

1. Einleitung

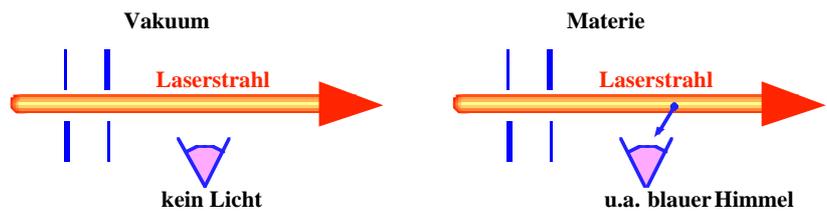
1.EINLEITUNG	1
1.1 Allgemeines und Organisation	2
1.1.1 Inhalt	2
1.1.2 Publikum	2
1.1.3 Organisatorisches	2
1.2 Wechselwirkung von Licht und Materie	3
1.2.1 Übersicht	3
1.2.2 Materialeigenschaften und mikroskopische Theorien	5
1.3 Formen der Spektroskopie	6
1.3.1 Spektralbereiche	6
1.3.2 Wechselwirkungen	6
1.3.3 γ -Strahlen	7
1.3.4 Röntgenstrahlen	8
1.3.5 Sichtbares Licht	8
1.3.6 Infrarot	8
1.3.7 Mikrowellen	9
1.3.8 ESR	11
1.3.9 NMR	12
1.3.10 Teilchen	14

1.2 Wechselwirkung von Licht und Materie

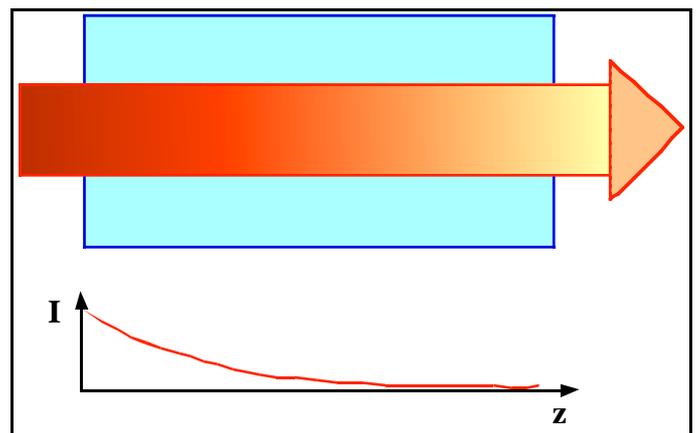
1.2.1 Übersicht

Die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung, insbesondere Licht, und Materie hat Philosophen und Naturwissenschaftler seit vielen Jahrhunderten beschäftigt und zu engagierten Debatten geführt, so z.B. zwischen Goethe und Newton. Ursprünglich wurde die Diskussion nur über die Wechselwirkung von Licht mit Materie geführt, da dies damals die einzige bekannte elektromagnetische Strahlung war. Wir betrachten zunächst einmal die Phänomene, die hierbei auftreten.

Während sich Licht durch das Vakuum ausbreiten kann ohne dass man das von der Seite bemerkt, ist das in Material nicht der Fall, sondern man sieht seitlich Streulicht. Dies ist u.a. ein Grund dafür, dass der Himmel tagsüber blau ist. Diese Streuung stammt größtenteils von Partikeln. Wir werden deshalb im weiteren nicht im Detail darauf eingehen. Was uns mehr interessiert ist die Streuung an Atomen und Molekülen oder Elektronen in Festkörpern.



Absorption: Man stellt fest, dass die Intensität des Lichtes vermindert wird, wenn es durch ein Medium durchtritt. Dieses Phänomen ist eng verwandt mit dem Phänomen der Streuung: Energieerhaltung fordert, dass die Abschwächung der Leistung des transmittierten Lichtes mindestens gleich groß ist wie die Leistung des gestreuten Lichtes. Wir werden uns zunächst mit linearen Systemen beschäftigen, d.h. Systemen, bei denen die Verringerung der Intensität des Lichtes bei der Durchquerung einer dünnen Schicht direkt proportional zur Intensität des einfallenden Lichtes ist,



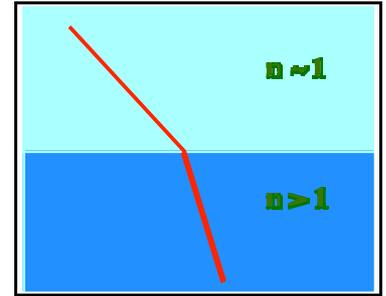
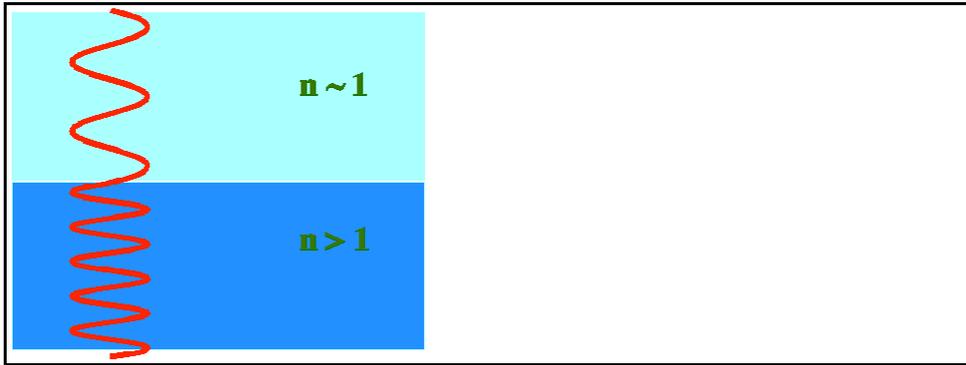
$$dI/dz = -\alpha I,$$

wobei die Proportionalitätskonstante α offenbar die Dimension einer inversen Länge aufweist. Die Lösung ist offenbar

