

# Labrapport FYS3710: Elektron spinn resonans spektroskopi

Aleksander Hansen

11. november 2011

## Sammendrag

I denne laboppgaven målte vi ESR spekteret til Hydrogen- og Deuterium-radikaler. Vi fryste ned dråper av  $H_2SO_4/D_2SO_4$  med LN2 og bestrålte de med røntgenstråling for å skape radikaler. Kulene måtte hele tiden holdes nedkjølt for ikke å reagere med miljøet. I del 2 bestemte vi stråledosen noen nitroglyserintabletter var blitt utsatt for ved hjelp av ESR-dosimetri. Siden nitroglyserintabletter hovedsaklig består av sukker som fyllstoff, og radikalerne i sukker er veldig stabil var det mulig å bestemme dosen nesten 30 år etter bestålingen fant sted.

## 1 Deteksjon av fri radikaler i bestrålt løsning av svovelsyre, vann og tungtvann

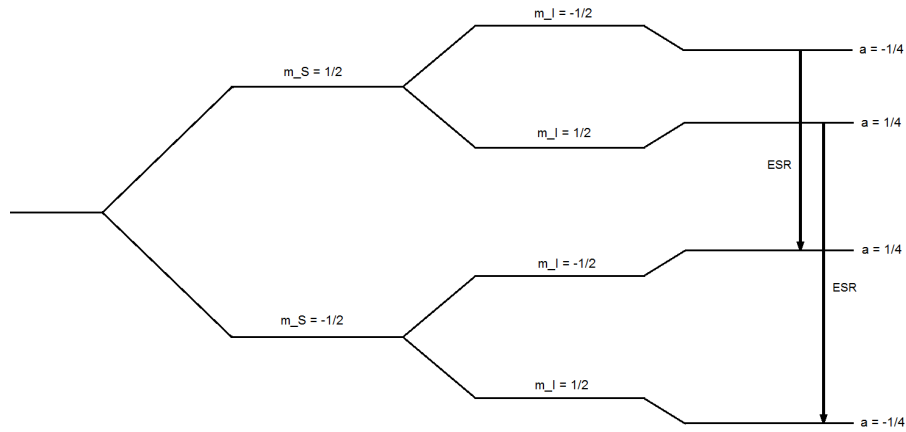
1. Energien til ESR spekteret er gitt ved,

$$E = g_e \beta B m_s - g_N \beta_N B m_l + a_{iso} m_s m_l$$

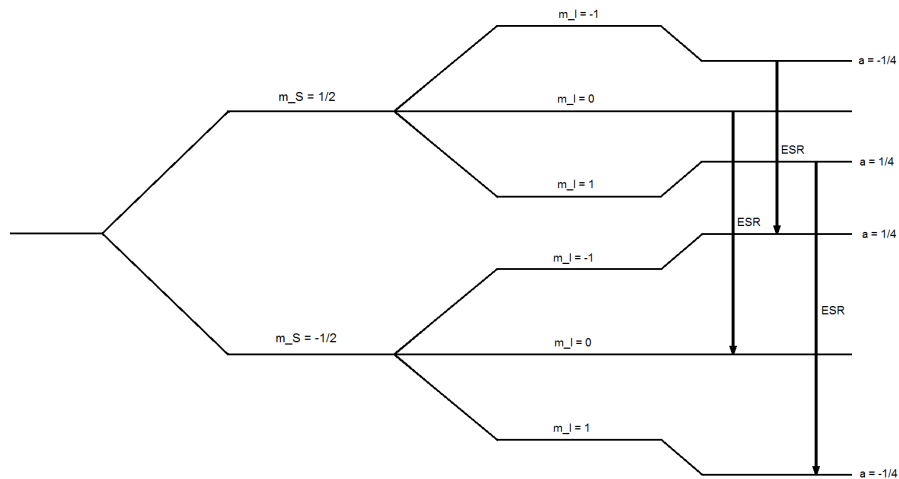
Vi har en ESR overgang når elektronet flipper spinn, mens kjernen holder seg i ro. Siden Hydrogen har kjernespin 1/2 så har den 2 tillatte verdier for  $m_l$ , altså  $m_l = \pm 1/2$ . Deuterium har kjernespin 1 og kan ta verdiene  $m_l = 1, 0, -1$ . Dette gjør at vi har 2 tillatte ESR overganger for Hydrogen og 3 for Deuterium, slik vist i figur 1 og 2 respektivt.

2. Vi har at,

$$a = \frac{2\mu_0}{3} g_N \beta_N |\psi(0)|^2$$



Figur 1: Energidiagram for Hydrogen



Figur 2: Energidiagram for Deuterium

Siden vi vet at alt som er forskjellig i uttrykkene for  $a_H$  og  $a_D$  er den spektroskopiske splittingsfaktoren,  $g_N$ . Får vi at forholdet,

$$\frac{a_H}{a_D} = \frac{g_N(H)}{g_N(D)} = \frac{5,585}{0,857} \approx 6,517$$

Hvor  $g_N(H)$  og  $g_N(D)$  er  $g_N$  for Hydrogen og Deuterium respektivt.

