## V 49

# gepulste NMR

Donata Osthues donata.osthues@tu-dortmund.de

Jonas Rönsch jonas.roensch@tu-dortmund.de

Durchführung: 16.11.20 Abgabe: 07.12.20

TU Dortmund – Fakultät Physik

## Inhaltsverzeichnis

1	Ziel	setzung	3		
2	Theorie				
	2.1	Magnetisierung	3		
	2.2	Hochfrequenzfeld			
	2.3	Spin-Echo, Carr-Purcell und Meiboom-Gill Methode			
	2.4	Spinrelaxation einer Flüssigkeit	4		
3	Dur	chführung	5		
	3.1	Versuchsaufbau	5		
	3.2	Justage und Temperaturmessung	5		
	3.3	$T_1$ -Messung	5		
	3.4	$T_2$ -Messung	6		
	3.5	Diffusionsmessung	6		
4	Aus	wertung	7		
	4.1	Justage der Apperatur	7		
	4.2	Bestimmung der Relaxationszeit $T_1$	7		
	4.3	Bestimmung der Relaxationszeit $T_2$			
	4.4	Diffusionsmessung	12		
5	Diskussion				
	5.1	Bestimmung der Relaxationszeiten	16		
	5.2	Diffusionsmessung und Bestimmung des Molekülradius			
Lit	teratı	ur	16		

## 1 Zielsetzung

In diesem Versuch soll die Diffusionskonstante von Wasser experimentell bestimmt werden, indem eine Probe bezüglich ihrer Spinausrichtung unter einem Hochfrequenzfeld untersucht wird.

#### 2 Theorie

#### 2.1 Magnetisierung

Wird ein äußeres Magnetfeld  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_{\rm B}$  um die Probe angelegt, führt dies zu einer Aufspaltung der Kernspinzustände in m=2S+1 Unterniveaus, wobei S die Spinquantenzahl und m die magnetische Quantenzahl darstellt. Die Präzession der Momente um  $\vec{B}_0$  kann mittels der Larmorfrequenz  $\omega_{\rm L} = \gamma B_0$  beschrieben werden. Nach Abschalten von  $\vec{B}_0$  bewegen sich die Momente wieder zurück in ihre Ausgangslagen (Relaxation). Dabei werden die Spin-Gitter-Relaxationszeit  $T_1$  (parallel zu  $\vec{B}_0$ ) und Spin-Spin-Relaxationszeit  $T_2$  (senkrecht zu  $\vec{B}_0$ ) unterschieden. Zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Magnetisierung  $\vec{M}$  einer Probe werden die Bloch-Gleichungen verwendet

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B}_0 - \vec{e}_{\rm x} \frac{M_{\rm x}}{T_2} - \vec{e}_{\rm y} \frac{M_{\rm y}}{T_2} - \vec{e}_{\rm z} \frac{M_{\rm z} - M_0}{T_1}.$$
 (1)

#### 2.2 Hochfrequenzfeld

Um die magnetischen Momente aus ihrer Ruhelage auszulenken wird ein Hochfrequenzfeld  $\vec{B}_{\rm H}=2\vec{B}_1\cos{(\omega t)}~(\vec{B}_1\perp\vec{e}_{\rm B})$  angelegt. Die Lösung der Bloch-Gleicheungen vereinfacht sich durch Transformation in ein mit der Frequenz  $\omega$  um  $\vec{B}_0$  rotierendes Koordinatensystem. Das äußere Magnetfeld transformiert sich dann zu  $\vec{B}_{\rm eff}=\vec{B}_0+\vec{B}_1+\frac{\vec{\omega}}{\gamma}$ . Das Einschalten eines Hochfrequenzfeldes für die Zeit

