# 315 – Messung des HFS-Intervallfaktors an quasi-freiem, atomarem Wasserstoff

Versuchsprotokoll zum F-Praktikum an der Ruhr-Universität Bochum

Paul Katolla <p\_katolla@yahoo.de> Tobias Krähling <Tobias.Kraehling@SemiByte.de> 25.09.2009 Version 1.1

## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Grundlagen2.1Teilchen im externen Magnetfeld2.2Hyperfeinstrukturaufspaltung2.3Hyperfeinstrukturaufspaltung im schwachen externen Magnetfeld2.4Hyperfeinstrukturaufspaltung im starken externen Magnetfeld2.5Die Breit-Rabi-Formel2.6Linienverbreiterungsmechanismen	<b>2</b> 3 5 6 7 9
3	Aufbau des ESR-Spektrometers         3.1       Abstimmung der Mikrowellenbrücke	<b>9</b> 10
4	Kalibrierung des Magnetfeldes	11
5 6	Bestimmung des Intervallfaktors von Wasserstoff         5.1       Übersichtsaufnahme         5.2       Aufnahme der Wasserstoff-Resonanzen         5.3       Bestimmung des Intervallfaktors         Überprüfung der Breit-Rabi-Formel	<ol> <li>13</li> <li>14</li> <li>14</li> <li>14</li> </ol>
7	Fazit	18
A	Anhang: Bearbeitung der Übungsaufgaben         A.1       Übung 1         A.2       Übung 2         A.3       Übung 3         A.4       Übung 4         A.5       Übung 5         A.6       Übung 6	<ol> <li>19</li> <li>19</li> <li>19</li> <li>20</li> <li>20</li> <li>20</li> </ol>
Lit	leratur	21

-1-

### 1 Einleitung

Ziel dieses Versuchs ist die Bestimmung des Hyperfeinstruktur-Intervallfaktors von quasifreiem, atomaren Wasserstoff im Rahmen des Fortgeschrittenen-Praktikums an der Ruhr-Universität Bochum. Dabei bedienen wir uns eines computergestützten Elektronen-Spin-Resonanz-Spektrometers (ESP). Vor Beginn der eigentlichen Messung wird zunächst das Magnetfeld mit Hilfe einer Kalibriersubstanz kalibriert. Anschließend wird eine Übersichtsspektrum der gefrorenen Ammoniak-Probe, in die die Wasserstoffatome eingebettet sind, aufgenommen. Entsprechend dieser Daten werden die Magnetfeldbereiche für die Resonanzlinien des atomaren Wasserstoffs ermittelt und ihre Spektren detailliert aufgenommen. Der Intervallfaktor wird anschließend numerisch sowie iterativ berechnet und die Gültigkeit der Breit-Rabi-Formel verifiziert.

### 2 Grundlagen

### 2.1 Teilchen im externen Magnetfeld

Abgesehen von dem harmonischen Oszillator sind Zweiniveausysteme einfache, jedoch wichtige, Modellsysteme in der Physik, da viele physikalische Systeme nur zwei mögliche Zustände einnehmen bzw. sich gut durch diese näherungsweise beschreiben lassen können. Ein sehr einfaches Beispiel für ein quantenmechanisches Zweiniveausystem ist ein Elektron im homogenen, externen Magnetfeld.

Weißt ein geladenes Elementarteilchen einen von Null verschiedenen Eigendrehimpuls (Spin) auf, so hat dessen Existenz unmittelbare Folgen für physikalische Systeme. Aufgrund des Spins *S* besitzt das Teilchen ein magnetisches Moment  $\mu$ , wobei dieses proportional zum Spin ist:

$$\boldsymbol{\mu} = g \mu_{\{B,K\}} \boldsymbol{S}$$
 mit  $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e}$  und  $\mu_K = \frac{\hbar e}{2m_p}$ . (2.1)

Hier bezeichnet  $\mu_B$  das Bohr'sche Magneton,  $\mu_K$  das Kernmagneton von Wasserstoff sowie g den Landé-Faktor (g-Faktor). Dieser stellt die Proportionalitätskonstante zwischen dem magnetischen Moment eines Teilchens und seinem Spin dar. Gemäß den quantenmechanischen Auswahlregeln kann sich die dritte Komponente des Spins, also die magnetische Quantenzahl  $m = -S, \ldots, S$ , immer nur um eine Einheit ändern. Demzufolge besitzt ein Teilchen in einem äußeren Magnetfeld **B**<sub>ext</sub> die Energie

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}_{ext} = -g\mu_{\{B,K\}}\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B}_{ext} = -g\mu_{\{B,K\}}\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}_{ext} = E(\boldsymbol{m}).$$
(2.2)

Die Energieänderung  $\Delta E$  bei einem Übergang im externen Magnetfeld beträgt folglich:

$$\Delta E = |E(m) - E(m \pm 1)| = g\mu_{\{B,K\}} B_{ext}.$$
(2.3)

#### 2.2 Hyperfeinstrukturaufspaltung

Bezieht man bei der Beschreibung von Atomen den Spin des Atomkerns mit ein, so kann man die magnetische Wechselwirkung des daraus resultierenden Kernmoments mit dem Magnetfeld der Hüllenelektronen, die Hyperfein-Wechselwirkung, beobachten. Experimentell ist diese sehr kleine Aufspaltung mit heutigen spektroskopischen Methoden gut zugänglich.

Mit dem Spin des Atomkerns, dem Kernspin I, ist ein magnetisches Moment  $\mu_I$  verbunden:

$$\boldsymbol{\mu}_I = g_K \boldsymbol{\mu}_K \boldsymbol{I}. \tag{2.4}$$

Hier ist  $\mu_K$  das Kernmagneton sowie  $g_K$  der Landé-Faktor des Kerns. Gemäß dem magnetischen Moment (Gleichung (2.4)) und dem von der Elektronenhülle am Ort des Kerns erzeugtem Magnetfeld  $B_0$  ist die Wechselwirkungsenergie gegeben durch

$$V_{HFS} = -\boldsymbol{\mu}_I \cdot \boldsymbol{B}_0. \tag{2.5}$$

Das von der Elektronenhülle erzeugte Magnetfeld  $B_0$  setzt sich zusammen aus den Beiträgen aller Bahndrehimpulse L und Eigendrehimpulse S der Elektronen. Dabei wechselwirken diese miteinander, d. h. sie koppeln zu einem Gesamtdrehimpuls der Elektronenhülle J mit

$$J = L + S. \tag{2.6}$$

Diese sogenannte Spin-Bahn-Kopplung sorgt dafür, dass *L* und *S* präzedieren. Das gesamte magnetische Moment  $\mu_J$  präzediert ebenfalls in der gleichen Ebene (siehe Abbildung 1). Betrachten wir nur das zeitliche Mittel von  $\mu_J$ , so bleibt nur die Projektion in Richtung *J* erhalten.

