

# Bericht zum Versuch **Magnetische Resonanz am Rubin**

Anton Haase, Michael Goerz

29. Januar 2007

FREIE UNIVERSITÄT BERLIN  
Fortgeschrittenenpraktikum Teil A  
Tutor: C. Elsäßer

## Inhalt

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>2</b>
1.1	Elektronen- und Spin-Konfiguration der Chrom-Ionen . . . . .	2
1.2	Spin-Hamiltonian des Gesamtsystems . . . . .	2
1.3	Aufgaben zum Verständnis . . . . .	3
1.3.1	Energieschema und Übergangswahrscheinlichkeiten . . . . .	3
1.3.2	Signalform . . . . .	4
1.3.3	Transformation der Eigenwerte bei Drehung des B-Feldes . . . . .	5
1.3.4	Quenching . . . . .	5
1.3.5	Vorzeichen der Nullfeldaufspannung . . . . .	5
1.3.6	Verhältnis der Besetzungszahlen . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Fragestellung</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Versuchsaufbau und Durchführung</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>7</b>
4.1	Bestimmung von $g_{\parallel}$ und $D$ aus den Messungen bei $\theta = 0^\circ$ . . . . .	7
4.2	Messung der Hyperfeinaufspaltung . . . . .	8
4.3	Winkelabhängigkeit der Gesamtspektren . . . . .	8
4.4	Interpretation des Spektrums bei $90^\circ$ . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>11</b>

# 1 Einführung

Wir betrachten die Elektronenspinresonanz an paramagnetischen  $\text{Cr}^{3+}$ -Ionen, die in einem Rubin-Kristall eingebettet sind. Es werden dabei Mikrowellen eingestrahlt, um die Wechselwirkungen zwischen den Chrom-Atomen und ihrer Umgebung zu untersuchen.

## 1.1 Elektronen- und Spin-Konfiguration der Chrom-Ionen

Die Elektronenkonfiguration des Chrom-Ions ist  $[\text{Ar}]3d^3$ . Daraus folgt ein resultierender Spin von  $S = \frac{3}{2}$  und ein Bahndrehimpuls von  $L = 3$ , und somit, da die Schale nur halb-besetzt ist, einen Gesamtdrehimpuls von  $J = L - S = \frac{3}{2}$ .

Diese Betrachtung vernachlässigt aber die Einbettung der Ionen in das Rubin-Gitter; die Kugelsymmetrie geht in unserem Fall durch diese verloren, statt dessen haben wir es mit einer in erster Näherung kubischer Symmetrie zu tun. Es kommt zum sog. „Quenching“, der Bahndrehimpuls  $L$  wird fast vollständig aufgehoben (siehe 1.3.4). Unser Gesamtdrehimpuls besteht dann praktisch nur noch aus dem Spin, und kann – im Magnetfeld – durch die Spinzustände  $m_1 = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$  charakterisiert werden.

## 1.2 Spin-Hamiltonian des Gesamtsystems

Wir betrachten nun den genauen Hamiltonian des Systems. Er ist in unserm Fall aus vier Bestandteilen zusammengesetzt:

$$H = H_S + H_{NF} + H_{HF} + H_{NZ} \quad (1)$$

$H_S$  ist dabei der Zeeman-Term, also die Wechselwirkung zwischen Elektronenspin und äußerem Magnetfeld. Es gilt

$$H_S = \mu_b \cdot \vec{B} \hat{g} \vec{S} \quad (2)$$

$\hat{g}$  ist dabei ein Tensor. Wir wählen das Koordinatensystem so, dass das Magnetfeld in der x-y-Ebene liegt und den Winkel  $\theta$  mit der z-Achse einschließt. Dann lässt sich  $g$  in eine parallele und eine orthogonale Komponente zerlegen, und Gl. (2) wird zu

$$H_S = \mu_b \cdot B \cdot (g_{\parallel} S_z \cos \theta + g_{\perp} S_x \sin \theta) \quad (3)$$

