

RESONANCIA DE ESPIN ELECTRONICO EN MUESTRA DE DPPH

EDUAR E. CARVAJAL T.
UNICOR
2007

OBJETIVOS

- El objetivo de esta practica es calcular el factor giromagnetico de electrón a partir de la resonancia de espin electrónico (ESR) entre los subniveles Zeeman que se observa en la molécula de Difenil–Picril-Hidrazil (DPPH), cuando se somete a un campo magnético.
- También se busca encontrar el ancho energético entre los subniveles zeeman

PALABRAS CLAVES

- Difenil-Picril-Hidrazil.
- Efecto Zeeman
- Transiciones por Resonancia de Espin

Molécula de DPPH

- Las moléculas de DPPH se componen de tres anillos de seis átomos de carbono ($Z=6$), cinco átomos de nitrógeno ($Z=7$) y seis de oxígeno ($Z=8$). La estructura de la molécula de DPPH puede verse en la figura.

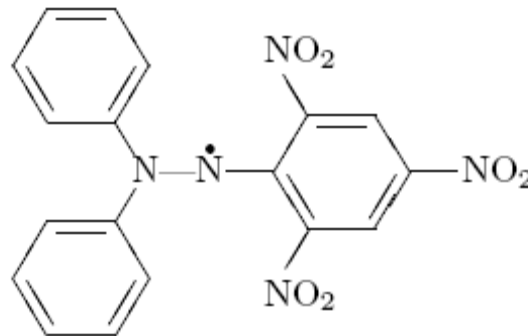


Figura 1: Estructura química de la molécula de 1,1-difenil-2-picrilhidracilo (DPPH). El número total de electrones de la molécula es impar, ya que se observa un único electrón desapareado en uno de los átomos de nitrógeno.

- Cada molécula de DPPH contiene 191 electrones

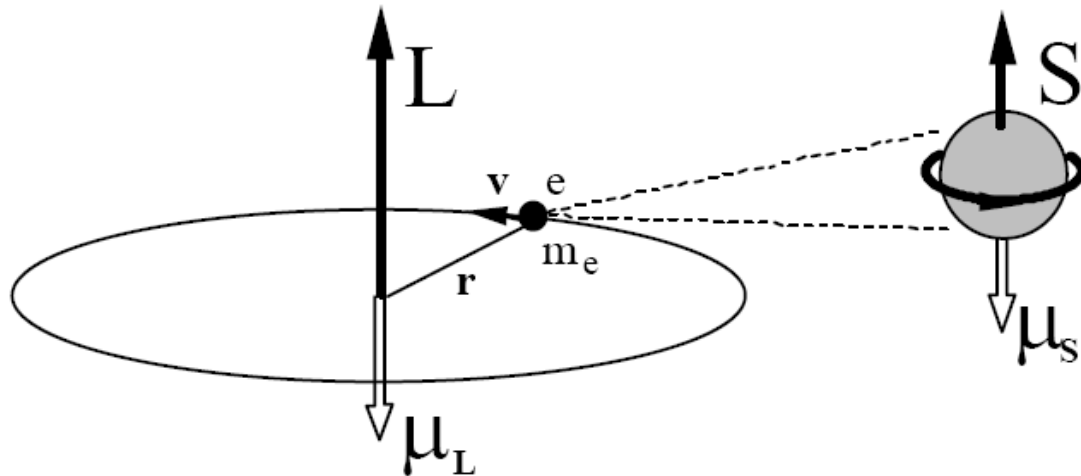
Molécula de DPPH

El espín total de la molécula viene dado por el electrón desapareado, $S=1/2$.

Además el momento angular orbital de la molécula es nulo, $L=0$

Finalmente $J = L+S = 1/2$

MOMENTOS MAGNETICOS ORBITAL Y DE ESPIN



$$\mu_L = \frac{e}{2m_e} L = \gamma L$$

$$\mu_S = g_e \frac{e}{2m_e} S = \gamma S$$

$$\gamma = g_e \frac{e}{2m_e} - \frac{e}{m_e}$$

"factor giromagnético anómalo" del electrón $g_e=2.0023$

INTERACCION ZEEMAN

- Interacción del momento magnético: μ con el campo externo B_0 .

