

FORTGESCHRITTENEN-PRAKTIKUM I

Kernspin

13. und 14. Oktober

Moritz
BITTERLING

Benjamin
ROTTLER

Betreuer: Philip SOMMER



INSTITUT FÜR MATHEMATIK UND PHYSIK
ALBERT-LUDWIGS-UNIVERSITÄT
FREIBURG IM BREISGAU

Alle Berechnungen in diesem Protokoll wurden unter Python 2.7 mit Hilfe folgender Programmbibliotheken

- PyROOT (<http://root.cern.ch/drupal/content/pyroot>)
- NumPy (<http://www.numpy.org/>)

oder mit oder Mathematica 10 durchgeführt. Die Graphiken wurden mit Inkscape (<http://www.inkscape.org>) gezeichnet.

Alle Python-Skripte, L^AT_EX-Skripte und SVG-Graphiken können online unter <https://github.com/Bigben37/FP1/tree/master/1013-Kernspin> abgerufen werden.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| 1. Versuchsziel | 1 |
| 2. Physikalische Grundlagen | 1 |
| 2.1. Kernspin | 1 |
| 2.2. Magnetisches Moment | 2 |
| 2.3. Kernspinresonanz | 2 |
| 2.4. Der Hall-Effekt | 3 |
| 3. Versuchsaufbau | 4 |
| 4. Versuchsdurchführung | 5 |
| 5. Messergebnisse und Auswertung | 6 |
| 5.1. Fehler der Messgrößen | 6 |
| 5.2. Vermessung des Magnetfeldes | 7 |
| 5.3. Bestimmung der gyromagnetischen Verhältnisse | 9 |
| 5.4. Berechnung des Kern-g-Faktors | 11 |
| 5.5. Berechnung des kernmagnetischen Moments | 12 |
| 6. Literatur | 13 |
| A. Anhang | 13 |
| A.1. Messprotokoll | 13 |

1. Versuchsziel

Ziel des Versuches ist die Untersuchung kernmagnetischer Eigenschaften von Wasserstoff und Fluor: In einem starken statischen Magnetfeld werden Energieniveaus des Kerns aufgespalten (Zeeman-Effekt) und dann die feldstärkenabhängige Frequenz bestimmt, bei der Photonen einen Übergang zwischen den beiden Energieniveaus induzieren und absorbiert werden. Aus dieser Frequenz können das *gyromagnetische Verhältnis*, der *Kern-g-Faktor* und das *kernmagnetische Moment* bestimmt werden.

2. Physikalische Grundlagen

Die Ausführungen dieses Kapitels basieren auf [1].

2.1. Kernspin

2.1.1. Definition

Der mechanische Drehimpuls eines Atomkerns, verursacht durch die Eigenrotation um den Schwerpunkt, wird *Kernspin* \vec{I} genannt. Er folgt den Gesetzen eines quantenmechanischen Drehimpulses: Nur sein Betrag $|\vec{I}|$ und die Projektion I_z auf eine *Quantisierungsachse*, welche frei wählbar ist und meistens parallel zur z -Achse gelegt wird, können gleichzeitig bestimmt werden. Für den Betrag $|\vec{I}|$ gilt:

$$|\vec{I}| = \hbar \sqrt{I(I+1)} \quad (2.1)$$

mit der *Kernspinquantenzahl* $I \geq 0$. Die Projektion I_z auf die z -Achse ergibt sich zu

$$I_z = m_I \cdot \hbar. \quad (2.2)$$

Die *magnetische Kernspinquantenzahl* m_I kann dabei nur $2I + 1$ entweder ganz- oder halbzahlige Werte im Bereich von $-I \leq m_I \leq I$ annehmen.

2.1.2. Verschiedene Beispiele für I

Protonen und Neutronen besitzen einen Kernspin von $I = \frac{1}{2}$, daher kann m_I nur die Werte $\pm \frac{1}{2}$ annehmen.

Bei Atomkernen werden alle Kernspins der Nukleonen aufaddiert. Hierzu wird die g-u-Nomenklatur eingeführt: Eine gerade Anzahl von Protonen oder Neutronen wird mit g bezeichnet, eine Ungerade mit u . Jeder Kern besitzt zwei dieser Zustände, sie werden hintereinander aufgelistet (gg , uu , gu , ug), dabei bezeichnet der erste Buchstabe die Anzahl der Protonen, der Zweite die der Neutronen.

Im Grundzustand folgen die Nukleonen dem Pauliprinzip, da sowohl Protonen als auch Neutronen aus Fermionen aufgebaut sind. Ein Orbital wird mit zwei Protonen oder Neutronen, deren Kernspin in gegensätzliche Richtungen zeigt, gefüllt. Daher haben gg -Kerne einen Kernspin von $I = 0$. Für gu - und ug -Kerne gilt $I = \frac{1}{2}$. Bei uu -Kernen gilt $I = 1$, da das Pauliprinzip nur für Teilchen gleicher Art gilt.

