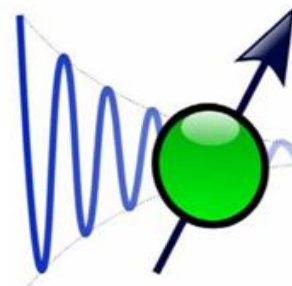


***KATEDRA FIZYKI***

***WYDZIAŁ INŻYNIERII PRODUKCJI  
I TECHNOLOGII MATERIAŁÓW  
POLITECHNIKA CZĘSTOCHOWSKA***



***LABORATORIUM Z PRZEDMIOTU  
METODY REZONANSOWE***



***ĆWICZENIE NR MR-4***

***SYMULACJA WIDM EPR PRZY POMOCY  
PROGRAMU EASYSPIN***

## 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](http://www.easyspin.org).
2. Ściągnąć plik EasySpin.zip z podanej wyżej strony [www](http://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](http://www.easyspin.org))