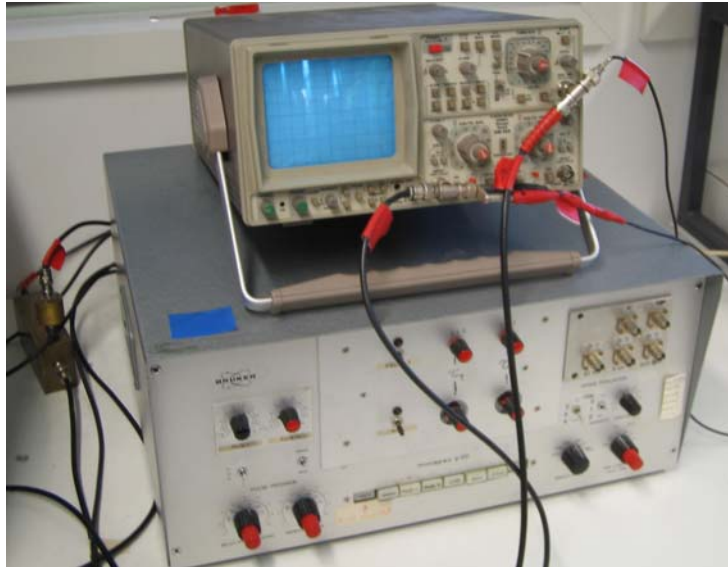


## ***Versuch F61: Kernresonanzspektroskopie***



**Betreuer: *Lotfi Benabderrahmane, Bogdan Vulpescu***

**Versuch durchgeführt am: *7. bis 9.06.2004*  
von: *Ronny Geisler und Ronak F.Kalhor,*  
im: *INF 501***

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Theorie und Einleitung</b>	<b>3</b>
1.1. Spin-Spin und Spin-Gitter Relaxationseffekte	3
1.2. 90° und 180° Impuls	3
1.3. Messung der Relaxationseffekte	3
1.4. Chemische Verschiebung, indirekte Kopplung und Dipol-D-WW	4
<b>2. Relaxationszeiten</b>	<b>5</b>
2.1. Spin-Spin-Relaxationszeit $T_2$	5
2.2. Spin-Spin-Relaxationszeit $T_2$ mit CP-Folge	6
2.3. Spin-Gitter-Relaxationszeit	8
<b>3. Flüssigkeitsspektren</b>	<b>9</b>
3.1. Probe A+	9
3.2. Probe B+	10
3.3. Probe C+	11
3.4. Probe D+	12
3.5. Probe E+	12
<b>4. Einkristallspektrum</b>	<b>13</b>
<b>5. Kritische Diskussion</b>	<b>15</b>
<b>6. Referenzen</b>	<b>16</b>

# 1. Theorie und Einleitung

## 1.1. Spin-Spin und Spin-Gitter Relaxationseffekte

In einem homogenen Magnetfeld befinden sich die Kernspins in einem Gleichgewichtszustand. Die makroskopische Probe besitzt dann eine Gesamtmagnetisierung  $M$ . Erzeugt man durch einen Puls eine Ungleichgewichtsmagnetisierung, dann strebt das System danach, zurück ins Gleichgewicht zu kommen. Hierbei unterscheidet man zwei Prozesse: longitudinale (Spin-Gitter) und transversale (Spin-Spin) Relaxation.

Die **Spin-Gitter-Relaxation** beschreibt den Wiederaufbau der z-Magnetisierung (parallel zum äußeren B-Feld). Dabei handelt es sich um einen energetischen Prozess, da das Gitter Energie ausgleicht, die das Spinsystem aufnimmt bzw. abgibt.

Bei der **Spin-Spin Relaxation** tauschen die Spins untereinander Energie aus, d. h. dass die Energie innerhalb des Kernspinsystems erhalten bleibt. Hierbei handelt es sich um einen entropischen Prozess, bei der die Entropie zunimmt.

## 1.2. 90° und 180° Impuls

Zur Messung der Relaxationszeiten legt man senkrecht zum statischen Magnetfeld ein oszillierendes, transversales HF-Magnetfeld  $B_1$  an, welches mit der Larmorfrequenz  $\omega_L$  um die z-Achse rotiert. In diesem rotierendem Koordinatensystem führt die Magnetisierung ein Präzessionsbewegung um das  $B_1$ -Feld aus. Mit der Kreisfrequenz  $\omega_1 = \gamma B_1$  erhält man für den Drehwinkel folgenden Zusammenhang:  $\alpha = \gamma B_1 t$ . Durch variieren von  $t$  kann man einen 90° bzw. 180°-Impuls erhalten.

Schaltet man nun das HF-Magnetfeld ab, so misst man die Induktion der Transversalkomponente der Magnetisierung in der Spule als Kernspinsignal (FID).

## 1.3. Messung der Relaxationseffekte

Zur Messung der **Spin-Gitter-Relaxationszeit  $T_1$**  legen wir zuerst einen 180°-Impuls an, um eine maximale Auslenkung aus dem Gleichgewichtszustand zu bewirken. Anschließend wird durch einen 90°-Impuls der zeitliche Verlauf gemessen.

Die **Spin-Spin-Relaxationszeit  $T_2$**  kann man auf zwei verschiedene weisen messen: mit der Spin-Echo-Methode oder der CP-Folge (Carr-Purcell-Folge). Bei der Spin-Echo-Methode erhält man durch ein 90°-180°-Pulsfolge ein stimuliertes Echo: nach dem 90°-Impuls laufen die Spinpakete infolge von Inhomogenitäten auseinander, welche durch den 180°-Impuls umgekehrt werden und wieder reversibel zusammenlaufen und den Echoimpuls erzeugen.

Bei der CP-Folge werden durch mehrere hintereinander folgende 180°-Impulse weitere Echos erzeugt.

Im Rechner wird dann mittels Fouriertransformation unser Zeitspektrum in ein Frequenzspektrum transformiert.

#### 1.4. Chemische Verschiebung, indirekte Kopplung und Dipol-Dipol-WW

Eine der drei relevanten inneren Wechselwirkungen von magnetischen Momenten, neben der Dipol-Dipol-WW und der Indirekten Kopplung, ist die **chemische Verschiebung**. Diese rührt daher, dass die ein magnetisches Moment umgebende Elektronenhülle am Kernort ein dem äußeren Magnetfeld proportionales Magnetfeld erzeugt. Der Proportionalitätsfaktor  $\sigma$  heißt magnetische Abschirmung, da sie dem äußere Magnetfeld entgegenwirkt. Für unsere Messungen ist dabei von Bedeutung, dass  $\sigma$  charakteristisch für jedes Molekül und jeden Kern im Molekül ist. Dabei kommt es meistens nur auf die H Atome an, da die anderen Kerne meist ein verschwindendes magnetisches Moment haben.