2.2. Magnetisches Moment

Durch den Kernspin \vec{I} folgt ein *magnetischen Dipolmoment* $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu} = \gamma \cdot \vec{I} \quad (2.3)$$

Dabei ist die Proportionalitätskonstante γ das *gyromagnetische Verhältnis*:

$$\gamma = \frac{g_I \cdot \mu_K}{\hbar} \quad (2.4)$$

Hier ist g_I der *Kern-g-Faktor*, eine kernspezifische Größe, und μ_K das Kernmagneton (analog zum Bohrschen Magneton, nur mit der Protonenmasse m_P anstatt der Elektronenmasse):

$$\mu_K = \frac{e \cdot \hbar}{2m_P} \quad (2.5)$$

Mit [Gleichung 2.2](#) und [Gleichung 2.4](#) folgt für die z -Komponente des magnetischen Dipolmoments aus [Gleichung 2.3](#):

$$\mu_z = g_I \cdot \mu_K \cdot m_I \quad (2.6)$$

2.3. Kernspinresonanz

2.3.1. Der Kern im äußeren Magnetfeld

Legt man an das Atom ein äußeres Magnetfeld \vec{B} an, so besitzt der Kern mit dem magnetischen Dipolmoment μ folgende Energie:

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (2.7)$$

Für ein Magnetfeld in z -Richtung ($\vec{B} = B \cdot \hat{e}_z$) folgt mit [Gleichung 2.6](#):

$$E = -g_I \cdot \mu_K \cdot m_I \cdot B \quad (2.8)$$

Es entstehen folglich mehrere energetische Niveaus, die von m_I abhängen. Die Differenz ΔE zwischen zwei benachbarten Niveaus (Zeemanaufspaltung) beträgt, da $\Delta m_I = \pm 1$:

$$\Delta E = g_I \cdot \mu_K \cdot B \quad (2.9)$$

2.3.2. Wechselwirkung mit einem Strahlungsfeld

Der Kern kann zwischen den verschiedenen Energieniveaus (Zuständen) durch spontane oder induzierte Emission und Absorption von Photonen übergehen. Die Photonen (aus einem Strahlungsfeld) müssen für solch einen Übergang nach [Gleichung 2.9](#) eine ganz bestimmte Energie besitzen, man spricht von *Resonanz*. Für die *Resonanzfrequenz* gilt nun:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \stackrel{(2.9)}{=} \frac{g_I \cdot \mu_K \cdot B}{h} \stackrel{(2.4)}{=} \frac{\gamma \cdot B}{2\pi} \quad (2.10)$$

Experimentell lässt sich diese Resonanzfrequenz nur mit einer endlichen Linienbreite bestimmen. Gründe dafür sind Effekte wie die natürliche Linienbreite (Energie-Zeit-Unschärfe), der Dopplereffekt und Stöße.

2.3.3. Besetzungszahlen

In diesem Versuch haben alle zu untersuchenden Atome und Moleküle einen Kernspin von $I = \frac{1}{2}$, also $m_I = \pm \frac{1}{2}$. Es ergeben sich folglich zwei verschiedene Energieniveaus (E_{hoch} und E_{tief} , $E_{\text{hoch}} > E_{\text{tief}}$) mit den Besetzungszahlen n_{hoch} und n_{Anzahl} . Diese liegen im thermischen Gleichgewicht unter der Boltzmannverteilung vor. Für das Verhältnis der beiden Besetzungszahlen gilt:

$$\frac{n_{\text{hoch}}}{n_{\text{tief}}} = e^{-\frac{E_{\text{hoch}} - E_{\text{tief}}}{k \cdot T}} = e^{-\frac{\Delta E}{k \cdot T}} > 0 \quad (2.11)$$

Das tiefere Energieniveau ist also mehr besetzt als das Höhere. Daher werden mehr Photonen des Strahlungsfeldes absorbiert als neue Photonen durch Emission gewonnen werden, das Strahlungsfeld verliert an Energie. Dieser Effekt kann durch die Dämpfung des Schwingkreises, welcher das Strahlungsfeld erzeugt, gemessen werden.

2.3.4. Relaxationsprozesse

Über einen längeren Zeitraum betrachtet sollten sich die Besetzungszahlen der beiden Energieniveaus annähern, was zu einer Reduktion des oben beschriebenen Effekts führt. Dieser Abnahme wird durch *Relaxationsprozesse* entgegengewirkt, durch welche die höherenergetischen Zustände in die niederenergetischen Zustände zurückfallen, ohne dabei Strahlung abgeben.

Wird die Energie bei dieser Zustandsänderung in Form von Wärme an das Gitter des Materials ab, so spricht man von *Spin-Gitter-Relaxation*.

Des Weiteren gibt es die *Spin-Spin-Relaxation*.