$$H = - \sum \mu \cdot B$$

Para el caso del DPPH. $\mu = \mu_e$

$$H = -(\mu_s + \mu_l) \cdot B$$

$$H = \mu_B (g_L L + g_s S) \cdot B$$

Con μ_B el Magneton de Bohr y g_s el factor giromagnetico del electrón. Que según la electrodinámica cuántica tiene la forma:

$$g_s = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} - 0.328 \frac{\alpha^2}{\pi^2} + \dots \right) \approx 2.0023.$$

- La forma del hamiltoniano sugiere escribir:

$$-g_j \mu_B \mathbf{J} = -g_\ell \mu_B \mathbf{L} - g_s \mu_B \mathbf{S},$$

- Y la forma de g_j viene dada por:

$$g_j = 1 + (g_s - 1) \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}$$

- g_j se conoce como el Factor de Landé
- Para el nivel fundamental de la molécula de DPPH, se tiene $\ell=0$ y $j=s=1/2$

Y por tanto el factor de Landé coincide con el factor giromagnetico del electrón

$$g_j = g_s$$

Si suponemos $B=B_z$, la corrección de energía de primer orden seria

$$\Delta E^{(1)} = \mu_B g_s B M_j ,$$

- Con valores posibles para $M_j = \pm 1/2$, la transición entre estos dos estados es posible ya que $\Delta M = \pm 1$, tal y como exigen las reglas de selección.

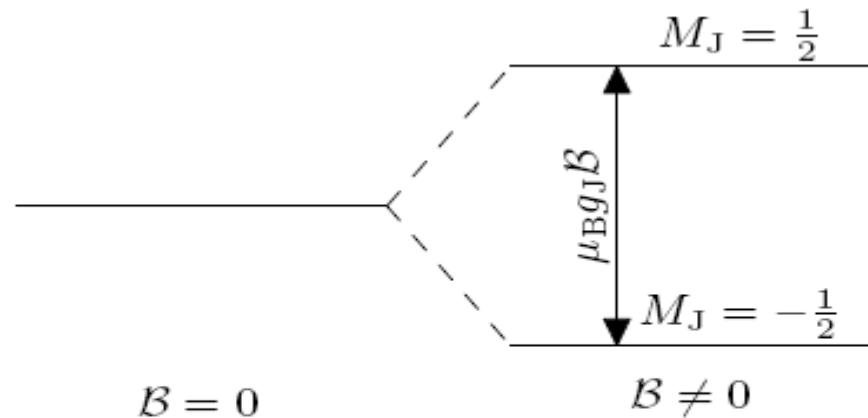


Figura 2: Esquema del desdoblamiento Zeeman del nivel fundamental de la molécula de DPPH. Como $J = \frac{1}{2}$, los posibles valores del número cuántico azimutal son $M_J = \pm \frac{1}{2}$, y sólo aparecen dos subniveles Zeeman.

- Una vez establecido el campo magnético, se pueden provocar transiciones entre los dos subniveles Zeeman aplicando un campo electromagnético de frecuencia dada por la relación energética:

$$h\nu = \mu_B g_s \mathcal{B}_r .$$

- En la ESR a diferencia de otras técnicas espectroscópicas se fija el campo electromagnético con el que se va a irradiar y se modula el campo magnético uniforme.
- En nuestro caso el campo magnético oscilante posee una frecuencia de 146MHz
- El valor del campo magnético uniforme es variado hasta que la separación entre los subniveles Zeeman sea igual a la energía de la radiación incidente, de tal forma que se pueda producir la transición entre estos

Aspectos Experimentales



Aspectos Experimentales

- La muestra de DPPH se encuentra en el interior de una bobina que forma parte de un circuito puente (ver figura 3).
- Ajustando convenientemente la capacidad del condensador C y la resistencia R_p , la diferencia de potencial V_{ab} se anula.
- entonces, en el interior de la bobina hay un campo electromagnético oscilante cuya frecuencia coincide con la de la fuente de alimentación (146MHz).