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z}$$

besitzt, d.h. die Intensität fällt exponentiell ab. Die Proportionalitätskonstante α ist somit das Inverse der Distanz, über die die Intensität auf $1/e$ abfällt. Diese Distanz wird als Absorptionslänge bezeichnet.

Licht breitet sich nicht geradlinig aus wenn es durch ein Medium durchtritt.



Wie in Physik III gezeigt wird kann die Brechung direkt darauf zurückgeführt werden kann, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes anders ist als im Vakuum. Die Feldamplituden hängen in diesem Fall vom Brechungsindex n des Systems ab:

$$A(x) = A_0 e^{i(\omega t - k_0 n x)} e^{-\alpha z/2} ,$$

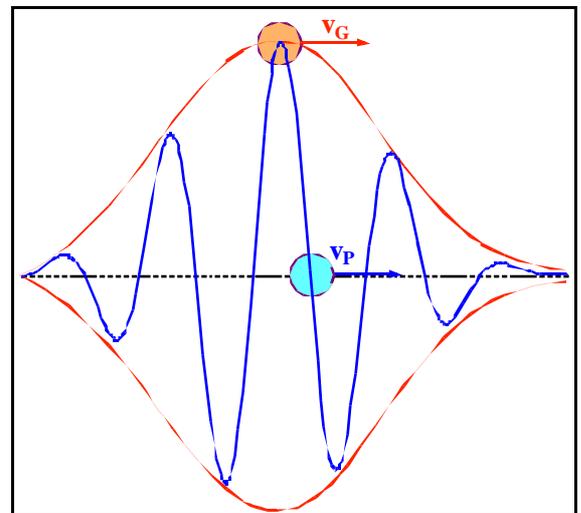
In den meisten Fällen ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit niedriger als die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, sie kann aber auch höher sein. Dies ist typischerweise der Fall für Röntgenlicht.

Man unterscheidet verschiedene Arten von Geschwindigkeiten: bereits aus der Physik 3 bekannt ist die Unterscheidung von Phasen- und Gruppengeschwindigkeit. Wenn wir das Licht als elektromagnetische Welle mit Kreisfrequenz ω und Wellenvektor k beschreiben, ist die Phasengeschwindigkeit gegeben als

$$v_P = \omega/k$$

und die Gruppengeschwindigkeit als

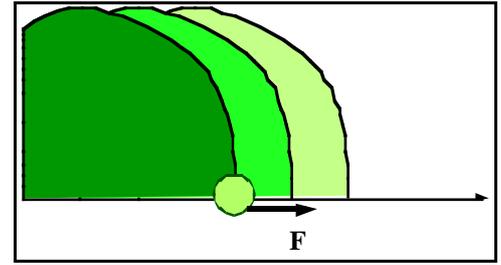
$$v_G = d\omega/dk .$$



Die beiden unterscheiden sich dann, wenn sie von der Wellenlänge abhängen, d.h. wenn $\omega \neq c k$ gilt.

Beide können kleiner oder grösser als die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, c , sein. Die Relativitätstheorie verlangt jedoch, dass die Signal-Ausbreitungsgeschwindigkeit nicht größer als c sein darf.

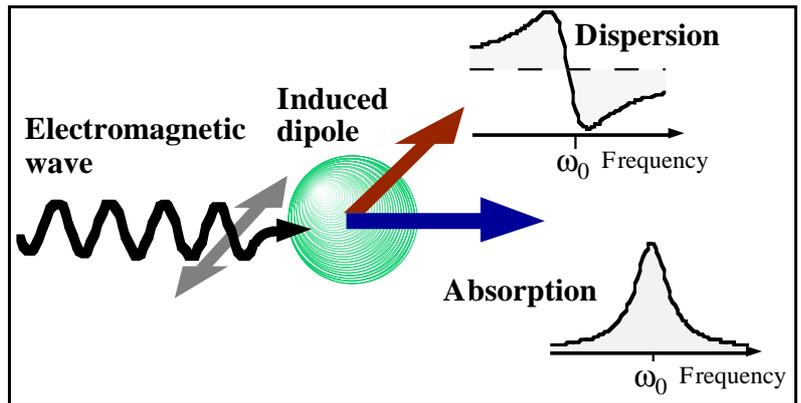
Diese kann z.B. definiert werden als die Geschwindigkeit, mit der sich die Front eines Lichtpulses ausbreitet.



1.2.2 Materialeigenschaften und mikroskopische Theorien

Das Interesse an diesen Effekten bezog sich ursprünglich in erster Linie auf die unterschiedliche Absorption und Brechung (d.h. Dispersion) verschiedener Materialien als Funktion der Wellenlänge.

$$n = n(\lambda) , \alpha = \alpha(\lambda)$$



F: Beispiel für Verhalten des Brechungsindex / Absorptionslinie.