2.4. Der Hall-Effekt

Bringt man einen stromdurchflossenen Leiter in ein Magnetfeld, dann wirkt auf die Leitungselektronen die Lorentzkraft \vec{F}_L :

$$\vec{F}_L = q \cdot (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.12)$$

Die Elementarladung ist q , \vec{v} die Driftgeschwindigkeit der Elektronen und \vec{B} das Magnetfeld. Durch die Kraft werden die Elektronen gegenüber den festen Atomrümpfen verschoben und es bildet sich ein elektrisches Feld \vec{E} aus, das auf die Elektronen die Kraft

$$\vec{F}_C = \vec{E} \cdot q \quad (2.13)$$

ausübt. Mit

$$U_H = \frac{E}{d}, \quad (2.14)$$

dem Kräftegleichgewicht $\vec{F}_L = \vec{F}_C$ und $\vec{v} \perp \vec{B}$ folgt

$$U_H = v \cdot B \cdot d. \quad (2.15)$$

Es bildet sich also eine Hall-Spannung U_H aus, die proportional zur Stärke des Magnetfelds ist und als Messsignal verwendet werden kann. [Abbildung 2.1](#) zeigt diese Verhältnisse am Leiter.

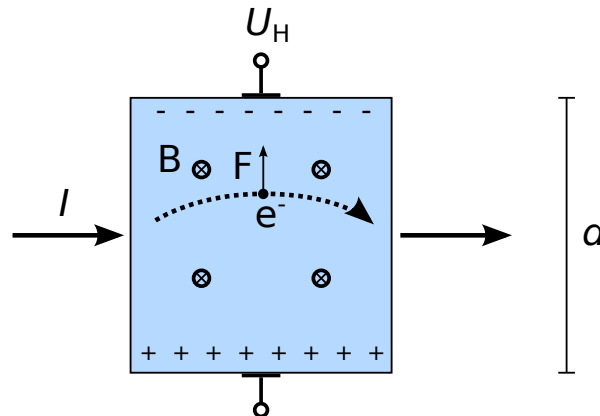


Abbildung 2.1: Hall-Effekt: Ablenkung von bewegten Elektronen im Leiter.

3. Versuchsaufbau

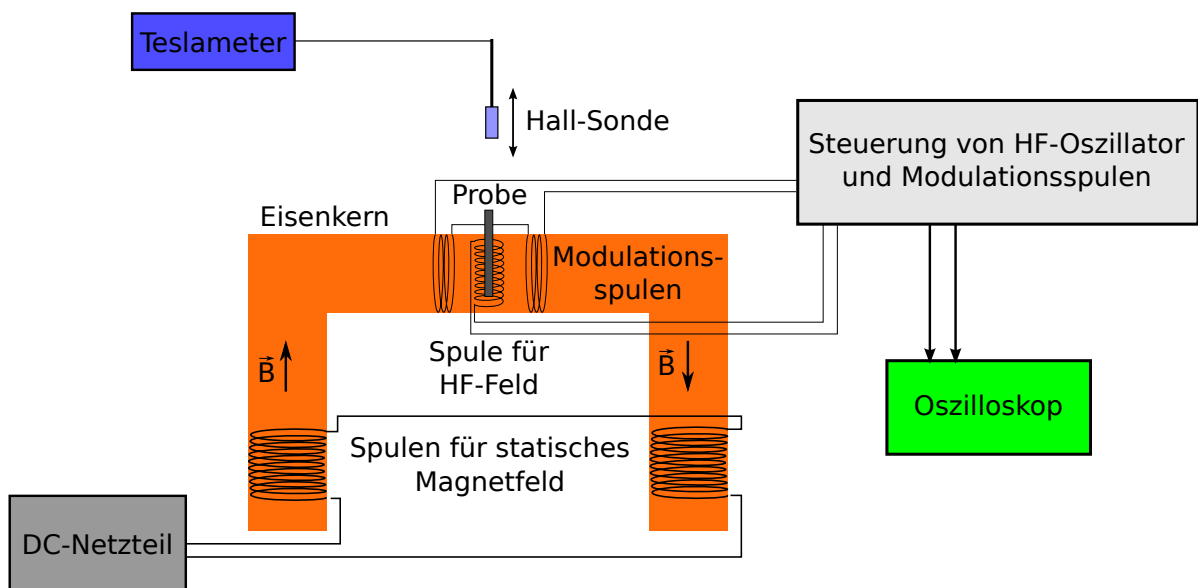


Abbildung 3.1: Versuchsaufbau zur Messung der Kernspinresonanz.

