

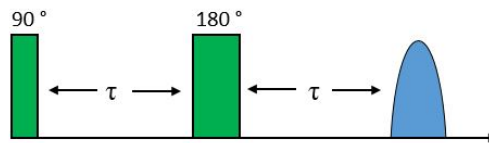
Übungsblatt 13

zur EPR Vorlesung WS18/19

Besprechung am 05.02.19

1. Aufgabe

2-Puls-ESEEM



In ihrem System mit einem Radikal, welches mit einem Kern dipolar gekoppelt ist, sind folgende Parameter gegeben:

$$B_0 = 0.374 \text{ T}, \omega_I = 80 \cdot 10^6 \frac{1}{\text{s}}, A = 4.19 \text{ MHz}, B = 0.761 \text{ MHz}, T_m^{(e)} = 159 \text{ ns}.$$

a) Berechnen Sie zunächst die Werte für die Frequenzen ω_α , ω_β , ω_+ und ω_- und die Modulationstiefe k . Berechnen Sie danach die Echointensität $V'_{2p}(\tau)$ für die τ -Werte 12 ns, 67 ns und 94 ns, bei der Sie die Relaxation berücksichtigen.

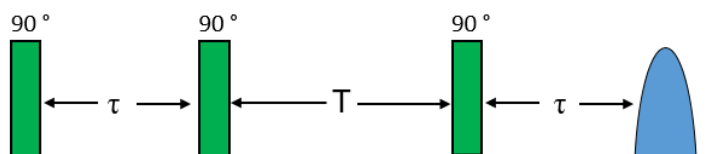
$$\omega_{12} = \left(\omega_I + \frac{A}{2}\right) \cos(\eta_\alpha) - \frac{B}{2} \sin(\eta_\alpha)$$

$$\omega_{34} = \left(\omega_I - \frac{A}{2}\right) \cos(\eta_\alpha) + \frac{B}{2} \sin(\eta_\alpha)$$

b) Erläutern Sie warum ein Elektron-Kern-Abstand mit ESEEM bestimmt werden kann und unter welchen Bedingungen dies nicht mehr möglich ist.

2. Aufgabe

3-Puls-ESEEM



a) Berechnen Sie die Echointensität $V'_{3p}(\tau, T)$ für die selben τ -Werte aus Aufgabe 1 mit den selben Parametern für $T = 100 \text{ ns}$. Vernachlässigen Sie dabei die Relaxation.

b) Was würde ihnen beim Vergleich der drei Spektren (nach der FT) bei den oben genannten unterschiedlichen τ -Werten auffallen? Ordnen Sie jeweils die betroffene(n) Frequenz(en) dem

τ -Wert zu.

c) Nennen Sie die Vor- und Nachteile des 3-Puls-ESEEM im Vergleich zum 2-Puls-ESEEM.

d) Sie führen ein 3-Puls ESEEM Experiment mit folgendem Phasenzyklus durch:

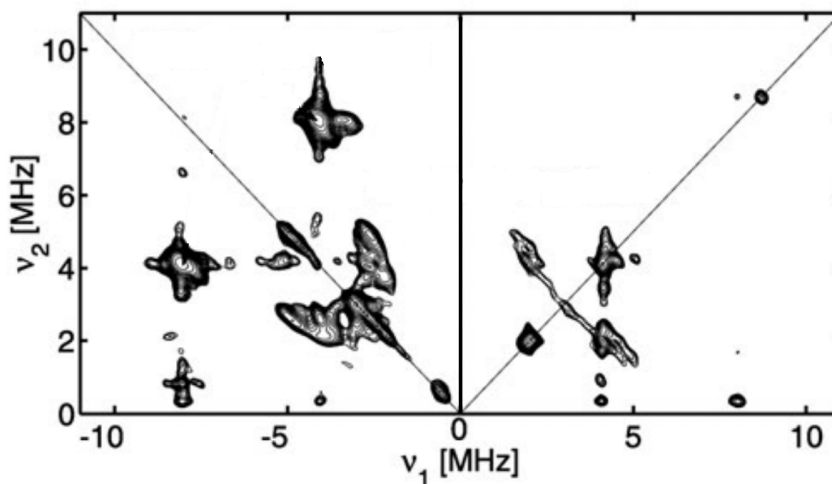
	P ₁	P ₂	P ₃	Detektion
A	+x	+x	+x	+y
B	-x	+x	+x	-y
C	+x	-x	+x	-y
D	-x	-x	+x	+y

Skizzieren Sie zu jedem Fall A, B, C und D die zugehörige Pulssequenz mit allen möglichen Echos (Vorzeichen beachten!). Beurteilen Sie anschließend, welches Echo nach diesem Phasenzyklus detektiert wird.

3. Aufgabe

HYSCORE

Ihnen ist das folgende ¹⁴N HYSCORE Spektrum im X-Band (330 mT) gegeben:



Beurteilen Sie, bei welchen Signalen es sich in dem Spektrum um Kernresonanzen von ¹⁴N handelt und ob der Fall einer starken oder schwachen Kopplung vorliegt und begründen Sie Ihre Antwort. Markieren Sie die NMR-Doppelquanten- ($\Delta m_I = \pm 2$) sowie die Einzelquanten-Übergänge ($\Delta m_I = \pm 1$) im Spektrum. Zeichnen Sie hierfür die Geraden (parallel zur Anti-Diagonalen) in das Spektrum, auf denen Sie die Signale für ¹⁴N für unterschiedliche Hyperfeinkopplungen erwarten.

Zusatz: Wieso sind für ¹⁴N im Allgemeinen die NMR-Doppelquantenübergänge schmäler als die Einzelquantenübergänge? Hinweis: Zeichnen Sie hierfür eine schematische Darstellung der Energieniveaus von einem $S = \frac{1}{2}$, $I = 1$ System unter Berücksichtigung aller möglichen Wechselwirkungen (Elektron-Zeeman, Kern-Zeeman, Hyperfein, Kern-Quadrupol).