Bei der **indirekten Kopplung** treten die magnetischen Momente verschiedener Kerne innerhalb eines Moleküls über die Elektronenhülle miteinander in WW, wodurch es zu einer weiteren Aufspaltung der Spektren kommen kann. Zwischen verschiedenen Molekülen ist die Brown'sche Bewegung für das herausmitteln der Aufspaltung verantwortlich.

Diese Beiden spielen bei isotropen Flüssigkeiten die größte Rolle.

Im wohlgeordneten Festkörpern dominiert dagegen die **Dipol-Dipol-WW**, die zwischen allen Paaren von magnetischen Momenten auftritt.

## 2. Relaxationszeiten

Zur Bestimmung von Relaxationszeiten haben wir wie in der Einleitung beschrieben  $90^\circ$  und  $180^\circ$  Impulse verwendet, welche wir bei Versuchsbeginn auch entsprechend justiert haben.

### 2.1. Spin-Spin-Relaxationszeit $T_2$

Wir haben die Spin-Spin-Relaxationszeit einmal für eine wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung und einmal für eine stark verdünnte wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung bestimmt. Die von uns gemessene Magnetisierungskomponente wird durch folgende Exponentialfunktion beschrieben:  $M_y(t) = M_0 \exp\left(\frac{-t}{T_2}\right)$ , so dass wir durch einen exponentiellen Fit unserer Messdaten die gesuchte Relaxationszeit  $T_2$  erhalten.

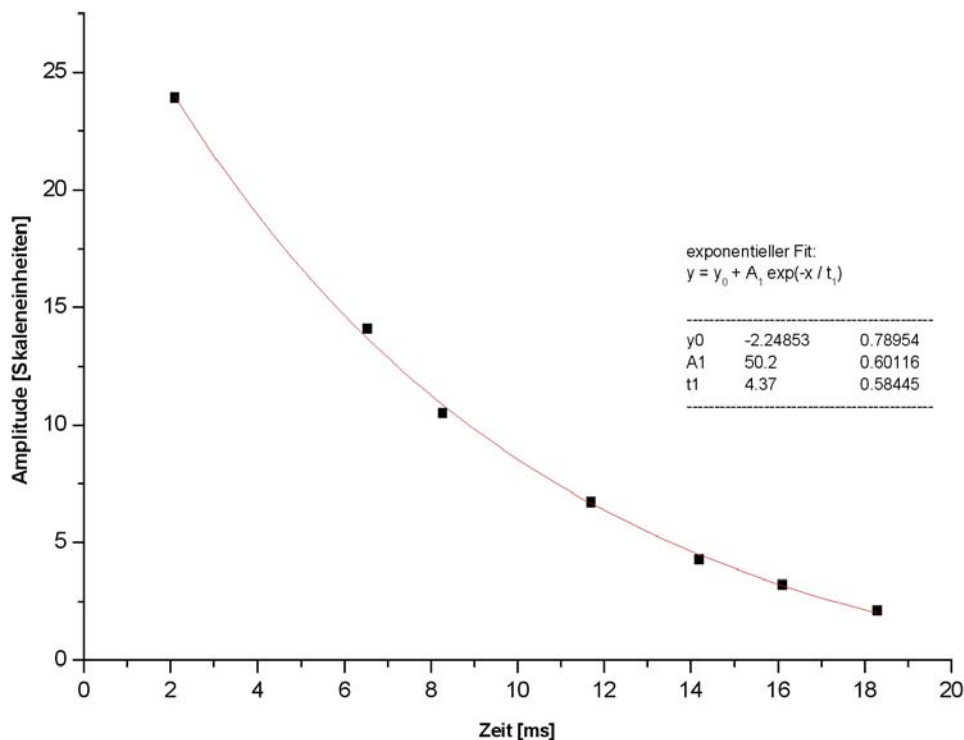


Abbildung 1: Spin-Spin-Relaxationszeit für wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung

Die Relaxationszeit für die wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung ergibt sich somit zu  $T_{2,wL} = (4,37 \pm 0,58)$  ms.

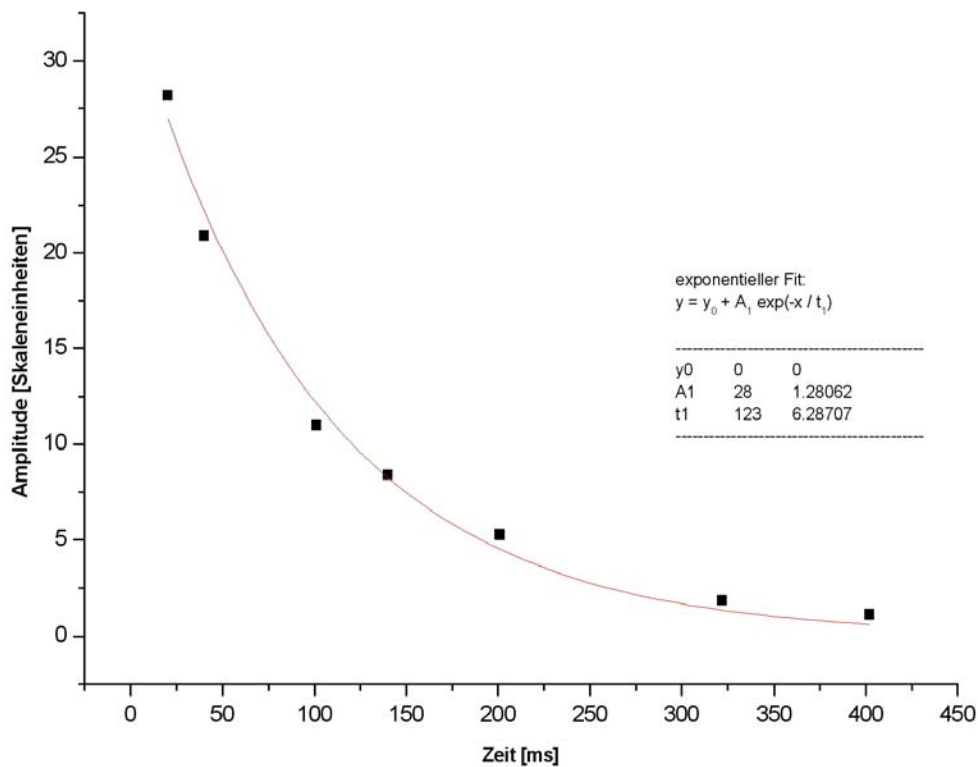


Abbildung 2: Spin-Spin-Relaxationszeit für stark verdünnte wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung

Die Relaxationszeit für die stark verdünnte wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung ergibt sich zu  $T_{2,\text{svwL}} = (123 \pm 6)$  ms.

