

UNIVERSITÄT ZU KÖLN

MATHEMATISCH–NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT



PRAKTIKUM B

28. Mai 2024

---

# B1.5

## Elektronenspinresonanz

---

CATHERINE TRAN  
CARLO KLEEFISCH  
OLIVER FILLA

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1	Elektromagnetismus . . . . .	4
2.1.1	Dipolmoment . . . . .	4
2.1.2	Spin . . . . .	4
2.1.3	Zeemann–Effekt . . . . .	5
2.1.4	Lamorpräzession . . . . .	5
2.1.5	Paramagnetismus . . . . .	5
2.1.6	Erdmagnetfeld . . . . .	6
2.2	Resonanz . . . . .	6
2.3	Energieniveaus . . . . .	6
2.3.1	Hauptstruktur . . . . .	6
2.3.2	Feinstruktur . . . . .	7
2.4	Elektrotechnik . . . . .	7
2.4.1	Schwingkreise . . . . .	7
2.4.2	Impedanz . . . . .	7
2.4.3	Wheatstonebrücke . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Durchführung</b>	<b>9</b>
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>10</b>
<b>5</b>	<b>Fazit</b>	<b>11</b>
<b>6</b>	<b>Literatur</b>	<b>12</b>

# 1 Einleitung

Die Elektronenspinresonanz (ESR) ist eine Hochfrequenzspektroskopiemethode, welche das Untersuchen von Eigenschaften paramagnetischer Proben ermöglicht. Sie basiert auf dem Zeeman-Effekt, der die Aufspaltung von Energieniveaus in einem äußeren Magnetfeld begründet.

Bei der ESR kann man Übergänge zwischen Zeeman-Niveaus mit gleicher Hauptquantenzahl beobachten, indem die resonante Absorption von Mikrowellen beobachtet wird.

Durch das aufgezeichnete Absorptionsspektrum lässt sich weiterhin der Landé-Faktor bestimmen.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Elektromagnetismus

#### 2.1.1 Dipolmoment

Das magnetische *Dipolmoment*  $\vec{\mu}$  tritt auf, wenn sich elektrische Ladungen bewegen. Es lässt sich über das auf einen magnetischen Dipol wirkende Drehmoment  $\vec{\tau}$  in einem Magnetfeld  $\vec{B}$  definieren.

Für eine ebene Leiterschleife ist es folgendermaßen beschrieben. [3] Damit ist das Dipolmoment  $\vec{\mu}$  parallel zum Drehimpuls  $\vec{L}$ . Die Energie  $E$  zur Ausrichtung eines Dipolmomentes wird durch das Skalarprodukt  $\vec{\mu} \cdot \vec{B}$  beschrieben.

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \quad (2.1)$$

$$E = \vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.2)$$

Das magnetische Moment eines Atoms wird durch Rotation einer elektrischen Ladung erzeugt. Beispielsweise entsteht im Bohr–Sommerfeld’schen Atommodell das *Bohr’sche Magneton*  $\mu_B$  durch die Rotation eines Elektrons um den Atomkern. Es wird durch die reduzierte Planck–Konstante  $\hbar$ , die Elementarladung  $e$  und die Elektronenmasse  $m_e$  beschrieben.

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (2.3)$$

#### 2.1.2 Spin

Der Spin  $\vec{s}$  ist der Drehimpuls, der durch die Rotation eines Körpers um sich selbst entsteht. Er kann nur einen von zwei Werten annehmen.

Beispielsweise beträgt der Eigenwert des Elektronenspins immer  $\pm \frac{\hbar}{2}$ , insbesondere gilt für die  $z$ -Komponente des Spins  $\hat{s}_3 |z\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |z\pm\rangle$ . Dadurch ist die magnetische Quantenzahl  $m = \pm \frac{1}{2}$ . Da  $j$  die Grenzen der gültigen  $m$  definiert, muss die Drehimpulsquantenzahl  $j = s = \frac{1}{2}$  sein. Dies wird als Spin bezeichnet.

Elektronen nennt man *Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen* oder Fermionen, da der Spin  $s = \pm \frac{1}{2}$  halbzahlig ist.

Das Dipolmoment  $\vec{\mu}$  und der Spin  $\vec{s}$  sind über das *gyromagnetische Verhältnis*  $\gamma$  miteinander verknüpft. Dazu wird der *Landé-Faktor*  $g$  benötigt.

