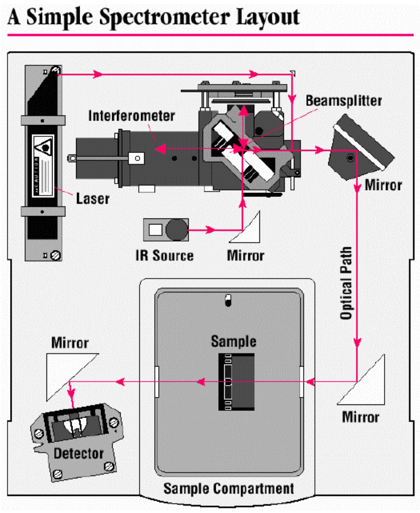
Modul P20: Mehrelektronen- und Molekülphysik WS 2013 / 14 **Übung 11**

Aufgabe 1: FTIR Signalverarbeitung

Zur Erinnerung: Zusammenhangs zwischen Interferogramm I(x) (x=Verfahrweg des Spiegels) und IR Spektrum G(k) (k ist der Wellenvektor ω/c)



Pathlength difference = x

The intensity detected of two plane waves:

$$I = |\vec{E}|^2 = |E_1|^2 + |E_2|^2 + 2\vec{E}_1 \bullet \vec{E}_2 \cos(\theta)$$

Normal incidence, θ = kx, can simplify to:

$$I(x) = 2[1 + \cos(kx)]$$

For non-monochromatic light:

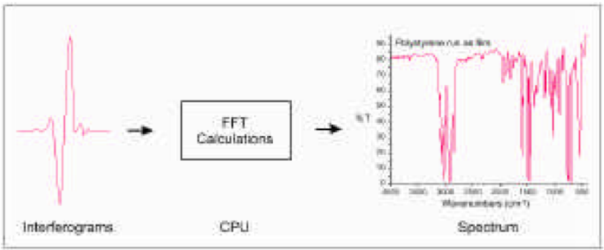
$$I(x) = \int_0^\infty [1 + \cos(kx)]G(k)dk$$
$$= \int_0^\infty G(k)dk + \int_0^\infty G(k)\frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2}dk$$
$$= \frac{1}{2}I(0) + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} G(k)e^{ikx}dk$$

We can rewrite this to something more familiar:

$$W(x) \equiv \frac{2I(x) - I(0)}{\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} G(k)e^{ikx}dk$$

A Fourier Transform!

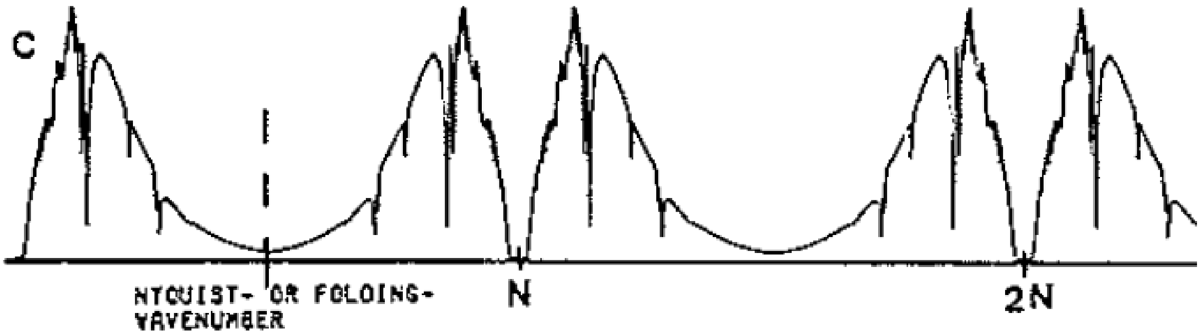
The detected intensity as a function of moving mirror position, I(x), can therefore be converted into G(k), the intensity spectrum as a function of frequency by a simple Fourier transform.



a) Das Interferogramm I(x) wird nur über einen endlichen Spiegel-Verfahrweg L aufgenommen. Mathematisch lässt sich dies über die Beziehung IL(x)=I(x)*BX(x) darstellen wobei BX(x) eine Rechteckfunktion BX(x)=1 für 0<x<L und BX(x)=0 sonst. Wie lautet die Funktion GL(k) die zu IL(x) gehört im allgemeinen (Tip: Faltungs-Theorem)? Welche Linienform würde des FTIR Spektrometer mit diesem Verfahrweg L für eine unendlich scharfe Spektrallinie ausgeben? Wieso benutzt man anstatt der Rechteck-Funktion BX(x) oft andere Funktionen zur „Apodisierung“? Welchen Nachteil hat die Apodisierung?

b) Im Spektrometer wird in der Realität wird das Interferogramm I(x) nur an endlich vielen Punkten n*Δx (n=0…N-1) gemessen und das Spektrum daraus durch eine diskrete Fourier-Transformation berechnet. Heraus kommt eine periodische Funktion die sich nach wiederum

N Stützstellen $i*\Delta\nu=i/(N*\Delta x)$ ($i=0\ldots N-1$) wiederholt:



Skizzieren Sie das Spektrum der Probe zu dem obige, diskrete Fourier Transformation gehört! Was passiert wenn das Spektrum auf dem Detektor noch nicht verschwindende Intensität für Wellenzahlen größer als die ‚Nyquist'-Wellenzahl $\nu_f = 1/(2*\Delta x)$ hat?

Aufgabe 2: NMR: Blochsche Gleichungen

(im Vorgriff auf Vorlesung nächste Woche, siehe auch Vorlesung zu Photonen Echo, googeln macht die Lösung dieses Standard-Problems einfacher)

Das zeitliche Verhalten von Spins in einem Magnetfeld läßt sich klassisch durch die Magnetisierung **M** ausdrücken. Sie wird beschrieben durch die Gleichung:

$$d\mathbf{M}/dt = \mathbf{M} \times \gamma\mathbf{H} - (M_x/T_2)\mathbf{e}_x - (M_y/T_2)\mathbf{e}_y - [(M_z - \langle M_z \rangle)/T_1]\mathbf{e}_z$$

Dabei ist **H** ein Magnetfeld das zuerst nur eine z-Komponente haben soll, **e** sind Einheitsvektoren in die jeweilige Richtung.

a) für T1 und T2 -> unendlich: Wie verhält sich eine beliebige Magnetisierung **M** zeitlich (Stichwort: Larmor Präzession mit Frequenz Ω)?
b) für endliche T1 und T2: lösen Sie die Gleichungen und diskutieren Sie den Einfluss von T1 und T2 auf die Bewegungen.
c) Durch Anlegen eines Wechselfeldes $H_x=H_0 \cos(\Omega t)$ für eine kurze Dauer lässt sich die Magnetisierung aus der z-Richtung in die xy-Ebene drehen (π/2 Puls) bzw in die entgegengesetzte Richtung orientieren (π Puls). Wie sind die entsprechenden Zeiten?
d) Durch alternierende π Pulse und π/2 Pulse mit einem variablen Zeitabstand τ dazwischen läßt sich die Relaxationszeit T1 messen. Versuchen Sie das zu erklären.