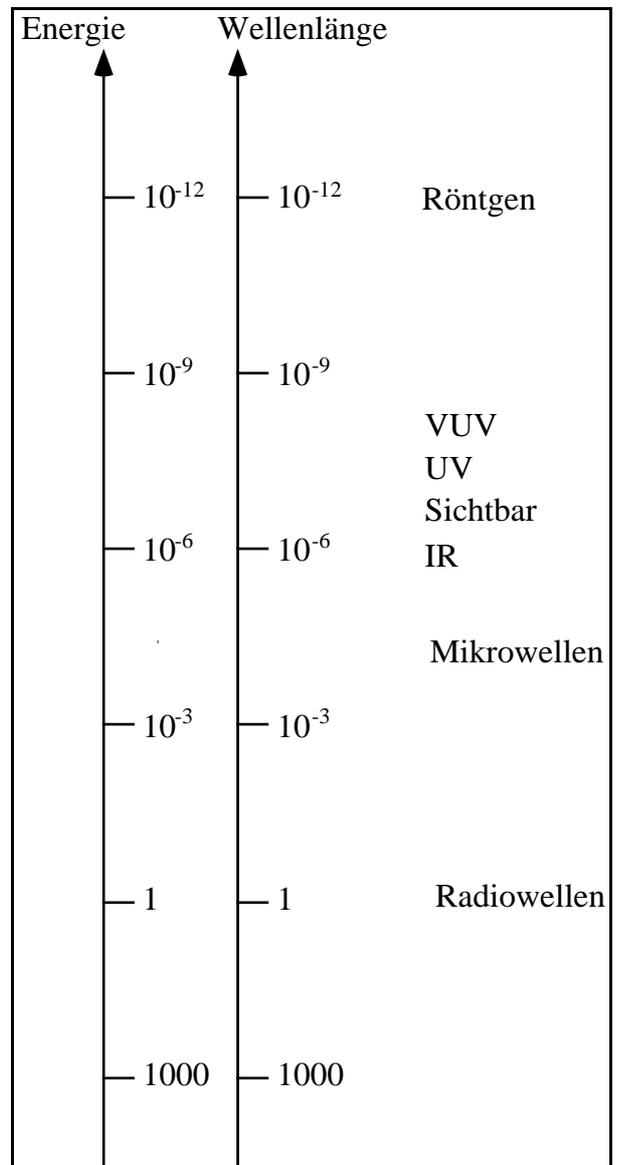
Ganz allgemein findet man ein resonantes Verhalten, d.h. eine hohe Verstärkung wenn die Wellenlänge in die Nähe einer charakteristischen Wellenlänge des Materials kommt. Diese Wellenlängen sind direkt an Energiedifferenzen des Materials gekoppelt und können deshalb Informationen über die mikroskopischen Bestandteile, d.h. die Atome oder Moleküle liefern. Hierin liegt auch ein wesentlicher Grund für das Interesse an unterschiedlichen Spektroskopien: in Verbindung mit einer geeigneten Theorie erlauben und spektroskopische Messungen Rückschlüsse auf mikroskopische Materialeigenschaften.

1.3 Formen der Spektroskopie

Spektroskopische Experimente untersuchen die Abhängigkeit von Absorption und Brechungsindex von der Wellenlänge, resp. Frequenz des Lichtes. Die Motivation für solche Experimente liegt zum einen darin, diese Eigenschaften zu verstehen und anzuwenden, zum andern darin, aus den gemessenen Daten Informationen über den mikroskopischen Aufbau der Materie zu erhalten. Es gibt verschiedene Gebiete der Spektroskopie, die man zum einen aufgrund der verwendeten Strahlung unterscheiden kann, zum andern anhand der Wechselwirkung und drittens anhand der untersuchten Eigenschaften klassifizieren kann.

1.3.1 Spektralbereiche

Die elektromagnetische Skala kann nach Wellenlängen, Frequenzen oder Energien gegliedert werden. Im langwelligen, resp. niederenenergetischen Bereich beginnt die Skala mit Radiowellen, deren Wellenlängen praktisch beliebig lang werden können. Im Bereich von ca. 1 GHz, resp. 30 cm Wellenlänge beginnt man üblicherweise von Mikrowellen zu sprechen. Im Bereich von einigen THz, resp. unterhalb eines Millimeters beginnt man von Millimeterwellen, THz-Wellen zu sprechen und etwas später von Fern-Infrarot. Ab einer Wellenlänge von ca. 10 - 0.75 μm spricht man von Infrarot und von 750 nm bis 400 nm findet man das sichtbare Licht. Daran schließt das UV, resp. daran das Vakuum-UV an, und schließlich Röntgen und Gamma-Strahlen. Ab diesem Bereich spricht man aber meistens nicht mehr von Wellen, sondern benutzt eher den Teilchencharakter der Strahlung.