$$\Delta t_{90} = \frac{\pi}{2\gamma B_1} \tag{2}$$

während  $\vec{B}_{\rm eff} = \vec{B}_1$  und  $\sphericalangle(\vec{M}, \vec{B}_1) = 90^\circ$  gilt, realisiert eine Drehung der Magnetisierung von der z- in die y-Richtung (90°-Puls). Analoges gilt für einen 180°-Puls ( von z- in -z-Richtung). Unter dem freien Induktionszerfall (FID) wird die Präzession der Magnetisierung senkrecht zu  $\vec{B}_0$  und die anschließende Relaxation zurück in die Ruhelage nach einer Auslenkung um 90° verstanden. Ursächlich für den FID ist die Inhomogenität eines real erzeugten Magnetfeldes mit der Relaxationszeit  $T_{\Delta \rm B}$  und die Wechselwirkung mit den magnetischen Momenten der Nachbarkerne und -schalen. Dadurch werden die Spins schließlich dephasiert und die transversale Magentisierung zerfällt. Die Gesamtrelaxationszeit ergibt sich als

$$T_2^* = \frac{1}{T_2^{-1} + T_B^{-1}}. (3)$$

#### 2.3 Spin-Echo, Carr-Purcell und Meiboom-Gill Methode

Während der Dephasierung nach einem initialen 90°-Puls rotieren die Spins mit größerer Larmourfrequenz im Uhrzeigersinn. Die Spins mit kleinerer Larmorfrequenz jedoch in die entgegengesetzte Richtung. Nach der Zeit  $\tau \ll T_{\rm B}$  wird ein 180°-Puls auf die Probe gerichtet, sodass die Spins wieder aufeinander zulaufen. Es entsteht das sogenannte Hahn-Echo, d.h. eine transversale Magnetisierung in entgegengesetzter Richtung nach der Zeit  $2\tau$ . Die Höhe des Spin-Echos kann über den Zusammenhang

$$M_{\mathbf{y}}(t) = M_0 \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right) \tag{4}$$

bestimmt werden. Um mehrere Echos in einer Messung aufnehmen zu können, werden in der Carr-Purcell Methode (CPM) mehrere 180°-Pulse hintereinander mit Abstand  $2\tau$  gesendet, sodass eine Fokussierung der transversalen Magnetisierung erzeugt wird. Ist die Einstellung der 180°-Pulse zu ungenau, wird die Magnetisierung in der x-y-Ebene zu klein, weil die Spins nicht genau in diese Ebene hinein gedreht werden, sodass eine aussagekräftige Bestimmung von  $T_2$  nicht möglich ist. Die Meiboom-Gill Methode (MGM) umgeht diese Problematik, indem sie die 180°-Pulse gegen die initialen 90°-Pulse um 90° phasenverschoben aussendet. Das führt zu einer Drehung der Spins um die y-Achse anstelle der x-Achse , sodass Fehler aufgrund von ugenauen 180°-Pulseinstellungen durch den folgenden PPuls wieder ausgeglichen werden können.

#### 2.4 Spinrelaxation einer Flüssigkeit

Für Flüssigkeiten müssen die Bloch´schen Gleichungen durch einen Diffusionsterm ergänzt werden, da die Brown´sche Molekularbewegung ein zeitlich veränderliches Magnetfeld erzeugt. Sie sind dann durch

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \underbrace{\gamma \left( \vec{M} \times \vec{B} \right)}_{\text{Präzession}} \underbrace{-\frac{M_{\text{x}}\vec{x} + M_{\text{y}}\vec{y}}{T_2} - \underbrace{\frac{(M_{\text{z}} - M_0)\vec{z}}{T_1}}_{\text{Relaxation}} \underbrace{+ (\vec{x} + \vec{y} + \vec{z})D\Delta M}_{\text{Diffusion}}$$
(5)

gegeben. Aufgrund dieser Bedingungen muss Geichung 4 angepasst werden und unter der Annahme eines innerhalb der Probe konstanten Feldgradienten G ergibt sich 4 zu

$$M_{\rm y}(t) = M_0 \exp \left(-\frac{t}{T_{\rm 2}}\right) \exp \left(-\frac{t}{T_{\rm D}}\right) \tag{6}$$

