0.0.1 Übersicht

ESR, NMR:

- resonante Absorption von Mikrowellenstrahlung durch paramagn. Ionen, Moleküle… in einem statischen Magnetfeld
- Aufspaltung der Energieniveaus durch statisches Magnetfeld
- Anregung von Übergängen zwischen Energieniveaus durch oszillierendes Magnetfeld
- ESR: magnet. Dipole nötig, Oszillationsfrequenz im Mikrowellenbereich

Bloch-Gleichungen:

- Bewegungsgleichungen für Magnetisierung $\vec{M}$
- Änderung der Magnetisierung in Abhängigkeit äußerer Felder
- phänomenologische, einfachst mögliche Beschreibung

0.0.2 Übersicht

- für ESR magnet. Dipole notwendig: Spin, Drehmoment
- magnet. Moment: Maß für die Stärke eines Dipols
- magnet. Moment eines Atoms: LS-Kopplung:

$$\vec{\mu} = -\mu_{\mathrm{B}} \left(\vec{L} + g\vec{S} \right) = -\gamma \hbar \vec{J} \tag{0.1}$$

- negatives Vorzeichen: Elektronen
- g: Lande-Faktor, gyromagnetisches Verhältnis

- klassische Rechnung μ_B

$$\hbar L = mvr \tag{0.2}$$

$$\mu = IA = \frac{\mathrm{e}}{2\pi r/v}\pi r^2 = \frac{evr}{2} = \frac{e\hbar}{2m}L = \mu_\mathrm{B} L \tag{0.3}$$

- S, L, J aus Hundschen Regeln
- LS-Kopplung (Spin-Bahn–Kopplung) – aus $\vec{L}$ und $\vec{S}$: $\vec{J}$
- Hamilton-Operator: $\mathcal{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2$, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, $\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}$
- Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{H} = g\mu_\mathrm{B}\vec{H} \cdot \vec{J} = g\mu_\mathrm{B} H J_z \tag{0.4}$$

0.0.3 Zeeman-Aufspaltung

- $J + 1$-fache Aufspaltung
- Aufhebung der Entartung
- äquidistante Aufspaltungen
- nur gültig bei schwachen Feldern

0.0.4 Bewegungsgleichungen

- Integration dτ ueber Raum und Spins
- Erwartungswert eines Dipols
- Heisenbersche Bewegungsgleichungen, Ehrenfest-Theorem

- μ ist nicht zeitabhängig $\Rightarrow$ Einsetzen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\vec{\mu}\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle[\mathcal{H},\vec{\mu}]\rangle \tag{0.5}$$
$$= -\mathrm{i}\gamma^2\hbar H\langle[J_z,\vec{J}]\rangle \tag{0.6}$$
$$= \gamma^2\hbar H\langle J_y\vec{e}_x - J_x\vec{e}_y\rangle \tag{0.7}$$
$$= \gamma H\langle \mu_x\vec{e}_y - \mu_y\vec{e}_x\rangle \tag{0.8}$$
$$= \gamma\vec{H}\times\langle\vec{\mu}\rangle \tag{0.9}$$

- gleiche Bewegungsgleichung wie klassischer Dipol
- Dipole wechselwirken nicht miteinander
- isotropes System (kein Kristallfeld)
- Gültigkeit der LS-Kopplung ($\vec{J}$)
- auch gültig für Magnetisierung

0.0.5 statisches Magnetfeld

- statisches Magnetfeld $\vec{H} = H\vec{e}_z$
- Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mu}_x = -\gamma H\mu_y \tag{0.10}$$
$$\dot{\mu}_y = \gamma H\mu_x \tag{0.11}$$
$$\dot{\mu}_z = 0 \tag{0.12}$$

- harmonischer Oszillator

$$\ddot{\mu}_x = -\gamma H \dot{\mu}_y = -(\gamma H)^2 \mu_x \tag{0.13}$$
$$\ddot{\mu}_y = \gamma H \dot{\mu}_y = -(\gamma H)^2 \mu_y \tag{0.14}$$

0.0.6 Lösung im rotierenden Magnetfeld

- magnet. Resonanzexperimente benutzen zeitl. veränderliche Felder
- experimentell üblich: Feld in z-Richtung konstant, $\cos \omega t$ in x-Richtung
- Transformation

$$\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\vec{\mu}'}{\mathrm{d}t} + \vec{\omega} \times \vec{\mu} \tag{0.15}$$
$$\frac{\mathrm{d}\vec{\mu}'}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\vec{\mu}}{\mathrm{d}t} - \vec{\omega} \times \vec{\mu} = \gamma \vec{H} \times \vec{\mu} - \vec{\omega} \times \vec{\mu} \tag{0.16}$$
$$= \gamma \underbrace{\left(\vec{H} - \frac{\vec{\omega}}{\gamma}\right)}_{\vec{H}_e} \times \vec{\mu} \tag{0.17}$$

- $f = \frac{\gamma H_1}{2\pi}, \Rightarrow \frac{T}{2} = \frac{\pi}{\gamma H_1}$

0.0.7 Bloch-Gleichungen

- bei Resonanzexperimenten: Resonanz durchlaufen
- eine Möglichkeit: 90°-Puls
- bis jetzt: unendliche Präzession
- Präzession ist nicht kohärent über die ganze Probe

- tatsächlich: Abnahme der Präzession
- Einführen von Relaxationstermen
- Annahme linearer Antwort (mathematisch einfach)
- statistisches Problem ⇒ Magnetisierung
- Energie nur abhängig von M_z ⇒ Kopplung ans Gitter (Spin-Gitter-Relaxation)
- x und y symmetrisch
- Spin-Spin-Relaxations meistens schneller als Spin-Gitter-Relaxation