Aus der Säkulardeterminanten erhält man die zugehörigen Eigenwerte

$$E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \mu_b \cdot B \cdot \sqrt{g_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + g_{\perp}^2 \sin^2 \theta} \quad (4)$$

Der zweite Term,  $H_{NF}$ , ist die sog. Nullfeldwechselwirkung, die die Störung durch die Rubin-Kristallstruktur, bzw. eine Spin-Spin-Wechselwirkung zwischen Cr- und Rubin-Elektronen beschreibt. Sie wird quantifiziert durch

$$H_{NF} = D \left( S_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right) \quad (5)$$

mit den Eigenwerten

$$E_{\pm \frac{1}{2}} = -D \quad (6)$$

$$E_{\pm \frac{3}{2}} = +D \quad (7)$$

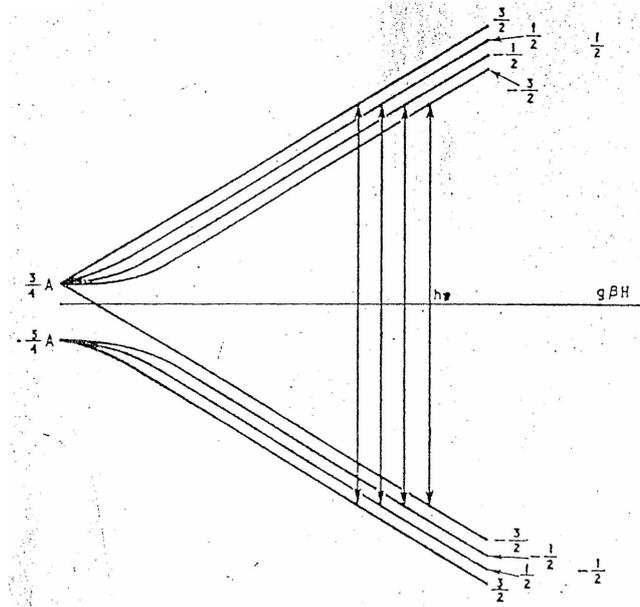


Abb. 1: Hyperfeinaufspaltung

Nimmt man  $H_S$  und  $H_{NF}$  zusammen, erhält man für den Fall  $\theta = 0$  die Eigenwerte

$$E_{\pm\frac{1}{2}} = \pm\frac{1}{2} \cdot g_{\parallel} \cdot \mu_b \cdot B - D \quad (8)$$

$$E_{\pm\frac{3}{2}} = \pm\frac{3}{2} \cdot g_{\parallel} \cdot \mu_b \cdot B + D \quad (9)$$

Diese beiden Gleichungen werden in 1.3.1 genauer betrachtet und graphisch dargestellt.

Der letzte Term,  $H_{HF}$ , beschreibt die Hyperfeinwechselwirkung. Es gilt

$$H_{HF} = A \cdot \vec{S} \cdot \vec{I} \quad (10)$$

mit dem Kernspin  $I$  und der Kopplungskonstanten  $A$ . Dieser Term spaltet die Energieniveaus noch weiter auf, sodass die Darstellung in Abb. 2 zu der in Abb. 1 übergeht.

