

Übungsblatt 7 :

Aufgabe 1: Der volle Hyperfein-Tensor

i)

Folgendes CW-Spektrum einer Pulverprobe wurde mit einer Mikrowellenfrequenz von 263 GHz aufgenommen und als Absorptionsspektrum dargestellt. Bestimmen Sie sowohl den g-Faktor als auch den vollen Hyperfein-Tensor.

Stellen Sie den Hyperfein-Tensor in folgender Form dar:

$$\tilde{A} = a_{iso}\tilde{1} + D \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}}_{\tilde{T}}$$

Dabei entspricht $\tilde{1}$ der Einheitsmatrix, D der Dipolaren-Kopplungskonstante und a_{iso} der isotropen Hyperfeinwechselwirkung.

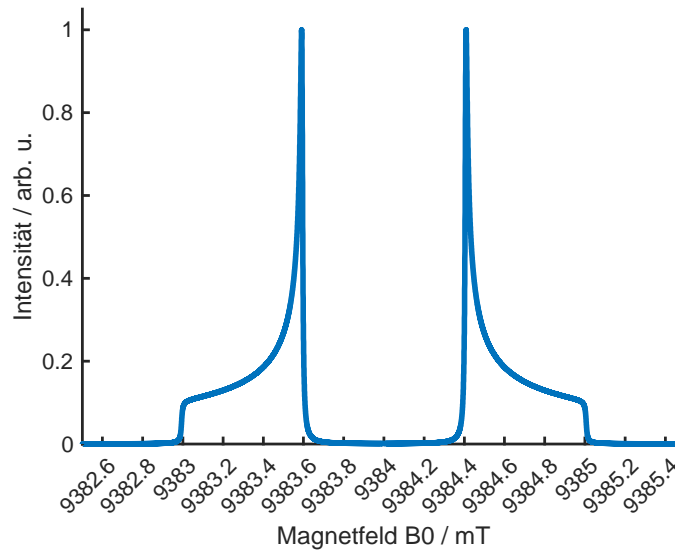
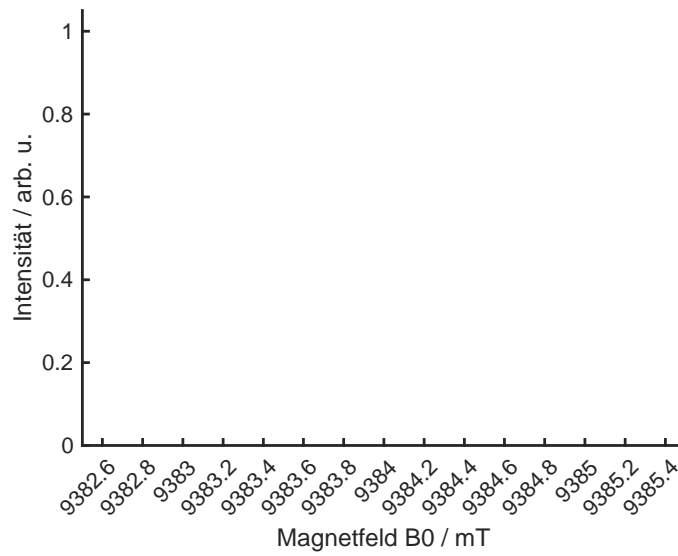


Abbildung 1: Elektron mit $S = 1/2$ und sowohl isotroper als auch axialer anisotroper Hyperfein-Kopplung zu Proton.

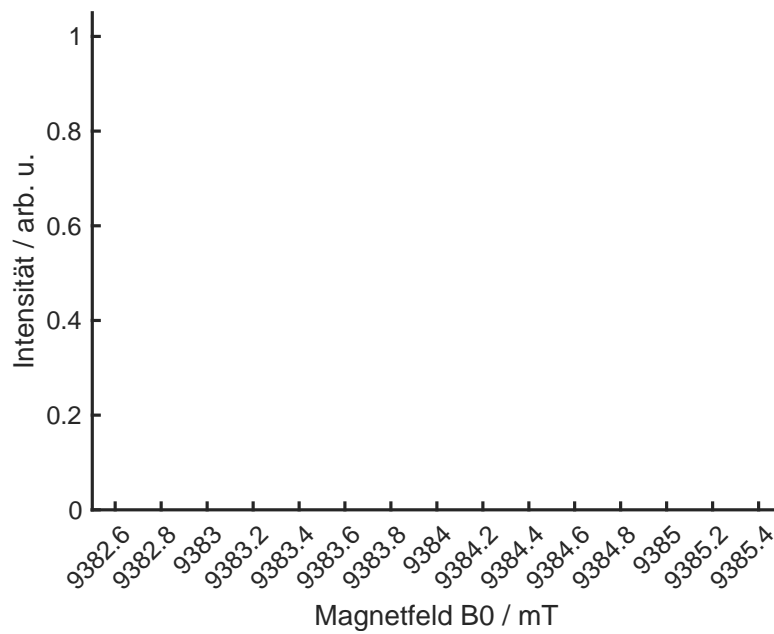
ii)

Wie würde das Spektrum aussehen wenn das Vorzeichen der isotropen Hyperfein-Wechselwirkung umgekehrt wäre? Skizzieren Sie das Spektrum.



iii)

Wie Würde das Spektrum aussehen wenn das Molekül gelöst und bei Raumtemperatur aufgenommen wäre? Skizzieren Sie das Spektrum.