[Abbildung 3.1](#) zeigt den Aufbau zur Messung der Kernspinresonanz. Von einem Netzteil wird ein Gleichstrom von mehreren Ampere durch zwei Spulen geschickt, die durch einen Eisenkern verbunden sind. Auf dem Eisenkern befinden sich außerdem zwei kleinere Modulationsspulen, mit denen das hohe statische Magnetfeld noch leicht abgeändert

werden kann. Zwischen den Modulationsspulen ist die zu untersuchende Probe eingebaut, die sich in einer weiteren Spule befindet. Diese Spule und die Modulationsspule werden von einem Netzgerät angesteuert, an dem Frequenz und Amplitude der Ströme gewählt werden können. Das Signal an den Modulationsspulen sowie die Amplitude des HF-Signals an der Proben­spule werden von einem Oszilloskop angezeigt.

Mit einer Hall-Sonde kann die Stärke des Magnetfelds am Ort der Probe bestimmt werden.

4. Versuchsdurchführung

Charakterisierung des Aufbaus

Vor Durchführung der Kernspinresonanz-Messung werden zwei Messreihen zur Charakterisierung des Aufbaus durchgeführt:

Mit der Hall-Sonde wird der gesamte Bereich der Probenhalterung in senkrechter Richtung abgefahren und in 5 mm-Schritten die Stärke des Magnetfelds bestimmt.

Dann wird bei fester Position der Hall-Sonde (20 mm unter der Oberkante der Öffnung) die Abhängigkeit der Magnetfeldstärke vom Spulenstrom untersucht, um später schnell gewünschte Feldstärken einstellen zu können.

Messung der Kernspinresonanz an Wasser, Teflon und Glykol

Die Messung der Kernspinresonanz an Wasser wird für feste Frequenzen des HF-Wechselfeldes (zwischen 16 MHz und 19 MHz in 0.5 MHz-Schritten) durchgeführt und für jede Frequenz der Strom für das statische Magnetfeld am Netzteil so eingestellt, dass am Oszilloskop die Minima der Absorption gleich weit voneinander entfernt sind ([Abbildung 4.1](#)). Für jeden eingestellten Strom wird durch eine Messung mit der Hall-Sonde die Magnetfeldstärke gemessen.

Danach wird mit dem selben Messprinzip je ein Messpunkt bei 17.5 MHz für Teflon und für Glykol aufgenommen.

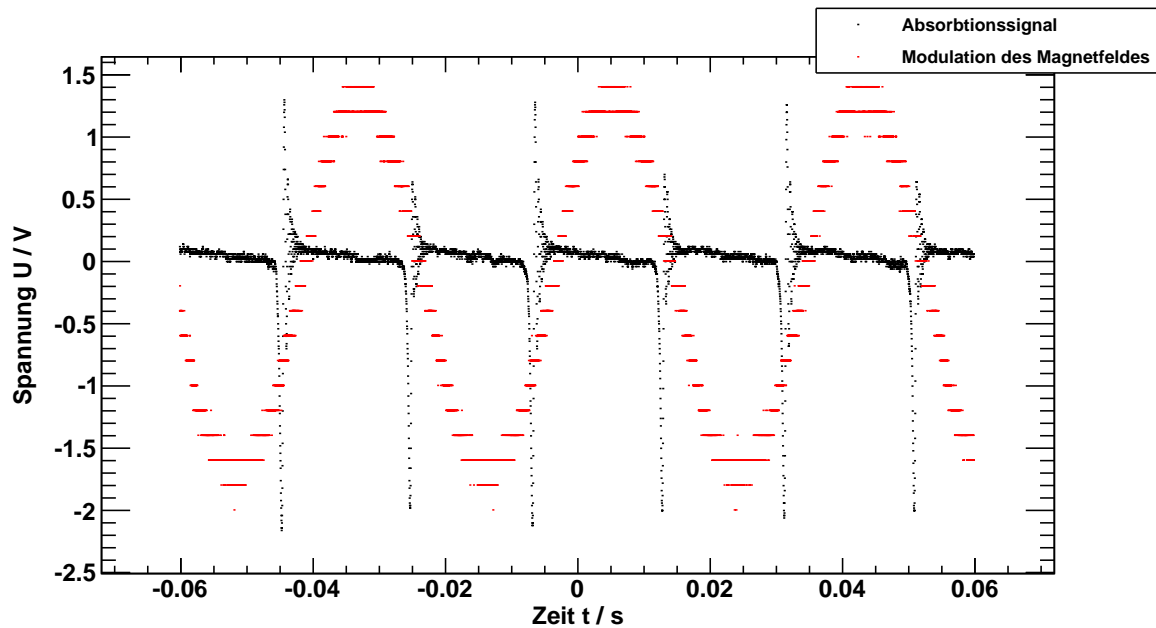


Abbildung 4.1: Geeignete Einstellung des statischen Magnetfeldes, so dass die Resonanz zwei mal pro Periode getroffen wird. (Hier mit Wasserstoff, $\nu = 16.0220$ MHz, $B = 372$ mT)

