

# Inhalt

|  |           |
|--|-----------|
| <b>1. EINLEITUNG .....</b>                                     | <b>4</b>  |
| <b>1.1 Allgemeines und Organisation.....</b>                   | <b>4</b>  |
| 1.1.1 Inhalt.....  | 4         |
| 1.1.2 Publikum.....  | 4         |
| 1.1.3 Organisatorisches.....                                   | 4         |
| 1.1.4 Ziele.....   | 4         |
| <b>1.2 Magnetische Resonanz: Was, Wann, Wie und Wozu?.....</b> | <b>6</b>  |
| 1.2.1 Prinzip.....   | 6         |
| 1.2.2 Geschichte.....  | 7         |
| 1.2.3 Informationsgehalt.....                                  | 8         |
| 1.2.4 Kernspintomographie.....                                 | 11        |
| 1.2.5 Kopplungen und Strukturbestimmung.....                   | 12        |
| 1.2.6 Austauschspektroskopie.....                              | 14        |
| 1.2.7 Bewegungsprozesse und Relaxation.....                    | 15        |
| 1.2.8 Elektronenspinresonanz.....                              | 16        |
| 1.2.9 Grundlagen.....  | 17        |
| 1.2.10 Experimentelle Aspekte.....                             | 18        |
| <b>2. GRUNDLAGEN UND WECHSELWIRKUNGEN .....</b>                | <b>19</b> |
| <b>2.1 Magnetismus und magnetisches Moment.....</b>            | <b>19</b> |
| 2.1.1 Felder und Dipole; Einheiten.....                        | 19        |
| 2.1.2 Magnetischer Dipol im Magnetfeld.....                    | 20        |
| 2.1.3 Drehimpuls und magnetische Dipole.....                   | 20        |
| 2.1.4 Modellrechnung: Kreisstrom.....                          | 22        |
| 2.1.5 Der Elektronenspin.....                                  | 23        |
| 2.1.6 Kernmomente.....   | 23        |
| 2.1.7 Resonanzfrequenz.....                                    | 24        |
| 2.1.8 Beispiele.....   | 25        |
| <b>2.2 Chemische Verschiebung.....</b>                         | <b>26</b> |
| 2.2.1 Phänomenologie der chemischen Verschiebung.....          | 26        |
| 2.2.2 Interpretation.....                                      | 27        |
| 2.2.3 Qualitative Theorie der chemischen Verschiebung.....     | 29        |
| 2.2.4 Anisotropie.....   | 31        |
| 2.2.5 Knight Shift.....  | 32        |
| <b>2.3 Quadrupolwechselwirkung .....</b>                       | <b>34</b> |
| 2.3.1 Elektrostatische Energie des Kerns.....                  | 34        |
| 2.3.2 Modellsystem.....  | 36        |
| 2.3.3 Symmetrie.....   | 37        |
| <b>2.4 Spin-Spin Wechselwirkungen.....</b>                     | <b>39</b> |
| 2.4.1 Phänomenologie.....                                      | 39        |
| 2.4.2 Dipol-Dipol Wechselwirkung.....                          | 40        |
| 2.4.3 Indirekte (skalare, J-) Kopplung.....                    | 41        |
| <b>2.5 Evolution der Spins im Magnetfeld.....</b>              | <b>43</b> |
| 2.5.1 Drehimpuls und Drehmoment.....                           | 43        |
| 2.5.2 Larmorpräzession.....                                    | 44        |
| 2.5.3 Radiofrequenzfeld.....                                   | 45        |
| 2.5.4 Rotierendes Koordinatensystem.....                       | 45        |
| 2.5.5 Transformation der Bewegungsgleichung.....               | 47        |
| 2.5.6 Lösung der Bewegungsgleichung.....                       | 48        |
| 2.5.7 Spezialfälle.....  | 49        |