wobei  $T_{\rm D}=\frac{3}{D\gamma^2G^2\tau^2}$  mit der Diffusionskonstante D. CPM und MGM können für  $T_{\rm D}\gg T_2$  weiterhin verwendet werden, wogegen bei der Betrachtung der Amplitude des ersten Spin-Echso beachtet werden muss, dass  $t=2\tau$  gilt. Zur Bestimmung von  $T_1$  wird zunächst ein 180°-Puls (Spinrichtung:  $\vec{z}\to -\vec{z}$ ) und nach  $\tau$  ein 90°-Puls ausgesendet, woraufhin die Spins in der x-y-Ebene präzidieren. Für die Magnetisierung in  $\vec{z}$ -Richtung gilt dann

$$M_{\rm z}(\tau) = M_0 \left( 1 - 2 \exp\left[ -\frac{\tau}{T_1} \right] \right). \tag{7}$$

[3]

## 3 Durchführung

#### 3.1 Versuchsaufbau

Der schematische Versuchsaufbau besteht zum einen aus einer Spule in die eine Probe eingeführt werden kann und zum anderen aus zwei Polschuhen, die in ihrem Zwischenraum ein äußeres Magnetfeld erzeugen können, inwelchem sich die eben genannte Spule befindet. Das durch die Polschuhe erzeugte Magnetfeld entspricht  $B_0$ . In der Spule selbst wird das Hochfrequenzfeld  $\vec{B}_1$  erzeugt. An der Spule ist ein Empfänger angeschlossen, der in der Lage ist, das Induktionssignal welches durch die Präzession der Magnetisierung hervorgerufen wird, zu messen. Das empfangene Signal kann daraufhin auf einem Oszilloskop sichtbar gemacht werden.

#### 3.2 Justage und Temperaturmessung

Zum Justieren wird anstelle einer reinen Wasserprobe eine mit Kupfersulfat durchsetzte Probe verwendet. Diese Alternative führt zu verkürzten Relaxationszeiten. Zunächst werden die Gradientenspulen auf die Werte

$$x = -1.0 \tag{8}$$

$$y = -5.0 \tag{9}$$

$$z = 3.7 \tag{10}$$

$$z = 3.7$$
 (10)  
 $z^2 = -2.4$  (11)

eingestellt. Bei diesen Werten wird das Magnetfeld so homogen wie möglich. Die Frequenz wird auf 21,715 85 MHz eingestellt, da bei diesem Wert die Signalschwingungen am geringsten sind. Die Phase wird auf -130° eingestellt, sodass fast nur Signal im Realteil erscheint. Da sich die Pulslängen zwischen dem ersten 90°-Puls und dem zweiten 180°-Puls um den Faktor 2 unterscheiden müssen, wird die erste Pulslänge auf 2,7 µs und die Zweite auf 5 µs eingestellt. Die Periode, also die Zeit für welche sich die 180°-Pulse wiederholen sollen, wird auf 0.5s eingestellt. Danach wird mit einem Thermoelement die Temperatur in der Spule gemessen. Sie beträgt 22.2° Celsius [2].

#### 3.3 $T_1$ -Messung

Zunächst wird die erste Pulslänge A auf 5 µs eingestellt. Die zweite Pulslänge B wird auf 2,7 us eingestellt. Jetzt soll die Anzahl der B-Pulse 1 sein und die Periode 10 s betragen. Dabei ist zu beachten, dass bei einem Abstand von  $\tau = 1\,\mathrm{s}$  zwischen dem A und B Puls die Periodenlänge um  $\tau$  erhöht werden muss. Jetzt wird eine Messreihe von 25 Wertepaaren aufgenommen.  $\tau$  wird ausgehend von dem Wert  $0,0001\,\mathrm{s}$  bis zu einem Wert von  $3,5\,\mathrm{s}$ erhöht, wobei die Amplitude des FID nach dem 90°-Puls notiert wird. Die Wertepaare werden danach mit der Funktion (7) gefittet, wobei  $M_0 = M(\tau_{\min}) - M_1$  gilt. Jetzt kann  $T_1$  abgelesen werden [2].

