

## 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  $\omega_1$ ) 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,  $\omega_1$  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.

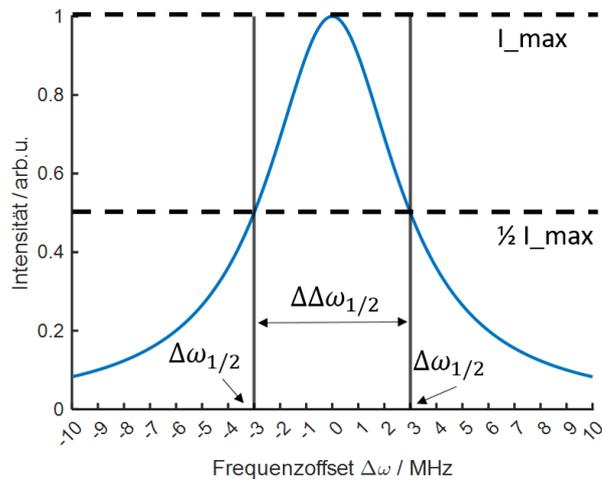


Abbildung 1: Veranschaulichung Halbwertsbreite.

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