5. Messergebnisse und Auswertung

5.1. Fehler der Messgrößen

In [Tabelle 5.1](#) sind die hier verwendeten Messgrößen mit ihren Fehlern aufgelistet. Da es zu den benutzten Geräten von den Herstellern keine Angabe des Fehlers gab, sind dies alles geschätzte Werte. Die Fehler des Magnetfeldes und der Stromstärke, mit welcher die magnetfelderzeugenden Spulen durchflossen wurden, wurde auf einen Digit-Fehler gesetzt. Der Fehler der Frequenz wurde durch Variation, ohne dass sich das Signal auf dem Oszilloskop bemerkbar verändert, bestimmt. Auf die Eindringtiefe der Hallsonde wurde ein Fehler einer halben Skalenbreite geschätzt.

| Messgröße | Fehler |
|-------------------|-----------|
| Magnetfeld B | 1 mT |
| Frequenz ν | 0.005 MHz |
| Eindringtiefe x | 0.5 mm |
| Stromstärke I | 0.01 A |

Tabelle 5.1: Fehler der Messgrößen.

5.2. Vermessung des Magnetfeldes

5.2.1. Ortsabhängigkeit

Die Abhängigkeit der Stärke B des Magnetfeldes von der Eindringtiefe x ist in [Abbildung 5.1](#) dargestellt. Das Magnetfeld ist größtenteils homogen, nur in den Randbereichen fällt es ab. Das Plateau wurde in [Abbildung 5.2](#) vergrößert dargestellt. Für die folgenden Messungen wurde die Eindringtiefe der Hallsonde und die Position der Proben auf $x = 20$ mm eingestellt.

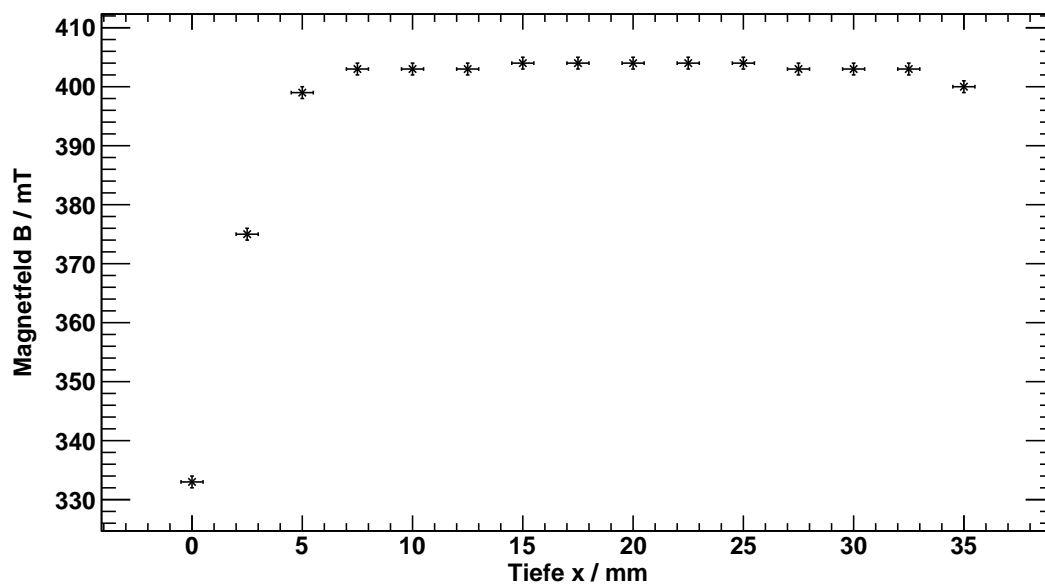


Abbildung 5.1: Magnetfeldstärke B in Abhängigkeit der Eindringtiefe x .

