

Übung zur Vorlesung  
Anorganische Chemie IV (Instrumentelle Analytik)  
WS 2019/20

Blatt 1

KW 48

---

### NMR-Grundlagen, T<sub>1</sub>-Relaxation

1. In einer Probe wird durch das Einstrahlen eines hochfrequenten Pulses die Magnetisierung in folgenden Zustand überführt:  $M_x = M_0, M_y = 0, M_z = 0$

Welche Prozesse laufen anschließend ab? Unterscheiden Sie hierbei zwischen einer Flüssigkeit und einem Festkörper. Wie ist die Temperaturabhängigkeit der Prozesse zu erklären?

2. Für einen durch Dipol-Dipol-Wechselwirkung dominierten Relaxationsprozess hängt die T<sub>1</sub>-Zeit wie folgt von der Spektralen Dichte  $\mathcal{J}$  ab:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{3}{10} b^2 \{ \mathcal{J}(\omega_0) + 4\mathcal{J}(2\omega_0) \}$$

$b$  ist hierbei die dipolare Kopplungskonstante, die vom Abstand der Kerne abhängt (muss nicht berücksichtigt werden). Zur Vereinfachung vernachlässigen wir für diese Aufgabe den zweiten Term ( $4\mathcal{J}(2\omega_0) = 0$ )! Für einen thermisch aktivierten Prozess ist die Spektrale Dichte eine Lorentz-Funktion:

$$\mathcal{J}(\omega) = \frac{\tau_c}{1 + \omega^2 \tau_c^2}$$

Zeigen Sie, welchen Wert die Korrelationszeit  $\tau_c$  am T<sub>1</sub>-Minimum hat.

3. Die untenstehende Abbildung zeigt die T<sub>1</sub> Zeit von Li<sup>+</sup> Ionen in einem ionenleitenden Borophosphatglas als Funktion der inversen Temperatur, gemessen bei einer Larmorfrequenz von  $\omega_0 = 2\pi \cdot 150 \text{ MHz}$ . Der Prozess kann näherungsweise als thermisch aktiviert angesehen werden.
- a. Schätzen Sie aus dem Graphen die zur minimalen Relaxationszeit zugehörige Temperatur ab. Wie hoch ist hier die Korrelationszeit  $\tau$  für den Sprung eines Lithiumions von einer Defektstelle zur nächsten?

- b. Schätzen Sie für einen weiteren Punkt in der Näherung für langsame Bewegung die  $T_1$ -Zeit und die zugehörige Temperatur ab. Berechnen Sie damit und mit den Werten für das Minimum aus a. die Zeitkonstante  $\tau_0$  und die Aktivierungsenergie  $E_A$  für diesen Prozess ( $\tau$  folgt dem Arrhenius-Gesetz)! Wie schnell springen die Lithiumionen bei 400 K und bei 800 K?

