

Übungsblatt 10 :

Aufgabe 1: Die steady-state Lösung der Blochgleichungen

Bei kontinuierlicher Einstrahlung der Mikrowelle (CW-EPR) sollte sich in den Blochgleichungen ein Gleichgewicht einstellen somit gilt $dM(t)/dt = 0$. Wenn man diese Bedingungen in die Blochgleichungen einsetzt kann man die steady-state Lösung der Blochgleichungen bestimmen, daraus folgt folgender Ausdruck für M_y .

$$M_y(GGW) = M_0 \frac{\omega_1 T_2}{1 + \Delta\omega^2 T_2^2 + \omega_1^2 T_1 T_2} \quad (1)$$

Damit man in der CW-EPR akkurat die Linienbreite bestimmen kann ist es wichtig die Linie nicht zu sättigen deswegen arbeitet man mit sehr kleinen Mikrowellen Leistungen (kleines ω_1) wodurch sich Gleichung 1 wie folgt vereinfacht:

$$M_y(GGW) = M_0 \frac{\omega_1 T_2}{1 + \Delta\omega^2 T_2^2} \quad (2)$$

Hierbei steht M_0 für die Ausgangsmagnetisierung, T_2 für die Transversale Relaxationszeit, ω_1 für die Rabi-Frequenz und $\Delta\omega$ für den Frequenzoffset ($\omega_{Larmor} - \omega_{MW}$).

i) Überlegen Sie, wie sich aus Gleichung 2 der Ausdruck für die Halbwertsbreite $\Delta\Delta\omega_{1/2} = 2/T_2$ ergibt. Als Tipps: Schauen Sie sich die Veranschaulichung in Abbildung 1 an. Das Maximum der Linie ist bei $\Delta\omega = 0$ bestimmen Sie den Maximal Wert von M_y und überlegen Sie was für einen Wert der Ausdruck $\Delta\omega^2 T_2^2$ in Gleichung 2 annehmen muss um auf die Hälfte dieses Wertes zu kommen.

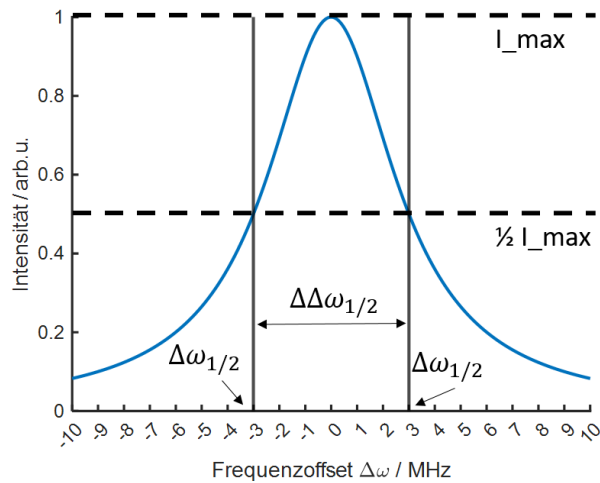


Abbildung 1: Veranschaulichung Halbwertsbreite.

(Bonusaufgabe versuchen Sie den gegebenen Ausdruck für M_y aus der Blochgleichungen im rotierenden Koordinatensystem herzuleiten.)

ii) Welche Relaxationszeit, Longitudinale T_1 oder die Transversale T_2 ist in der EPR üblicherweise die kürzere? Gibt es einen Unterschied in Festkörpern und Flüssigkeiten?

Aufgabe 2: Linienbreiten und Auflösung

Sie haben zwei Proben gegeben von denen Sie zwei CW-Spektren bei einer Frequenz 263 GHz aufgenommen haben:

Probe 1: das Spektrum der ersten Probe besteht aus zwei Absorptionslinien mit den g-Werten $g = 2.007559$ und $g = 2.006487$, beide Linien weisen eine transversale Relaxationszeit von $T_2 = 50 \text{ ns}$ auf.

Probe 2: das Spektrum der zweiten Probe hat den g-Wert des freien Elektrons, ist mit einer isotropen Hyperfeinkonstante $a_{iso} = 20 \text{ MHz}$ aufgespalten und hat eine transversale Relaxationszeit von $T_2 = 100 \text{ ns}$.

i) Bestimmen Sie die Linienbreiten $\Delta\Delta\omega_{1/2}$ der ersten und zweiten Probe in mT .

ii) Bestimmen sie jeweils die zwei Peakpositionen von Probe 1 und Probe 2 in mT .

iii) Können Sie die zwei Peaks in Probe 1 und Probe 2 unterscheiden wenn Sie davon ausgehen, dass die Peaks dafür mindestens mit ihrer Linienbreite separiert seien müssen?

iv) Sie nehmen nun die Spektren bei X-Band Frequenzen auf, hat sich die Situation in Bezug auf das Unterscheiden der Peaks geändert?

Konstanten: $g_e = 2.0023193$; $\mu_B = 9.2740 \cdot 10^{-24} J \cdot T^{-1}$; $h = 6.6261 \cdot 10^{-34} J \cdot s$; $\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-34} J \cdot s \cdot rad^{-1}$