Damit können wir für das von der Elektronenhülle am Ort des Kerns erzeugte Magnetfeld  $B_0$ schreiben als

$$B_0 = -\bar{B}_0 \frac{J}{J}$$
 mit  $|\bar{B}_0| = 16.7 \text{ T.}$  (2.7)





Aus den Gleichungen (2.4, 2.5, 2.7) kann die Wechselwirkungsenergie für die Hyperfeinstruktur bestimmt werden zu

$$V_{HFS} = \underbrace{\frac{g_{K}\mu_{K}B_{0}}{J}}_{=:A} \boldsymbol{I} \cdot \boldsymbol{J} = \frac{A}{2} \left( \boldsymbol{F}^{2} - \boldsymbol{I}^{2} - \boldsymbol{J}^{2} \right)$$
(2.8)



Abbildung 2: Hyperfeinstrukturaufspaltung des Grundzustandes im H-Atom

mit dem Gesamtdrehimpuls F von Kernspin und Hüllenspin

$$F = I + J$$
 mit  $m_F = -F, -F + 1, \dots, F$  (2.9)

und der (auch quantenmechanisch anwendbaren) binomischen Beziehung

$$I \cdot J = \frac{1}{2} \left( F^2 - I^2 - J^2 \right).$$
 (2.10)

Die Energieeigenwerte können dann gemäß dem Hamiltonoperator ermittelt werden zu

$$E_{HFS} = \langle V_{HFS} \rangle = \frac{A}{2} \left( F(F+1) - I(I+1) - J(J+1) \right) \quad \text{mit} \quad A = \frac{g_K \mu_K \bar{B}_0}{J}, \tag{2.11}$$

wobei Berücksichtigt wurde, dass der Eigenwert eines quadratischen Drehimpulsoperators  $\langle L^2 \rangle$  gleich L(L + 1) ist. Hierbei bezeichnet A den sogenannten Intervallfaktor, der aus der Intervallregel folgt:

$$\Delta E = E_{HFS}(F) - E_{HFS}(F-1) = A \cdot F.$$
(2.12)

Für den Wasserstoffgrundzustand mit L = 0, J = I = 1/2 erhält man zwei Energieniveaus (siehe Abbildung 2), von denen der für F = 1 dreifach entartet ist:

$$A_H := A(J = I = 1/2) = 2g_K \mu_K |\bar{B}_0| = 5,875 \,\mu\text{eV}$$
 (2.13a)

$$F = 1:$$
  $E_{HFS} = \frac{1}{2} \frac{A_H}{2} = \frac{A_H}{4}$  (2.13b)

$$F = 0:$$
  $E_{HFS} = -\frac{3}{2}\frac{A_H}{2} = -\frac{3}{4}A_H$  (2.13c)

Bei der Hyperfeinstrukturaufspaltung des Grundzustandes von Wasserstoff, also dem Übergang  $F = 1 \rightarrow F = 0$ , wird Strahlung der Wellenlänge  $\lambda = 21,1$  cm ausgesandt. Dabei handelt es sich um Mikrowellenstrahlung, die bei einem sogenannten Spin-Flip-Übergang emittiert wird. Entsprechend den Auswahlregeln für Dipolstrahlung sind Spin-Flip-Übergänge verboten. Das



Abbildung 3: Zeeman-Effekt im Wasserstoffgrundzustand

bedeutet, dass die Übergangswahrscheinlichkeit für diese Art von Übergängen sehr klein ist. Atomarer Wasserstoff ist jedoch in interstellaren Gaswolken in ausreichenden Mengen vorhanden, sodass diese Strahlung trotzdem auf der Erde mit einer Intensität beobachtet werden kann, die über dem Detektionslimit liegt. Die Untersuchung dieser Strahlung spielt in der Radioastronomie eine bedeutende Rolle.

### 2.3 Hyperfeinstrukturaufspaltung im schwachen externen Magnetfeld

Setzt man atomaren Wasserstoff zusätzlich zu dem internen Magnetfeld  $B_0$  einem schwachen externen Magnetfeld  $B_{ext}$  aus, so bewirkt dies eine weitere Aufspaltung der entarteten Hyperfeinstrukturzustände des Wasserstoffgrundzustandes. Dies bezeichnet man als Zeeman-Effekt (siehe Abbildung 3).

Ohne ein zusätzliches externes Magnetfeld besitzen die Eigenzustände zu F = 1 mit den magnetischen Quantenzahlen  $m_F = (-1,0,1)$  den gleichen Energieeigenwert – sie sind entartet. Der gesamte Hüllendrehimpuls J bleibt in diesem Fall zeitlich konstant, dabei präzedieren L und S um die Richtung von J (siehe Abbildung 1). In einem schwachen externen Magnetfeld  $B_{ext}$  bleibt die Kopplung von L und S zu J erhalten. Die Richtung von J ist jedoch nicht mehr fest, da das magnetische Moment  $\mu_J$  und damit auch J ein Drehmoment im äußeren Magnetfeld erfährt. Ein schwaches Magnetfeld bedeutet hier, dass die Wechselwirkungsenergie des Kernmoments mit dem Hüllenmagnetfeld größer ist als die Wechselwirkungsenergie des Hüllenmoments mit dem externen Magnetfeld<sup>1</sup>. Dabei orientiert sich der Gesamtdrehimpuls F = I + J am äußeren Magnetfeld und präzediert langsam um dessen Feldrichtung. Die Vektoren I und J präzedieren dabei ihrerseits schnell um die Richtung von F. Dies betrifft auch die zugehörigen magnetischen Momente (siehe Abbildung 4).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Siehe hierzu auch Übung 2 im Anhang.



