

FYS3710 EPR

Kristian Tuv

November 16, 2017

1 Innledning

I denne oppgaven skal vi bruke Elektron Paramagnetisk Resonans spektroskopi til

- a) Deteksjon av H og D-atomer i bestrålt vann og tungtvann
- b) Dosebestemmelse av bestrålte nitroglyserintabletter fra kjellerulykken i 1982

2 Teori

Et elektron har et magnetisk moment

$$\mu = -g\beta S$$

der g er en karakteristisk konstant og β er Bohrmagnetonet $e\hbar/2me$ og S er spinnet.

Elektronet vil påvirkes av et ytre magnet felt og rette seg etter magnetfeltet med spinnet enten parallellt eller antiparallellt.

Disse to tilstanden har ikke samme energi og energidifferansen er

$$\Delta E = g\beta B$$

Der B er den magnetiske flukstettheten. Det vil alltid være noen flere elektroner i tilstanden forbundet med lavest energi. Vi kan indusere overganger mellom de to energitilstandene ved å utsette spinnsystemet for elektronmagnetisk stråling med energi

$$h\nu = \Delta E = g\beta B$$

der ν er frekvensen til strålingen. Dette kalles resonansbetingelsen.

Sannsynligheten for å få overganger mellom tilstandene er den samme uansett hvilken vei overgangen skjer, men fordi det er flere elektroner i den laveste energi tilstanden vil vi få en netto energiabsorpsjon. Det er denne energiabsorpsjonen som utgjør et EPR-signal.

Intensiteten av energiabsorpsjonener proporsjonalt med antallet uparede elektroner i prøven som studeres. Arealet er ofte proporsjonalt med absorpsjonsskurvens amplitude, slik at det under slike forhold rekkes å måle absorpsjonsskurvens amplituder i stedet for å integrere spektret for å finne arealet.

EPR spekteret er også avhengig av om det finnes kjerner i nærheten av elektronet som kan påvirke det magnetiske momentet til elektronet. Slike vekselvirkninger fører til at den enkle energiabsorpsjonslinjen en får ved resonans fra elektronet alene blir splittet opp på en måte som er karakteristisk for hvilke kjerner elektronet vekselvirker med, antallet av slike kjerner, samt styrken av koplingen til de forskjellige kjernene.

3 Gjennomføring del a

Svovelsyre fra en blanding av tungtvann og normalt vann dryppes med en dråpeteller ned i et bad med flytende nitrogen ($T=77\text{ K}$). Iskulene som dannes bestråles med røntgenstråling (60 kV / 40 mA) i ca. 10 minutter og EPR spektrene tas deretter opp ved 77 K. Vi leser av magnetfelt verdiene på toppene i spekeret, og bruker disse verdiene til å beregne

