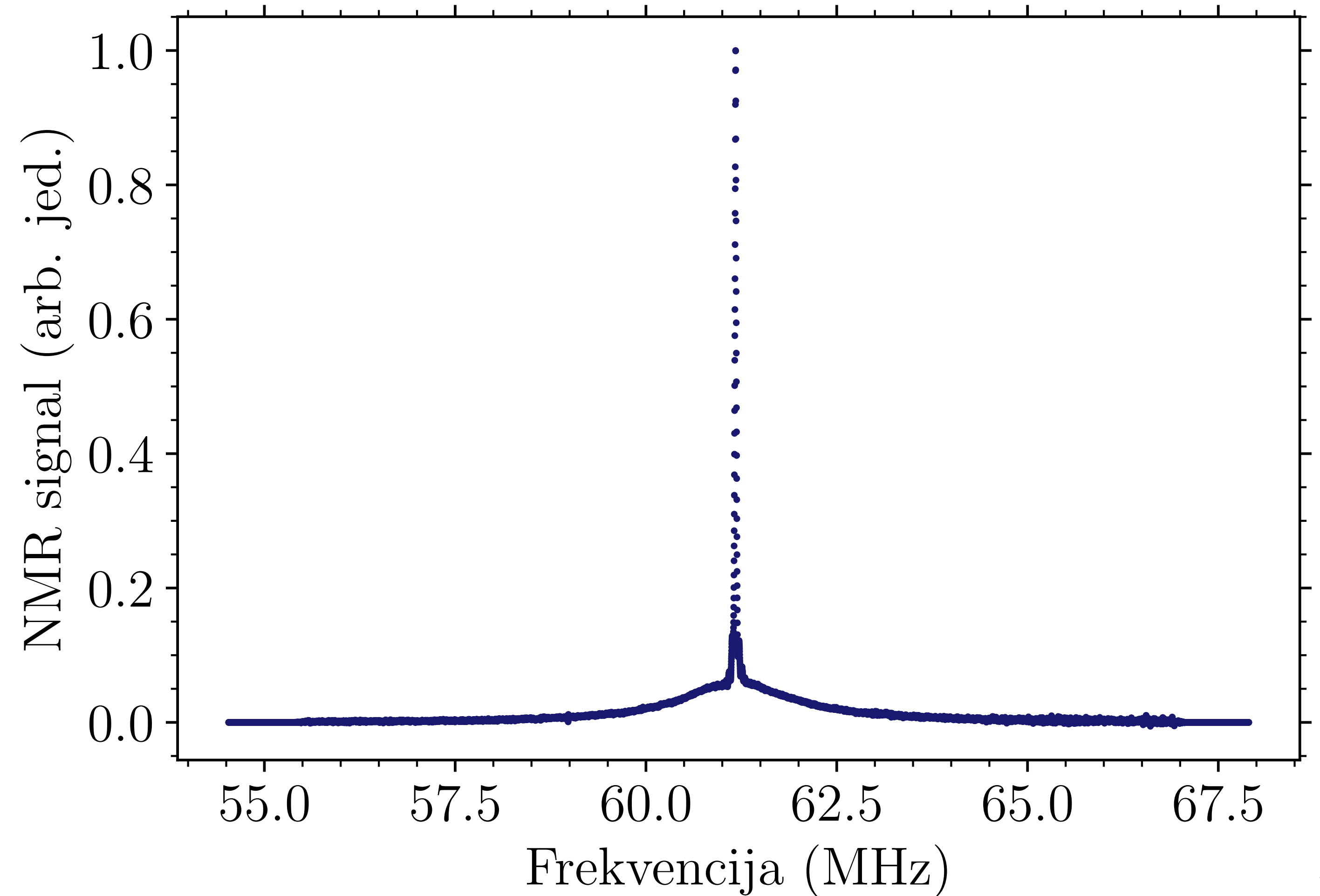
- Jasna centralna linija
 $\nu_L = 61,17 \text{ MHz}$
- Gotovo nema satelita
- nema deformacija, pa nema kvadrupolnih momenata
- neuređene dislokacije