Aus diesen beiden Messungen ist zu erkennen, dass die Spin-Spin-Relaxationszeit für eine stärker verdünnte wässrige Lösung deutlich höher ist.

## 2.2. Spin-Spin-Relaxationszeit $T_2$ mit CP-Folge

Die Magnetfeldinhomogenität in unseren Proben führt zur Moleküldiffusion, die sich störend auf unserer Messung auswirkt. Diese Diffusion führt zu einer irreversiblen Zerstörung der Phasenbeziehung der Magnetisierung einzelner Spinpakete.

Um dies zu verhindern misst man die Spin-Spin-Relaxationszeit mit der so genannten Carr-Purcell-Folge (CP-Folge).

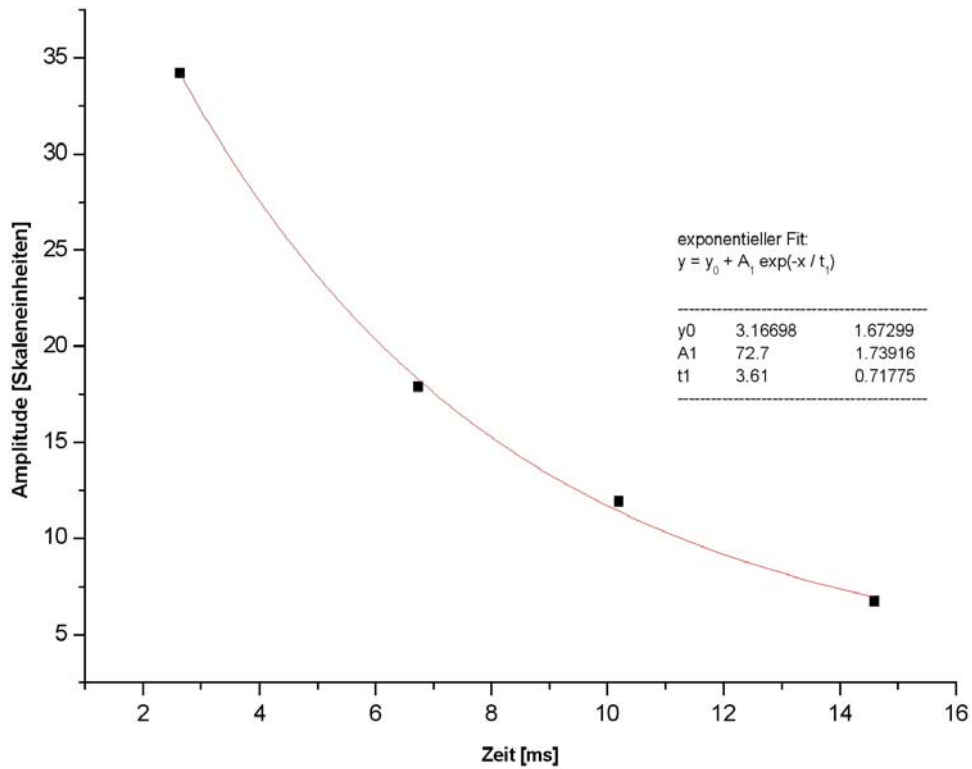


Abbildung 3: Spin-Spin-Relaxationszeit mit CP-Folge für wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung

Die Relaxationszeit für die wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung ergibt sich somit zu  $T_{2\text{CP,wL}} = (3,61 \pm 0,72) \text{ ms}$ .

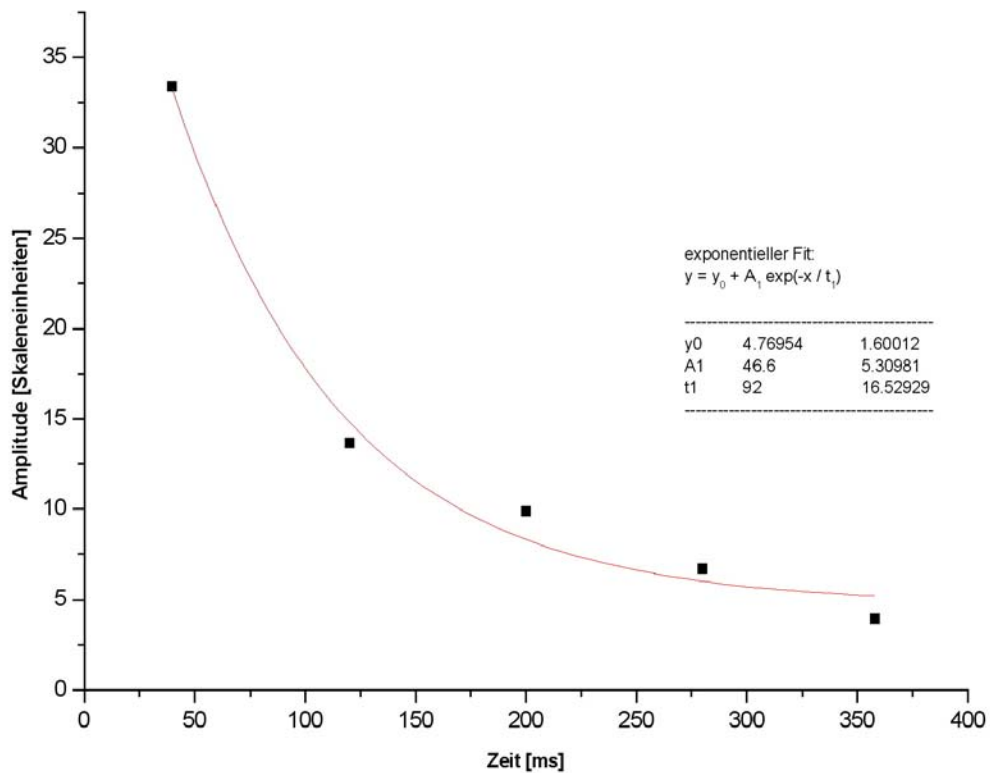


Abbildung 4: Spin-Spin-Relaxationszeit mit CP-Folge für stark verdünnte wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung

Die Relaxationszeit für die stark verdünnte wässrige CuSO<sub>4</sub>-Lösung ergibt sich zu  $T_{2CP,svwL} = (92 \pm 16) \text{ ms}$ .