1.3.2 Wechselwirkungen

Die elektromagnetischen Felder können über den elektrischen oder magnetischen Teil an entsprechende elektrische, resp. magnetische molekulare Dipole koppeln. Dazu gehören zum einen elektronische Dipolmomente, welche durch Elektronen und Kerne in Atomen oder Molekülen gebildet werden. Dies ist zum Beispiel der Fall im Bereich der Röntgenstrahlen, welche die Elektronen treiben. Im Bereich des UV- und des sichtbaren Lichtes erzeugen die elektromagnetischen Felder

Übergänge zwischen einzelnen atomaren oder molekularen Zuständen, wobei die Kopplung wiederum über das molekulare Dipolmoment läuft. Im Infraroten kann die Kopplung ans molekulare elektrische Dipolmoment Schwingungen erzeugen und im Mikrowellenbereich Rotation von Molekülen in gasförmigen Molekülen. In Festkörpern kann mit dielektrischer Spektroskopie im Frequenzbereich von THz bis sub-Hertz die Bewegung ganzer Atome, Moleküle und Ionen in Festkörpern untersucht werden.

Der magnetische Anteil der Felder kann an atomare und molekulare magnetische Dipolmomente koppeln. Diese sind immer an einen Drehimpuls gekoppelt. Davon gibt es als mögliche Quellen den Bahndrehimpuls des Elektrons, den Elektronenspin, sowie den Kernspin. Interessant ist zunächst der Elektronenspin, welcher im Gebiet der Elektronenspin-Resonanz (ESR) untersucht werden, deren Frequenzbereich im Mikrowellenbereich liegt, und der Kernspin, der in der NMR oder Kernspinresonanz untersucht wird, wobei die Frequenzen im Bereich von einigen MHz bis zu 800 MHz liegen.

1.3.3 γ -Strahlen

γ -Strahlen, also der Teil des elektromagnetischen Spektrums mit der höchsten Energie, wird zum einen zur Analyse von radioaktiven Materialien verwendet. Wenn ein Kern γ -Strahlen emittiert geht er von einem angeregten, meist metastabilen Zustand, in einen energetisch niedriger liegenden Zustand über. Die dabei freiwerdende Energie weist ein Spektrum auf, dessen Zentralfrequenz durch die Energiedifferenz der beiden Zustände gegeben ist und dessen Breite u.a. durch die Lebensdauer der Zustände.

Z: Kernzustände / Emission

Durch die Messung des Spektrums der emittierten Strahlung kann man deshalb feststellen, welcher Kern zerfällt. Ein berühmter Fall, wozu dies verwendet werden kann ist das Beispiel der kalten Fusion. Hier wurde das γ -Spektrum als „Beweis“ aufgeführt, dass bei dem Experiment wirklich verschiedene Wasserstoffisotopen verschmolzen worden waren. Allerdings zeigt dieses Beispiel auch gleich, dass man bei solchen Messungen genau wissen muß, was man wirklich mißt, und die erhaltenen Daten im Detail diskutieren.

F: Zerfallsdaten

Eine weitere spektroskopische Anwendung der γ -Strahlen ist die Mössbauerspektroskopie. Hierbei werden γ -Strahlen von metastabilen Atomkernen emittiert und von den entsprechenden Kernen im Grundzustand wieder absorbiert. Man kann die Kerne und das Material darum so auswählen, dass die Absorption / Emission extrem scharf ist und auf diese Weise Resonanzlinien erhalten, die eine relative Breite

$$\Delta\nu/\nu < 10^{-13}$$

aufweisen. Dies war für lange Zeit die höchste bekannte Auflösung im gesamten Spektralbereich und wurde u.a. für Präzisionsmessungen verwendet, welche der Bestätigung der Relativitätstheorie ermöglichten.

1.3.4 Röntgenstrahlen

Röntgenstrahlen werden in erster Linie für Beugungsexperimente eingesetzt, wobei die Wellenlänge im wesentlichen die Art und Stärke der Wechselwirkung bestimmt, während die Frequenz nur eine sekundäre Rolle spielt.

Die oszillierenden elektrischen Felder der Röntgenstrahlen regen in der Elektronenhülle eine Oszillationsbewegung an. Die Elektronen strahlen dabei als beschleunigte Ladungen wiederum ein Feld ab. Da die Elektronen in diesem Zusammenhang als quasi-frei betrachtet werden können ist die Wechselwirkung nur wenig abhängig von der Wellenlänge.

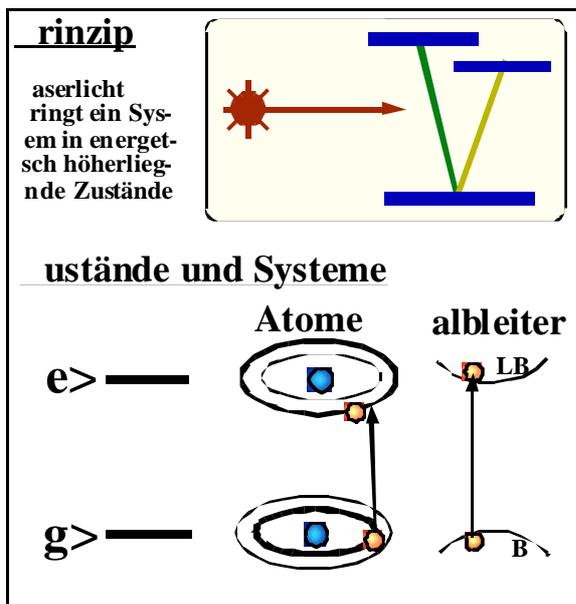
Z: Streuung an bewegtem Elektron

Röntgenstrahlen können aber auch für Röntgenfluoreszenz eingesetzt werden. Hierbei werden Elektronen aus niedrig liegenden Schalen der Atome angeregt, worauf in einem kaskadenartigen Prozeß Elektronen aus höheren Schalen hinunterfallen und die frei gewordene Position einnehmen. Dabei werden mehrere Photonen niedrigerer Energie frei, welche gemessen werden können. Damit können Atome einer bestimmten Sorte in fast jeder chemischen Umgebung beobachtet werden.