Abbildung 4: Drehimpulskopplung im schwachen Magnetfeld

Für den Wasserstoffgrundzustand beträgt die gesamte Aufspaltung der Hyperfeinstrukturniveaus im schwachen externen Magnetfeld

$$F = 1, m_F: \quad E_{HFS}^{ext,schw} \simeq \frac{A}{4} + \mu_B B_{ext} m_F \tag{2.14a}$$

$$F = 0: \quad E_{HFS}^{ext,schw} = -\frac{3}{4}A \tag{2.14b}$$

mit der zusätzlichen Energieverschiebung

$$\delta E_{HFS}^{ext,schw} \simeq \mu_B B_{ext} m_F. \tag{2.15}$$

### 2.4 Hyperfeinstrukturaufspaltung im starken externen Magnetfeld

Bisher haben wir den Fall betrachtet, in dem die Wechselwirkungsenergie des Kernmoments mit dem Hüllenmagnetfeld größer ist als die Wechselwirkungsenergie des Hüllenmoments mit dem externen Magnetfeld. Bei einem genügend starken externen Magnetfeld gilt dagegen genau das Gegenteil. In diesem Fall kann man keinen Gesamtdrehimpuls *F* mehr definieren. Der Kernspin *I* und der Hüllenspin *J* präzedieren unabhängig voneinander um die Richtung des externen Feldes – sie sind entkoppelt–, wobei ihr zeitliches Mittel parallel zu diesem orientiert ist (siehe Abbildung 5(b)). In noch stärkeren Magnetfeldern kann es außerdem vorkommen, dass der Hüllendrehimpuls *J* sich nicht mehr definieren lässt, da *S* und *L* unabhängig voneinander



Abbildung 5: Paschen-Back-Effekt, (a) L und S entkoppelt, (b) I und J entkoppelt.

um die Richtung des externen Feldes präzedieren (siehe Abbildung 5(a)). Das kann auch als die Entkopplung von Bahn- und Eigendrehimpuls der Elektronen verstanden werden.

Für den Wasserstoffgrundzustand beträgt die gesamte Hyperfeinstrukturaufspaltung im starken externen Magnetfeld

$$E_{HFS}^{ext,stark} = g_e \mu_B B_{ext} m_J + A_H m_I m_J - g_K \mu_K B_{ext} m_I$$
(2.16)

mit

$$A_H = 2g_K \mu_K |\bar{B}_0|. \tag{2.17}$$

Entsprechend dem erstem Term der Starkfeld-Näherung (Gleichung (2.16)) bildet sich ein Doublett mit der Aufspaltung  $g_e \mu_B B_{ext}$ , welches gemäß dem zweiten Term mit  $\Delta E = A_H/2$  in zwei weitere Niveaus aufgespalten wird. Dagegen leistet der dritte Term keinen Beitrag zur Übergangsenergie.

Als wichtigstes Resultat lässt sich festhalten, dass der Intervallfaktor *A* auch im Hochfeldbereich (siehe Abbildung 6) zu finden ist, obwohl er zunächst die Aufspaltung im Nullfeldbereich beschreibt. Bei der Nullfeldaufspaltung kommt es zu sogenannten Spin-Flip-Übergängen. Die Wahrscheinlichkeit, diese im Labor zu beobachten, ist sehr gering, da die Abregung eher durch Stöße erfolgt. Durch das Auftauchen des Intervallfaktors im Hochfeldbereich ergibt sich eine Möglichkeit, diesen aus den erlaubten Übergängen mit  $\Delta m = 1$  im Paschen-Back-Bereich zu ermitteln.

#### 2.5 Die Breit-Rabi-Formel

Der Übergangsbereich zwischen dem schwachen und dem starken externen Magnetfeld wird als Breit-Rabi-Bereich bezeichnet. Theoretisch kann dieser für J = 1/2 in geschlossener Form durch die Breit-Rabi-Formel dargestellt werden:

$$E_{HFS}^{ext}\left(I,J = \frac{1}{2}, m \neq -\left(I + \frac{1}{2}\right)\right) = -\frac{A_H}{4} - g_K \mu_K B_{ext} m \pm \frac{\Delta E_0}{2} \sqrt{1 + \frac{4m}{2I + 1}x + x^2}$$
(2.18a)

$$E_{HFS}^{ext}\left(I,J=\frac{1}{2},m=-\left(I+\frac{1}{2}\right)\right)=-\frac{A_{H}}{4}-g_{K}\mu_{K}B_{ext}m+\frac{\Delta E_{0}}{2}\left(1-x\right)$$
(2.18b)



Abbildung 6: Entwicklung der Energieniveaus für den Wasserstoffgrundzustand bei wachsendem externen Magnetfeld

Für den Wasserstoffgrundzustand (I = 1/2) beträgt der Intervallfaktor  $A_H = \Delta E_0$ . Er stimmt also mit der Gesamtaufspaltung zwischen den Zuständen F = 1 und F = 0 überein. Das positive bzw. negative Vorzeichen des Faktors vor der Wurzel in Gleichung (2.18a) ergibt sich hierbei entsprechend  $F = I \pm \frac{1}{2}$ . Zusätzlich wurde noch der dimensionslose Parameter *x* eingeführt, mit dessen Hilfe sich die Magnetfeldbereiche genauer definieren lassen:

$$x = (1+\epsilon)\frac{g_{j}\mu_{B}B_{ext}}{\Delta E_{0}} \quad \text{mit} \quad \epsilon = \frac{g_{K}\mu_{K}}{g_{J}\mu_{B}} = \frac{1}{660} \quad \text{und} \quad \Delta E_{0} = A_{H}\left(I + \frac{1}{2}\right).$$
(2.19)

In Tabelle 1 sind die vier Magnetfeldbereiche mit dem Separierungskriterium (Parameter x) und den niveauseparierenden Quantenzahlen aufgeführt.

Bereich	Feld	<b>Parameter</b> <i>x</i>	Quantenzahlen
Hyperfeinstruktur	Nullfeld	x = 0	F
Zeeman-Effekt der HFS	schwaches Feld	$x \ll 1$	$F, m_F$
Breit-Rabi-Bereich	Übergang	$x \sim 1$	$m = m_J + m_I$
Paschen-Back-Effekt der HFS	starkes Feld	$x \gg 1$	$m_J, m_I$

Tabelle 1: Übersicht	der Kriterien für die	unterschiedlichen	Magnetfeldbereiche
		unterserieunenen	magneticiabereiene