#### 3.4 $T_2$ -Messung

Zur Bestimmung von  $T_2$  wird A auf 2,7 µs und B auf 5 µs eingestellt. Die B-Pulse sollen 100-fach wiederholt werden. Die Periode wird auf das Dreifache von  $T_1$  eingestellt. Außerdem muss Puls A gegen Puls B um 90° phasenverschoben werden. Der Pulsabstand wird auf  $\tau=0,0119$  s eingestellt. Bei diesem Wert liegt die Höhe des 100. Echomaximums bei etwa einem Drittel des 1. Echomaximums. Daraufhin wird ein Bild des Signals aufgenommen und sowohl als .png- als auch als .csv-Datei gespeichert. Danach wird ein Fit wie in Gleichung ?? an die Höhe der Peaks gelegt, wobei  $T_1$  durch  $T_2$  ersetzt wird. Jetzt wird die Phasenverschiebung aufgehoben und es wird eine weiteres Bild des Signals sowohl als .png- als auch als .csv-Datei aufgenommen [2].

#### 3.5 Diffusionsmessung

Als erstes muss der Gradient umgepolt und dann auf den maximalen Wert gedreht werden. Die Einstellungen der A- und B-Pulse, sowie die Periode werden nicht verändert. Allerdings wird die Anzahl der B-Pulse wieder auf 1 reduziert. Jetzt werden 16 Wertepaare aufgenommen, wobei  $\tau$  wieder von 0,0001 s ausgehend erhöht wird, bis es den Wert 0,0122 s angenommen hat. Dabei werden die die zugehörigen Amplituden der Echos notiert. Das Echo bei  $\tau=0,0004$  s wird als .csv-Datei gespeichert. Die Messdaten werden danach als  $\ln{(M(\tau))}-\frac{2\tau}{T_2}$  gegen  $\tau^3$  geplottet. Jetzt kann der Parameter  $T_{\rm D}$  bestimmt werden. Dazu wird zunächst ein linearer Plot der Echoamplituden erstellt und angepasst. In der Fitfunktion

$$M(\tau) = M_0 \exp\left(-\frac{2\tau}{T_2}\right) \exp\left(-\frac{\tau^3}{T_D}\right) + M_1 \tag{12}$$

wird der zuvor bestimmte Wert für  $T_2$  verwendet. Aus  $T_{\rm D}$  kann dann die Diffusionskonstante bestimmt werden. Zur Abschätzung des Gradienten wird mittels einer Fouriertransformaion der Amplitudenwerte das zugehörige Spektrum ermittelt. Dabei wird der Signalkanal des Echos als Realteil betrachtet und der erste Punkt des Imaginärteils muss 0 sein, während die Amplitude des ersten Realteilspunkt halbiert wird [2].

## 4 Auswertung

#### 4.1 Justage der Apperatur

Um ein möglichst homogenes Magnetfeld zu erzeugen, werden die Shim-Parameter auf

$$x = -1.0$$
  
 $y = -5.0$   
 $z = 3.7$   
 $z^2 = -2.4$ 

eingestellt. Die Lamorfrequenz wird auf  $\omega_{\rm L}=21{,}715\,85\,{\rm MHz}$  eingestellt. Die Pulslänge für einen 90° Puls wird als  $t_{90}=2{,}7\,{\rm µs}$  bestimmt. Für den 180° Puls beträgt die Pulslänge  $t_{180}=5\,{\rm µs}$ , dass passt mit der Annahme überein, dass diese Pulslänge doppelt so lang sein soll. Die Temperatur an der Stelle der Probe beträgt 22,2 °C.