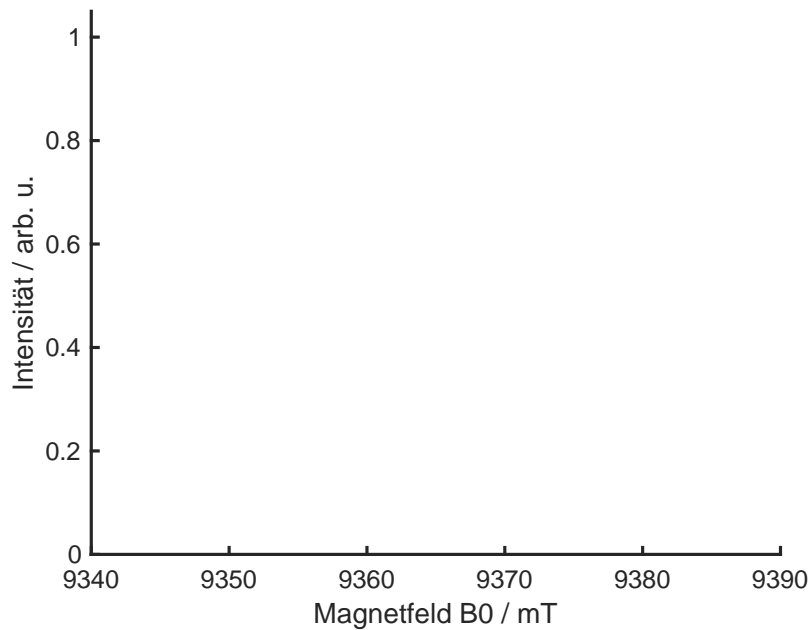
Aufgabe 2: Der g-Tensor

Ihnen ist folgender g-Tensor gegeben eines ein Kristalls gegeben, das Molekül hat außer der Zeeman Wechselwirkung keine weiteren Interaktionen.

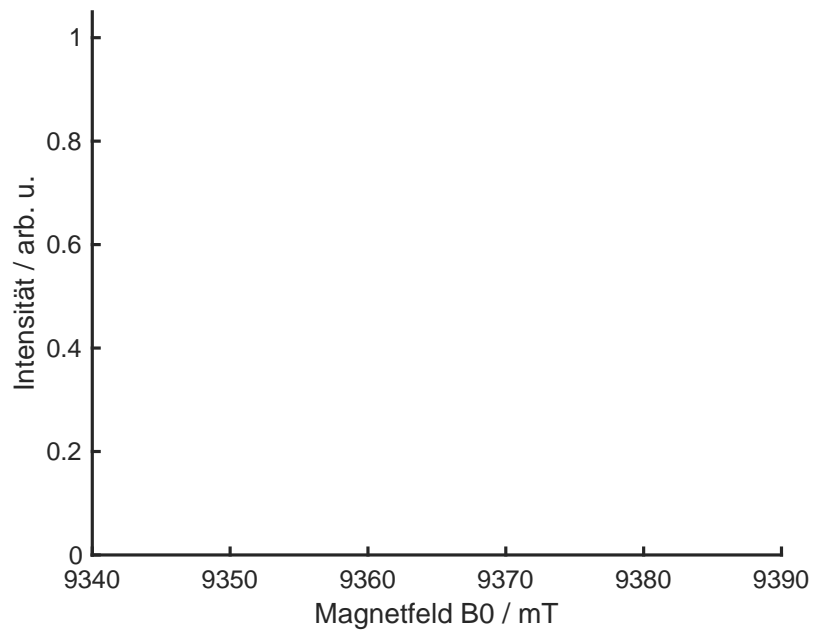
$$g = \begin{pmatrix} 2.0033 & 0 & 0 \\ 0 & 2.0076 & 0 \\ 0 & 0 & 2.0097 \end{pmatrix}$$

i) Was erwarten Sie für einen g-Faktor wenn die X-Achse des g-Tensors entlang des B_0 Felds ausgerichtet ist ?

ii) Skizzieren Sie das Spektrum wenn das Molekül mit dem selben g-Tensor in Lösung bei Raum Temperatur und bei einer Mikrowellenfrequenz von 263 GHz aufgenommen wird.



iii) Skizzieren Sie das Pulver-Spektrum wenn das Molekül mit dem selben g-Tensor als Festkörper bei einer Mikrowellenfrequenz von 263 GHz aufgenommen wird.



Konstanten:

$$\mu_0 = 1.2566 \cdot 10^{-6} \text{ N A}^{-2}; h = 6.6261 \cdot 10^{-34} \text{ J s}; g = 2.0023; g_{1H} = 5.5857; \mu_N = 5.0508 \cdot 10^{-27};$$

$$\mu_B = 9.2740 \cdot 10^{-24}$$