**3/4.** Det 1. deriverte ESR-spekteret av  $H_2SO_4/D_2SO_4$  løsningen er presen-

tert i Figur 3.

5. Hyperfinsplittingen for Hydrogen er avstanden mellom peek 1 og peek 5, mens for Deuterium er hyperfinsplittingen halvparten av avstanden mellom peek 2 og peek 4. Vi bruker disse verdiene fordi det er enklere og mer nøyaktig enn å prøve å finne  $a_D$  direkte. Fra tabell 1 finner vi at,

$$a_H = 3632,56 - 3125,67 = 506,89G = 0,050689T$$

og,

$$a_D = \frac{3474 - 3319,67}{2} = 77,165G = 0,0077165T$$

Som gir oss forholdet,

$$\frac{a_H}{a_D} = \frac{506,89}{77,165} \approx 6,569$$

Vi ser at forskjellen mellom verdien for det målte forholdet  $\frac{a_H}{a_D}$  i forhold til det vi teoretisk beregnet i punkt 2 over er mindre enn 1%.

6.  $g_e$ -verdiene er gitt ved,

$$g_e = \frac{h\nu}{\beta B_0}$$

Hvor  $h = 6,626068 \cdot 10^{-34} \frac{m^2 kg}{s}$  er plancks konstant,  $\nu = 9,520713GHz$  er frekvensen til strålingen vi brukte,  $\beta = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,274009 \cdot 10^{-24} \frac{J}{T}$  er bohrmagnetonet i SI-enheter og  $B_0$  er verdien på magnetfeltet der hvor hyperfinsplittingene er sentrert på.  $B_0$ -verdiene er,

$$B_0(H) = \frac{3632,56 + 3125,67}{2} = 3379,115G = 0,3379115T$$

$$B_0(D) = \frac{3474 + 3319,67}{2} = 3396,835G = 0,3396835T$$

$g_e$ -verdiene for H-og D-atomet er da,

$$g_e(H) = \frac{h\nu}{\beta B_0(H)} \approx 2.0131$$

$$g_e(D) = \frac{h\nu}{\beta B_0(D)} \approx 2.0026$$

Vi ser at disse verdiene ikke er like store, som kommer av at siden  $a_H$  er så stor så vil vi få et annenordens skift  $\approx \frac{a^2}{4B}$  mot lavere feltverdier som fører til en større  $g_e$ -verdi.

8. Bølgefunksjonen for elektronet i 1s-orbitalen til H- og D-atomene er gitt ved,

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{(-r/a_0)}$$

Der  $r$  er avstanden fra kjernen og  $a_0 \approx 5,291772 \cdot 10^{-11} m$  er Bohrradien. Teoretisk får vi at,

$$|\psi(0)|^2 = \psi(0)^* \psi(0) = \frac{1}{\pi a_0^3} \approx 2,148 \cdot 10^{30} m^{-3}$$

Ut fra de observerte hyperfinsplittingene finner vi sannsynlighetsamplituden for å finne elektronet på kjernens plass ved å løse,

$$a = \frac{2\mu_0}{3} g_N \beta_N |\psi(0)|^2$$

mhp.  $|\psi(0)|^2$ , hvor  $\mu_o = 1,256637 \cdot 10^{-6} \frac{Tm}{A}$  og  $\beta_N = 5,050683 \cdot 10^{-27}$  Vi har for Hydrogen, ( $g_N(H) = 5,585$ ),

$$|\psi(0)|^2 = \frac{3a_H}{2\mu_0 g_N(H) \beta_N} \approx 1,721 \cdot 10^{30} m^{-3}$$

og for Deuterium ( $g_N(D) = 0,857$ ),

$$|\psi(0)|^2 = \frac{3a_D}{2\mu_0 g_N(D) \beta_N} \approx 1,707 \cdot 10^{30} m^{-3}$$