4 Oppgaver del a

1

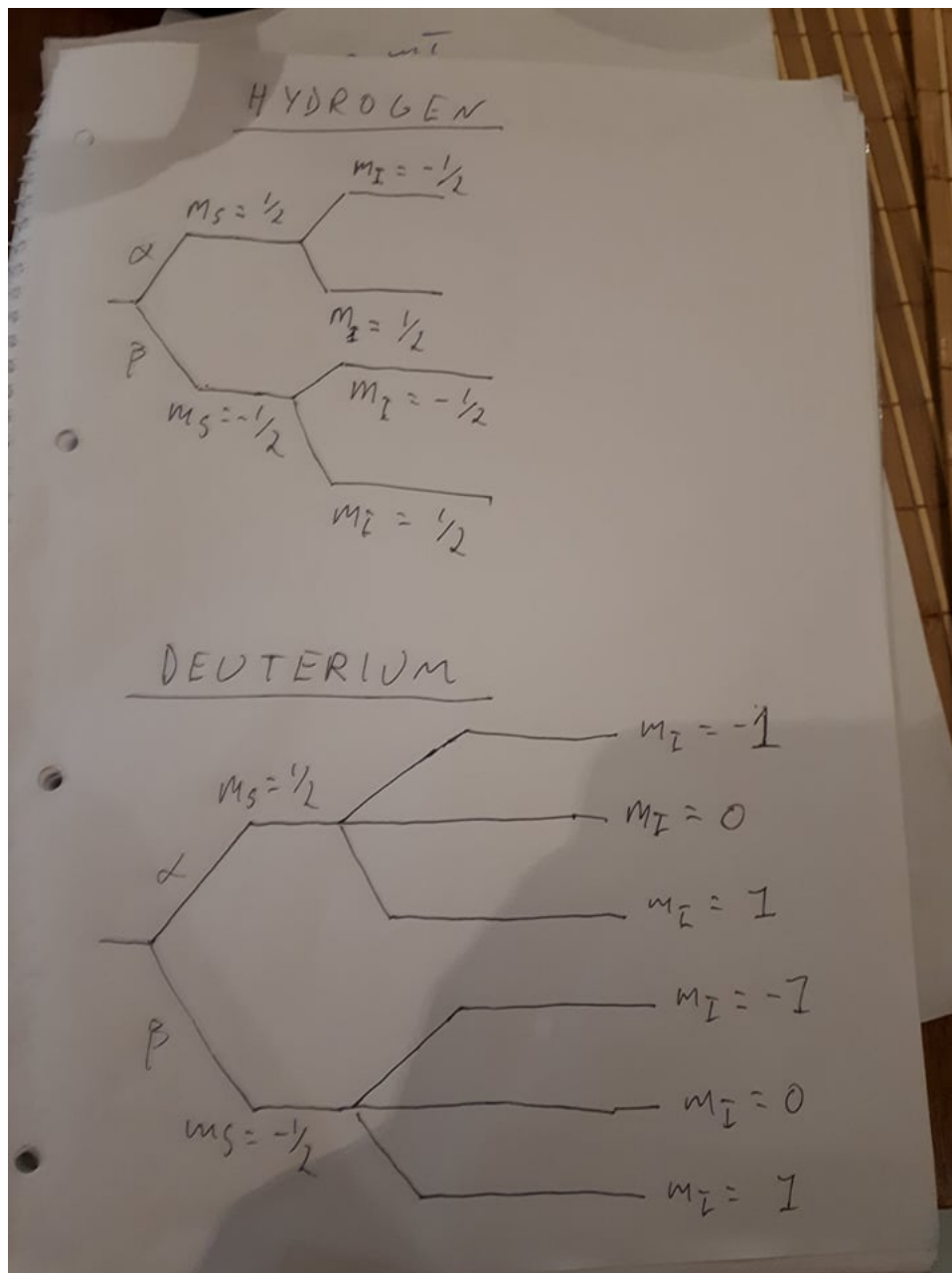


Figure 1: Energidiagram

2

$$a = (2\mu_0/3)g_N\beta_N|\Psi(0)|^2$$

Det eneste som er ulikt for a_H og a_D er g_N , så

$$\frac{a_H}{a_D} = 5.585/0.857 = 6.517$$

3 og 4

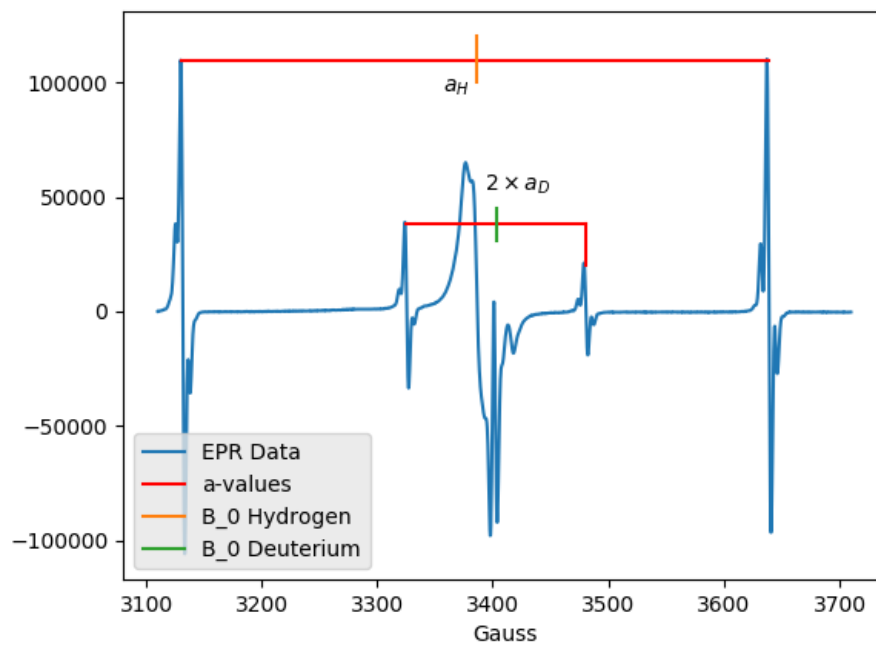


Figure 2: EPR spekter. De røde linjene markerer hyperfinsplittingene a_H og a_D . Den tredje linjen til deuterium ligger i midten sammen med støyen fra svovel, vi har derfor målt avstanden $a_D \times 2$ og må derfor dele denne avstanden på to for å finne a_D

5

Fra målingene har vi:

$$H_1 = 3131.8 \text{ gauss}$$

$$H_2 = 3639.2 \text{ gauss}$$

$$a_H = H_2 - H_1 = 507.4 \text{ gauss} = 50.74 \text{ mT}$$

$$D_1 = 3325.6 \text{ gauss}$$

$$D_2 = 3480.7 \text{ gauss}$$

$$a_D = (D_2 - D_1)/2 = 77.55 \text{ gauss} = 7.755 \text{ mT}$$

$$a_H/a_D = 6.543$$

Sammenligner vi med det teoretiske resultatet i oppgave 3.2, er dette ganske bra.