Ein Vergleich mit den Relaxationszeiten, die wir ohne CP-Folge gemessen haben, zeigt eine Korrektur durch die CP-Folge, was sich in einer verkürzten Relaxationszeit bemerkbar macht.

### 2.3. Spin-Gitter-Relaxationszeit

Folgende Exponentialfunktion beschreibt die Magnetisierungskomponente  $M_z$ :

$$M_z(t) = M_0 - (M_0 - M_z(t=0)) \exp\left(\frac{-t}{T_1}\right),$$

die uns mit einem exponentiellen Fit die

gesuchte Relaxationszeit  $T_1$  liefert.

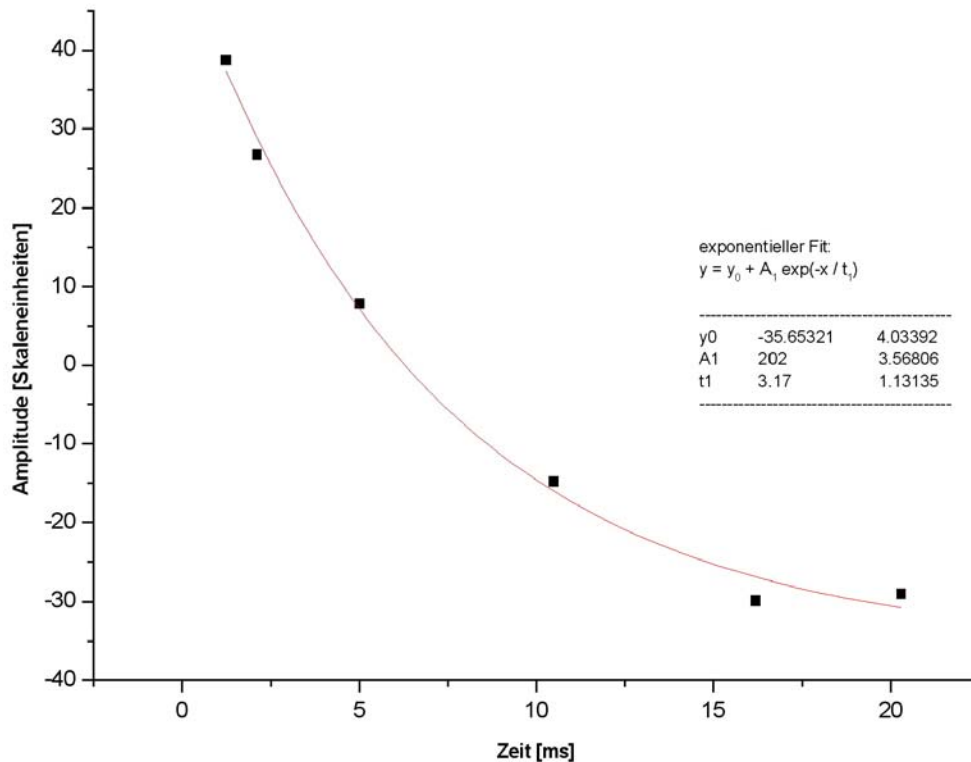


Abbildung 5: Spin-Gitter-Relaxationszeit für wässrige CuSO<sub>4</sub>-Lösung

Die Relaxationszeit für die wässrige CuSO<sub>4</sub>-Lösung ergibt sich somit zu  $T_{1,wL} = (3,17 \pm 1,13) \text{ ms}$ .

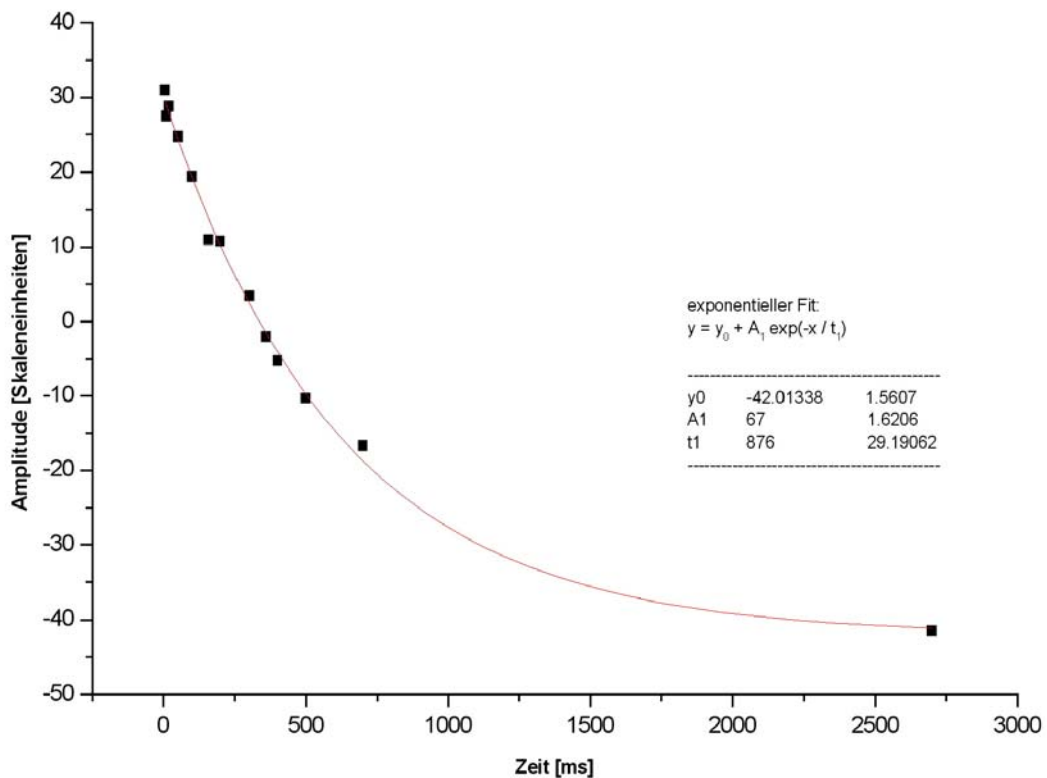


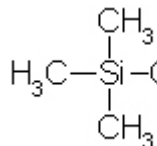
Abbildung 6: Spin-Gitter-Relaxationszeit für stark verdünnte wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung

Die Relaxationszeit für die stark verdünnte wässrige  $\text{CuSO}_4$ -Lösung ergibt sich zu  $T_{1,\text{svwL}} = (876 \pm 29)$  ms.

Leider waren uns keine Theoriewerte gegeben, so dass wir unsere Werte nicht vergleichen und bewerten konnten.