### 4.2 Bestimmung der Relaxationszeit $T_1$

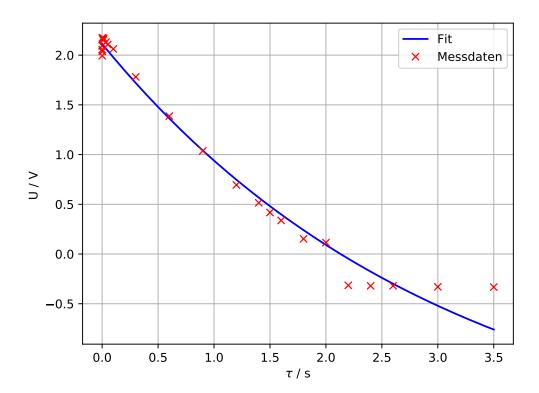
Für die Bestimmung der Relaxationszeit wird die Spannung in Abhängigkeit des Pulsabstandes  $\tau$  gemessen. Die gemessenen Daten sind in Tabelle 1 aufgelistet. An die Daten aus Tabelle 1 wird die Funktion  $(\ref{eq:tabelle})$  angepasst. Die Fitparameter sind

$$M_0 = (-2.11 \pm 0.04) \text{ V}$$
  
 $T_1 = (3.07 \pm 0.08) \text{ s}.$ 

Der Fitparameter  $T_1$  ist die Relaxationszeit. Die Messdaten und der Fit sind in Abbildung 1 zu sehen.

 Tabelle 1: Mess<br/>daten für die Bestimmung der Relaxationszeit  ${\cal T}_1.$ 

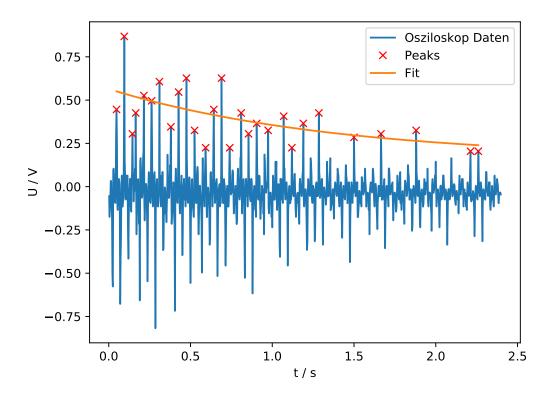
$\tau/\mathrm{s}$	U/V
0,0002	2,093 75
0,0005	$2,\!05625$
0,001	1,99375
0,0015	2,0375
0,0025	$2,\!175$
0,005	$2,\!1625$
0,01	$2,\!15$
0,015	$2{,}16875$
0,035	$2{,}13125$
0,05	$2{,}10625$
0,1	2,0625
0,3	1,78125
0,6	$1,\!3875$
0,9	1,0375
1,5	$0,\!4175$
1,2	0,695
1,4	$0,\!515$
1,6	$0,\!3375$
1,8	$0,\!1525$
2,0	$0,\!115$
$^{2,2}$	-0,315
$^{2,4}$	-0,32
$^{2,6}$	-0,32
3,0	-0.33
3,5	-0,3325



**Abbildung 1:** Messdaten und Fit für die Bestimmung der Relaxationszeit  $T_1.$ 

#### 4.3 Bestimmung der Relaxationszeit $T_2$

In diesem Versuchsteil wird der A-Puls auf 90° und der B-Puls auf 180 degree eingestellt. Der B-Puls soll 100 mal wiederholt werden. Die Periodendauer wird auf den Wert  $P=3T_1\approx 6.0\,\mathrm{s}$  eingestellt. Die damit aufgenommenen Daten sind in Abbildung 2 dargestellt. Die markierten Peaks aus Abbildung 2 wurden mit der Funktion find\_peaks



