

Übung zur Vorlesung
Anorganische Chemie IV (Instrumentelle Analytik)
WS 19/20

Blatt 2

KW 49

NMR

1. Der FID eines isolierten $I = 1/2$ Kerns kann durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$M = M_0 e^{i\Delta\omega t} e^{-\frac{t}{T_2}}$$

Um aus dem FID in der Zeitdomäne ein Spektrum in der Frequenzdomäne zu erhalten muss eine Fouriertransformation durchgeführt werden, die wie folgt definiert ist:

$$S(\omega) = \int_0^{\infty} dt (f(t) e^{-i\omega t})$$

Führen Sie die Fouriertransformation durch und leiten Sie aus $S(\omega)$ einen Ausdruck für die Halbwertsbreite des Signals ab. Betrachten Sie dafür nur den Realteil von $S(\omega)$, der dem Adsorptionssignal entspricht.

(Eigentlich geht das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$, der FID ist jedoch nur für $t \geq 0$ definiert; Zwischenergebnis $S(\omega) = M_0 \frac{1}{i(\omega - \Delta\omega) + \frac{1}{T_2}}$)

2. Durch einen Puls wird im rotierenden Koordinatensystem ein Feld mit der Stärke $\nu_{nut} = \frac{1}{2\pi} \gamma B_1^0 = 100 \text{ kHz}$ erzeugt.
- Welche Länge muss der Puls haben um die Magnetisierung vollständig auf die x,y-Ebene zu bringen?
 - Wenn der Puls nicht exakt die Frequenz des anzuregenden Spins besitzt, ist er off-resonant. Die Achse, um die die Magnetisierung gedreht wird, steht im Winkel $\theta = \arctan\left(\frac{\nu_{nut}}{\Omega}\right)$ zur z-Achse, wobei Ω dem Frequenzoffset entspricht. Wie off-resonant darf der Puls sein, damit eine vollständige Auslenkung der Magnetisierung auf die x,y-Ebene überhaupt noch möglich ist?
 - Die effektive Stärke ν_{eff} eines off-resonanten Pulses ergibt sich nach $\nu_{eff} = \sqrt{\nu_{nut}^2 + \Omega^2}$. Wie lang muss der Puls sein, um die Magnetisierung der Spins, deren Larmorfrequenz 100 kHz von der Anregungsfrequenz entfernt ist ($\Omega = 100 \text{ kHz}$), auf die x,y-Ebene auszulenken?