### 3. Flüssigkeitsspektren

In diesem Versuchsteil messen wir chemische Verschiebungen der Protonen, dabei standen uns 5 Verbindungen mit und ohne Beimengungen von TMS (Tetra-Methyl-Silan:



) zur Verfügung. Durch Vergleich konnten wir die TMS-Linie identifizieren

und dann die relativen Verschiebungen der anderen Linien dazu bestimmen. Desweiteren war uns eine Tabelle gegeben mit den relativen Linienverschiebungen zwischen diesem TMS und verschiedenen funktionellen Gruppen. Aus den gemessenen verschiedenen Linienverschiebungen konnten wir die 5 Lösungen wie im folgenden erläutert zuordnen.

#### 3.1. Probe A+

In Probe A+ haben wir die unten angegebenen relativen Linienverschiebungen aus dem nebenstehenden Spektrum bestimmt.

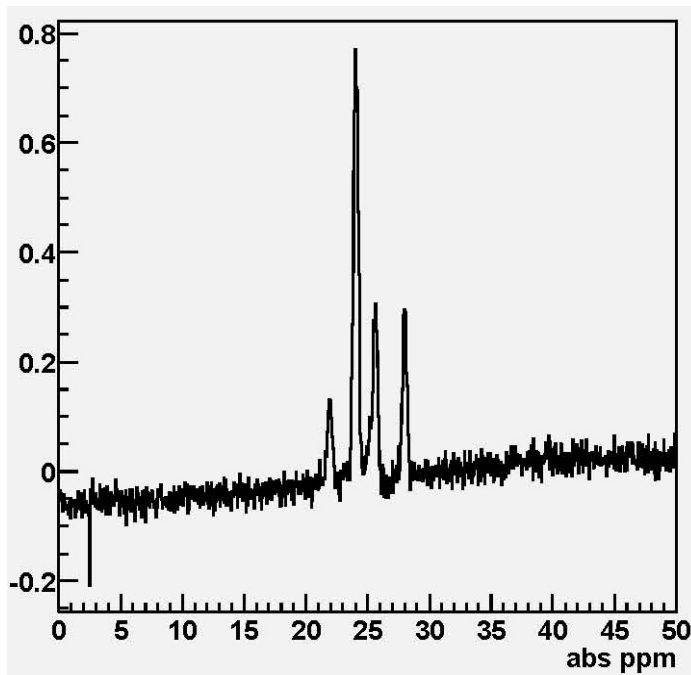
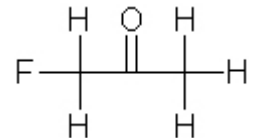


Abbildung 7: Flüssigkeitsspektrum der Probe A+

**gemessene Linienverschiebungen  
relativ zur TMS-Linie:**

- 1. Linie: 2,5 ppm
- 2. Linie: 4,0 ppm
- 3. Linie: 6,0 ppm

Diese Linienverschiebungen lässt sich am besten dem Fluoracetone:



zuordnen. Die 1. und 2. Linie kommt von der CH<sub>2</sub> und CH<sub>3</sub>-Gruppe, welche je eine Linie mit einer relativen Linienverschiebungen zwischen 0,5 bis 5,5 ppm bzw. 0 bis 4,5 ppm hervorruft. Die 3. Linie kann dem Fluor zugeordnet werden.

### 3.2. Probe B+

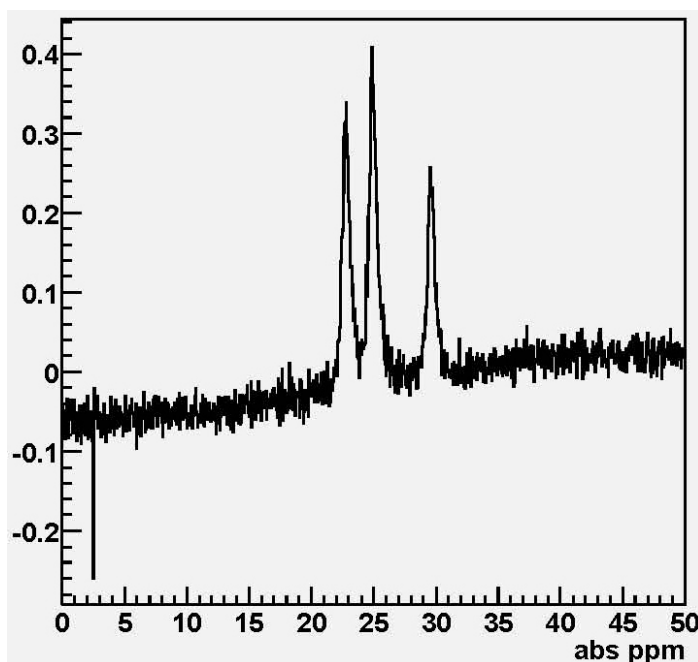
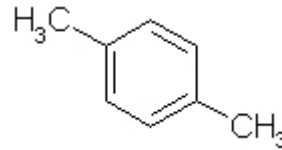


Abbildung 8: Flüssigkeitsspektrum der Probe B+

**gemessene Linienverschiebungen  
relativ zur TMS-Linie:**

- 1. Linie: 2,2 ppm
- 2. Linie: 7,0 ppm

Am markantesten ist hier die 2. Linie, die dem Benzolring (Verschiebung zwischen 6,5 und 8,0 ppm) zugeordnet werden kann. Die 1. Linie kommt von den zwei CH<sub>3</sub>-Gruppen am Benzolring (2 bis 2,7 ppm). Damit lässt sich p-Xylol:



dieser Lösung

zuordnen.

### 3.3. Probe C+

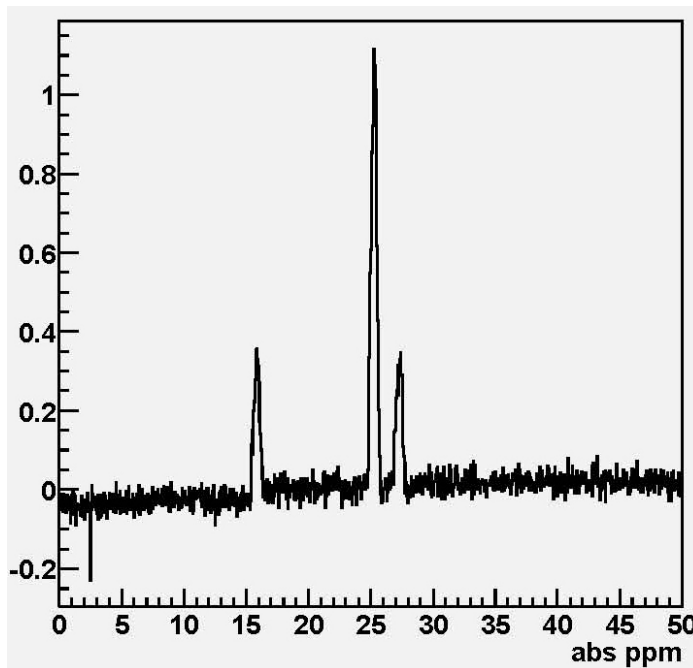


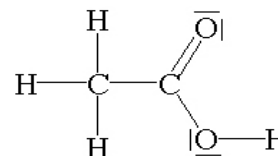
Abbildung 9: Flüssigkeitsspektrum der Probe C+