#### 2.6 Linienverbreiterungsmechanismen

Der Resonanzfall ist in einem idealen System diskret und bei einer bestimmten Kombination der Systemparameter (wie Frequenz, Magnetfeld usw.) wohlbestimmt - die sogenannte Linie. Verschiedene physikalische Effekte führen jedoch zu einer Verschmierung der Linien, dem sogenannten Linienprofil, die zu einer Verbreiterung und Verschiebung der Linien führen. Mechanismen, die zu einer homogenen Linienverbreiterung in der magnetischen Resonanz führen, sind unter anderem die Unschärferelation und die Relativbewegung der Dipole untereinander, was zu einer Fluktuation der lokalen Felder führt. Zusätzlich ist eine Dopplerverbreiterung zu erwarten, dessen Effekt jedoch aufgrund der eingeschränkten Beweglichkeit bei festen Proben gering ist. Inhomogene Verbreiterung kann neben Inhomogenitäten des externen Feldes durch Dipol-Dipol Wechselwirkungen hervorgerufen werden. Zusätzlich führen Fehlordnungen der kristallinen Struktur zu Abhängigkeiten der Larmorfrequenz von der Orientierung der Probe im Magnetfeld - die sogenannte Anisotropie des g-Faktors. Bei einer größeren Anzahl an Hyperfeinkomponenten kann es desweiteren zu unaufgelösten Linien kommen, wobei nur noch deren Einhüllende beobachtbar ist. Anisotrope Hyperfeinstruktur-Verbreiterung entsteht - wenn die HFS durch dipolare Elektron-Kern-Wechselwirkung entsteht - bei der Abhängigkeit der HFS von der externer Magnetfeldrichtung und der Verbindungsachse Elektron-Kern (Goertz, 2002, S. 34f).

Diese Verbreiterungsmechanismen sowie weitere Veränderungen des Signals durch die Messapparatur führen zu einer Profilform, die eine Überlagerung von Gauß- und Lorentzprofil darstellt. Dabei kann, je nach Einfluss der Verbreiterungsmechanismen, mal das Gauß- oder Lorentzprofil dominieren.

### 3 Aufbau des ESR-Spektrometers

In Abbildung 7 ist ein Blockschaltbild des verwendeten ESR-Spektrometers wiedergegeben. Die am Gunn-Oszillator erzeugten Mikrowellen werden in einen Mess- und Referenzarm aufgeteilt. Im Messarm durchlaufen die Mikrowellen einen variablen Abschwächer und anschließend einen Mikrowellenverstärker. Der nachfolgende variable Abschwächer (A2) ermöglicht, die dem Resonator zugeführte Mikrowellenleistung in einem großen Bereich (ca. 80 dB) zu regeln. Über einen Zirkulator (Z1) und Mikrowellensaxophon wird die Mikrowellenleistung in den Zylinderresonator (ZR) eingekoppelt. Die im Zylinderresonator reflektierte Leistung wird über den Zirkulator an ein Paar Mikrowellendetektoren (D1/2) geleitet, wobei zur Verbesserung des Signal/Rausch-Verhältnisses der zweite Detektor ein um 180° verschobenes Signal erhält. Beide Detektorsignale werden voneinander subtrahiert und mit einem Lock-In-Verstärker (LV) detektiert. Das Referenzsignal wird, nach Durchlauf eines weiteren variablen Abschwächers (A3) und einer Verzögerungsleitung mit dem Messsignal überlagert, wodurch bei Gleichphasigkeit das benötigte Absorptionssignal herausgefiltert wird<sup>2</sup>. Das Spektrometer ist so aufgebaut, dass Mess- und Referenzarmlänge gleich sind, so ist die Phasenlage zwischen beiden Wellen

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Absorptions- und Dispersionssignal sind beim Messsignal mit einer Phasenverschiebung von 90° überlagert, so dass durch Überlagerung mit einem Referenzsignal der entsprechende Anteil durch Phasenverschiebung des Referenzsignals herausgefiltert werden kann.



Abbildung 7: Blockschaltbild des ESR-Spektrometers (RUB, 2009)

unabhängig von der Frequenz, was das Messverfahren vereinfacht sowie Störungen (Fluktuationen) am Oszillator einen geringeren Einfluss haben, da bei der Überlagerung von Messund Referenzsignal beide Wellenteile dieselbe Störung aufweisen.

Der Zylinderresonator mit der Probe befindet sich im homogenen Zentrum eines Elektromagneten, dessen Feld senkrecht zur Zeichenebene in Abbildung 7 steht. Das Magnetfeld des Elektromagneten kann im Bereich der Resonanz langsam und kontinuierlich verändert werden. Zur Verbesserung des S/R-Verhältnisses wird dieses quasi-statische Magnetfeld noch durch ein mit Audio-Frequenzen oszillierenden Magnetfeld überlagert – erzeugt durch einen Audiogenerator (AG) und den in den Resonatorwänden eingebrachten Sattelspulen –, welches durch den Lock-In-Verstärker herausgefiltert wird. Hierdurch wird die Resonanz (Larmor-Bedingung) sowohl quasi-statisch als auch periodisch durchfahren. Um Signalverzerrungen zu vermeiden, sollte dabei die Modulationsamplitude des Magnetfeldes kleiner als ein drittel der Linienbreite gewählt werden. Durch den Einsatz dieses Modulationsverfahrens wird jedoch nicht das Absorptionssignal, sondern dessen erste Ableitung detektiert.

### 3.1 Abstimmung der Mikrowellenbrücke

Bevor mit den Messungen begonnen werden kann, muss zunächst die Mikrowellenbrücke abgestimmt werden. Hierzu wird am Messarm eine Leistung von 2 mW eingestellt und die Probe mit dem Dewar-Gefäß in den Resonator eingebracht. Anschließend wird die Mikrowellenfrequenz derart verändert, dass die Ausschläge der Detektoren D1 und D2 beide gleich Null sind – d. h. der Resonator befindet sich in Resonanz. Automatische Frequenzregelung sowie Referenzarm werden zugeschaltet, die Phasenlage grob auf Absorption eingestellt (Mittenlage der Skala) und das Koppelloch des Resonators solange verstellt, bis beide Detektoren etwa das gleiche Signal anzeigen (der Detektor 2 zeigt aufgrund veränderter Empfindlichkeiten immer ein etwas höheres Signal als Detektor 1 an). Zweckmäßig ist es, die Dämpfung am variablen Abschwächer A3 für die Anpassung zunächst zu verringern, so dass von beiden Detektoren die Signale sich etwa Mittig der Skala befinden (die Abschwächer sind so konzipiert, dass diese die Phasenlage nur sehr geringfügig in Abhängigkeit der Dämpfung verändern, so dass eine Veränderung der Dämpfung nicht zu einer Verstimmung der Mikrowellenbrücke führen). Anschließend wird noch einmal die Phasenlage kontrolliert und ggf. nachgeregelt, da Phasenlage und Ankopplung nicht unabhängig voneinander sind. Abschließend wird die Messleistung über A2 auf 10  $\mu$ W eingestellt.