**Abbildung 2:** Peaks und Fit für die Bestimmung der Relaxationszeit  $T_2$ .

aus der Bibliothek scipy.signal [Quelle hinzufühgen] ermittelt. Die Peaks sind in Tabelle 2 aufgelistet. An die Peaks wird die Funktion (??) angepasst, bei dieser Funktion wird allerdings  $T_1$  mit  $T_2$  ausgetauscht. Die Fitparameter sind

$$\begin{split} U_0 = & (0.40 \pm 0.24) \text{ V} \\ U_1 = & (0.16 \pm 0.27) \text{ V} \\ T_2 = & (1.4 \pm 1.8) \text{ s}. \end{split}$$

Tabelle 2: Ermittelte Peaks für die Bestimmung des Fits.

t/s	U/V
0,0475	$0,\!445854$
0,095	$0,\!867965$
0,145	$0,\!305151$
$0,\!165$	$0,\!425754$
0,215	$0,\!526256$
$0,\!2625$	$0,\!496106$
0,31	$0,\!606658$
$0,\!38$	$0,\!345352$
$0,\!4275$	$0,\!546357$
$0,\!475$	$0,\!626759$
$0,\!525$	$0,\!325251$
$0,\!5925$	$0,\!224749$
0,6425	$0,\!445854$
0,69	$0,\!626759$
0,74	$0,\!224749$
0,81	$0,\!425754$
0,855	$0,\!305151$
0,905	$0,\!365452$
0,975	$0,\!325251$
1,07	$0,\!40691$
$1,\!12$	$0,\!224749$
1,19	$0,\!365452$
1,285	$0,\!425754$
1,5	$0,\!28505$
1,665	$0,\!305151$
1,88	$0,\!325251$
2,2125	$0,\!204648$
2,26	0,204648

Mit der Carr-Purcell-Methode hätte die Relaxationszeit  $T_2$  auch bestimmt werden können, wenn die Pulslänge für den 180°-Puls exakt eingestellt wäre. Da dies aber nicht der Fall ist, kommt er zu einem systematischen Fehler, dadurch würde die damit bestimmte Relaxationszeit fehlerhaft sein. Dieser Fehler hebt sich bei der vorherigen Meiboom-Gill-Methode durch die Phasenverschiebung auf. Das Bild mit dem  $T_2$  bestimmt werden soll ist die Abbildung 3.

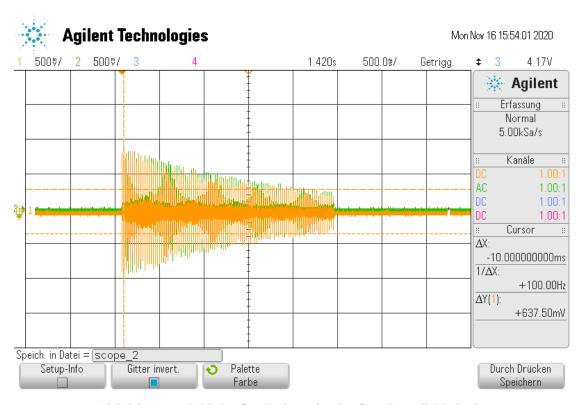


Abbildung 3: Bild des Oszilloskops für die Carr-Purcell-Methode.

#### 4.4 Diffusionsmessung

Bei diesem Versuchsteil muss der z-Gradient umgepolt und maximiert werden. Die anderen Shim-Parameter bleiben unverändert. Um den Diffusionskoeffizenten zu messen wird der A-Puls auf 90° und der B-Puls auf 180° eingestellt. Die Anzahl der Pulsewiederholungen von B ist N=1. Die Periodendauer wird wieder auf  $P=3T_1\approx 6,0$ s eingestellt. Es wird wieder die Spannungsamplitude in Abhängigkeit des Pulsabstandes  $\tau$  gemessen. Die gemessenen Daten sind in Tabelle 3 aufgelistet. An die Messdaten aus Tabelle 3 wird die Funktion

$$U(\tau) = U_0 \exp\left(-\frac{2\tau}{T_2}\right) \exp\left(-\frac{\tau^3}{T_D}\right) + U_1 \tag{13}$$

Tabelle 3: Messdaten für die Bestimmung des Diffusionskoeffizenten.