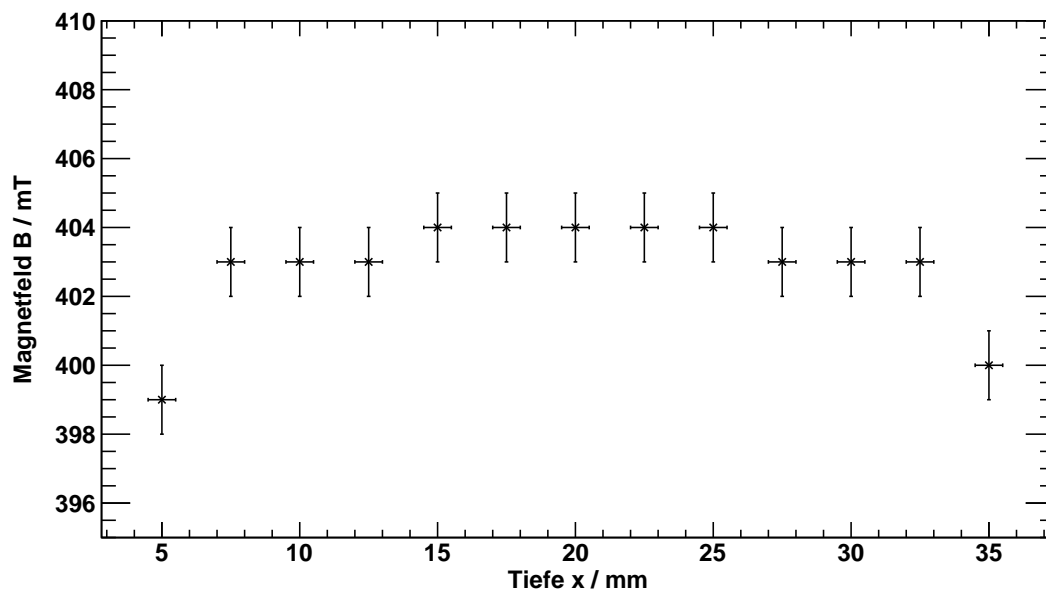


Abbildung 5.2: Vergrößerung von [Abbildung 5.1](#).

5.2.2. Stromabhängigkeit

In [Abbildung 5.3](#) sieht man die Abhängigkeit der Stärke B des Magnetfeldes von dem verwendeten Strom. Das Magnetfeld steigt zunächst linear mit dem Strom an, ab 3 A wird jedoch eine Sättigung bemerkbar.

Es wurden zwei Messreihen aufgenommen, die sich in der Richtung der Änderung des Stroms unterscheiden. Es lässt sich ein Hystereseeffekt erkennen, je nachdem ob vor der aktuellen Messung einen höheren oder niedrigeren Strom eingestellt wurde. Dies ist jedoch für die nachfolgenden Messungen und Berechnungen nicht relevant, da direkt die Stärke des Magnetfeldes bestimmt wird. Mit dieser Messung konnte die einzustellende Stromstärke für ein bestimmtes Magnetfeld B bei einer festgelegten Frequenz ν geschätzt werden, was die Suche nach dem genauen Wertepaar von B und ν , bei welchem Resonanz beobachtet wird, beschleunigt.

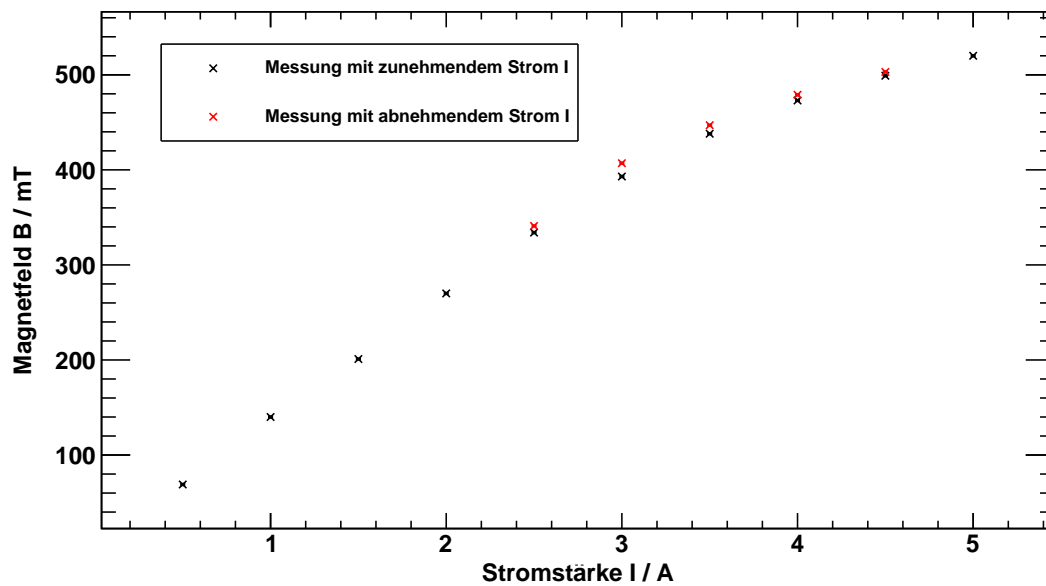


Abbildung 5.3: Magnetfeldstärke B in Abhängigkeit des Stroms I und Richtung seiner Veränderung.

5.3. Bestimmung der gyromagnetischen Verhältnisse

Um das gyromagnetische Verhältnis γ zu bestimmen, ist im Prinzip genau eine Resonanzfrequenz ν mit entsprechender Magnetfeldstärke B notwendig. Um jedoch den Fehler auf γ besser abzuschätzen wurden für Wasserstoffprobe mehrere Messwerte aufgenommen. Aus dem Fit lässt sich auch γ bestimmen, jedoch lässt sich der Fehler besser abschätzen, da auch statistische Schwankungen berücksichtigt werden. Der relative Fehler des so bestimmten Wertes für γ_H wird deshalb auch als Fehler der anderen gyromagnetischen Verhältnisse, berechnet aus nur einem Wertepaar, gesetzt.