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{s} \quad (2.4)$$

$$\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar} \quad (2.5)$$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) + l(l+1)}{2j(l+1)} \quad (2.6)$$

Hierbei werden die Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren  $\hat{j}, \hat{s}, \hat{l}$  benötigt, die den Spin  $\vec{s}$ , den Bahndrehimpuls  $\vec{l}$  und den Gesamtdrehimpuls  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  beschreiben. Falls es keinen Bahndrehimpuls  $l = 0$  gibt, so folgt  $g = 2$ .

### 2.1.3 Zeemann–Effekt

Nach dem Bohr–Sommerfeldschen Atommodell haben Elektronen durch die Rotation um den Atomkern einen gequantelten Drehimpuls  $\vec{L}$ . Er ist durch die Quantenzahl  $l = 1, 2, 3, \dots$  quantisiert, es gilt  $|\vec{L}| = l\hbar$ . Die Drehimpulskomponente in Richtung der  $z$ -Achse  $L_z = m\hbar$  ist nun durch eine magnetische Quantenzahl  $m = -l, -l + 1, \dots, l$  zu beschreiben.

Durch  $L_z$  werden die Energieniveaus der Elektronen verschoben. Die Energieverschiebung  $\Delta E$  entspricht der Energie, ein Dipolmoment  $\vec{\mu}$  in einem Magnetfeld  $\vec{B}$  auszurichten (2.2). Diese Verschiebung führt zu einer Verschiebung der Spektrallinien. Außerdem ist dadurch auch das magnetische Moment gequantelt.

Aufgrund des Zeemann–Effekts kommt es zur Lamorpräzession der Elektronen.

### 2.1.4 Lamorpräzession

Das magnetische Moment  $\mu$  eines Spins im Magnetfeld  $\vec{B}$  weist durch Quantenschwebung eine Präzession mit einer *Lamorfrequenz*  $\omega_L$  auf. Dies bedeutet, dass der Spin rotiert.

$$\omega_L = \gamma \cdot B \quad (2.7)$$

### 2.1.5 Paramagnetismus

In einem paramagnetischen Material existieren innere magnetische Dipolmomente, die beispielsweise durch den Spin und den Bahndrehimpuls der Elektronen hervorgerufen werden. Im Gegensatz zum Ferromagnetismus bilden diese jedoch keine kohärenten Domänen, sondern sind zufällig angeordnet. Ein Atom benötigt ungepaarte Elektronen, um ein permanentes Dipolmoment aufzuweisen.

Erst in Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes richten sich die Dipolmomente entlang des Feldes aus. Daher ist die magnetische Suszeptibilität  $\chi$  eines Paramagneten positiv. Die Magnetisierung  $M$  ergibt sich aus dem Produkt der Suszeptibilität  $\chi$  und der magnetischen Feldstärke  $H$ .

Die Suszeptibilität ist sowohl material- als auch temperaturabhängig. Mit steigender Temperatur erhöht sich die Wahrscheinlichkeit einer antiparallelen Ausrichtung der magnetischen Dipolmomente zum Magnetfeld. Zudem führt die erhöhte thermische Energie zu einer Zunahme der Eigenbewegung der Teilchen, was der Ausrichtung entgegenwirkt. Dadurch nimmt die Magnetisierung ab. Dieses Verhalten wird durch das Curie–Gesetz beschrieben, welches die Curie–Konstante  $C$  einführt.

$$\chi = \frac{C}{T} \quad (2.8)$$

### 2.1.6 Erdmagnetfeld

Unsere Erde verhält sich wie ein großer Stabmagnet mit einem starken Magnetfeld.

95 % des Feldes entsteht aus Induktionsvorgängen im flüssigen, elektrisch leitfähigen Erdkern. Dieser Prozess wird Geodynamo-Prozess genannt. Magnetisierte Gesteine sowie Felder von Stromsystemen in der Ionosphäre und Magnetosphäre tragen die restlichen 5 % zum Magnetfeld bei.