### 4 Kalibrierung des Magnetfeldes

Sowohl die unzureichende Genauigkeit des verwendeten Teslameters (Hall-Sonde) als auch der Magnetfeldschlupf – hervorgerufen durch die Induktivität der Magneten, die zu einem geringeren Ist-Wert des Magnetfeldes als dem angesteuerten Soll-Wert führt – führen zu einem systematischen Fehler des Magnetfeldes, so dass das Magnetfeld zunächst kalibriert werden muss. Dabei hängt die Abweichung von der Scangeschwindigkeit, also der Änderungsrate des Magnetfeldes, ab. Für die Kalibrierung wird die Resonanz der Substanz DPPH (1,1-Diphenyl-2-pikryl-hydrazyl) bei derjenigen Änderungsrate des Magnetfeldes betrachtet, die auch im Folgenden für die Bestimmung des HFS-Intervallfaktors von Wasserstoff verwendet wird. Der *g*-Faktor von DPPH ist sehr genau bekannt ( $g = 2,0036 \pm 0,0001$ , (RUB, 2009, S. 15)) – somit lässt sich über Vergleich des gemessenen Magnetfeldes am Absorptionsmaximum ( $B^{exp}$ ) mit dem berechneten Magnetfeldwert ( $B^{lit}$ ) die relative Feldabweichung

$$\frac{\mathrm{d}B}{B} = \frac{B^{exp} - B^{lit}}{B^{exp}} \tag{4.1}$$

bestimmen, mit der die im Folgenden gemessenen Magnetfelder über

$$B^{korrigiert} = B^{gemessen} \cdot \left(1 - \frac{\mathrm{d}B}{B}\right) = B^{gemessen} \cdot k_f \tag{4.2}$$

korrigiert werden müssen, wobei  $k_f$  den Korrekturfaktor bezeichnet.

In den Resonator des ESR wird hierfür das Dewar-Gefäß mit der DPPH-Probe eingebracht, wobei die Höhenmarkierung am Gefäß für die Justage der Eindringtiefe in den Resonator verwendet wurde und die Apperatur gemäß Abschnitt 3.1 abgestimmt. Anschließend kann die Resonanzlinie über die Steuerungs- und Auswertesoftware aufgenommen werden, wobei die in Tabelle 2 aufgeführten Parameter für die Messung verwendet wurden.

Die Frequenz wurde während der Messung mehrfach am Mikrowellengenerator abgelesen und aus den sieben Werten der Mittelwert für die Auswertung gebildet. Anhand der Frequenzabweichung (~  $2 \cdot 10^{-5}$ %) erkennt man, das der Mikrowellengenerator die eingestellte Frequenz sehr genau halten kann. Anzumerken sei noch, dass diese Frequenzstabilität sich erst nach einiger Zeit einstellt – im kalten Zustand driftet die Frequenz, so dass vor der ersten Messung die Apperatur einige Zeit laufen sollte.



Abbildung 8: Kalibrierung mit DPPH (1,1-Diphenyl-2-pikryl-hydrazyl)

Abbildung 8 zeigt die gemessene Resonanzlinie von DPPH, in Abbildung 8(a) ist das gemessene (differenzierte) Signal dargestellt, in Abbildung 8(b) wurde das Signal integriert.

Der theoretische Wert für das Magnetfeld kann einfach bestimmt werden über die Beziehung

$$\Delta E = h\nu = Bg\mu_B \qquad \Rightarrow \qquad B^{lit} = \frac{h\nu}{g\mu_b}$$

bestimmt werden und man erhält

$$B^{lit} = (333,124 \pm 0,017) \,\mathrm{mT},$$

wobei der Fehler durch Gauß'sche Fehlerfortpflanzung ermittelt wurde<sup>3</sup>. Der experimentelle Wert wurde aus dem Nulldurchgang (Abbildung 8(a)) mit Hilfe des Analyseprogrammes bestimmt zu

$$B^{exp} = 335,095778 \,\mathrm{mT}.$$

Für den Korrekturfaktor erhält man (vgl. Gleichung (4.1) und (4.2))

 $k_f = 0,99411 \pm 0,00005.$ 

<sup>3</sup> Der Frequenzfehler konnte dabei aufgrund des sehr kleinen Fehlerintervalls vernachlässigt werden.

Haupt-Magnetfeld <i>B</i> [mT]	$335,0 \pm 1,25$
Modulationsfeld $\delta B$ [mT]	0,01
Scanzeit T <sub>S</sub> [min]	5
Anzahl der Messpunkte	512
Frequenz v [GHz]	9,3411654
Frequenzabw. $\Delta \bar{\nu}$ [GHz]	±0,0000016

#### Tabelle 2: Parameter bei der Kalibrierung

Haupt-Magnetfeld B [mT]	$335,0 \pm 30$
Modulationsfeld $\delta B$ [mT]	0,1
Scanzeit $T_S$ [min]	10
Anzahl der Messpunkte	512
Frequenz $\bar{\nu}$ [GHz]	9,339486



**Tabelle 3:** Parameter für die Aufnahme desAmmoniak-Spektrums



Dabei wurde für die Fehlerabschätzung die Gauß'sche Fehlerfortpflanzung verwendet, wobei  $\Delta g$  den Fehler dominiert und  $\Delta v$  vernachlässigt werden kann. Da für den Fehler von  $B^{exp}$  kein Intervall für den Nulldurchgang aufgenommen wurde, ist hier der Fehler durch Integration und anschließendem Fit mit einem Lorentz-Profil (siehe Abbildung 8(b)) abgeschätzt worden<sup>4</sup>. Das Lorentz-Profil ergab ein mittleres Magnetfeld von  $B = (335,09898 \pm 0,00027)$  mT bei einem kor.  $\chi^2$  von 4,54 · 10<sup>-7</sup>. Dieser Fehler des mittleren Magnetfeldes ist gegenüber  $\Delta g$  ebenfalls vernachlässigbar und führt zu keiner signifikanten Veränderung des Korrekturfaktors  $k_f$ .

### 5 Bestimmung des Intervallfaktors von Wasserstoff

Nachdem der Korrekturfaktor bestimmt ist, kann das Ammoniak-Spektrum untersucht werden, um den Intervallfaktor von Wasserstoff zu bestimmen. Hierzu wird ein kleiner Ammoniak-Kristall, der sich bereits in einer Glaskapillare befindet, aus dem Vorratsgefäß in das Festtemperatur-Dewar des ESR-Spektrometers verbracht und das Dewar-Gefäß mit flüssigem Stickstoff gekühlt. Mit der Messung sollte erst dann begonnen werden, wenn die Blasenbildung (blubbern) des flüssigen Stickstoffs sich beruhigt hat, da dies die Messung stören kann. Weiterhin sollte während der nachfolgenden Messungen darauf geachtet werden, dass die Probe ausreichend gekühlt ist.