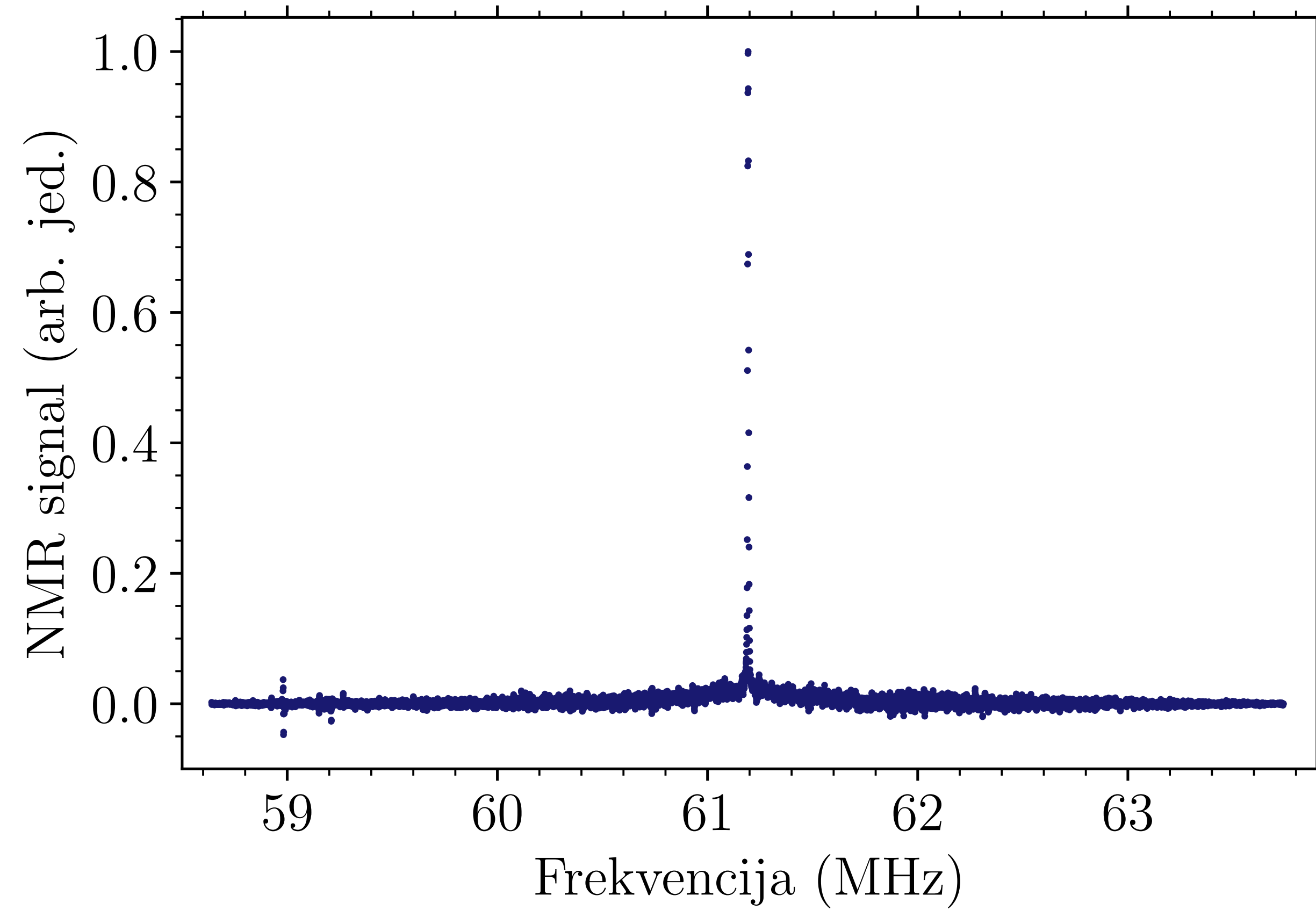
Rezultati

DEFORMIRANI UZORAK

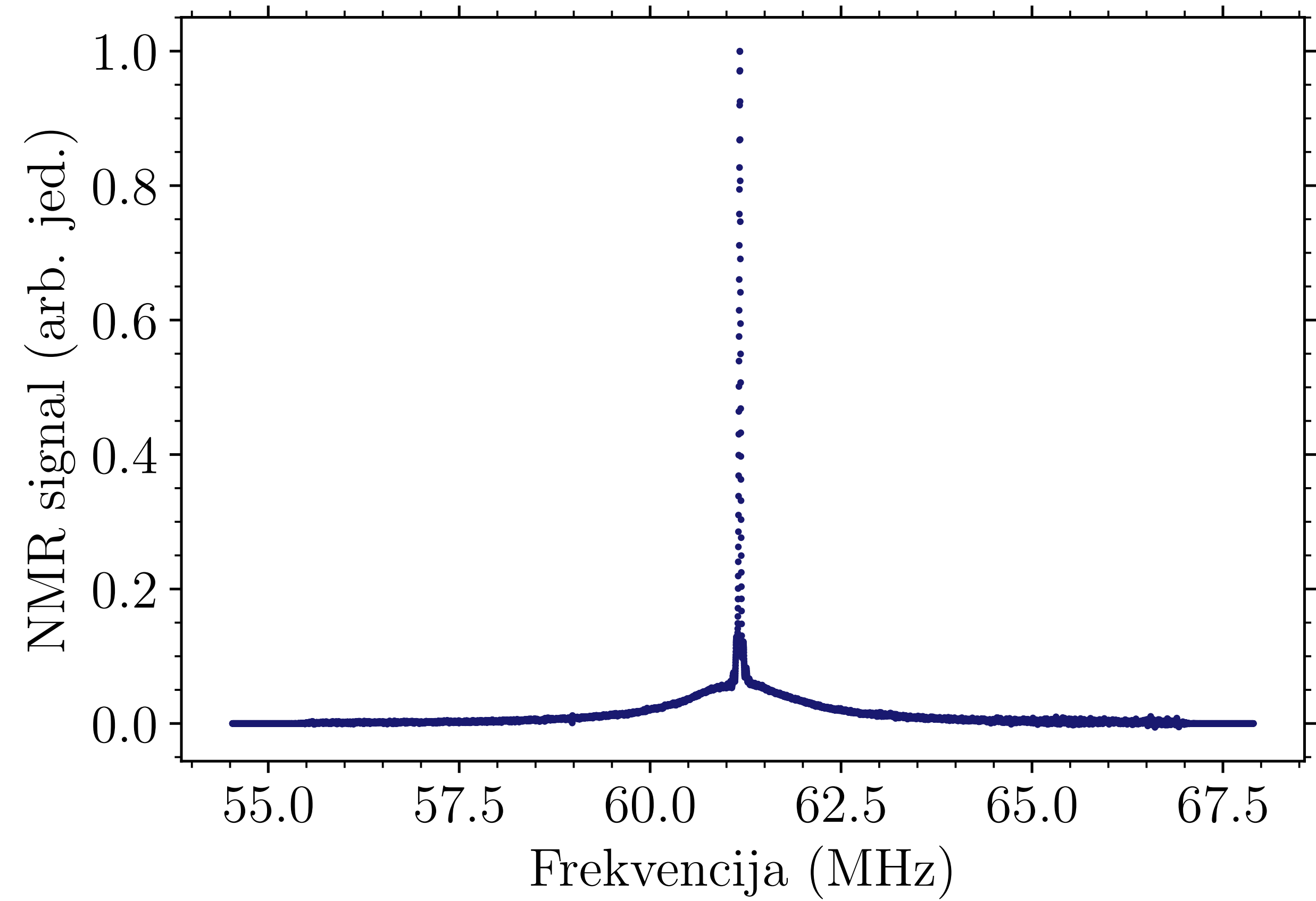
- Sateliti su razmazani i stopljeni
 - kontinuirana ovisnost kvadrupolne frekvencije o naprezanju