**gemessene Linienverschiebungen  
relativ zur TMS-Linie:**

- 1. Linie: 2,0 ppm
- 2. Linie: 11,3 ppm

Wieder am markantesten ist die 2. Linie, die dem H-Atom aus der Carboxylgruppe (9 bis 13 ppm) zugeordnet werden kann. Desweiteren ist auch wieder die CH<sub>3</sub>-Gruppe (0 bis 4,5

ppm) vertreten. Damit kommt die Ethansäure:



am besten in

Betracht.

### 3.4. Probe D+

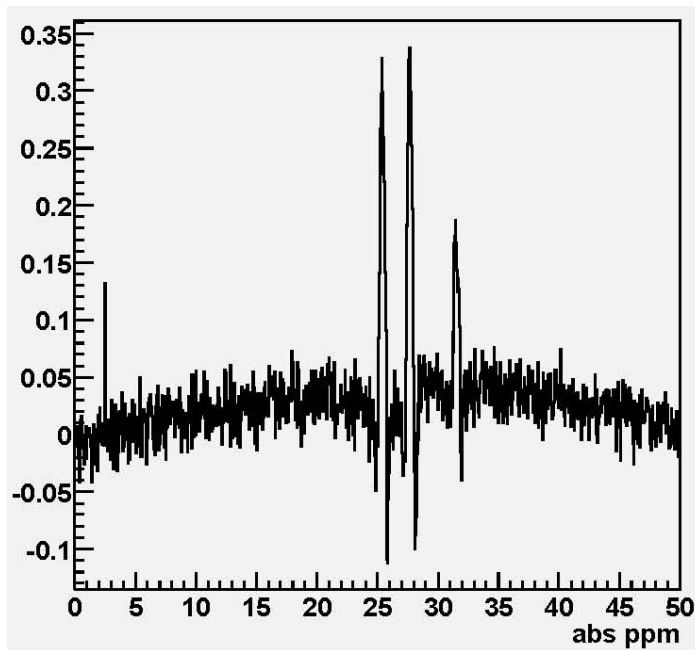


Abbildung 10: Flüssigkeitsspektrum der Probe D+

**gemessene Linienverschiebungen  
relativ zur TMS-Linie:**

- 1. Linie: 4,0 ppm
- 2. Linie: 6,3 ppm

Die erste Linie lässt sich der CH<sub>2</sub>-Gruppe (0,5 bis 5,5 ppm) zuordnen. Das Fluor ruft eine Linie mit einer relativen Verschiebung von 6,3 ppm hervor. Daraus lässt sich für das

Fluoracetonitril:  $\begin{array}{c} \text{H} \\ | \\ \text{F}-\text{C}-\text{C}\equiv\text{N} \\ | \\ \text{H} \end{array}$  die Kopplungskonstante  $J_{\text{HF}}$  wie folgt berechnen:

$$J_{\text{HF}} = \Delta\nu \cdot h = 6,3 \text{ ppm} \cdot 20 \text{ Hz/ppm} \cdot 6,626076 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = \underline{\underline{8,34 \cdot 10^{-32} \text{ J}}}$$

### 3.5. Probe E+

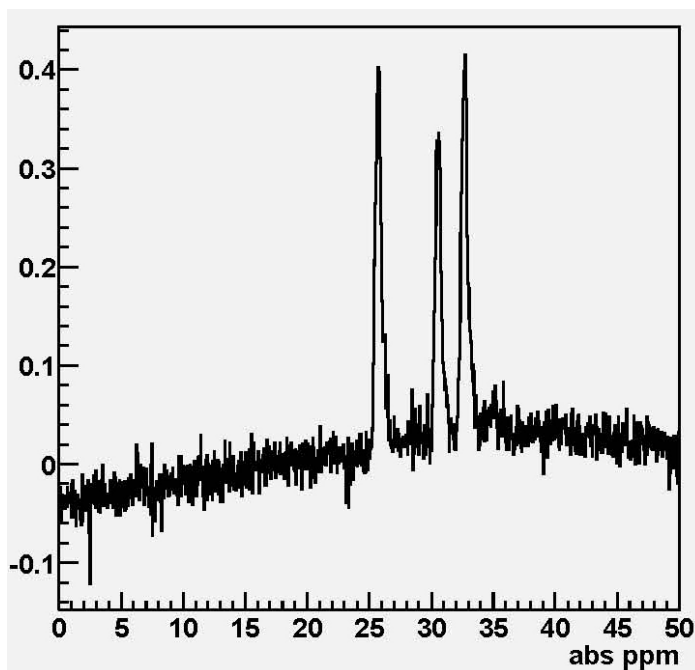
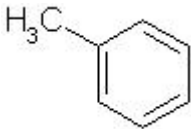


Abbildung 11: Flüssigkeitsspektrum der Probe E+

**gemessene Linienverschiebungen  
relativ zur TMS-Linie:**

- 1. Linie: 2,0 ppm
- 2. Linie: 6,7 ppm

Für die letzte Probe lässt sich die 1. Linie der CH<sub>3</sub>-Gruppe am Benzolring (2 bis 2,7 ppm) zuordnen und die 2. Linie den H-Atomen am Benzolring selber (6,5 bis 8,5 ppm). Damit

passt Toulol:  am besten zu dieser Messung.

## 4. Einkristallspektrum von Ba(ClO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O

In diesem Versuchsteil ging es darum, den Abstand der Protonen und die Richtung ihrer Verbindungslinie zu bestimmen. Hierzu nutzen wir aus, dass das ZZ-Element von  $D_{HA}$  (Kopplungstensor im Hauptachsensystem, diagonalisiert) den Abstand zweier dipolarer gekoppelter Protonen liefert. Die Richtung der Kernverbindungslinie erhalten wir über den Eigenvektor desselben Elements. Dank eines hilfreichen Programmes erhielten wir ohne großen Aufwand  $D_{HA}$ .