### 5.1 Übersichtsaufnahme

Zunächst wird eine Übersichtsaufnahme des Spektrums aufgenommen (siehe Abbildung 9), um die Position der beiden Wasserstoff-Resonanzen zu ermitteln. Dabei wurden die in Tabelle 3 aufgeführten Parameter verwendet, wobei die Frequenz mehrfach während der Messung abgelesen wurde.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Hier wurde ein Lorentz-Modell verwendet, da sich dieses wesentlich besser an das Signal anzupassen war als ein Gauß-Profil.

Abbildung 9 zeigt das Ammoniak-Spektrum – die mit 1 und 2 gekennzeichnet Signale sind die low-field bzw. high-field Resonanzen des atomaren Wasserstoff, das Signal in der Mitte stammt vom Ammoniak. Für die beiden Wasserstoff-Resonanzen wird das Magnetfeld bei Nulldurchgang bestimmt, um diese Werte in den beiden nachfolgenden genaueren Messungen als Parameter zu verwenden.

### 5.2 Aufnahme der Wasserstoff-Resonanzen

Die Aufnahmen der low-field bzw. high-field Resonanzen von atomaren Wasserstoff wurden mit den in Tabelle 4 aufgeführten Parametern durchgeführt (die Frequenzen wurde dabei wieder mehrfach während der Messung aufgenommen und aus den Werten der Mittelwert gebildet).

Abbildung 10(a) und Abbildung 11(a) zeigen die differenzierten Resonanzspektren (aufgenommenes Signal) im low-field bzw. high-field Fall – in Abbildung 10(b) und Abbildung 11(b) sind die entsprechenden integrierten Signale mit einem angepassten Gauß-Profil dargestellt. Mit der Analysesoftware konnte der Nulldurchgang der gemessenen Signale bestimmt werden zu

$$B_l^{\dagger} = (308,079 \pm 0,029) \text{ mT}$$
  
 $B_l^{\dagger} = (358,62 \pm 0,04) \text{ mT},$ 

wobei hier das Magnetfeld mit dem Fehlerintervall derart bestimmt wurde, dass der minimale und maximale Wert des Magnetfeldes bestimmt wurde, bei dem ein Nulldurchgang stattgefunden hat und anschließend der mittlere Wert mit der Abweichung bestimmt wurde<sup>5</sup>. Diese so erhaltenen Werte müssen noch um den Korrekturfaktor  $k_f$  korrigiert werden (vgl. Abschnitt 4) und man erhält:

$$B_l = (306,27 \pm 0,06) \text{ mT}$$
  
 $B_h = (356,51 \pm 0,08) \text{ mT}$ 

In dem Fehler fließt sowohl der Ablesefehler von  $B_{l,h}$  als auch der Fehler des Korrekturfaktors gemäß Gauß'scher Fehlerfortpflanzung ein – offensichtlich liefern beide Fehler den selben Beitrag zum Gesamtfehler.

### 5.3 Bestimmung des Intervallfaktors

Um den Intervallfaktor experimentell bestimmen zu können, wird die Energiedifferenz zwischen den beiden erlaubten Übergängen mit  $\Delta m = 1$  im Paschen-Back-Bereich (siehe Abbildung 6) ausgenutzt. Durch Differenzbildung der entsprechenden Niveaus ergeben sich hierbei die Übergangsenergien nach Gleichung (2.18a, 2.18b) zu

$$\Delta E_{(F=1, m=+1 \to F=0, m=0)} = -g_K \mu_K B_l + \frac{A_H}{2} \left( \sqrt{1 + x_l^2} + (1 + x_l) \right)$$
(5.1a)

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Der Fehler für das Magnetfeld (Peakmitte) über das Fit-Modell mit einem Gauß-Profil führte auf einen Fehlerbereich, der zwei bis drei Größenordnungen kleiner gewesen ist, wobei wir uns beim vorliegen von zwei verschieden Fehlerabschätzungsmöglichkeiten für die schlechtere Fehlerabschätzung entschieden haben und eher eine Maximalfehlerabschätzung vornehmen.

Haupt-Magnetfeld	
low-field <i>B</i> <sub>l</sub> [mT]	$308,0 \pm 2,5$
high-field B <sub>h</sub> [mT]	358,9 ± 2,5
Modulationsfeld $\delta B$ [mT]	0,1
Scanzeit $T_S$ [min]	10
Anzahl der Messpunkte	512
Frequenz	
low-field $\bar{v}_l$ [GHz]	9 <i>,</i> 339354
high-field $\bar{v}_h$ [GHz]	9 <i>,</i> 339345

Tabelle 4: Parameter für die Resonanzspektren von atomaren Wasserstoff



Abbildung 10: low-field Resonanzspektrum für atomaren Wasserstoff



Abbildung 11: high-field Resonanzspektrum für atomaren Wasserstoff

und

$$\Delta E_{(F=1,m=0\to F=1,m=-1)} = -g_K \mu_K B_H + \frac{A_H}{2} \left( \sqrt{1 + x_h^2} - (1 - x_h) \right), \tag{5.1b}$$

wobei der Index l den low-field und der Index h den heigh-field Resonanzbereich bezeichnet. Subtraktion der Gleichung (5.1a) von Gleichung (5.1b) liefert die Beziehung

$$A_{H} = \frac{1}{2} \Big( \sqrt{A_{H}^{2} + ((1+\epsilon)g_{e}\mu_{B}B_{h})^{2}} - \sqrt{A_{H}^{2} + ((1+\epsilon)g_{e}\mu_{B}B_{l})^{2}} + (1-\epsilon)g_{e}\mu_{B}(B_{h}-B_{l}) \Big),$$
(5.2)

mit deren Hilfe sich der Intervallfaktor nur numerisch bestimmen lässt. Einsetzen der erhaltenen Werte für das low-field und high-field Magnetfeld liefert

$$A_H = (5,79 \pm 0,02) \,\mu \mathrm{eV},$$

wobei das Fehlerintervall den Maximalfehler aus den Fehlerintervallen von  $B_l$  und  $B_h$  darstellt<sup>6</sup>.