Die Stärke des Feldes ist abhängig vom Ort und schwankt stark. Geodynamo-Prozesse polen das Erdmagnetfeld um, was tausende Jahre dauert. Momentan befindet sich der magnetische Nordpol in der Nähe des geografischen Südpols und umgekehrt. Die magnetische Flussdichte beträgt am Äquator etwa  $25 \mu T$  und an den Polen etwa  $70 \mu T$ . [5]

## 2.2 Resonanz

Ganz allgemein ist Resonanz das verstärkte Mitschwingen eines schwingungsfähigen Systems, wenn es einer zeitlich veränderlichen Einwirkung unterliegt. Dabei kann das System um ein Vielfaches stärker ausschlagen als beim konstanten Einwirken der Anregung mit ihrer maximalen Stärke.

Im Falle von ESR werden die magnetischen Dipole von Elektronen resonant angeregt. Dazu sind ungepaarte Elektronen notwendig, die durch Radikale bereitgestellt werden.

Als *Radikale* bezeichnet man Atome oder Moleküle mit mindestens einem ungepaarten Elektron, die meist besonders reaktionsfreudig sind. Radikale werden mit einem Punkt dargestellt, z.B. Stickstoffmonoxid ( $\text{NO}^\bullet$ ), der das freie Elektron symbolisiert. [4]

## 2.3 Energieniveaus

Nicht alle physikalischen Größen können kontinuierliche Werte annehmen. In der Quantenmechanik sind nur bestimmte diskrete Werte erlaubt. Demnach ist auch die Energie in Atomen gequantelt. Durch die Quantenhypothese ist die minimale Größe  $E$  der Energiepakete bekannt, die übertragen werden. Diese wird durch das reduzierte Planck'sche Wirkungsquantum  $\hbar$  und die Kreisfrequenz  $\omega$  beschrieben

$$E = \hbar \cdot \omega \quad (2.9)$$

### 2.3.1 Hauptstruktur

Zur Vereinfachung wird im Folgenden das Wasserstoffatom betrachtet. Dessen Energieeigenwerte sind allein durch die Hauptquantenzahl  $n$  bestimmt. Sie wird zudem durch die Rydberg-Konstante  $Ry$  und die Kernladungszahl  $Z$  beschrieben.

$$E_n = -Ry \cdot \frac{Z^2}{n^2} \quad (2.10)$$

$$Ry = 13.6057 \text{ eV} \quad (2.11)$$

Die Energiedifferenz  $E_{21}$  zwischen zwei Energiezuständen entspricht der Energie des Photons, das bei dem Übergang zwischen den Zuständen erzeugt oder vernichtet wird.

$$E_{21} = \text{Ry} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2.12)$$

$$= \hbar\omega \quad (2.13)$$

Die Drehimpulsquantenzahl  $l$  erfüllt die Bedingung  $l \leq n-1$ , woraus folgende Bedingung für den Entartungsgrad  $k$  folgt.

$$k = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \quad (2.14)$$

$$k = n^2 \quad (2.15)$$

### 2.3.2 Feinstruktur

## 2.4 Elektrotechnik

### 2.4.1 Schwingkreise

Ein *LC-Schwingkreis* besteht aus einem Kondensator  $C$  und einer Spule  $L$ , die kurzgeschlossen sind. Die Ladung des Kondensators wird über die Spule entladen und infolge der Selbstinduktion der Spule umgekehrt gepolt wieder aufgeladen. Wegen Leitungswiderständen klingt der Schwingkreis nach wenigen Perioden ab.

### 2.4.2 Impedanz

Die elektrische *Impedanz* ist ein elektrischer Widerstand in der Wechselstromtechnik. Sie gibt bei einem zweipoligen Netzwerkelement das Verhältnis von elektrischer Spannung  $U$  zur Stromstärke  $I$  an.

Der Begriff wird insbesondere dann verwendet, wenn zwischen den beiden Größen eine Phasenverschiebung besteht, wodurch sich das Verhältnis vom Widerstand in Gleichstromanwendungen unterscheidet.

Die Impedanz einer Spule  $S_L$  wird durch die Induktivität  $L$  bestimmt, die Impedanz eines Kondensators  $S_C$  durch die Kapazität  $C$ .

$$Z_L = i\omega L \quad (2.16)$$

$$Z_C = \frac{1}{i\omega C} \quad (2.17)$$

Ein *Ohm'scher Widerstand* ist dagegen ein elektrischer Widerstand, der unabhängig von elektrischer Spannung  $U$ , Stromstärke  $I$  und deren Frequenz  $\nu$  ist. Das *Ohm'sche Gesetz* kann sowohl für Ohm'sche Widerstände  $R$  als auch für Impedanzen  $Z$  angewendet werden.

$$U = R \cdot I \quad (2.18)$$

$$U = Z \cdot I \quad (2.19)$$

### 2.4.3 Wheatstonebrücke

Eine *Wheatstonebrücke* wird verwendet, um die ohm'schen und kapazitiven Anteile von Wechselstromwiderständen zu bestimmen.