$\tau/\mathrm{s}$	U/V
0,0002	$1,\!16250$
0,0010	$1{,}19375$
0,0050	$1,\!11875$
0,0100	0,70625
0,0133	$0,\!34375$
0,0140	$0,\!28750$
0,0150	$0,\!20000$
0,0160	$0,\!16875$
0,0170	$0,\!12500$
0,0180	0,08750
0,0115	$0,\!52500$
0,0060	$1,\!00625$
0,0075	0,96250
0,0085	0,88750
0,0138	$0,\!33125$
0,0122	$0,\!41250$

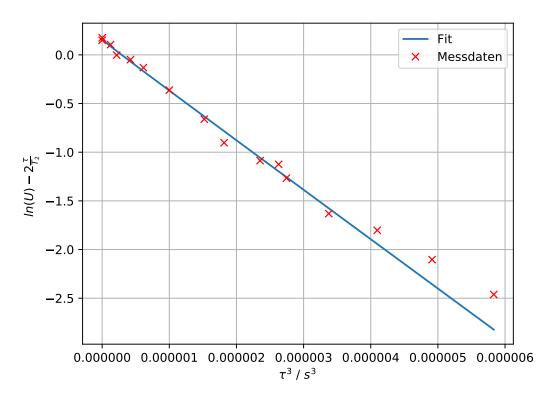
angepasst. Hierbei ist  $T_2$  keiner der Fit<br/>parameter, stattdessen wird der vorher bestimmte Wert verwendet. Die Fit<br/>parameter sind

$$\begin{split} &U_0 = \!\! 51 \, \mathrm{V} \\ &T_\mathrm{D} = \!\! -57 \, 341 \, \mathrm{s} \\ &U_1 = \!\! -49 \, \mathrm{V}. \end{split}$$

Da das Fitprogramm die Funktion schlecht optimieren konnte, können keine Unsicherheiten angegeben werden. Daher sind die daraus berechneten Werte fehlerhaft. Um den Fit und die Messdaten zu überprüfen wird die Funktionen

$$\ln\left(M(\tau)\right) - 2\frac{\tau}{T_2} \tag{14}$$

gegen  $\tau^3$  aufgetragen, dabei soll ein linearer Zusammenhang entstehen. Abgebildet ist das in Abbildung 4. Mit der Parameter  $T_{\rm D}$  kann der Diffusionskoeffizient bestimmt werden. Hierfür wird der zweite Exponent der Formel (6) nach D umgestellt. Um die Gradientenstärke G zu bestimmen, wird zunächst eine Fouriertransformation angewendet.



 ${\bf Abbildung}$ 4: Plot zur Überprüfung der Messdaten um den Diffusionskoeffizenten zu bestimmen.

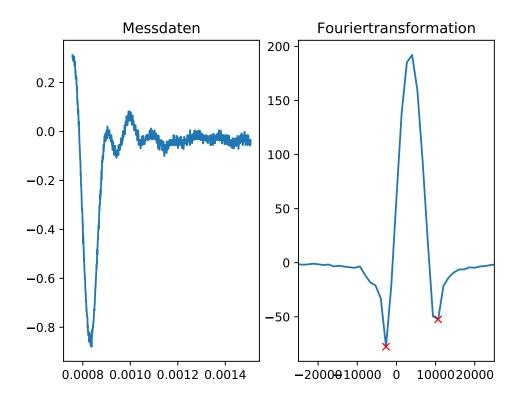


Abbildung 5: Der Echopuls und die Fouriertransformation.