6

$$B_0(H) = (H_1 + H_2)/2 = 3385.5 \text{ gauss} = 338.55 \text{ mT}$$

$$B_0(D) = (D_1 + D_2)/2 = 3403.15 \text{ gauss} = 340.315 \text{ mT}$$

$$g_H = h\nu/\beta B_0(H) = 2.01324$$

$$g_D = h\nu/\beta B_0(D) = 2.00279$$

Disse er ikke like på grunn av spinn-bane koblingen. Elektronets angulær moment og egenspinns vekselvirker med hverandre, noe som fører til en liten korreksjon i energinivåene.

7

Teoretisk:

$$|\Psi(0)|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp(0/a_0)\right)^2 = \frac{1}{\pi a_0^3}$$

a_0 er bohrradien på $0.529 \times 10^{-10}\text{m}$

$$\rightarrow |\Psi(0)|^2 = 2.15022106014e + 30m^{-3}$$

Bare avhengig av bohrradien, og er derfor den samme for H og D

Eksperimentelt:

$$|\Psi(0)|^2 = 3 * a / (2\mu_0 g_N \beta)$$

$$\beta = 9.274009e - 24 \text{ J/T } \mu u_0 = 1.257e - 6 \text{ T*m/A } g_N(H) = 5.585 \text{ } g_N(D) = 0.857 \text{ } a_H = 50.74\text{mT } a_D = 7.755 \text{ mT}$$

Fyller vi inn verdiene får vi

$$|\Psi_H(0)|^2 = 1.16900334479e + 27$$

$$|\Psi_D(0)|^2 = 1.16436582094e + 27$$

Aner ikke hva problemet er.

5 Gjennomføring del b

Vi skal ta opp EPR spektre fra tre rør med pulver av bestrålte tabletter. Disse rørene har blitt bestrålt med 68 Gy, 20 Gy og 10 Gy. Vi adderer sammen fire spektre for hver prøve. I tillegg adderer vi sammen fire spektre fra en prøve bestrålt med et ukjent mengde Gy, som skal være tilsvarende mengde som ble funnet i nitroglyserin tablettene til J.L. Vi lager et kalibreringsdiagram utifra prøvene med kjente doser og benytter dette digrammet til å bestemme dosen J.L fikk under kjellerulykken.

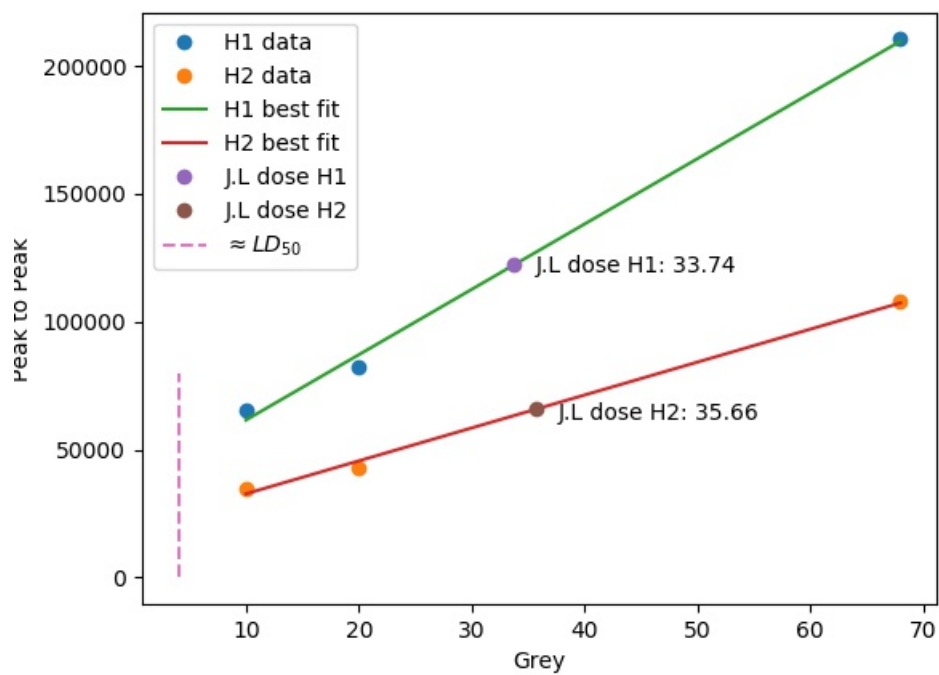
6 Oppgaver del b

1

2

Dose	H_1	H_2
68	2.105×10^5	1.078×10^5
20	82503	4.307×10^4
10	65356	3.481×10^4
J.L	1.222×10^5	6.575×10^4

3



4

Utifra kurvene i oppgave 3 ser vi at dosen J.L fikk i seg var ca 34 Gy

5

Siden en helkroppsdose på 10 Gy er regnet som en grense der 100 % av befolkningen vil dø, ville det vært et medisinsk mirakel om J.L overlevde en helkroppsdose på 34 Gy