Alternativ kann eine Iterationsmethode verwendet werden. In 0-ter Näherung kann der Intervallfaktor  $A_H^{(n)}$  geschrieben werden als:

$$A_{H}^{(0)} = g_{e}\mu_{B}(B_{h} - B_{l})$$
(5.3)

mit dem abgeschätzten Fehler

$$\Delta A_H^{(0)} = g_e \mu_B \sqrt{\Delta B_h^2 + \Delta B_l^2}.$$
(5.4)

Iterative Anwendung der Gleichung

$$A_{H}^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left( \sqrt{(A_{H}^{(n)})^{2} + ((1+\epsilon)g_{e}\mu_{B}B_{h})^{2}} - \sqrt{(A_{H}^{(n)})^{2} + ((1+\epsilon)g_{e}\mu_{B}B_{l})^{2}} + (1-\epsilon)g_{e}\mu_{B}(B_{h}-B_{l}) \right)$$
(5.5)

liefert den Intervallfaktor, wobei diese iterative Form im Rahmen des Messfehlers (siehe Gleichung (5.4)) sehr schnell konvergiert.

n	$A_{H}^{(n)}$ [ $\mu$ eV]
0	5,82287
1	5,78985
2	5,79021
3	5,79021

Tabelle 5: Intervallfaktor der Iterationslösung

In Tabelle 5 sind die ersten Iterationslösungen aufgeführt. Deutlich ist die schnelle Konvergenz dieses Verfahrens, da sich bereits ab n = 1 der Wert im Rahmen des Fehlers nach Gleichung (5.4) ( $\Delta A_H = 0.012 \,\mu\text{eV}$ ) nicht mehr ändert. Man erhält somit für den Intervallfaktor

 $A_H = (5,790 \pm 0,012) \,\mu \mathrm{eV},$ 

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Der Intervallfaktor und die Fehlerintervalle wurden mittels Maple und der fsolve Methode numerisch gelöst.

wobei die bestimmten Werte über beide Methoden – numerisches und iteratives Verfahren – identisch sind.

Die relative Abweichung des hier bestimmten Intervallfaktors vom Literaturwert ( $A_H^{Lit} = 5,875 \,\mu\text{eV}$  aus RUB (2009)) beträgt ~ 1,4 % und der bestimmte Intervallfaktor wurde zu niedrig bestimmt. Ursächlich für diese kleine, jedoch außerhalb der Fehlergrenzen liegenden, Abweichung vom Literaturwert ist die Verwendung von quasi-freiem atomaren Wasserstoff, wobei der Literaturwert für freien atomaren Wasserstoff gilt. Die Einbettung des Wasserstoffs in die Ammoniak-Matrix führt zu einer Veränderung der Energieniveaus und somit zu einer Änderung des Intervallfaktors.

### 6 Überprüfung der Breit-Rabi-Formel

Im vorherigen Abschnitt wurde der Intervallfaktor im Paschen-Back-Bereich über die Breit-Rabi-Formel (Gleichungen (5.1a) und (5.1b)) bestimmt. Um dieses Vorgehen zu rechtfertigen wird der theoretische und gemessene Linienschwerpunkt miteinander verglichen. Die Breit-Rabi-Formel sagt einen Linienschwerpunkt

$$\bar{B} \coloneqq \frac{B_h + B_l}{2} \tag{6.1}$$

voraus. Addition der Gleichungen (5.1a) und (5.1b) liefert

$$2\Delta E = \frac{1}{2} \left( \sqrt{A_H^2 + ((1+\epsilon)g_e\mu_B B_h)^2} + \sqrt{A^2 + ((1+\epsilon)g_e\mu_B B_l)^2} + (1-\epsilon)g_e\mu_B (B_h + B_l) \right)$$
(6.2)

Umstellung von Gleichung (6.2) nach  $\overline{B}$  und Verwendung von  $\Delta E = hv$  liefert einen "theoretischen" Wert für den Schwerpunkt des Magnetfeldes:

$$\bar{B}_{theo} = \frac{1}{(1-\epsilon)g_e\mu_B} \left[ 2h\nu - \frac{1}{2} \left( \sqrt{A^2 + ((1+\epsilon)g_e\mu_b B_h)^2} + \sqrt{A_H^2 + ((1+\epsilon)g_e\mu_B B_l)^2} \right) \right]$$
(6.3)

mit dem abgeschätzen Fehler<sup>7</sup>

$$\delta(\bar{B}_{theo}) \simeq -\delta\left(\frac{B_h + B_l}{2}\right). \tag{6.4}$$

Einsetzen der gemessen Werte  $B_l$ ,  $B_h$  und  $\nu$  (siehe Abschnitt 5.2 und Tabelle 4) in die Gleichungen (6.1) und (6.3) liefert

$$\bar{B} = (331,39 \pm 0,05) \text{ mT}$$
  
 $\bar{B}_{theo} = (331,39 \pm 0,07) \text{ mT}.$ 

Beide Werte stimmen überein, so dass davon ausgegangen werden kann, dass die vorherige Vorgehensweise korrekt ist und die Breit-Rabi-Formel den Übergangsbereich gut beschreibt.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Der abgeschätze Fehler ist der Absolutbetrag der Variation  $\delta(\bar{B}_{theo})$ .

### 7 Fazit

In diesem Versuch konnte der Intervallfaktor von atomaren Wasserstoff bestimmt werden und die Nullfeldaufspaltung im Wasserstoffgrundzustand auf eine Bestimmung dieser Aufspaltung auf eine Messung im Starkfeld-Bereich (Paschen-Back-Effekt) zurückgeführt werden. Der ermittelte Intervallfaktor von  $A_H = (5,79 \pm 0,02) \mu$ eV konnte über zwei verschiedene Verfahren, einer Näherungslösung sowie einer iterativen Lösung der Breit-Rabi-Formel, sehr präzise ermittelt werden – der relative Fehler beträgt nur ~ 0,3%. Die Abweichung von ~ -1,4% vom Literaturwert liegt in dem hier verwendeten quasi-freien Wasserstoff begründet, der in einer Ammoniak-Matrix eingebunden ist, wohingegen der Literaturwert für freien Wasserstoff angegeben ist. Zusätzlich konnte über die Betrachtung der Linienschwerpunkte gezeigt werden, das die Breit-Rabi-Formel hier angewendet werden kann und diese den Übergangsbereich zwischen schwachen Feld (Zeeman-Effekt) und starken Feld (Paschen-Back-Effekt) gut beschreibt.