5.3.1. Berechnung von γ_H

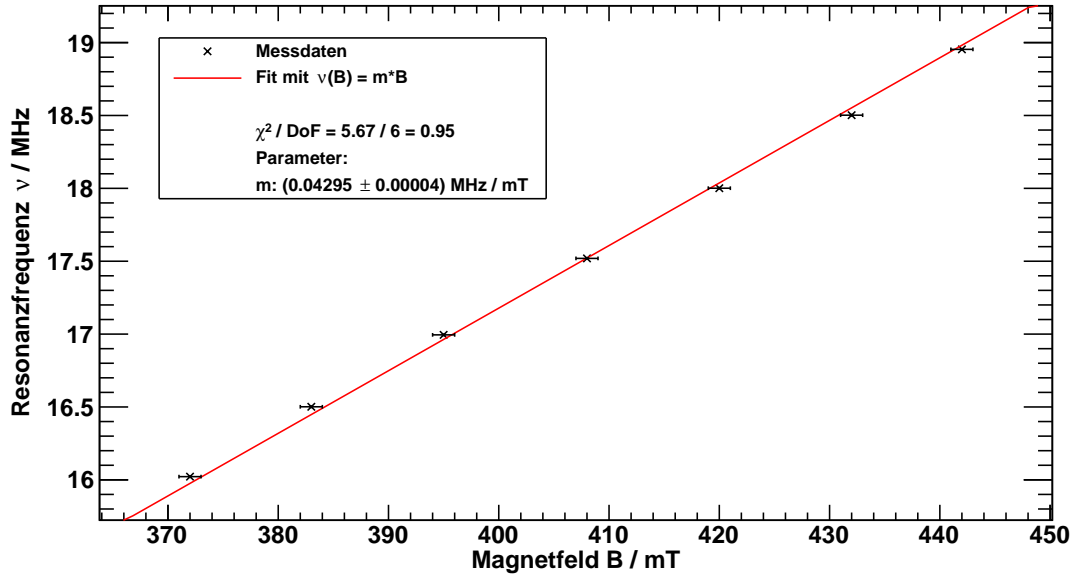


Abbildung 5.4: Messungen der Resonanzfrequenzen ν an der Wasserstoffprobe für verschiedene Magnetfelder B .

In [Abbildung 5.4](#) die Resonanzfrequenz ν über der verwendeten Magnetfeldstärke B aufgetragen. Entsprechend [Gleichung 2.10](#) wurden die Daten mit

$$\nu(B) = m \cdot B \quad (5.1)$$

gefittet.¹

Dem χ^2 -Wert ist ein linksseitiger p-Wert von 46% zugeordnet. Dies zeigt, dass die Fehler richtig abgeschätzt wurden und das Modell die Messdaten korrekt beschreibt.

Man erhält für die Steigung

$$m = (0.04295 \pm 0.00004) \frac{\text{MHz}}{\text{mT}}. \quad (5.2)$$

Daraus lässt sich nach [Gleichung 2.10](#) durch Multiplikation mit dem Faktor 2π das gyromagnetische Verhältnis von Wasserstoff γ_H bestimmen.

$$\gamma_H = (270.0 \pm 0.3) \cdot 10^8 \frac{1}{\text{s} \cdot \text{T}} \quad (5.3)$$

¹Auf einen Achsenabschnitt wurde bewusst verzichtet, da die Stärken des Magnetfeldes sehr weit von 0 abweichen, und somit schon eine sehr kleine Abweichung der Steigung vom Erwartungswert zu einem großen Achsenabschnitt führt.

Der relative Fehler beträgt:

$$s_{\gamma_H, \text{rel}} = \frac{s_{\gamma_H}}{\gamma_H} = 0.0009 \quad (5.4)$$

Er wird für die folgenden gyromagnetischen Verhältnisse benutzt.

5.3.2. Berechnung von γ_{Glykol} und γ_{Teflon}

Mit [Gleichung 2.10](#) lässt sich das gyromagnetische Verhältnis von Glykol und Teflon bestimmen. Man erhält

$$\gamma_{\text{Glykol}} = (268.7 \pm 0.3) \cdot 10^8 \frac{1}{\text{s} \cdot \text{T}} \quad (5.5)$$

und

$$\gamma_{\text{Teflon}} = (253.4 \pm 0.2) \cdot 10^8 \frac{1}{\text{s} \cdot \text{T}} . \quad (5.6)$$

Der Mittelwert $\overline{\gamma_H}$ für die beiden Messungen am Proton (γ_H und γ_{Glykol}) beträgt

$$\overline{\gamma_H} = (269.4 \pm 0.2) \cdot 10^8 \frac{1}{\text{s} \cdot \text{T}} \quad (5.7)$$

Die Literaturwerte^{2 3} lauten:

$$\gamma_H^{\text{Lit}} = 2.6752 \cdot 10^8 \frac{1}{\text{s} \cdot \text{T}}, \quad \gamma_F^{\text{Lit}} = 2.5166 \cdot 10^8 \frac{1}{\text{s} \cdot \text{T}} \quad (5.8)$$

Die gemessenen Werte liegen beide ungefähr 1% über den Literaturwerten. Dies deutet auf einen systematischen Fehler hin, zum Beispiel bei der Bestimmung des Magnetfeldes (äußere Magnetfelder, Drehung der Hallsonde).