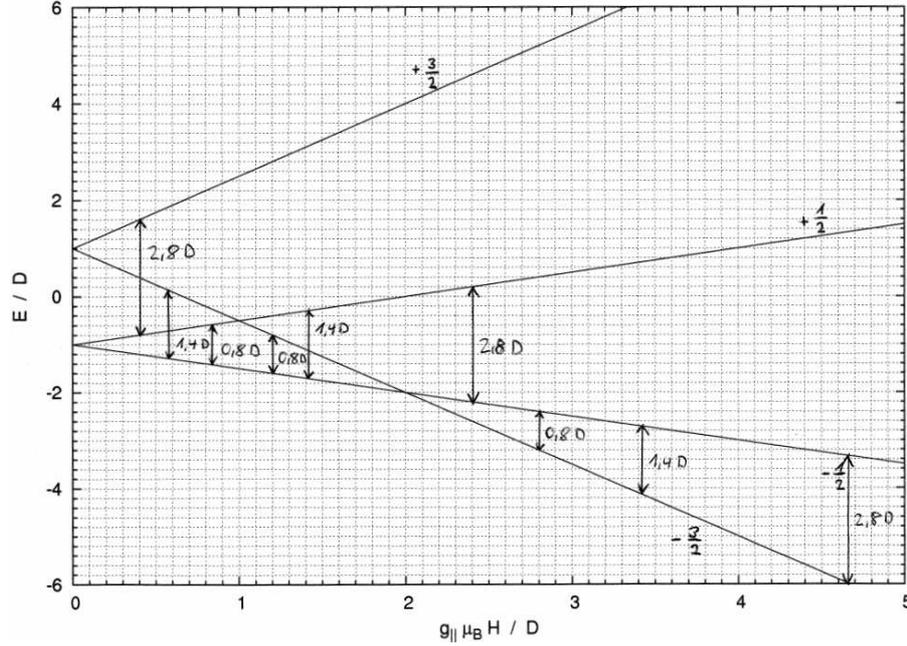
### 1.3 Aufgaben zum Verständnis

#### 1.3.1 Energieschema und Übergangswahrscheinlichkeiten

Das Energieschema für ein magnetisches Feld entlang der  $c$ -Achse ist in Einheiten von der Nullfeldaufspaltung  $D$  in Abb. 2 dargestellt.

Die Reihenfolge der Übergänge kann direkt aus Abb. 2 abgelesen werden. Die relativen Abstände der Linien nimmt mit der Energie der Mikrowellenstrahlung ab:

$$\begin{aligned} 2.8 D: & \quad 1/2 \rightarrow 3/2, \quad -1/2 \rightarrow 1/2, \quad -3/2 \rightarrow -1/2 \\ 1.4 D: & \quad -1/2 \rightarrow -3/2, \quad -1/2 \rightarrow 1/2, \quad -3/2 \rightarrow -1/2 \\ 0.8 D: & \quad -1/2 \rightarrow 1/2, \quad -1/2 \rightarrow -3/2, \quad -3/2 \rightarrow -1/2 \end{aligned}$$

Abb. 2: Energieschema für ein externes magnetisches Feld  $H$ 

Die Wahrscheinlichkeiten der Übergänge ergeben sich direkt aus Fermi's Goldener Regel

$$W_{M, M\pm 1} = \frac{4\pi^2 \mu_B^2 g^2}{\hbar^2} H_x \cdot \frac{\hbar}{4} [S(S+1) - M(M\pm 1)]. \quad (11)$$

Damit ergeben sich für die oben aufgeführten Übergänge folgende Wahrscheinlichkeiten:

$$W_{1/2 \rightarrow 3/2} = \frac{15}{4} - \frac{3}{4} = 3 \quad (12)$$

$$W_{-1/2 \rightarrow 1/2} = \frac{15}{4} + \frac{1}{4} = 4 \quad (13)$$

$$W_{-3/2 \rightarrow -1/2} = \frac{15}{4} - \frac{3}{4} = 3 \quad (14)$$

Somit sind die Übergänge zwischen  $-1/2 \rightarrow 1/2$  geringfügig wahrscheinlicher, als die Übergänge zwischen den Dubletts. Wir erwarten dies in der Intensität der Peaks wiederzufinden.

### 1.3.2 Signalform

Zum Messen schwacher Signale wird häufig ein Verfahren eingesetzt, bei dem das Messsignal mit einer zusätzlichen Frequenz überlagert wird. Damit ist es möglich direkt die Steigung der eigentlichen Messkurve, also dessen Ableitung zu messen. Diese ist oft deutlich stärker als das Signal selbst und kann daher besser ausgewertet werden. Da es sich bei den erwarteten Resonanzpeaks um

gaussförmige Kurven handelt, werden wir folglich die Ableitung einer solchen Kurve detektieren.