|            |   |           |
|------------|---|-----------|
| <b>2.6</b> | <b>Relaxation und stationäre Lösung</b>                         | <b>50</b> |
| 2.6.1      | Phänomenologische Einführung der longitudinalen Relaxation      | 50        |
| 2.6.2      | Transversale Komponenten  | 51        |
| 2.6.3      | Stationäre Lösung   | 52        |
| 2.6.4      | Longitudinale Magnetisierung                                    | 52        |
| 2.6.5      | Absorbierte Leistung  | 53        |
| 2.6.6      | Messung von Absorption und Dispersion                           | 54        |
| 2.6.7      | Transversale Komponenten  | 54        |
| <b>3.</b>  | <b>NMR SPEKTREN</b>   | <b>56</b> |
| <b>3.1</b> | <b>Quantenmechanischer Formalismus</b>                          | <b>56</b> |
| 3.1.1      | Vorgehen  | 56        |
| 3.1.2      | Spin-Operatoren   | 57        |
| 3.1.3      | Beschreibung eines Ensembles                                    | 58        |
| 3.1.4      | Definition des Dichteoperators                                  | 59        |
| 3.1.5      | Eigenschaften, Beispiele  | 59        |
| 3.1.6      | Dichteoperator für Ensembles                                    | 60        |
| 3.1.7      | Basisoperatoren für den Dichteoperator                          | 61        |
| 3.1.8      | Rechnen mit dem Dichteoperator                                  | 62        |
| 3.1.9      | Evolution eines Spins $I=1/2$                                   | 63        |
| <b>3.2</b> | <b>Signale von einer Spinspezies</b>                            | <b>65</b> |
| 3.2.1      | Evolution eines Spins $I=1/2$                                   | 65        |
| 3.2.2      | Detektion   | 66        |
| 3.2.3      | Berechnung des Spektrums  | 67        |
| <b>3.3</b> | <b>Quadrupolspektren</b>  | <b>70</b> |
| 3.3.1      | Quadrupol-Wechselwirkung  | 70        |
| 3.3.2      | Reine Quadrupolresonanz   | 71        |
| 3.3.3      | Spin 1  | 72        |
| 3.3.4      | Spin $5/2$  | 73        |
| 3.3.5      | Quadrupolwechselwirkung im starken Magnetfeld                   | 74        |
| 3.3.6      | Spektrum  | 76        |
| <b>3.4</b> | <b>Gekoppelte Spinsysteme</b>                                   | <b>78</b> |
| 3.4.1      | Matrixdarstellung von Operatoren in Systemen mit mehreren Spins | 78        |
| 3.4.2      | Direktes Produkt  | 79        |
| 3.4.3      | Dipol-Dipol Hamiltonoperator                                    | 79        |
| 3.4.4      | Skalare Kopplung  | 80        |
| 3.4.5      | AX System (2 Spins $1/2$ , schwach gekoppelt)                   | 81        |
| 3.4.6      | Berechnung mit Dichteoperator                                   | 82        |
| 3.4.7      | Dipolkopplung zwischen identischen Spins im starken Magnetfeld  | 83        |
| 3.4.8      | Unterschiedliche Spins  | 84        |
| 3.4.9      | Eigenwerte und Spektrum   | 86        |
| 3.4.10     | Andere Spinsysteme  | 87        |
| 3.4.11     | Dipolkopplung: Orientierungsabhängigkeit                        | 88        |
| 3.4.12     | Skalare Kopplung  | 89        |
| <b>3.5</b> | <b>Verallgemeinerung</b>  | <b>91</b> |
| 3.5.1      | Übergang in Eigenbasis des Hamiltonoperators                    | 91        |
| 3.5.2      | Analytische Berechnung ohne Matrixdarstellung                   | 92        |
| 3.5.3      | 2D Spektroskopie: Motivation und Grundlagen                     | 93        |
| 3.5.4      | Datenverarbeitung   | 95        |
| 3.5.5      | Interpretation der Spektren                                     | 97        |
| 3.5.6      | Spektren mit mehr als 2 Dimensionen                             | 98        |
| <b>4.</b>  | <b>EXPERIMENTE UND ANWENDUNGEN</b>                              | <b>99</b> |
| <b>4.1</b> | <b>Austausch und Sprungprozesse</b>                             | <b>99</b> |
| 4.1.1      | Motivation und Phänomenologie                                   | 99        |
| 4.1.2      | Linienformen  | 100       |

|            |  |            |
|------------|--|------------|
| 4.1.3      | 2D Austausch.....                                | 100        |
| 4.1.4      | Sprungprozesse in Festkörpern.....               | 101        |
| 4.1.5      | Spindiffusion.....                               | 103        |
| <b>4.2</b> | <b>Spin Echo und Diffusionsmessungen.....</b>    | <b>105</b> |
| 4.2.1      | Dephasierung.....                                | 105        |
| 4.2.2      | Hahn-Echo.....                                   | 106        |
| 4.2.3      | Diffusionsmessungen im Magnetfeldgradienten..... | 107        |
| 4.2.4      | Diffusion in Ionenleitern.....                   | 108        |
| <b>4.3</b> | <b>MAS.....</b>                                  | <b>110</b> |
| 4.3.1      | Pulvermittel.....                                | 110        |
| 4.3.2      | Prinzip.....                                     | 111        |
| 4.3.3      | FID, Spektrum.....                               | 113        |
| 4.3.4      | Erweiterungen.....                               | 114        |
| 4.3.5      | Tensoren höherer Stufe.....                      | 115        |
| <b>4.4</b> | <b>Strukturbestimmung in Proteinen.....</b>      | <b>117</b> |
| 4.4.1      | COSY.....  | 117        |
| 4.4.2      | Form und Interpretation des Spektrums.....       | 118        |
| 4.4.3      | NOESY.....                                       | 119        |
| 4.4.4      | Proteine.....                                    | 122        |
| 4.4.5      | Beispiel: BPTI.....                              | 124        |
| 4.4.6      | Festkörper.....                                  | 126        |
| 4.4.7      | Lichtinduzierte Konformationsänderung.....       | 128        |
| <b>4.5</b> | <b>Medizinische Anwendungen.....</b>             | <b>130</b> |
| 4.5.1      | MRI: Grundlagen.....                             | 130        |
| 4.5.2      | Beispiele.....                                   | 131        |
| 4.5.3      | Kontrast.....                                    | 133        |
| 4.5.4      | Funktionelle Bildgebung.....                     | 134        |
| <b>5.</b>  | <b>INSTRUMENTELLE ASPEKTE.....</b>               | <b>136</b> |
| <b>5.1</b> | <b>Spektrometer.....</b>                         | <b>136</b> |
| 5.1.1      | Messprinzip.....                                 | 136        |
| 5.1.2      | Magnet.....                                      | 136        |
| 5.1.3      | RF Spule und Schwingkreis.....                   | 137        |
| 5.1.4      | Detektion.....                                   | 138        |
| 5.1.5      | Analoge Signalverarbeitung.....                  | 139        |
| 5.1.6      | Demodulation.....                                | 140        |
| 5.1.7      | CW Experiment.....                               | 141        |
| <b>5.2</b> | <b>Computer.....</b>                             | <b>143</b> |
| 5.2.1      | Steuerung.....                                   | 143        |
| 5.2.2      | Datenverarbeitung.....                           | 144        |
| <b>5.3</b> | <b>ESR.....</b>                                  | <b>148</b> |
| 5.3.1      | Resonanzfrequenz.....                            | 148        |
| 5.3.2      | Mikrowellenbänder.....                           | 149        |
| 5.3.3      | Beispiel.....                                    | 150        |