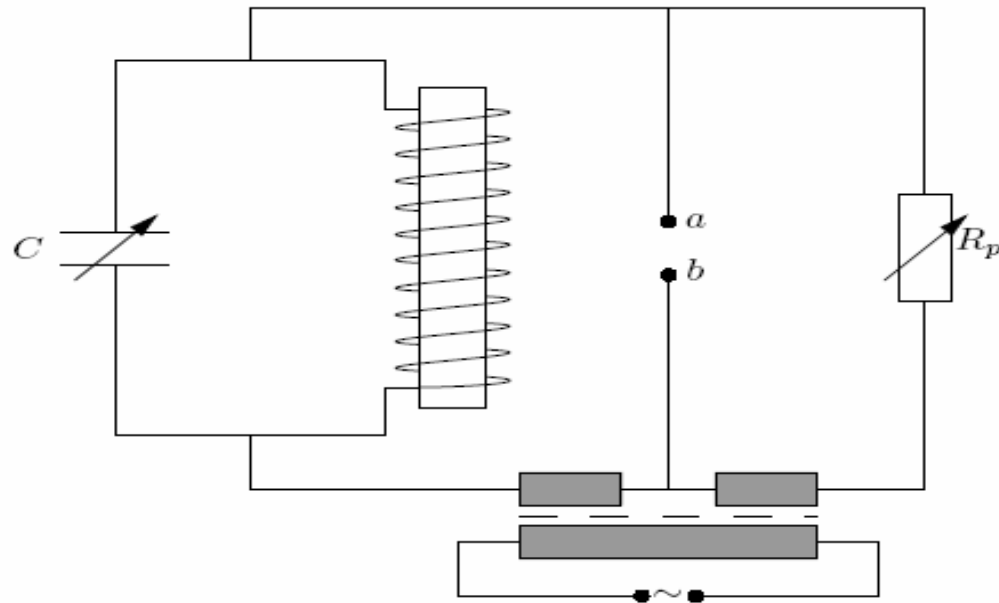


Figura 3: Esquema del circuito puente. La fuente, estabilizada con cuarzo, alimenta simétricamente la rama del reóstato y la del circuito resonador. El DPPH se halla en el interior de la bobina.

- Todo el circuito puente se halla en el interior de unas *bobinas de Hemholtz*, que crean en su zona central un campo magnético constante en muy buena aproximación, y cuya intensidad es:

$$\mathcal{B} = \left(\frac{4}{5}\right)^{\frac{3}{2}} \mu_0 \frac{NI}{r}$$

- donde μ_0 es la *permeabilidad magnética del vacío*
- N es el número de vueltas en cada bobina.
- I es la intensidad de corriente que circula por ellas
- r es su radio.
- Nótese que la relación entre el campo magnético B y la intensidad I es lineal.

- Para nuestro montaje en particular el guión de prácticas nos proporciona los valores $N = 250$ y $r = 5,4\text{cm}$.
- Para observar los picos resonantes, el campo magnético aplicado es de la forma:

$$\mathcal{B}(t) = \mathcal{B}_0 + \mathcal{B}_{\text{osc}} \sin(\omega_{\text{osc}} t).$$

- La componente continua B_0 está generada por una corriente constante I_0 que podemos variar.
- La componente oscilante se conecta al canal X del osciloscopio

- Una vez conocida la corriente I_c , en la que $B_c = B_r$, podemos calcular el factor giromagnetico según la expresión:

$$g_s = (5/4)^{3/2} \frac{h\nu}{\mu_B \mu_0} \frac{r}{N I_c}$$
$$= 2.505823 \text{ A} \frac{1}{I_c} .$$

- Esta corriente I_c es la que se mide con el amperímetro que tenemos en el montaje, e I_c será suficiente para calcular el factor giromagnetico cuando ocurre la resonancia

- Cuando se da la condición de resonancia (las moléculas de DPPH absorben fotones de 146MHz), se origina un desfase entre las ramas del circuito puente que hace aparecer una caída de tensión no nula entre los puntos *a* y *b*, V_{ab} .
- Esta diferencia de potencial se rectifica con un diodo semiconductor y se amplifica en el aparato de ESR, para después conectarla al canal Y del osciloscopio
- Al observar esta señal resonante, se pone en fase con la componente oscilatoria de $B(t)$ mediante el botón "Phase" que hay a tal efecto en el aparato de ESR

Conclusiones

- La corriente de resonancia hallada es de aproximadamente de 1.32 A.
- Este valor de corriente arrojo un valor para el factor giromagnetico de $g_s = 2.004$
- La discrepancia de esta de esta medida con respecto al valor teórico es de tan solo 0.12% ($g_s = 2.0024$)
- Este resultado muestra una muy buena precisión, pero vale la pena decir que es meramente académica, ya que el valor experimental mas preciso es de $g_s = 2.0023193043718$
- La diferencia entre los dos subniveles de energía Zeeman calculados es de $\Delta E = 1.8 \cdot 10^{-8}$ eV, como puede verse es una franja pequeña

[Muchas Gracias]