Z: Röntgenfluoreszenz

1.3.5 Sichtbares Licht

Mit ultraviolettem und sichtbarem Licht werden höher liegende Elektronen, insbesondere Valenzelektronen, in elektronisch angeregte Zustände gebracht. Dies kann sowohl in Atomen und Molekülen im gasförmigen Zustand geschehen, wie auch in Flüssigkeiten und Festkörpern. Die Position der Resonanzlinien gibt dabei Aufschluß über die Energien der beteiligten Zustände, während die Form von der Lebensdauer der Zustände abhängt. In kondensierter Materie erhält man auch Informationen über die Umgebung der Atome.



Z: Linienbreite

Während Resonanzlinien freier Atome sehr schmal sind (typischerweise $\Delta\nu/\nu < 10^{-8}$) können die Linien in Festkörpern und Flüssigkeiten sehr breit werden ($\Delta\nu/\nu \sim 0.1$), da die Wechselwirkung mit der Umgebung die Energien der Zustände verschiebt.

mit der Umgebung die Energien der Zustände verschiebt.

1.3.6 Infrarot

Bei noch größeren Wellenlängen Energien reichen die Energien nicht mehr aus für die Anregung von elektronischen Übergängen. Man gelangt dann in den Bereich der Vibrationsübergänge. Bekanntlich ist die Frequenz eines klassischen Pendels gegeben durch

Z: Vibrationsübergänge / Potential

$$\omega = \sqrt{f / m} ,$$

wobei f die Kraftkonstante und m die bewegte Masse darstellt. Je größer die Masse desto kleiner wird also die Frequenz des entsprechenden Oszillators. Da atomare Massen um rund 4 Größenordnungen schwerer sind als eine Elektronenmasse erwarten wir Frequenzen, die um 2 Größenordnungen unterhalb der elektronischen Frequenzen liegen. Diese „naive“ Erwartung entspricht auch in etwa den beobachteten Verhältnissen. Als Richtwert liegt die elektronische Anregung des Elektrons im Wasserstoff bei ca. 100 nm, während die energiereichste vibratorische Anregung (^1H -Streckschwingung) bei ca. 3 μm erscheint. Aus den gemessenen Spektren können Kraftkonstanten und Massen bestimmt werden.

Übung: Schwingungsfrequenz C-H; Annahme: Bindungsenergie 100 kJ/Mol; entspricht Streckung um 1 Å.

Entsprechend niedrigere Energien erhält man für flachere Potentiale, d.h. geringere Rückstellkräfte. Die Frequenzen von Normalschwingungen von Molekülen lassen sich nach relativ einfachen semiempirischen Regeln abschätzen. Die Messung von Schwingungsspektren ist deshalb zu einem wichtigen analytischen Werkzeug geworden.

Wenn das Potential gegen Null geht erhält man den Fall der freien Translationsbewegung. Hier ist die Anregungsenergie Null, d.h. die Energieverteilung ist kontinuierlich.