Nedeformirani uzorak



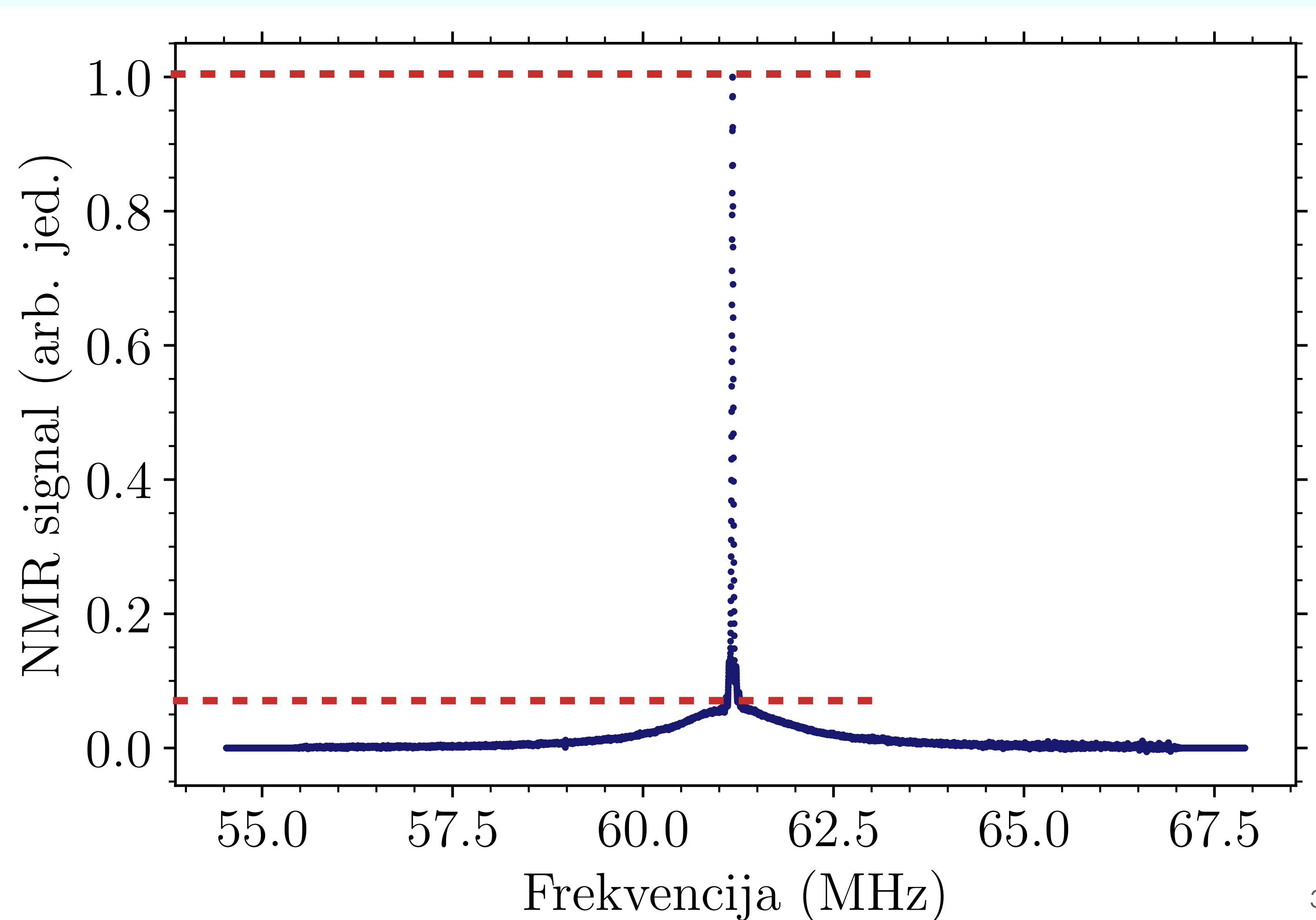
Deformirani uzorak



Rezultati

UDIO DEFORMIRANIH ČELIJA

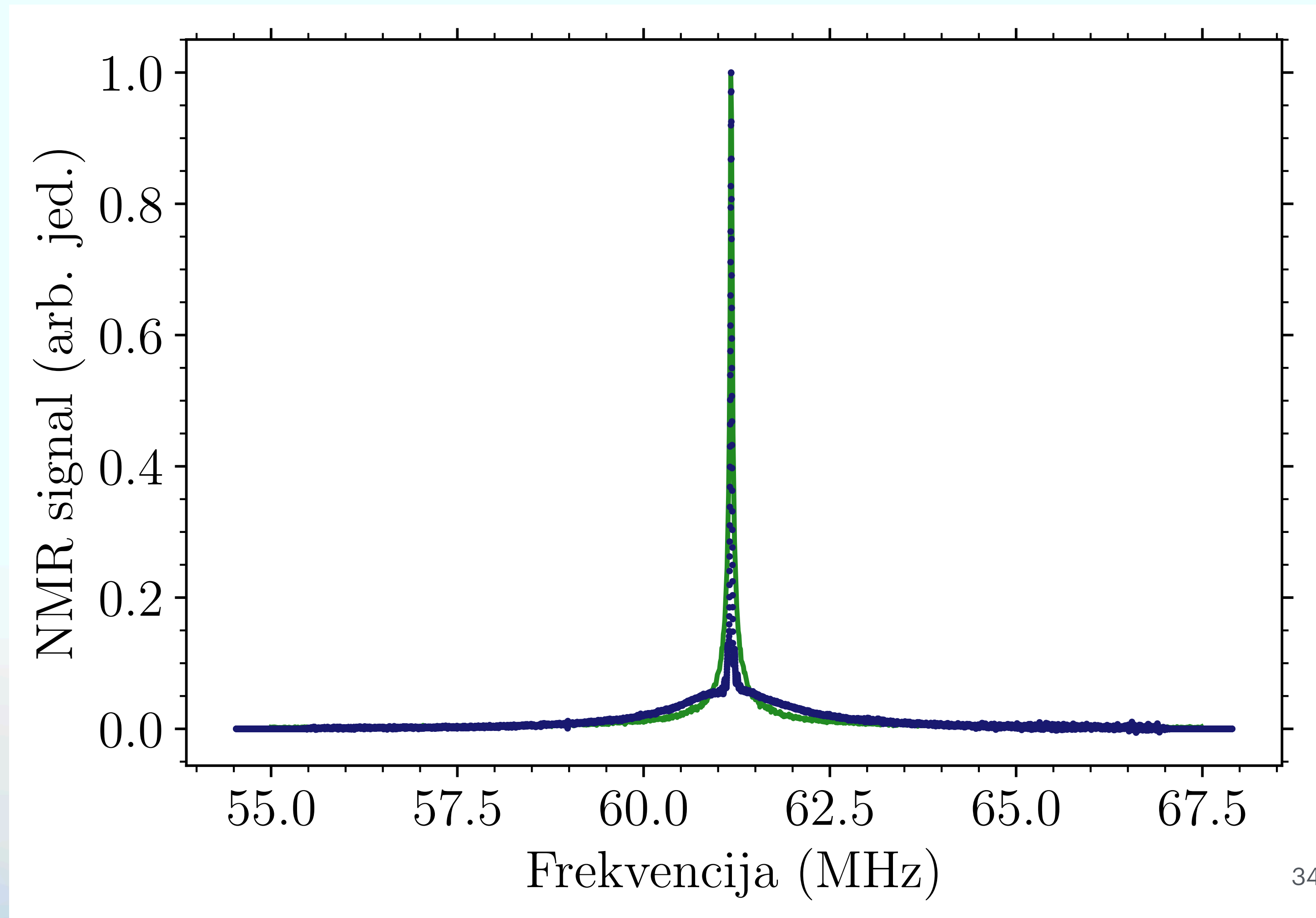
- Težinski omjer intenziteta
$$W \approx 4,99 \frac{I_{satellite}}{I_{central}}$$
- Rezultat: $W = 1,6 \%$
- Važno za buduća istraživanja
 - druge tehnike



Rezultati

PRILAGODBA KRIVULJE

- Numerički račun krivulje
 - *Binning* metoda
 - Vizualni fit
- Rezultat
 - prosječna udaljenost između zidova dislokacija **oko 80 ćelija**



Zaključak

Zaključak

MJERENJA

- Vežanje naprezanja na magnetizam
- Pojava dislokacijskih zidova prilikom deformacije smicanjem
- Udio jediničnih ćelija pod utjecajem dislokacijskog zida
 - koristan rezultat
 - teško mjerljiv drugim tehnikama

Zaključak

NUMERIČKI RAČUN

- Numerički račun NMR signala
 - prosječna udaljenost između dislokacijskih zidova
- problematika prilagodbe krivulje
 - potencijalno rješenje Monte Carlo metodama

Hvala na pažnji!

Literatura

1. E. Fukushima and S. B. W. Roeder, in **Experimental Pulse NMR: A Nuts and Bolts Approach** (CRC Press, Boca Raton, 2018) Chap. 1–2.
2. R. E. Walstedt, in **The NMR Probe of High-T Materials and Correlated Electron Systems**, Vol. 276, edited by Y. Chen, A. Fujimori, T. Muller, and W. C. Stwalley (Springer Nature, Berlin, 2018) Chap. 2, pp. 22–26, 2nd ed.
3. P. P. Man and P. Tougne, **Exact expression for the spin 7/2 line intensities: application to solid state ^{59}Co NMR**, Molecular Physics 83, 997 (1994).
4. E. A. Chekhovich, I. M. Griffiths, M. S. Skolnick, H. Huang, S. F. C. da Silva, X. Yuan, and A. Rastelli, **Cross calibration of deformation potentials and gradient-elastic tensors of GaAs using photoluminescence and nuclear magnetic resonance spectroscopy in GaAs/AlGaAs quantum dot structures**, Phys. Rev. B 97, 235311 (2018).
5. W. D. Callister Jr. and D. G. Rethwisch, in **Fundamentals of Materials Science and Engineering: an integrated approach** (John Wiley and Sons, Hoboken, 2012) Chap. 5 and 8, pp. 137–150 and 261–286, 4th ed.
6. **Theory of strain-induced magnetism in bulk STO** (2023).