### 1.3.3 Transformation der Eigenwerte bei Drehung des B-Feldes

Die Eigenwerte ändern sich mit dem Winkel genau so wie in Gl. (4) beschrieben. Die Intensität ist proportional zu  $g$  und skaliert mit dem selben Wurfelfaktor.

Zu bemerken ist allerdings noch, dass für  $\theta \neq 0^\circ$  auch Übergänge erlaubt werden, die die Auswahlregel  $\Delta m = 1$  verletzen, da auch  $g_\perp$  miteinbezogen werden muss.

### 1.3.4 Quenching

Unter Einfluss eines kubischen Feldes werden bestimmte d-Orbitale von den Valenzelektronen des  $\text{Cr}^{3+}$  bevorzugt besetzt. Es handelt sich dabei um die Orbitale in den drei Raumebenen, die durch

$$\begin{aligned} d_{xy} &= \frac{1}{i\sqrt{2}}(|2, 2\rangle - |2, -2\rangle) \\ d_{yz} &= \frac{1}{i\sqrt{2}}(|2, 1\rangle + |2, -1\rangle) \\ d_{xz} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2, 1\rangle - |2, -1\rangle) \end{aligned}$$

beschrieben werden. Die Wirkung der z-Komponente des Drehimpulsoperators ist durch

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

gegeben. Ein kurzer Blick auf die Ausdrücke für die d-Orbitale lässt einen sofort erkennen, dass

$$\langle \hat{L}_z \rangle = \langle d_{xy} | \hat{L}_z | d_{xy} \rangle = \langle d_{yz} | \hat{L}_z | d_{yz} \rangle = \langle d_{xz} | \hat{L}_z | d_{xz} \rangle = 0$$

Der Drehimpuls ist also gequenchet.

### 1.3.5 Vorzeichen der Nullfeldaufspaltung

Wie in Gl. (6) und (7) dargestellt, sind die Eigenwerte der Nullaufspaltung direkt  $\pm D$ . Das Vorzeichen entscheidet sich, je nachdem ob  $m_s = \frac{1}{2}$  oder  $m_s = \frac{3}{2}$  ist.

Experimentell kann man man beide Fälle an der Temperaturabhängigkeit unterscheiden: Die beiden Zweige in Abb. 2 wären vertauscht, sodass aufgrund der Tatsache, dass bei geringen Temperaturen der energetisch niedrigere Teil der Zweige stärker besetzt ist (s. 1.3.6), ein verschiedenes Spektrum in Bezug auf die Linienintensitäten sichtbar würde. Man könnte also mehrere Messungen bei verschiedenen Temperaturen durchführen und anhand dessen analysieren, welches Vorzeichen die Nullfeldaufspaltung besitzt.

### 1.3.6 Verhältnis der Besetzungszahlen

Befindet sich das System im ungestörten Zustand, so sind die Niveaus gemäß der Boltzmannverteilung

$$\frac{N_{1/2}}{N_{-1/2}} = e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} \quad (15)$$

besetzt. Bei Raumtemperatur (ca. 300 K) und einer Mikrowellenfrequenz von 10 GHz liegt das Verhältnis somit bei

$$\frac{N_{1/2}}{N_{-1/2}}(300 \text{ K}) = 0.998 \quad (16)$$

Für sehr kleinere Temperaturen (4 K) ist der energetisch höhere Zustand deutlich geringer besetzt:

$$\frac{N_{1/2}}{N_{-1/2}}(4 \text{ K}) = 0.887 \quad (17)$$

## 2 Fragestellung

Ziel des Versuches ist Messung mehrerer Spinelektronenresonanz-Spektren an in Rubin eingebetteten  $\text{Cr}^{3+}$ -Ionen bei konstanter eingestrahelter Mikrowellenfrequenz aber variablem Winkel. Aus mehreren Messungen bei  $\theta = 0$  sollen die Größen  $g_{\parallel}$  und  $D$  bestimmt werden. An einer detaillierten Messung der Linie  $-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$  soll die Hyperfeinaufspaltung beobachtet werden und  $A_{\parallel}$  bestimmt werden.