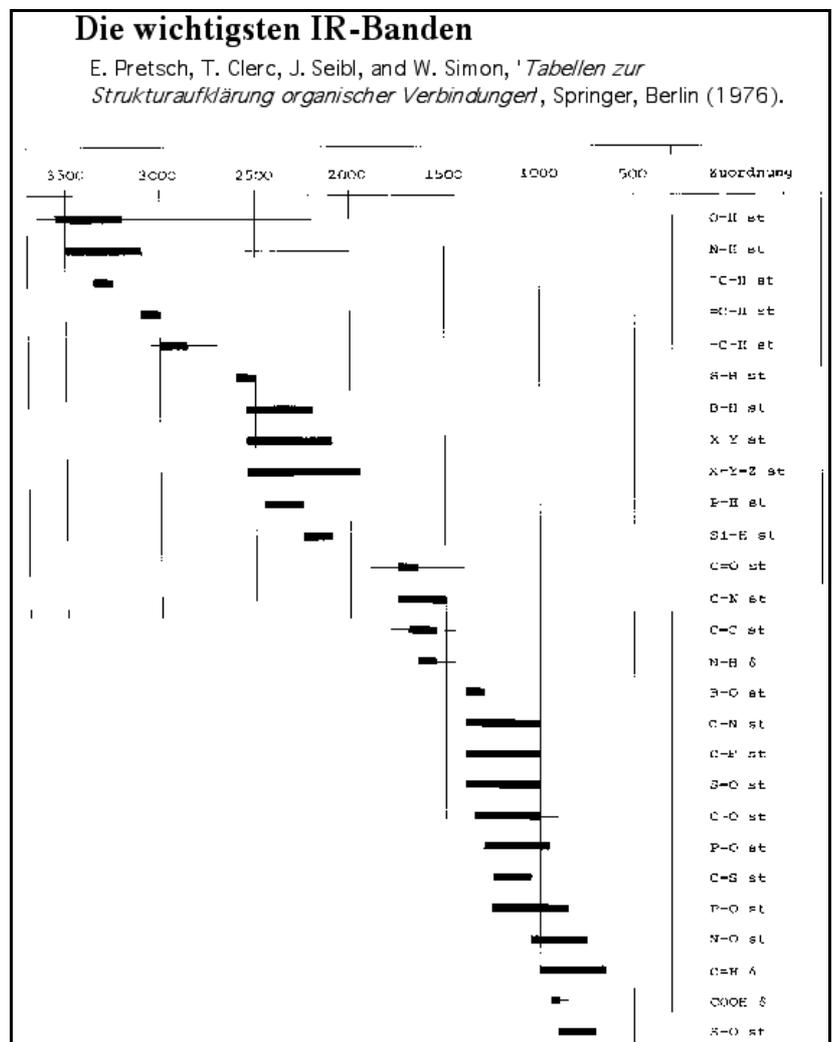
1.3.7 Mikrowellen

Auf einer noch niedrigeren Skala, im Mikrowellenbereich, sind die Photonenenergien zu klein um Bewegungen anzuregen, die in einem Potential stattfinden. Rotationsbewegungen freier Moleküle unterliegen keinem Potential. In Analogie zur kinetischen Energie der Translation schreibt man

$$\mathcal{H} = \hbar^2 L^2 / 2I,$$

wobei I das Trägheitsmoment des Moleküls darstellt und $\hbar L$ den Drehimpuls.

Der Drehimpuls eines Moleküls ist aber quantisiert, d.h. ein Molekül kann Drehimpuls nur in Form einzelner Quanten aufnehmen. Die Energie der Rotationszustände ist



$$E_n = J(J+1) \hbar^2/2I \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

Z: Energien

und die entsprechenden Übergangsenergien sind somit

$$\Delta E_n = 2(J+1) \hbar/2I$$

Literatur: M. Weissbluth, 'Atoms and molecules', Academic Press, San Diego (1978).

Übung: Trägheitsmoment eines I₂-Moleküls; Rotationspektrum

Wir berechnen zunächst des Trägheitsmoment. Die einzige relevante Komponente des Trägheitstensors ist diejenige bezüglich der Achse senkrecht zur Symmetrieachse des Moleküls. Das Trägheitsmoment beträgt

$$I = 2 m r^2 = 2 \cdot 127 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} (1.35 \cdot 10^{-10})^2 = 8 \cdot 10^{-45} \text{ m}^2 \text{ kg} .$$

Die Einheit der Rotationsenergie beträgt damit

$$\hbar^2/2I = 10^{-68}/16 \cdot 10^{-45} = 6 \cdot 10^{-25} \text{ J}$$

In Frequenzeinheiten entspricht dies

$$\Delta \nu = \Delta E/h = 6 \cdot 10^{-25}/6 \cdot 10^{-34} \text{ sec} = 10^9 = 1 \text{ GHz}$$

Die Übergangsfrequenzen liegen somit im Mikrowellenbereich.

Aus den gemessenen Rotationspektren freier Moleküle kann man somit das Trägheitsmoment bestimmen. Da die Massen bekannt sind kann darüber somit auch die molekulare Struktur bestimmt werden. Allerdings ergibt das Mikrowellenspektrum eines Moleküls zunächst nur drei Hauptelemente des Trägheitstensors, unabhängig von der Komplexität des Moleküls, während die Struktur durch $3N-6$ Parameter definiert ist. Die fehlenden Parameter können prinzipiell über isotope Substitution bestimmt werden. Allerdings ist dieses Verfahren zur Strukturbestimmung nur für sehr einfache Moleküle wirklich praktikabel.

1.3.8 ESR

Energien im Mikrowellenbereich können aber nicht nur Rotationsübergänge anregen, sondern auch Übergänge zwischen unterschiedlichen Zuständen eines molekularen oder atomaren magnetischen Momentes. Die Wechselwirkung zwischen magnetischen Momenten und einem äußeren Magnetfeld ist so schwach, dass Felder im Bereich von einem oder mehreren Tesla benötigt werden um energetische Aufspaltungen im Mikrowellenbereich zu erhalten. Für ein freies Elektron ($g=1$) liegt die Zeemanenergie in einem Feld von 1 T bei

$$\Delta v/B = \mu_B.$$

Der Proportionalitätsfaktor ist das Bohr'sche Magneton

$$\mu_B = e\hbar/2m =$$

$$= 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C } 10^{-34} \text{ J sec} / (2 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2$$

Wir können diese Einheit umrechnen mit $A \text{ sec V} = J$ und $T = V \text{ s/m}^2$, d.h.

$$9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2 = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 14 \text{ GHz/T}$$

