

---

## Ergebnisse der Triplett-Simulation von T-NDI-T 1CN

---

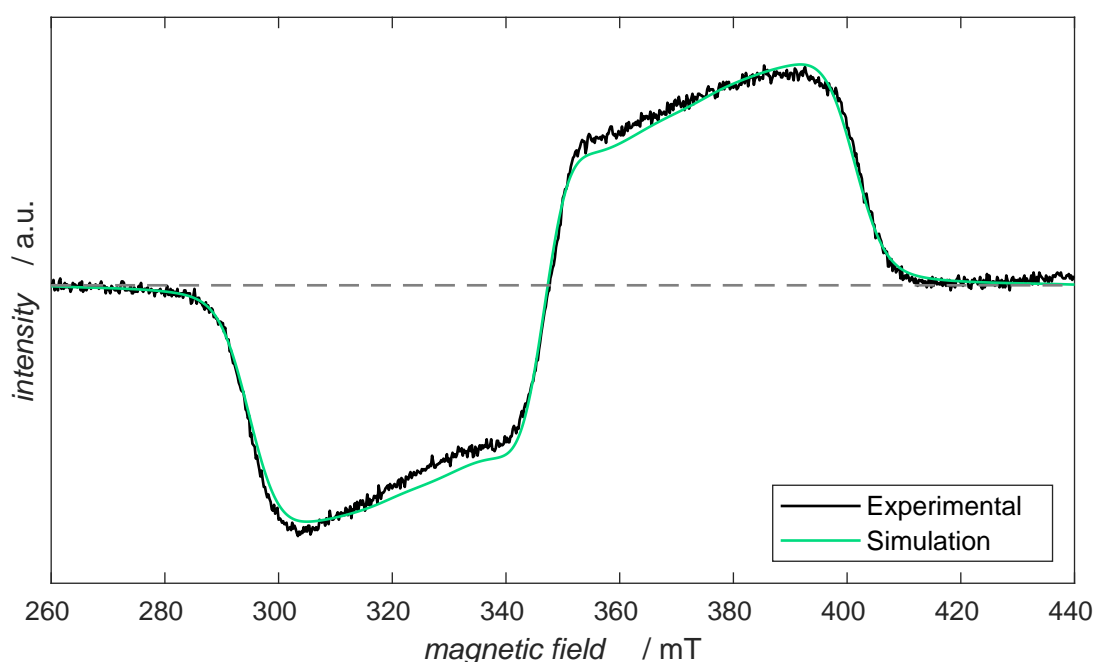
— moi, 2020-08-03 13:52:13

An das TREPR-Spektrum von T-NDI-T 1CN wurde mittels des Programms `Tsim` und unter Verwendung der Simulationsroutine `pepper` eine Triplett-Simulation angepasst.

**Zielstellung:** E nicht über D/3

**Nutzerkommentar:** E kleiner D/3

Für einen ersten Überblick über die Ergebnisse der Triplett-Simulation und der Anpassung an die experimentellen Daten vgl. Abb. 1, für die zugehörigen Simulationsparameter Tab. 1, S. 2, und für die Fitparameter Tab. 2, S. 2.



**Abbildung 1: Gemessene Daten zusammen mit einer angepassten Simulation.** Angepasst wurde die Simulation an einen Schnitt bei  $1.25 \times 10^{-6}$  s. Experimentelle Parameter: Mikrowellenfrequenz 9.77092 GHz, Mikrowellenleistung 2.00 mW (20 dB), 100 spp, Lichtanregung bei 486 nm mit 1 mJ Pulsleistung. Für die Simulationsparameter vgl. Tab. 1, S. 2.

— Disclaimer der Simulationsroutine —

*If you're using this routine for simulating your data,  
please cite the publications you will find at:  
<http://www.easyspin.org/>*

Für die Kurvenanpassung wurde die Funktion `lsqcurvefit` von `Matlab` verwendet. Die verwendeten Optionen können Tab. 3 entnommen werden. Das Abbruchkriterium der Kurvenanpassung lautete:

Local minimum possible.

`lsqcurvefit` stopped because the final change in the sum of squares relative to its initial value is less than the value of the function tolerance.

<stopping criteria details>

Optimization stopped because the relative sum of squares (r) is changing by less than `options.FunctionTolerance = 1.000000e-10`.

Gemessene Daten und Simulation wurden für die Kurvenanpassung jeweils auf gleiche Fläche normiert.

**Tabelle 1: Übersicht über die Simulationsparameter.** Die Simulationsparameter sind der vollständige Satz an Parametern, die für die Simulation des in Abb. 1 dargestellten Spektrums verwendet wurden.  $\Gamma$  steht für die Linienbreite, mit der die Simulation gefaltet wurde. Welche Parameter für die Kurvenanpassung wie variiert wurden, kann der Tab. 2 entnommen werden.

Standardparameter							
$g_x$	$g_y$	$g_z$	$p_1$	$p_2$	$p_3$	$D / \text{MHz}$	$E / \text{MHz}$
2.00200	2.00200	2.00200	0.000	1.000	0.000	1500.1	500.0

Parameter	Wert
$\Gamma_{\text{Gauß}} / \text{mT}$	8.01
$\Gamma_{\text{Lorentz}} / \text{mT}$	3.04
$\Delta B / \text{mT}$	-0.03

**Tabelle 2: Übersicht über die Fitparameter.** Diese Parameter stellen in der Regel eine Untermenge der für die Simulation des in Abb. 1 dargestellten Spektrums verwendeten Parameter dar. Für einen vollständigen Satz der Simulationsparameter vgl. Tab. 1. Der Fehler für jeden Parameter ist die Standardabweichung, die aus der Jacobi-Matrix berechnet wird.

Parameter	Startwert	untere Grenze	obere Grenze	Endwert	Fehler
D	1516.14	500.00	1591.95	1500.13	0.80
E	500.00	140.00	530.60	499.99	0.27
$p_2$	1.00	0.00	1.00	1.00	738.37
$p_3$	0.00	0.00	1.00	0.00	0.34
$\text{lwGauss}$	8.21	0.00	8.62	8.01	0.26
$\text{lwLorentz}$	2.53	0.00	7.00	3.04	0.24
$\Delta B$	-0.05	-0.10	0.30	-0.03	0.04

**Tabelle 3: Übersicht über die Optionen der Matlab-Routine `lsqcurvefit`, die bei der Kurvenanpassung Verwendung fanden.** Vergleiche auch das Abbruchkriterium der Funktion `lsqcurvefit` weiter oben.

Parameter	Wert
<code>MaxIter</code>	4.00e+02
<code>MaxFunEval</code>	1.00e+03
<code>TolFun</code>	1.00e-10