Um  $D_{HA}$  bestimmen zu können benötigt man zunächst ein Koordinatensystem. Wir benutzten in unserem Experiment das von Jochen Kraft willkürlich festgelegte Koordinatensystem mit den 3 orthogonalen Achsen  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ .

Bei diesem Kristall handelt es sich um einen wohlgeordneten Festkörper, so dass man die zuvor betrachtete chemische Verschiebung und die indirekte Kopplung vernachlässigen kann. Allein die Dipol-Dipol-Wechselwirkung führt hier zur Linienaufspaltung.

Wir haben für die 3 Kristallorientierungen jeweils im 10°-Abstand eine Aufnahme gemacht und diese dann mit dem Computerprogramm an die Funktion  $y = a + b \sin 2\phi + c \cos 2\phi$  gefittet:

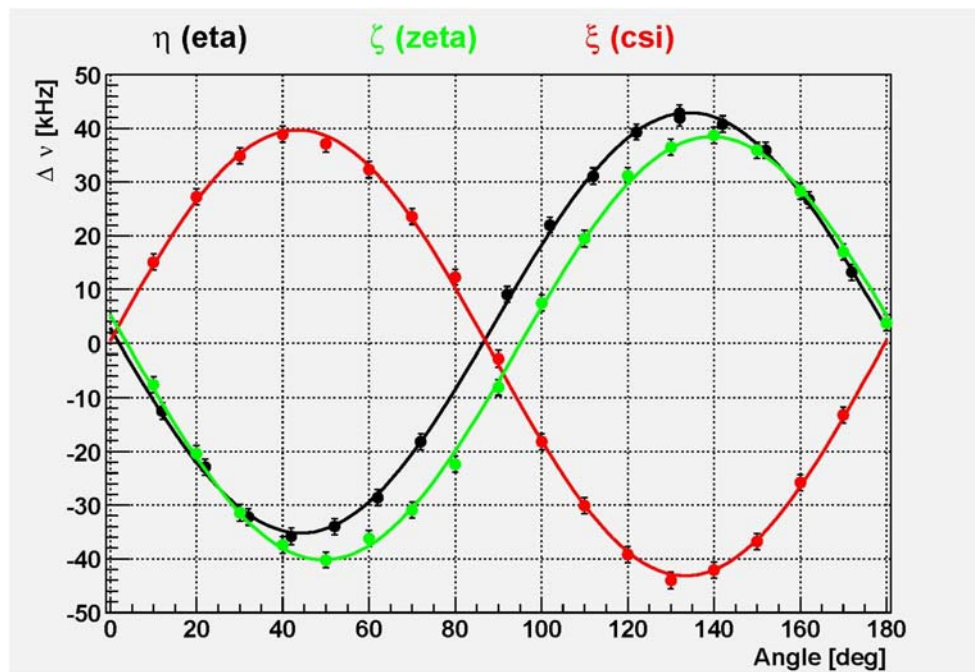


Abbildung 12: gefittete Sinuskurven für die drei Kristallachsen

$$D_{LS,zz}^{\tilde{\xi}}(\phi) = \xi_1 + \xi_2 \cos 2\phi + \xi_3 \sin 2\phi$$

$$D_{LS,zz}^{\tilde{\eta}}(\phi) = \eta_1 + \eta_2 \cos 2\phi + \eta_3 \sin 2\phi$$

$$D_{LS,zz}^{\tilde{\zeta}}(\phi) = \zeta_1 + \zeta_2 \cos 2\phi + \zeta_3 \sin 2\phi$$

Damit ergeben sich die Konstanten zu:  $\xi_1=3.86$  ;  $\xi_2=-1.10$  ;  $\xi_3=-39.04$  ;  $\eta_1=-1.72$  ;  $\eta_2=2.24$  ;  $\eta_3=-41.37$  ;  $\zeta_1=-0.88$  ;  $\zeta_2=6.11$  ;  $\zeta_3=-38.83$  .

Die Tensorgleichungen sind:

$$D_{LS,zz}^{\tilde{\xi}}(\phi) = \frac{1}{2}(D_{\eta\eta}^{\tilde{\xi}} + D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\xi}}) - \frac{1}{2}(D_{\eta\eta}^{\tilde{\xi}} - D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\xi}})\cos 2\phi - D_{\eta\zeta}^{\tilde{\xi}}\sin 2\phi$$

$$D_{LS,zz}^{\tilde{\eta}}(\phi) = \frac{1}{2}(D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\eta}} + D_{\xi\xi}^{\tilde{\eta}}) - \frac{1}{2}(D_{\xi\xi}^{\tilde{\eta}} - D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\eta}})\cos 2\phi + D_{\xi\zeta}^{\tilde{\eta}}\sin 2\phi$$

$$D_{LS,zz}^{\tilde{\zeta}}(\phi) = \frac{1}{2}(D_{\xi\xi}^{\tilde{\zeta}} + D_{\eta\eta}^{\tilde{\zeta}}) + \frac{1}{2}(D_{\xi\xi}^{\tilde{\zeta}} - D_{\eta\eta}^{\tilde{\zeta}})\cos 2\phi + D_{\xi\eta}^{\tilde{\zeta}}\sin 2\phi$$

Durch Vergleich und lösen des Gleichungssystems (  $D_{\eta\eta}^{\tilde{\xi}} = \xi_1 - \xi_2$  und  $D_{\eta\eta}^{\tilde{\zeta}} = \zeta_1 - \zeta_2$  ;  $D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\xi}} = \xi_1 + \xi_2$  und  $D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\eta}} = \eta_1 + \eta_2$  ;  $D_{\xi\xi}^{\tilde{\xi}} = \eta_1 - \eta_2$  und  $D_{\xi\xi}^{\tilde{\zeta}} = \zeta_1 + \zeta_2$  ) ergeben sich die Koeffizienten zu:  $D_{\eta\eta}^{\tilde{\xi}} = -5.5$  ;  $D_{\zeta\zeta}^{\tilde{\xi}} = 5.1$  ;  $D_{\xi\xi}^{\tilde{\xi}} = 1.6$  ;  $D_{\eta\zeta}^{\tilde{\xi}} = -41.37$  ;  $D_{\xi\zeta}^{\tilde{\eta}} = -39.04$  ;  $D_{\xi\eta}^{\tilde{\zeta}} = -38.83$

Dieser Tensor wurde nun mit dem Makro-Matrix diagonalisiert und die Eigenwerte ergeben sich zu  $\lambda_{\eta} = 38.09\text{kHz}$  ;  $\lambda_{\xi} = 42.46\text{kHz}$  ;  $\lambda_{\zeta} = -79.28\text{kHz}$  mit den Eigenvektoren:

$$v_{\eta} = (0.496; -0.788; 0.365) ; v_{\xi} = (-0.675; -0.086; -0.732) ; v_{\zeta} = (0.546; -0.609; 0.575)$$

Diese spannen nun auch unser Hauptachsenkoordinatensystem HA (x,y,z) im kristallfesten Koordinatensystem KFK ( $\xi, \eta, \zeta$ ) auf. Dabei gibt  $v_{\zeta}$  die Richtung  $\mathbf{r}$  (z-Achse) der Verbindungslinie zwischen den 2 Protonen an.