Desweiteren sollen Übersichtsspektren bei den Winkeln  $\pm 10^\circ$ ,  $\pm 20^\circ$  und  $\pm 30^\circ$  sowie abschließend bei  $90^\circ$  aufgenommen und analysiert werden.

## 3 Versuchsaufbau und Durchführung

Die Messungen wurden an einem geschlossenen Spektrometer durchgeführt, an dem die eingestrahlte Mikrowellenfrequenz fest auf  $(9.560 \pm 0.003)\text{GHz}$  eingestellt war. Variieren ließen sich der Winkel der Probe, Scan-Range und Scan-Mitte, die Empfindlichkeit des Detektors (Detektor-Level) sowie die Dauer der Messung.

Als Vorbereitung auf die eigentliche Messung mussten wir die Winkelskala für die Probe am Spektrometer durch Auffinden der Nullposition ( $\theta = 0^\circ$ ) kalibrieren. Dazu haben wir die Position solange variiert, bis in einer schnellen Übersichtsmessung bei einer Scan-Range von 5000 G und einer Scan-Mitte von 4000 G unkalibriert, 5586 G kalibriert,<sup>1</sup> nur noch die drei erwarteten Linien sichtbar waren.

Anschließend haben wir bei  $\theta = 0^\circ$  diese drei Linien (Tief-, Mittel- und Hochfeldlinie) in je einem 8-Minuten-Scan und bei einer Scanrange von 50 G, bzw. 500 G bei der Tieffeldlinie, und einem Detektorlevel von  $2.5 \cdot 10^3$  einzeln ausgemessen. Die Scan-Mitte war dabei auf 3395 / 3455 G (unkalibriert / kalibriert, Mittelfeldlinie), 7535 / 7644 G (Hochfeldlinie), und 1000 / 1169 G (Tieffeldlinie) eingestellt. Zur Beobachtung der Hyperfeinfeldaufspaltung wurde die Mittelfeldlinie noch einmal bei selber Einstellung, aber mit höherem Detektorlevel von  $2.5 \cdot 10^4$  ausgemessen.

Danach haben wir die Gesamtspektren bei den Winkeln  $0^\circ$ ,  $\pm 10^\circ$ ,  $\pm 20^\circ$ ,  $\pm 30^\circ$  und  $90^\circ$  gemessen, jeweils mit einer Scan-Zeit von 8 Minuten, einer Scan-Range von 5000 G, einer Scan-Mitte von 3100 / 4674 G und einem Detektorlevel von  $2.5 \cdot 10^2$ .

<sup>1</sup>Die am Spektrometer abgelesenen Werte waren inkorrekt und mussten mittels einer Tabelle umkalibriert werden. Aus dieser Tabelle und der notwendigen Extrapolation ergab sich ein für uns maßgeblicher Fehler von 0.1% für den Wert der Scan-Mitte.

## 4 Auswertung

### 4.1 Bestimmung von $g_{\parallel}$ und $D$ aus den Messungen bei $\theta = 0^\circ$

Aus der Messung der Gesamtspektren (Anhang B) lässt sich sehen, dass die Mittelfeldlinie deutlich intensiver ist als die Tieffeld- und die Hochfeldlinie. Nach Gl. (13) lässt sich daher bestimmen, dass es sich um einen Übergang  $-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$  handeln muss. Daher erhalten wir sofort aus Gl. (8) eine Formel für  $g_{\parallel}$ :