# A Anhang: Bearbeitung der Übungsaufgaben

### A.1 Übung 1

Die Übergangsfrequenz eines Elektrons in einem äußeren Magnetfeld der Stärke  $B_{ext} = 0,335$  T beträgt nach Gleichung (2.2):

$$\Delta E = g_e \mu_B B_{exp} = h\nu \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{g_e \mu_B B_{exp}}{h} = \mathbf{9,39} \,\mathbf{GHz}$$

mit  $g_e = 2,0023$ ,  $h = 6,6262 \cdot 10^{-34}$  Js und  $\mu_B = 9,2736 \cdot 10^{-24}$  J/T, wobei ein freies Elektron ein kontinuierliches Spektrum (unendlich viele Energieniveaus) besitzt.

#### A.2 Übung 2

Das Verhältnis von Kernmagneton  $\mu_K$  und Bohr'schem Magneton  $\mu_B$  ist nach Gleichung (2.1) gerade das Verhältnis von Elektronen- zur Protonenmasse:

$$\frac{\mu_K}{\mu_B} = \frac{e\hbar}{2m_p} \frac{2m_e}{e\hbar} = \frac{m_e}{m_p} \simeq \frac{1}{1836}$$

Die Kopplungsenergien von Kernmoment ans Hüllenmagnetfeld sowie von Hüllenmoment ans externe Feld sind gleich, wenn sich das Wasserstoffatom in einem externen Magnetfeld

$$\mu_B B_{ext} \stackrel{!}{=} \mu_K |\bar{B}_0| \implies B_{ext} = \frac{\mu_K}{\mu_B} |\bar{B}_0| = \frac{1}{1836} \cdot 16,7 \,\mathrm{T} \simeq 9,1 \,\mathrm{mT}$$

befindet (mit dem vom Elektron am Ort des Kern erzeugten Magnetfeld  $\bar{B}_0$  = 16,7 T im Wasserstoffgrundzustand).

#### A.3 Übung 3

Einsetzen von  $m = -(I + \frac{1}{2})$  in Gleichung (2.18a) liefert

$$E_{HFS} = -\frac{A}{4} - g_K \mu_K B_{ext} \left( I + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{\Delta E_0}{2} \sqrt{1 + \frac{-4\left( I + \frac{1}{2} \right)}{2I + 1}} x + x^2$$
$$= -\frac{A}{4} - g_K \mu_K B_{ext} \left( I + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{\Delta E_0}{2} \sqrt{1 - 2x + x^2}$$
$$= -\frac{A}{4} - g_K \mu_K B_{ext} \left( I + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{\Delta E_0}{2} \underbrace{\sqrt{(1 - x)^2}}_{=abs(1 - x)}$$

Der Wurzelterm kann als Betragsfunktion aufgefasst werden, der bei x = 1 nicht differenzierbar ist, also gerade dem Übergangsbereich, in dem die Breit-Rabi-Formel gelten soll (vgl. auch Tabelle 1). Daher ist eine Fallunterscheidung gemäß Gleichung (2.18a) und Gleichung (2.18b) notwendig.

### A.4 Übung 4

Im Wasserstoffgrundzustand gilt  $J = I = \frac{1}{2}$ . Für x = 0 folgt aus Gleichung (2.19), das kein externes Magnetfeld vorhanden ist (d. h.  $B_{ext} = 0$ ). Einsetzen in Gleichung (2.18a) bzw. Gleichung (2.18b) liefert

$$E = -\frac{A}{4} \pm \frac{\Delta E_0}{2} = -\frac{A}{4} \pm \frac{A\left(I + \frac{1}{2}\right)}{2} = \begin{cases} -\frac{3}{4}A \\ \frac{1}{4}A \end{cases}$$

mit  $\Delta E_0 = A \left(I + \frac{1}{2}\right)$ . Dies entspricht aber genau der Nullfeldaufspaltung (siehe Gleichung (2.13)), so dass die Breit-Rabi-Formel hier konsistent ist.

### A.5 Übung 5

Im Wasserstoffgrundzustand und einem externen Magnetfeld  $B_{ext}$  = 335 mT erhält man für den Parameter *x* der Breit-Rabi-Formel nach Gleichung (2.19):

$$x = (1 + \epsilon) \frac{g_J \mu_B B_{ext}}{\Delta E_0} \simeq \textbf{6,62}$$

mit  $\Delta E_0 = 5,875 \cdot 10^{-6}$  eV und  $g_J = 2,0023$ . Man befindet sich also im Übergangsbereich (siehe auch Tabelle 1, wie dies auch schon nach Übung 2 zu erwarten war.

### A.6 Übung 6

Für die Starkfeld-Näherung gilt

$$E_{HFS}^{ext,stark} = g_e \mu_B B_{ext} m_J + A_H m_I m_J - g_K \mu_K B_{ext} m_I.$$

Da  $\mu_B \gg \mu_K$  (vgl. Übung 2), kann der letzte Term vernachlässigt werden und man erhält

$$E_{HFS}^{ext,stark} \simeq g_e \mu_B B_{ext} m_J + A_H m_I m_J.$$

Für den Übergang  $m_J = \frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ ,  $m_I = -\frac{1}{2}$  bei einem externen Magnetfeld  $B_h$  erhält man

$$\Delta E \simeq g_e \mu_B B_{ext} B_h \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) - A_H \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{2} = g_e \mu_B B_h - \frac{A_H}{2} \tag{\dagger}$$

und für den Übergang  $m_I = \frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ ,  $m_I = \frac{1}{2}$  bei einem externen Magnetfeld  $B_l$ 

$$\Delta E \simeq g_e \mu_B B_{ext} B_l \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) + A_H \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \frac{1}{2} = g_e \mu_B B_l + \frac{A_H}{2} \tag{\ddagger}$$

Gleichsetzen der Gleichungen (†) und (‡) liefert

$$A_H = g_e \mu_B (B_h - B_l) \equiv A_H^{(0)}$$

und man erhält ebenfalls die 0-te Näherung des Intervallfaktors (vgl. Gleichung (5.3)).

### Literatur

- Stefan Goertz. Spintemperatur und magnetische Resonanz verdünnter elektronischer Systeme Ein Weg zur Optimierung polarisierbarer Festkörper-Targetmaterialien. Habilitationsschrift, Ruhr-Universität Bochum, 2002.
- 315 Messung des HFS-Intervallfaktors an quasi-freiem, atomarem Wasserstoff. RUB, 2009. Versuchsanleitung zum Praktikum für Fortgeschrittene an der Ruhr-Universität Bochum, Version vom 29.05.2009.

Liste der Versionen			
Version	Datum	Bearbeiter	Bemerkung
0.9	24.08.2009	Kat/Krä	Versuchsdurchführung
1.0	02.09.2009	Kat/Krä	Versuchsauswertung
1.1	25.09.2009	Krä	kleinere Korrekturen