

Hintergründe und Anwendung der Kernspinresonanz

am Beispiel der ^1H -NMR Spektroskopie

Adrian Schrader

29. Mai 2016

Zusammenfassung

Die quantenmechanischen Entdeckungen in der ersten Hälfte des 20. Jahrhunderts machen es durch präzise Spektroskopieverfahren möglich die Struktur von Molekülen, die für die Erklärung des Verhaltens und der Eigenschaften von Stoffen unersetzlich ist, mit physikalischen Prinzipien nachzuweisen. Durch die Eigenschaft des Kernspins gibt die NMR-Spektroskopie weitreichende Aufschlüsse ohne die Probe zu verändern oder gar zu zerstören und findet so auch in vielen weiteren Wissenschaftsbereichen wie etwa in der Medizin, der Forensik oder der Archäologie Anwendung. Dieses Paper bietet einen Einstieg in die Grundlagen dieses Verfahrens und zeigt anhand der ^1H -NMR-Spektroskopie welche Strukturaussagen möglich werden.

Gleichwertige Feststellung von Schülerleistungen im Neigungsfach Chemie, Bolten

Inhaltsverzeichnis

die Argumentation.

1 Grundlagen

Es gibt zwei verschiedene Ansätze, um die Hintergründe des Kernspinresonanzverhaltens von Atomkernen zu erläutern. Das Modell der Quantenmechanik entwickelt aus Operatoren der Wellenfunktion das Verhalten eines einzelnen Kerns und dessen Verhalten in statischen Magnetfeldern, während der klassische Erklärungsversuch zwar nicht an die mathematische Gründlichkeit herankommt, jedoch auf der Intuition des klassischen Physikers basiert. Diese klassische Methode betrachtet die Gesamtheit aller Atomkerne im betrachteten System, um mithilfe der Statistik die makroskopischen Effekte zu erklären.

Zum besseren Verständnis beschreibt dieses Paper nicht die mathematischen Hintergründe, sondern argumentiert mit Annahmen aus der Quantenmechanik, die es selbst nicht erklären kann. Oft werden an solchen Stellen Vergleiche zur klassischen Physik und zu den Gesetzen der Elektrostatik gezogen, obwohl diese in den Größenordnungen der Elementarladungen nicht mehr anwendbar sind. Sie vermitteln trotzdem eine Intuition für die quantenmechanischen Annahmen und verdeutlichen als Annahmen

1.1 Kernspin

Neben Masse und Ladung tragen Elektronen, Neutronen und Protonen die Eigenschaft des sogenannten Spins \vec{I} , der mit einem intrinsischen Drehimpuls vergleichbar ist. Als quantenmechanische Größe kann der Spin nur in diskreten Beträgen und Richtungen auftreten, die von seiner Spinquantenzahl I bestimmt werden. Protonen haben eine Spinquantenzahl von $I = \frac{1}{2}$ und weisen so die zwei Spinzustände „spin up“ ($m = \frac{1}{2}$) und „spin down“ ($m = -\frac{1}{2}$) auf. m beschreibt dabei die relevante magnetische Quantenzahl. [schlemm08]

Auch Atomkerne sind aus diesen Teilchen aufgebaut und können somit auch einen Spin tragen, wenn die Spins der Protonen und Neutronen nicht gepaart werden können. Generell haben Kerne mit ungerader Anzahl von Protonen oder Neutronen einen von null verschiedenen Spin.

Die häufigsten Isotope, die für die nachfolgenden Mechanismen eingesetzt werden können weil sie ungepaarte Nukleonen enthalten sind ^1H , ^{13}C , ^{15}N oder ^{17}O . Die gebräuchlichen Atome der organischen Chemie werden bei den Analysemethoden durch ihre benötigten kernspinaktiven Isotope ausgetauscht; jedoch werden wir sehen, dass es meist ausreicht den