$$g_{\parallel} = \frac{h\nu}{\mu_B \cdot B_{\text{mf}}} \quad (18)$$

Aus der Messung der Mittelfeldlinie in Anhang A lässt sich

$$B_{\text{mf}} = (3456 \pm 5) \text{ G}$$

bestimmen. Daraus folgt dann

$$g_{\parallel} = 1.98 \pm 0.01$$

Der Literaturwert ist

$$g_{\parallel}^{\text{lit}} = 1.9894(6)$$

Um nun noch  $D$  zu berechnen, müssen wir die Hoch- oder Tieffeldlinie betrachten. Dann berechnet sich  $D$  aus Gl. (8) und (9). Zusätzlich teilen wir noch durch  $h \cdot c$ , um  $D$  in denselben Einheiten wie dem Literaturvergleichswert zu erhalten. Für den Hochfeldübergang gilt dann:

$$D = \frac{g \cdot \mu_B \cdot B_{\text{hf}} - h\nu}{2 \cdot hc} \quad (19)$$

Mit

$$B_{\text{hf}} = (7645 \pm 20) \text{ G}$$

ergibt sich

$$D = (19.38 \pm 0.09) \text{ m}^{-1}$$

Für die Tieffeldlinie gilt:

$$D = \frac{g \cdot \mu_B \cdot B_{\text{tf}} + h\nu}{2 \cdot hc} \quad (20)$$

Mit

$$B_{\text{tf}} = (687 \pm 10) \text{ G}$$

erhält man hier

$$D = (19.11 \pm 0.05) \text{ m}^{-1}$$

Der Literaturwert liegt bei

$$D^{\text{lit}} = 19.17 \text{ m}^{-1}$$

Beide Ergebnisse sind also verträglich.

## 4.2 Messung der Hyperfeinaufspaltung

Aus Abb. 1 würde man eigentlich vier Hyperfeinlinien erwarten, in unserer Messung sind jedoch nur zwei sichtbar. Es ist davon auszugehen, dass die inneren beiden in unserem Fall von der Hauptlinie verdeckt werden.

Die Hyperfeinkonstante lässt sich daher bestimmen, indem man aus der vergrößerten Messung der Mittelfeldlinie die Differenz der beiden Hyperfeinlinien misst und davon die Breite der Hauptlinie abzieht. Multipliziert mit  $\mu_B$  und  $g$  erhält man dann die dreifache Hyperfeinkonstante, wie man aus der in [1, Kap. 4.6] angegebenen Säkulardeterminante ermitteln kann.

$$3A = \mu_B \cdot g \cdot \Delta B \quad (21)$$

mit  $\Delta B = (68 \pm 4) \text{ G} - (15 \pm 2) \text{ G}$ . Zusätzlich soll noch durch  $hc$  geteilt werden, um das Ergebnis in denselben Einheiten wie dem Literaturwert zu erhalten:

$$A = \frac{\mu_B \cdot g \cdot \Delta B}{3hc} \quad (22)$$

Durch Einsetzen erhält man

$$A = (0.16 \pm 0.02) \text{ m}^{-1}$$

Der Literaturwert ist

$$A^{\text{lit}} = 0.162 \text{ m}^{-1}$$

## 4.3 Winkelabhängigkeit der Gesamtspektren

Am Übersichtsspektrum für  $\theta = 0^\circ$  lassen sich die relativen Intensitäten der schon zuvor betrachteten Tief-, Mittel- und Hochfeldlinie ausmessen. Wir stellen fest, dass die Intensität der Linien etwa im Verhältnis 1:2 stehen, was etwas vom erwarteten Verhältnis 3:4 abweicht.

Für Winkel von  $\theta \neq 0^\circ$  gelten die in 1.3.3 beschriebenen Erwartungen. Zunächst lässt sich feststellen, dass die Spektren für  $\pm\theta$  völlig identisch sind. Dies spiegelt die Symmetrie bezüglich  $\theta$  in Gl. (4) wieder.