Die Einheitszelle unseres monoklinen Kristalls wird im KFK durch die folgenden Vektoren aufgespannt:

$$\mathbf{a} = (-0.5870; -0.6674; -0.0584) \quad \mathbf{b} = (0.5870; -0.5163; 0) \quad \mathbf{c} = (0; 0; 0.9390)$$

Der Winkel zwischen  $\mathbf{a}$  und  $v_{\zeta}$  ergibt sich mit  $\cos \alpha = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v}_{\zeta}}{|\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{v}_{\zeta}|}$  zu  $\alpha = 86,6^\circ$ . Nach gleicher

Rechnung ergibt sich, dass  $\mathbf{r}$  nicht orthogonal zu  $\mathbf{b}$  ist.

Der Zusammenhang mit dem dem Abstand der beiden Protonen ist durch folgende Beziehung gegeben:

$$\begin{pmatrix} \lambda_{\eta} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{\xi} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{\zeta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 38.09 & 0 & 0 \\ 0 & 42.46 & 0 \\ 0 & 0 & -79.28 \end{pmatrix} = \frac{1}{r^3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Durch Vergleich der Einträge erhalten wir für  $r$ :  ~~$r^3 = 0,025 \text{ nm}^3$~~   $\rightarrow r = 0,292 \text{ nm}$ .

---> siehe nächste Seite:

Our eigenvalues are:  $\lambda_{\eta} = 38.09 \text{ kHz}$  ;  $\lambda_{\xi} = 42.46 \text{ kHz}$  ;  $\lambda_{\zeta} = -79.28 \text{ kHz}$  ,

and so our eigen vectors are given by:

$$\begin{aligned} v_{\eta} &= (0.496 ; -0.788 ; 0.365) ; \\ v_{\xi} &= (-0.675 ; -0.086 ; -0.732) ; \\ v_{\zeta} &= (0.546 ; -0.609 ; 0.575) \end{aligned}$$

We have not got any errors for our eigen vectors from the software „Makro-Matrix“.

Now we can calculate r. Our „main value“ (Hauptwert)  $D_{zz}$  is given by our eigenvalue  $\lambda_{\zeta} = -79280 \text{ Hz} = D_{zz}$  . From equ. 55 (script) we get:

$$D_{LS,zz} = \frac{2}{3} \frac{h}{C} D_{zz} = \frac{32\pi^3}{3h\mu_0\gamma_I^2} D_{zz} = \frac{-2}{r^3}$$

The constant C is given by equ. 46 and the last relationship is given by equ. 48. With

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{\text{Vs}}{\text{Am}} , h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \text{ and } \gamma_I = 2.6752 \cdot 10^8 \frac{\text{Am}^2}{\text{Js}} \text{ we get for r:}$$

$$|r| = \sqrt[3]{\frac{-3h\mu_0\gamma_I^2}{16\pi^3 D_{zz}}} = 1.656 \cdot 10^{-10} \text{ m} = \underline{\underline{0.166 \text{ nm}}}$$

Because we have no error for  $D_{zz}$  we have no error for r. You can just estimate from the variance of our eigenvalues an error of about five per cent. Then we would get for r approximately:  **$r = (0.166 \pm 0.008) \text{ nm}$** .

## 5. Kritische Diskussion

von Ronny Geisler

Die Durchführung des Versuchs lief ohne größerer Komplikationen ab. Als einziges Anfangs etwas störende war, dass bei der Aufnahme der Daten für die Spin-Spin-Relaxationszeit, für mich nicht immer klar war, was wir da eigentlich aus dem Spektrum ablesen sollten. Dies könnte vielleicht besser erklärt werden. Ich denke aber das unsere Ergebnisse akzeptabel sind. Theoriewerte hatten wir ja leider nicht zum Vergleich um unsere Ergebnisse zu bewerten bzw. zu beurteilen. Die anderen Versuchsteile gingen ohne Probleme. Es ist mir aber noch etwas unklar, ob die Einheiten von  $J_{HF}$  (3.4.) und r (4.) so richtig sind.

Im großen und ganzen war der Versuch schon interessant. Die Einleitung war auch verständlich, vielleicht etwas formellastig. Die Versuchsaufbauten waren etwas schlicht, ich hätte mir vorher unter Kernresonanzspektroskopie etwas mehr „spektakuläres“ vorgestellt.

Im allgemeinen sollte bei manchen Teilaufgaben auch beim Versuch schon mal hingewiesen werden, was und wie man bestimmte Sachen dann auch in der Auswertung macht. Bei diesem Versuch war dies aber eigentlich kein Problem.

von Ronak F. Kalhor

Im Großen und Ganzen konnten wir den Versuch ohne größere Schwierigkeiten durchführen und die Schritte im einzelnen nachvollziehen. Die Einleitung war eine gute Vorbereitung zu dem Versuch, wobei aus meiner Sicht das Kapitel I.13 zu sehr in die Tiefe geht, und in der Form zu ausführlich ist, zumal wir die Rechnungen ohnehin nicht machen müssen, da zu diesem Zweck ein Programm geschrieben wurde.

Leider hatten wir keine Theoriewerte vorgegeben, so dass wir nicht die Möglichkeit hatten unsere Werte auf ihre Richtigkeit zu prüfen, und diese zu bewerten.

Ich hätte es interessant gefunden, wenn etwas mehr über Kernresonanzspektroskopie generell gesagt worden wäre, und (ungelöste) Probleme erwähnt worden wären.

Insgesamt war es eine gute Möglichkeit für mich zu sehen, wie man tatsächlich Kernresonanzspektroskopie betreibt und v.a. eine gute Festigung des Gelernten.

## **6. Referenzen**

### ***Bücher:***

- Versuchsanleitung, FP-Praktikum
- Taschenbuch der Physik, Stöcker, Verlag Harri Deutsch

### ***Internet:***

- [www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm](http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/bnmr.htm) (Basics of NMR)