Die Elektronenspinresonanz erlaubt die

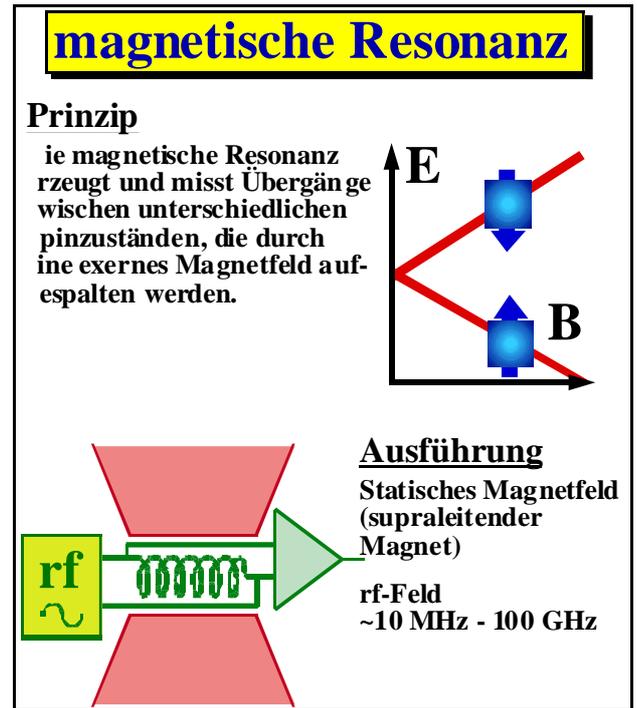
Z: Elektronenspin in einem Molekül / Kristall

Bestimmung der elektronischen Struktur, insbesondere die Verteilung eines ungepaarten Valenzelektrons. Natürlich kann man Elektronenspinresonanz nur dann untersuchen, wenn ein Spin vorhanden ist. Dies schließt insbesondere sämtliche Moleküle mit geschlossenen Schalen aus. Interessante Untersuchungsobjekte findet man insbesondere bei Biomolekülen, wo Radikale z.B. in der Photosynthese vorkommen. Auch in Festkörpern findet man häufig Defekte, welche lokalisierte paramagnetische Zentren erzeugen.

In Halbleitern sind die g -Faktoren der Leitungselektronen von der Bandstruktur abhängig. In dünnen Filmen von GaAs, sogenannten Quantenfilmen, findet man z.B. dass der g -Faktor von +0.4 bis -0.4 variiert. Dies hängt u.a. davon ab wie weit die Wellenfunktion in die Barriere eindringt, welche einen anderen g -Faktor aufweist als das GaAs.

Z: g-Abhängigkeit in Quantentöpfen

Da die Resonanzfrequenz proportional zur Feldstärke ist wird der Frequenzbereich durch die vorhandenen Magnetfelder bestimmt. Weitere technische Randbedingungen sind durch die Geräte zur Erzeugung und zum Nachweis der Mikrowellen gegeben. Kommer-



zielle Geräte benutzen heute Frequenzen im Bereich von etwa 9 bis rund 90 GHz. In Forschungslaboratorien stehen heute Geräte, welche bei Frequenzen bis zu 600 GHz arbeiten.

1.3.9 NMR

Eine weitere Stufe zu niedrigeren Frequenzen führt zu Radiofrequenzen, also zu Frequenzen unterhalb von 1 GHz. Hier findet man Kernspinübergänge. Aufgrund der höheren Masse des Kerns sind deren magnetische Momente $\mu = e\hbar/2M$ schwächer als diejenigen des Elektrons und die entsprechenden Übergangsfrequenzen niedriger. Das entsprechende Arbeitsgebiet wird als Kernspinresonanz oder NMR bezeichnet. Man benutzt für diese Experimente möglichst hohe Magnetfelder, wobei man heute Felder bis etwa 20 T erreicht. Die entsprechenden Resonanzfrequenzen hängen vom Kern ab, wobei unterschiedliche Isotopen unterschiedliche Kopplungskonstanten und damit Resonanzfrequenzen aufweisen. Ein Kernresonanzspektrometer muß deshalb immer einen sehr breiten Bereich von Frequenzen abdecken.

Die Kernspinresonanz erlaubt primär die Messung der Frequenz von Kernspinübergängen. Die Übergangsfrequenzen liegen hierbei im Bereich von einigen MHz bis zu einigen 100 MHz, während die Linienbreiten sehr vom System abhängen. In Flüssigkeiten sind Breiten von weniger als einem Hertz möglich, d.h. man erreicht eine Auflösung von einigen ppb (10^{-9}). Aufgrund dieser hohen Auflösung kann dabei sehr genau die Stärke des lokalen Magnetfeldes bestimmt werden. Diese hängt wiederum von der lokalen Struktur ab, sowie von Kopplungen an benachbarte Spins.

F: NMR-Frequenzen

In der Kernspinresonanz, wie auch in der ESR bringt man die zu untersuchende Probe in ein starkes Magnetfeld, welches die Entartung der Spinzustände aufhebt. Ein magnetisches Wechselfeld im Radiofrequenzbereich induziert Übergänge zwischen diesen Spinzuständen. Die physikalischen Grundlagen dieser Art von Experimenten sind seit den Pionierarbeiten von Bloch, Hahn, usw. vor bald 50 Jahren im wesentlichen bekannt. Trotzdem wird auf diesem Gebiet noch intensiv gearbeitet. Die meisten Experimente, zielen aber nicht mehr auf ein besseres Verständnis der Grundlagen ab, sondern versuchen die magnetische Resonanz auf die unterschiedlichsten Systeme anzuwenden.

Der Grund dafür, dass die magnetische Resonanz für die Untersuchung so vieler unterschiedlicher Systeme so nützlich geworden ist, liegt im wesentlichen darin, dass die Spinsysteme zwar ziemlich gut, aber nicht perfekt von den übrigen Freiheitsgraden des Systems entkoppelt sind. Die Entkoppelung erlaubt eine theoretische Beschreibung der Dynamik des Spinsystems, welche wesentlich vollständiger und exakter ist, als wir uns aus anderen Bereichen der Physik gewöhnt sind. Dabei brauchen wir nur die Spin-Freiheitsgrade explizit zu berücksichtigen; die räumlichen Freiheitsgrade erscheinen nur in der Form von Parametern im Hamiltonoperator des Systems. Dass sie aber erscheinen, zeigt, dass die Entkoppelung nicht vollständig ist. Und genau diese Restkopplung erlaubt uns, über die spektroskopischen Messungen Rückschlüsse auf die Struktur und Dynamik der untersuchten Substanzen zu ziehen.