In einer genaueren Betrachtung der einzelnen Linien lässt sich aus Gl. (8) und Gl. (9) Die folgenden Erwartungen für die Position herleiten. Wir kürzen dabei

$$g := \sqrt{g_{\parallel}^2 \cos^2 \theta + g_{\perp}^2 \sin^2 \theta} \quad (23)$$

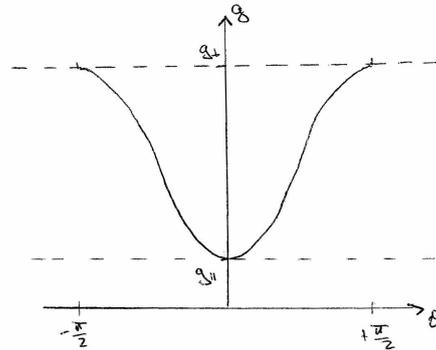
ab. Der Zusammenhang ist in Abb. 3 dargestellt. Dabei können  $g_{\parallel}$  und  $g_{\perp}$  beliebig verschoben werden, ob die Kurve steigt oder fällt, hängt davon ab, welcher von beiden größer ist.

Für die Tieffeldlinie ( $-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2}$ ) gilt:

$$B = \frac{2D - h\nu}{g\mu_B} \quad (24)$$

Für die Mittelfeldlinie ( $-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ ) gilt:

$$B = \frac{h\nu}{g\mu_B} \quad (25)$$

Abb. 3: Verlauf von  $g(\theta)$ 

Schließlich gilt für die Hochfeldlinie ( $-\frac{3}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}$ ):

$$B = \frac{h\nu + 2D}{g\mu_B} \quad (26)$$

Wir erwarten also, dass die Position der Linien sich mit dem Faktor  $\frac{1}{g}$  verändert, jeweils noch skaliert mit der Absolutposition (Linien bei höherem  $B$  wandern stärker). Die Intensität sollte gemäß  $g$  mit steigendem Winkel abnehmen.

In der Tat machen wir folgende Beobachtungen:

- Die Tieffeldlinie wandert mit der erwarteten Form leicht nach rechts und nimmt in ihrer Intensität ab. Für  $\theta = \pm 30^\circ$  ist sie nicht mehr sichtbar.
- Die Mittelfeldlinie wandert mit der erwarteten Form deutlich nach links, mit abnehmender Intensität. Auch sie ist für  $\theta = \pm 30^\circ$  nicht mehr sichtbar.
- Die Hochfeldlinie wandert in der erwarteten Form sehr stark nach links, ebenfalls mit abnehmender Intensität.
- Für  $\theta \neq 0^\circ$  wird eine zusätzliche Linie sichtbar, die mit wachsender Intensität nach rechts wandert. Es wird sich hierbei um den eigentlich verbotenen Übergang  $-\frac{3}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$  handeln, der durch die Anisotropie von  $g$  nun zum Vorschein kommt.

Es ist aus den Formeln (24-26) nicht unmittelbar ersichtlich, warum die Tieffeldlinie in eine andere Richtung als die Mittel- und Hochfeldlinie wandert. Wann man allerdings berücksichtigt, dass sich die Energieniveaus wie in Abb. 4 dargestellte verbiegen, kann man sich überlegen, dass das Wandern in unterschiedliche Richtungen durchaus plausibel ist, je nachdem ob sich die Übergänge vor oder hinter den Schnittpunkten der sich unterschiedlich stark biegenden Linien befinden.

Es ist ebenfalls erstaunlich, dass einige Linien bei  $\theta = \pm 30^\circ$  verschwinden. Wir glauben, dass sie einfach nicht mehr in ausreichender Intensität vorhanden sind, um vom Detektor erfasst zu werden. Man könnte diese Vermutung überprüfen, indem man bei der Messung die Verstärkung erhöht und über einen deutlich längeren Zeitraum als acht Minuten mittelt.

Wir müssen feststellen, dass die Veränderung der Linien mit dem Winkel recht gut unseren Erwartungen folgen, dass die Analyse im letzten Detail allerdings sehr kompliziert ist.