Mit der Fouriertransformation kann der Wert  $d_{\rm f}=13\,324\,{\rm Hz}$  bestimmt werden. Daraus kann die Gradientenstärke und damit der Diffusionskoeffizient bestimmt werden

$$G = \frac{2\pi d_{\rm f}}{\gamma d} \implies D = -\frac{3}{2} \frac{1}{T_{\rm D} \left(\frac{2\pi d_{\rm f}}{d}\right)^2} = 6.6 \cdot 10^{-20} \, \frac{\rm m^2}{\rm s}.$$

Der Wert  $d=4.4\,\mathrm{mm}$  kann an der Probe abgelesen werden. Mithilfe des Diffusionskoeffizienten und der Viskosität  $\eta=0.001\,\mathrm{Pa}\,\mathrm{s}$  kann der Molekülradius bestimmt werden.

$$r=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{D6\pi\eta}=2{,}97\,\mathrm{m}$$

Dieses Ergebnis ist offensichtlich falsch. Der Radius der bestimmt wird, indem eine hexagonale dichteste Kugelpackung angenommen wird, beträgt

$$r_{\text{hcp}} = \left(\frac{m_{\text{H}_{20}} \cdot 0,74}{\frac{4}{3}\pi\rho}\right) = 1,74 \cdot 10^{-10} \,\text{m}.$$

Hierbei wird berücksichtigt, dass eine hexagonal dichteste Kugelpackung 74% des Raumes ausfüllt.

#### 5 Diskussion

Da die Fehler die durch die Justage entstanden sind, nicht bestimmt werden können, beinhalten die Messdaten einen systematischen Fehler, der nicht berücksichtigt werden kann. Das Gleiche gilt für die Temperaturabhängigkeit der Messgrößen.

#### 5.1 Bestimmung der Relaxationszeiten

Die Relaxationszeiten wurden auf die Werte

$$T_1 = (1.92 \pm 0.24) \,\mathrm{s}$$
  $T_{1 \text{ lit}} = (3.09 \pm 0.15) \,\mathrm{s}$  (15)

$$\begin{split} T_1 = & (1.92 \pm 0.24) \, \mathrm{s} \qquad T_{1\_\mathrm{lit}} = (3.09 \pm 0.15) \, \mathrm{s} \\ T_2 = & (1.4 \pm 1.8) \, \mathrm{s} \qquad T_{2\_\mathrm{lit}} = (1.52 \pm 0.09) \, \mathrm{s} \end{split} \tag{15}$$

bestimmt. Die dazugehörigen Literaturwerte kommen aus der Quelle [1]. Der  $T_1$ -Wert hat eine relative Abweichung von 38% und der  $T_2$ -Wert hat eine von 8%. Die Abweichungen können durch die oben genannten Fehler entstanden sein oder können dadurch begründet werden, dass die Relaxationszeiten auch von der Reinheit des Wassers abhängen und die in dem Versuch verwendete Probe eine unterschiedliche Reinheit im Vergleich zur Probe aus der Literatur aufweisen kann.

#### 5.2 Diffusionsmessung und Bestimmung des Molekülradius

Der gemessene Diffusionskoeffizent liegt bei  $D = 6.6 \cdot 10^{-20} \,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$ . Der Literaturwerte beträgt  $D_{\rm lit} = (2.78 \pm 0.35) \cdot 10^{-9} \,\rm m^2/s$ . Die Abweichung kann nicht durch Messfehler erklärt werden. Diese könnte damit erklärt werden, dass der Fit mit dem  $T_{\mathrm{D}}$  bestimmt wurde nicht gut funktioniert hat oder das die Gradientenstärke falsch bestimmt wurde. D weicht um elf Größenordnungen ab, daher weicht auch der Molekülradius um zehn Größenordnungen ab, weil er mit D bestimmt wird.

#### Literatur

- D. C. Chang u. a. "Spin Echo Studies on Cellular Water". In: (1972). DOI: https: //doi.org/10.1038/235170a0.
- TU Dortmund. V 49 Messung von Diffusionskonstanten mittels gepulster Kernspinresonanz. 2020.
- L. Kjær u.a. "Evaluation of Relaxation Time Measurements by Magnetic Resonance Imaging". In: Acta Radiologica (1987), S. 345–351. DOI: https://doi.org/10.3109/ 02841858709177361.