So kann die genaue Resonanzfrequenz Aufschlüsse über die elektronische Struktur oder lokale Feldstärken geben. Kopplungen zwischen verschiedenen Spins enthalten Informationen über räumliche Strukturen oder die Natur von chemischen Bindungen. Relaxationsraten, resp. Linienbreiten geben Auskunft über Bewegungsprozesse.

Die meisten Anwendungen findet man immer noch in der Chemie, wo die magnetische Resonanz wohl das wichtigste Hilfsmittel für die Aufklärung von molekularen Strukturen darstellt.

In einer breiten Öffentlichkeit wurde die Kernresonanz in den letzten Jahre sehr viel bekannter weil auch die Medizin die Möglichkeit entdeckte, die Kernresonanz zu verwenden. Sie wird dort inzwischen als nichtinvasive Untersuchungsmethode für verschiedene Anwendungen eingesetzt, vor allem für weiche Gewebe. In der Physiologie verwendet man sie in erster Linie als Spektroskopie zur Aufklärung von Stoffwechselfvorgängen.

Am bekanntesten ist sie aber zweifellos als bildgebende Methode in der Form der Kernspin Tomographie oder MRI (Magnetic Resonance Imaging) geworden.

Dabei verwendet man einen Magnetfeldgradienten um den Ort eines Kernspins über seine Frequenz zu codieren. Das resultierende Spektrum enthält somit Informationen über die räumliche Verteilung der Kernspin. Aus einer genügend großen Zahl von solchen Projektionen auf die Richtung des Magnetfeldgradienten kann man das ursprüngliche Objekt rekonstruieren.

MRI kann nicht nur auf Festkörper und Flüssigkeiten angewendet werden, sondern auch auf Gase, wie z.B. ^3He . In diesem Beispiel wurde dies verwendet um eine Lunge zu untersuchen. Weiterhin ist es möglich, die Empfindlichkeit z.B. auf bewegt Flüssigkeiten zu optimieren. In diesem Beispiel wurde dies verwendet um Blutgefäße abzubilden.

Magnetic Resonance Imaging (MRI)

Die Position eines Kernspins im Raum kann aus dem Spektrum bestimmt werden wenn die Feldstärke räumlich variiert. Das gemessene Spektrum entspricht einer Projektion auf die Richtung des Gradienten.

Feldstärke und Resonanzfrequenz nehmen zu

Die Form kann aus einer Reihe von Projektionen errechnet werden.

Lunge (^3He)

Blutgefäße

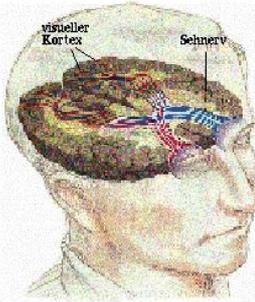
© Uni Mainz

MRI kann nicht nur für die Darstellung von statischen Strukturen verwendet werden, es ist ebenso möglich, zeitabhängige Veränderungen zu untersuchen. Dabei nutzt man die Tatsache dass durch den erhöhten Sauerstoffverbrauch während eines gedanklichen Prozesses mehr Sauerstoff ins Gehirn gebracht wird. In diesem Beispiel wird die Gehirnaktivität eines Probanden gemessen während er sich eine Reihe von Bildern betrachtet.

1.3.10 Teilchen

Neben elektromagnetischen Wellen können auch **Teilchenstrahlen** für spektroskopische Untersuchungen eingesetzt werden. Zu den wichtigsten gehören Neutronen, welche z.B. für die Bestimmung der Phononen-Dispersionsrelationen in Festkörpern benutzt werden, Elektronen für die Untersuchung der elektronischen Zustandsdichte an Oberflächen, und Atome, ebenfalls für Untersuchungen an Oberflächen.

Darstellung von Gehirnfunktionen

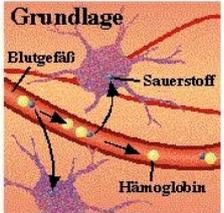


Um zu verstehen, wie das Gehirn funktioniert und um Fehler (Krankheiten) erkennen zu können, benötigt man Techniken, die Gehirnaktivität messen können.

Hier als Beispiel der Sehprozess: Informationen werden von den Augen ins Sehzentrum auf der Rückseite des Gehirns gebracht.

Regionen mit erhöhter Aktivität benötigen zusätzlichen Sauerstoff.

Grundlage



Blutgefäß
Sauerstoff
Hämoglobin

Funktionelle Bildgebung

In der funktionellen NMR Bildgebung (f-MRI) nutzt man die Änderung der NMR Signale aufgrund der erhöhten Sauerstoffzufuhr.

In diesem Beispiel betrachtet der Proband ein Lichtmuster. Die Bilder stellen die Änderung der Gehirnaktivität in vier aneinander angrenzenden Ebenen dar, welche dabei gemessen wird.