#### 4.4 Interpretation des Spektrums bei $90^\circ$

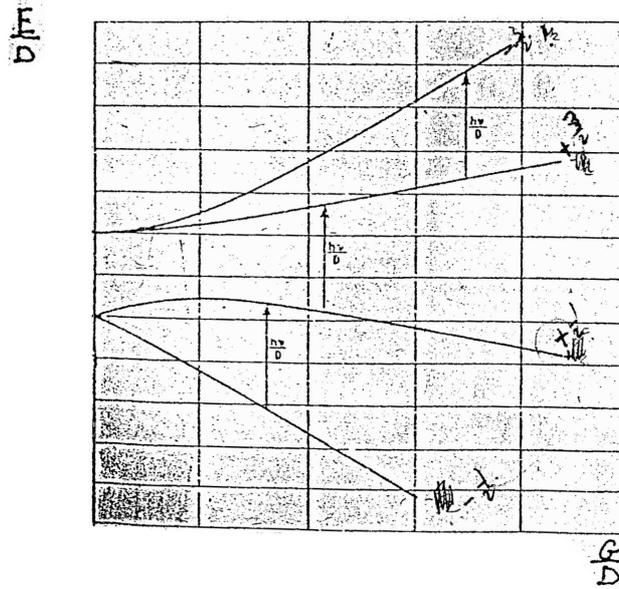


Abb. 4: Verlauf der Energieniveaus bei  $\theta = 90^\circ$

Bei  $\theta = 90^\circ$  und  $g_{\parallel} = g_{\perp} = g$  vereinfacht sich der Spinhamiltonian aus Gl. (3) zu

$$H_S = \mu_B \cdot B \cdot g \cdot S_x \quad (27)$$

Zusammen mit der Nullfeldaufspaltung aus Gl. (5) erhält man Energieeigenwerte von

$$E_{\pm\frac{1}{2}} = \pm\frac{1}{2}\mu_B \cdot g - \sqrt{(\mu_B B g)^2 \mp \mu_B B g D + D^2} \quad (28)$$

$$E_{\pm\frac{3}{2}} = \pm\frac{3}{2}\mu_B \cdot g + \sqrt{(\mu_B B g)^2 \mp \mu_B B g D + D^2} \quad (29)$$

Die Kurven sind in Abb. 4 gezeigt. Es sind außerdem die drei beobachteten Übergänge eingezeichnet. Nur der erste Übergang ist streng erlaubt ( $-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ ), die anderen sind eigentlich verboten, erscheinen aber durch die Anisotropie. Bemerkenswert ist, dass der erlaubte Übergang nur sehr schwach sichtbar ist, die nicht erlaubten jedoch stark. Dies ist aber konsistent mit den Beobachtungen aus den anderen Übersichtsspektren, dass mit steigendem Winkel die erlaubten Übergänge schwächer und die nichterlaubten stärker werden.

## 5 Zusammenfassung

Wir haben in diesem Versuch erfolgreich die ESR am im Rubin eingebetteten  $\text{Cr}^{3+}$ -Ionen durchgeführt. Dabei konnten wir in allen berechneten Werten  $g_{\parallel}$ ,  $D$ ,  $A$  ein mit dem Literaturwert übereinstimmendes Ergebnis erzielen. Auch das Winkelverhalten konnte von uns im Allgemeinen gut erklärt werden. Es hat sich gezeigt, dass die ESR ein sehr exaktes Werkzeug zur Messung von Energielinien ist. Der Fehler unserer Rechnungen besteht im Wesentlichen aus Ablesefehlern vom Schreiberpapier und aus Fehlern in der Kalibration des Spektrometers. Es ist davon auszugehen, dass mit einem modernen, exakt kalibrierten Gerät mit digitaler Ausgabe extrem exakte Messungen gemacht werden können.

## Literatur

- [1] ORTON, J.W.: *Electron Paramagnetic Resonance*. London, 1968