

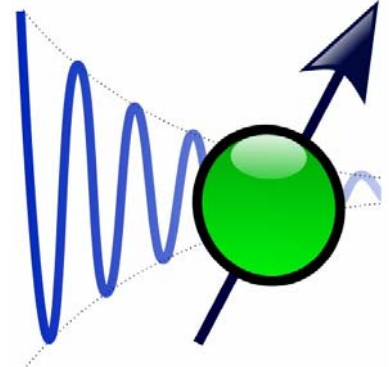
INSTYTUT FIZYKI

**WYDZIAŁ INŻYNIERII
PROCESOWEJ,
MATERIAŁOWEJ I
FIZYKI STOSOWANEJ**

**POLITECHNIKA
CZĘSTOCHOWSKA**



**LABORATORIUM Z PRZEDMIOTU
METODY REZONANSOWE**



ĆWICZENIE NR MR-4

**SYMULACJA WIDM EPR
PRZY POMOCY PROGRAMU EASYS PIN**

I. Zagadnienia do opracowania

1. Istota zjawiska EPR.
2. Ogólna budowa spektrometru EPR pracującego w fali ciągłej (cw) z wykorzystaniem metody podwójnej modulacji.
3. Widma EPR wolnych rodników w cieczach i monokryształach
4. Widma EPR jonów grupy $3d^n$ w substancjach mono- i polikrystalicznych.
5. Symulacja widm i optymalizacja parametrów przy pomocy programu Easyspin z wykorzystywaniem funkcji programu w funkcjach *garlic*, *peper* oraz *esfit*.

Celem ćwiczenia jest zapoznanie studentów ze możliwościami wykorzystania programu Easyspin do symulacji widm EPR

II. Przebieg ćwiczenia

II.1. Czynności wstępne

1. Program Easyspin jest dostępny nieodpłatnie na stronie www.easyspin.org.
2. Ściągnąć plik EasySpin.zip z podanej wyżej strony www i rozpakować do katalogu np. `C:\` lub innego wybranego. Rozpakowany plik programu *EasySpin* zawiera podkatalogi:
 - o `easyspin` – wszystkie funkcje programu (toolbox).
 - o `documentation` – dokumentacja programu w formacie HTML, plik początkowy dokumentacji `index.html`.
 - o `examples` – wszystkie przykłady, pogrupowane w podkatalogach.
3. Uruchomić program MATLAB (wersja 6.5 lub wyższa), przejść do menu „File → Set Path”. Dodaj podkatalog `easyspin` do ścieżki MATLAB-a przez kliknięcie na "Add Folder...", wybierając podkatalog `easyspin` katalogu z programem *EasySpin* a następnie kliknij przycisk "Save" aby program zapamiętał dodany katalog.
4. Dokonaj kompilacji. W tym celu napisz `easyspin` w oknie poleceń MATLAB-a. Możesz być poproszony o wybór kompilatora C. W takim przypadku wybierz `Lcc` (Windows) lub `gcc` (Linux, OSX). W oknie poleceń pojawi się wydruk w postaci podobnej do poniższej:

```
=====
EasySpin, a MATLAB toolbox for Electron Paramagnetic Resonance
Release:           3.1.0 (17 Jul 2009)
=====

Directory:        E:\easyspin-head\easyspin
MATLAB version:   7.8.0.347 (R2009a)
```

Platform: Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]
System date: 16-Jul-2009 23:18:34
Temp dir: C:\DOKUME~1\abc\LOKALE~1\Temp\
mex-files: mexw32, ok

=====

II.2. Symulacja widm EPR

II.2a Symulacja widm izotropowych przy z wykorzystaniem funkcji *garlic*.

Zapoznaj się z „*garlic tutorial*” z dokumentacji pakietu *easyspin* i dokonaj symulacji przynajmniej 3 przykładów widm z kilkoma równoważnymi i nierównoważnymi jądrami.

II.2b Symulacja widm EPR w ciałach stałych z wykorzystaniem funkcji *peper*

Zapoznaj się z „*peper tutorial*” z dokumentacji *easyspin* i dokonaj symulacji przynajmniej 4 przykładów widm zarówno w monokryształach jak i proszkach. Jeden z przykładów powinien wykorzystywać funkcje pozwalające uzyskać wykres anizotropii widm.

II.2c Symulacja widm z optymalizacja parametrów przy z wykorzystaniem funkcji *esfit*

Zapoznaj się z „*esfit tutorial*” z dokumentacji *easyspin* i dokonaj symulacji przynajmniej 2 przykładowych widm z optymalizacją parametrów przy pomocy wybranej metody optymalizacji.

Możesz w tym celu wykorzystać skrypty programu *easyspin*, ale dokonaj stosownej ich modyfikacji m.in. poprzez wybór innej metody optymalizacji, wartości parametrów początkowych i zakresu ich zmian, optymalizacji innych parametrów niż zadanych w przykładach.

III. Opracowanie pomiarów

1. W sprawozdaniu umieść parametry symulowanych widm z wybranych przykładów symulacji.
2. Wydrukować kody źródłowe skryptów matlab-a i symulowane widma.

IV. Literatura

Dokumentacja programu Easyspin (ze strony www.easyspin.org)