5.4. Berechnung des Kern-g-Faktors

Mit [Gleichung 2.4](#) können die Kern-g-Faktoren für die einzelnen Messungen berechnet werden. Sie lauten

$$\begin{aligned} g_{I,H} &= 5.634 \pm 0.005 \\ g_{I,\text{Glykol}} &= 5.610 \pm 0.005 \\ g_{I,\text{Teflon}} &= 5.301 \pm 0.005 \end{aligned} \quad (5.9)$$

Auf einen Vergleich mit den Literaturwerten wird hier verzichtet, da nur das gyromagnetische Verhältnis mit bekannten Konstanten verrechnet wird. Dies gilt auch für den folgenden Abschnitt.

²H: <http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?gammap>

³F: David R. Lide, ed., CRC Handbook of Chemistry and Physics, Internet Version 2005, <http://www.hbcpnetbase.com>, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005

5.5. Berechnung des kernmagnetischen Moments

[Gleichung 2.6](#) liefert die kernmagnetischen Momente. Sie lauten

$$\begin{aligned}\mu_{z,\text{H}} &= (1.4228 \pm 0.0013) \cdot 10^{-26} \frac{\text{J}}{\text{T}} \\ \mu_{z,\text{Glykol}} &= (1.4168 \pm 0.0013) \cdot 10^{-26} \frac{\text{J}}{\text{T}} \\ \mu_{z,\text{Teflon}} &= (1.3386 \pm 0.0012) \cdot 10^{-26} \frac{\text{J}}{\text{T}}\end{aligned}\tag{5.10}$$

6. Literatur

- [1] Köneke, K. Ortner, A., Köhli, M. *Kernspinresonanz, Fortgeschrittenen-Praktikum I.* Institut für Mathe und Physik, Albert-Ludwigs-Universität, Freiburg, 2013.

A. Anhang

A.1. Messprotokoll

Kernspin

1) Vermessung Magnetfeld

$$U = \cancel{7.0V} 7.0V$$

$$I = \cancel{2.5A} 3.00A$$

| <u>Tiefe x / mm</u> | <u>B / mT</u> |
|-------------------------|---------------|
| 35,0 | 400 |
| 30,0 | 403 |
| 25,0 | 404 |
| 20,0 | 404 |
| 15,0 | 404 |
| 10,0 | 403 |
| 5,0 | 399 |
| 0,0 | 333 |
| 32,5 | 403 |
| 27,5 | 403 |
| 22,5 | 404 |
| 17,5 | 404 |
| 12,5 | 403 |
| 7,5 | 403 |
| 2,5 | 375 |

$$S_f = 0,5 \text{ mm}$$

=> Abstand für zirkuläre Messung:
 $x = 20,0 \text{ mm}$

• Magnetfeld in Abhängigkeit von Strom I

| B / mT | I / A |
|--------------------|-------|
| 338 | 2,50 |
| 300 398 | 3,00 |
| 438 | 3,50 |
| 343 334 | 2,50 |
| 393 | 3,00 |
| 438 | 3,50 |
| 473 | 4,00 |
| 499 | 4,50 |
| 520 | 5,00 |
| 503 | 4,50 |
| 479 | 4,00 |
| 447 | 3,50 |
| 407 | 3,00 |
| 347 | 2,50 |

• vorher
falsche
Richtung

~~vorher~~ ~~vorher~~ ~~vorher~~

vorher

vor
her

=> HYSTERESE

| B / mT | I / A |
|--------|-------|
| 69 | 0,5 |
| 140 | 1,0 |
| 207 | 1,5 |
| 270 | 2,0 |
| | 2,5 |

Wds 28.56 Hz

CH2: Abs
CH2: AB

| ν / MHz | B / mT |
|--------------------|-----------------|
| 16,0220 | 372 |
| 16,5013 | 383 |
| 16,9948 | 395 |
| 17,5194 | 408 |
| 18,0010 | 420 |
| 18,5020 | 432 |
| 18,9536 | 442 |

07,02

~~07~~

~~07~~ 05,06

teflon : $\nu = 17,4949 \text{ MHz}$
 $B = 433 \text{ B/mT}$

07,08

GLYOL : $\nu = 17,4906 \text{ Hz}$
 $B = 409 \text{ B/mT}$

09,10