Dabei werden zwei Wechselstromwiderstände, bestehend aus einem Ohm'schen Widerstand  $R$  und einem Kondensator  $C$ , in Reihe geschaltet. Parallel dazu wird ein Widerstand geschaltet, der mit einem Schleifdraht geregelt werden kann. Dabei ist  $R_1$  der Widerstand in der Masche mit den zu bestimmenden Widerständen  $R_x$  und  $C_x$ ,  $R_2$  ist der Widerstand in der Masche mit bekannten Widerständen  $R_0$  und  $C_0$ .

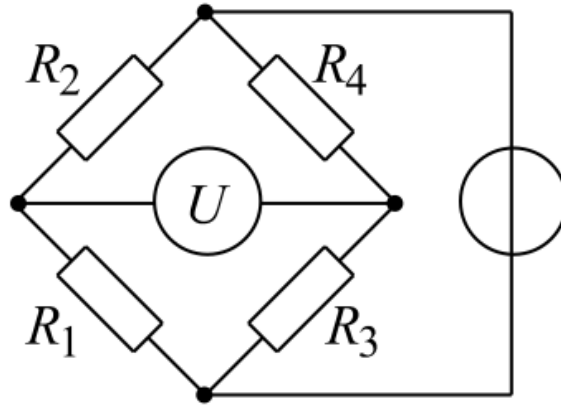


Abbildung 1: Schaltplan einer Wheatstonebrücke [2]

Durch das Oszilloskopsignal wird der Abgriff des Schleifdrahtes in die Mitte gebracht. Der Nullabgleich erfolgt dadurch, dass durch eine geeignete Wahl des Widerstandes  $R_0$  und der Kapazität  $C_0$  eines Kondensators das Signal am Oszilloskop auf ein Minimum gebracht wird. Der Feinabgleich erfolgt mit dem Schleifdraht.

Mithilfe der *Wheatstoneformel* kann ein unbekannter Widerstand  $R_x$  aus drei bekannten Widerständen  $R_i$  bestimmt werden.

$$R_1 I_A = R_2 I_B \quad (2.20)$$

$$R_3 I_A = R_4 I_B \quad (2.21)$$

$$\Rightarrow \frac{R_1}{R_2} = \frac{R_3}{R_4} \quad (2.22)$$



### **3 Durchführung**

## 4 Auswertung

## 5 Fazit

## 6 Literatur

- [1] Universität zu Köln, “B1.5: Elektronenspinresonanz”, April 2024, Online verfügbar unter [https://teaching.astro.uni-koeln.de/sites/default/files/praktikum\\_b/Anleitung\\_1.5.pdf](https://teaching.astro.uni-koeln.de/sites/default/files/praktikum_b/Anleitung_1.5.pdf)
- [2] Wikimedia, “File:WhBr\_Diagonalbild.svg”, [https://commons.wikimedia.org/wiki/File:WhBr\\_Diagonalbild.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:WhBr_Diagonalbild.svg), Abruf am 23.05.2024
- [3] J. D. Jackson, “Classical Elektrodynamics”, John Wiley & Sons, 1975, ISBN 978-0-471-43132-9
- [4] Chemie.de, “Radikale (Chemie)”, [https://www.chemie.de/lexikon/Radikale\\_\(Chemie\).html](https://www.chemie.de/lexikon/Radikale_(Chemie).html), Abruf am 23.05.2024
- [5] Physikalische–Technische Bundesanstalt, “Geomagnetismus: Grundlagen zum Erdmagnetfeld”, [https://www.ptb.de/cms/fileadmin/internet/fachabteilungen/abteilung\\_2/2.5\\_halbleiterphysik\\_und\\_magnetismus/2.51/Geomagnetismus.pdf](https://www.ptb.de/cms/fileadmin/internet/fachabteilungen/abteilung_2/2.5_halbleiterphysik_und_magnetismus/2.51/Geomagnetismus.pdf), Abruf am 27.05.2024