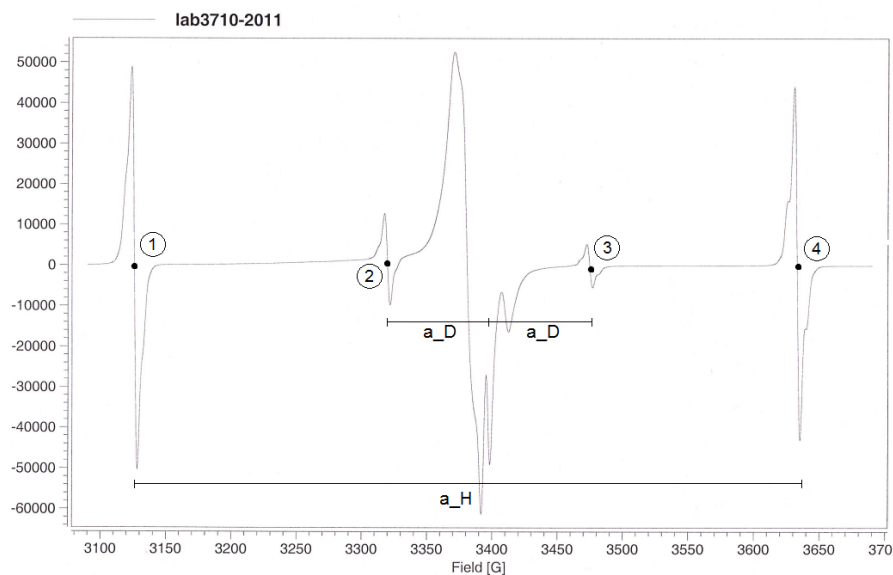
Jeg vet ikke helt hvorfor det er så stor forskjell på den teoretiske og sannsynlighetsamplituden beregnet fra de observerte hyperfinsplittingene.

Tabell 1: Verdiene til hyperfinsplittingene i Figur 3.

Punkt	B-felt [G]
1	3125,67
2	3319,67
3	3474,00
4	3632,56

## 2 Kvantitativ dosebestemmelse ved hjelp av ESR-dosimetri

ESR spekteret ble tatt opp fra nitroglyserintablettene. Siden jeg ikke har grafene har jeg skissert den generelle formen på grafene vi fikk i Figur 4.



Figur 3: ESR-spekter for H- og D-atomer

Basert på peek-to-peek verdiene i Tabell 2 laget vi et kalibreringsdiagram med peek-to-peek verdiene plottet som funksjon av de kjente dosene, slik Figur 5 viser. Setter vi inn peek-to-peek verdiene til den ukjente dosen i regresjonslikningene i Figur 5 og løser for x får vi,

$$x = \frac{8,67 - 3,96}{0,11} \approx 42,82$$

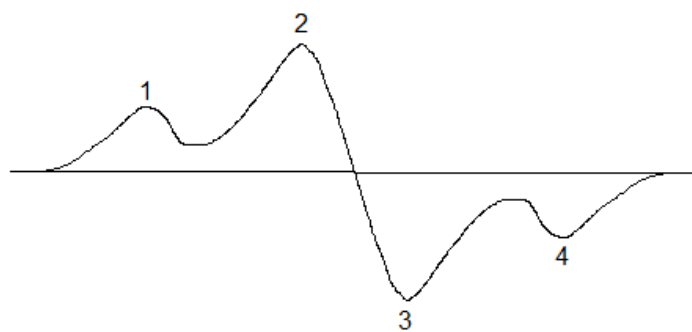
og,

$$x = \frac{14,09 - 5,42}{0,21} \approx 41,29$$

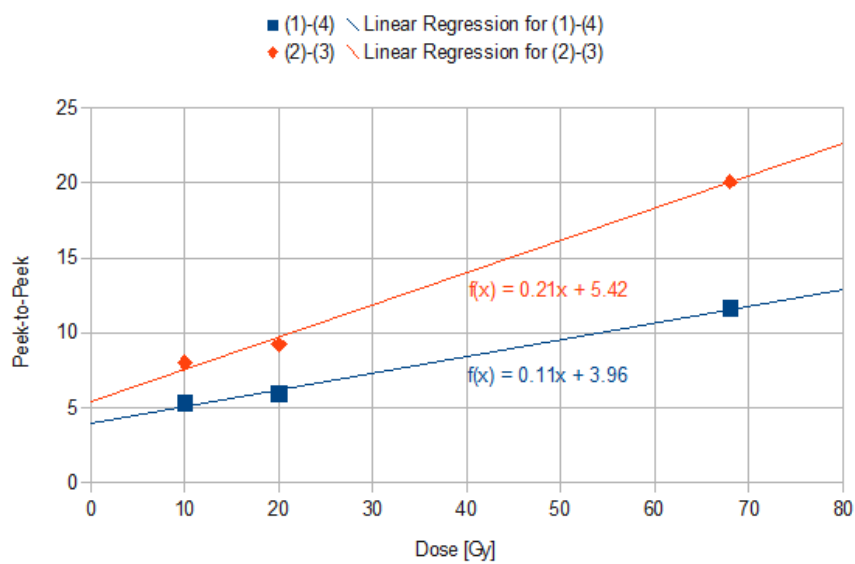
Den ukjente dosen kan vi anslå til å være gjennomsnittet av disse, altså ca. 42,06 Gy. Prognosen for å overleve en slik bestråling til hele kroppen på så kort tid er praktisk talt null.

Tabell 2: Peek-to-peek verdier for toppene, se Figur 4

Dose [Gy]	Peek-to-peek (1)-(4)	Peek-to-peek (2)-(3)
10	5,34	7,99
20	5,89	9,20
68	11,64	20,10
Ukjent	8,67	14,09



Figur 4: Skisse av ESR-spekter



Figur 5: Kalibreringsdiagram