

## **Pulsmodulation für EPR / Pulse Shaping for EPR**

### **Arbeitsgruppe/Research Group:**

ESR Spektroskopie / Prof Dr Christopher Kay

### **Beschreibung:**

Die Elektronenparamagnetische Resonanz (EPR) ist ein leistungsstarkes Werkzeug zur Strukturanalyse molekularer Komplexe in den Bereichen Biologie, Chemie und Physik. Insbesondere die Verwendung dieser spektroskopischen Methode im Zeitbereich ermöglicht den Zugang zu Schwingungsdynamik, Bewegungen und Spindichten. Dies wird durch die Manipulation von Spins durch kurze und intensive Mikrowellenpulse erreicht. Einige Komplexe weisen jedoch komplizierte Spinverteilungen auf, was die Bestimmung dieser Parameter schwierig macht. Moderne Mikrowellentechnologie ermöglicht es, die Mikrowellenimpulse gezielt zu formen, um diese Herausforderungen zu meistern. Dies ermöglicht die Entwicklung hochspezialisierter Pulssequenzen, die bestimmte Spins innerhalb eines Komplexes ansprechen können, wie die übliche Methode der Kernspinresonanz (NMR).

Diese Arbeit wird erste Grundlagen zur Pulsformung liefern. Es werden verschiedene Pulsformen untersucht und miteinander verglichen. Die Wirksamkeit wird an Proben getestet, wobei gängige Puls-EPR-Experimente wie Spininversion, Elektronen-Spin-Echo-Hüllkurvenmodulation (ESEEM) oder Elektronen-Kern-Doppelresonanz (ENDOR) durchgeführt werden.

---

Electron paramagnetic resonance (EPR) is a powerful tool for structural analysis of molecular complexes ranging from biology, chemistry to physics. Especially, using this spectroscopic method within the time domain gives access to vibrational dynamics, motions, and spin densities. This is achieved by manipulating spins via short and intense microwave pulses. However, some complexes have complicated spin distributions, which make discerning these parameters challenging. Modern microwave technology allows to specifically shape the microwave pulses to overcome these challenges. This enables the development of highly specialized pulse sequences, which can address specific spins inside of a complex, like the common methodology used in nuclear magnetic resonance (NMR)

This work will make first groundwork in pulse shaping. Different shapes for pulses will be investigated and compared with each other. The effectiveness will be tested on samples, performing common pulse EPR experiments, like spin inversion, electron spin echo envelope modulation (ESEEM) or electron nuclear double resonance (ENDOR).

### **Forschungsfeld / Research Area:**

Festkörperphysik (experimentell), Mikrowellentechnik, Elektronenparamagnetische Resonanz  
Solid-State Physics (experimental), Microwave Engineering, Electron Paramagnetic Resonance

### **Betreuer(innen) / Supervisor:**

Dr. Christoph Zollitsch