

## 1. Einleitung

### 1.1 Allgemeines und Organisation

- 1.1.1 Inhalt
- 1.1.2 Publikum
- 1.1.3 Organisatorisches
- 1.1.4 Ziele

### 1.2 Magnetische Resonanz: Was, Wie und Wozu?

- 1.2.1 Prinzip
- 1.2.2 Informationsgehalt
- 1.2.3 Kernspintomographie
- 1.2.4 Kopplungen und Strukturbestimmung
- 1.2.5 Gradienten-NMR: Messung der Diffusion
- 1.2.6 Austauschspektroskopie
- 1.2.7 Bewegungsprozesse und Relaxation
- 1.2.8 Elektronenspinresonanz
- 1.2.9 Grundlagen

## 2. Grundlagen

### 2.1 Magnetismus und magnetisches Moment

- 2.1.1 Felder und Dipole; Einheiten
- 2.1.2 Magnetischer Dipol im Magnetfeld
- 2.1.3 Drehimpuls und magnetische Dipole
- 2.1.4 Modellrechnung: Kreisstrom
- 2.1.5 Der Elektronenspin
- 2.1.6 Kernmomente
- 2.1.7 Energie der stationären Zustände

### 2.2 Evolution der Spins im Magnetfeld

- 2.2.1 Larmorpräzession
- 2.2.2 Makroskopische Beschreibung: Magnetisierung
- 2.2.3 Radiofrequenzfeld
- 2.2.4 Rotierendes Koordinatensystem
- 2.2.5 Transformation der Bewegungsgleichung
- 2.2.6 Eigenwerte und Eigenvektoren
- 2.2.7 Präzession und Pulse
- 2.2.8 Verstimmungsabhängigkeit

### 2.3 Relaxation und stationäre Lösung

- 2.3.1 Phänomenologische Beschreibung der Relaxation
- 2.3.2 Transversale Komponenten
- 2.3.3 Stationäre Lösung
- 2.3.4 Longitudinale Magnetisierung
- 2.3.5 Absorbierte Leistung
- 2.3.6 Messung von Absorption und Dispersion
- 2.3.7 Transversale Komponenten

### 2.4 Spektrometer

- 2.4.1 Messprinzip
- 2.4.2 Magnet
- 2.4.3 RF Spule und Schwingkreis
- 2.4.4 Detektion
- 2.4.5 Spektrometer und Messung
- 2.4.6 Computer

## 3. Wechselwirkungen

### 3.1 Chemische Verschiebung

- 3.1.1 Phänomenologie
- 3.1.2 Qualitative Theorie der chemischen Verschiebung
- 3.1.3 Anisotropie
- 3.1.4 Pulvermittel

### 3.2 Quadrupolwechselwirkung

- 3.2.1 Elektrostatische Energie des Kerns
- 3.2.2 Modellsystem
- 3.2.3 Quadrupolwechselwirkung

### 3.3 Spin-Spin Wechselwirkung

- 3.3.1 Der klassische magnetische Dipol
- 3.3.2 Orientierungsabhängigkeit
- 3.3.3 Indirekte (Skalare, J-) Kopplung

## 4. Quantenmechanische Beschreibung

### 4.1 Der Dichteoperator

- 4.1.1 Spin-Operatoren
- 4.1.2 Beschreibung eines Ensembles
- 4.1.3 Definition des Dichteoperators
- 4.1.4 Beispiele

### 4.2 Wechselwirkungen für einzelne Spins

- 4.2.1 Zeeman-Wechselwirkung
- 4.2.2 Verstimmungsabhängigkeit
- 4.2.3 Quadrupol-Wechselwirkung
- 4.2.4 Reine Quadrupolresonanz
- 4.2.5 Quadrupolwechselwirkung im starken Magnetfeld

### 4.3 Dipol-Dipol Kopplung

- 4.3.1 Hamiltonoperator
- 4.3.2 Dipolkopplung zwischen identischen Spins im starken Magnetfeld
- 4.3.3 Unterschiedliche Spins
- 4.3.4 Übergangsfrequenzen
- 4.3.5 Skalare Kopplung

### 4.4 Berechnung von Spektren

- 4.4.1 Vorgehen
- 4.4.2 Evolution eines Spins  $I=1/2$
- 4.4.3 Detektion

- 4.4.4 Das AX System
- 4.4.5 Matrixdarstellung von Operatoren Systemen mit mehreren Spins
- 4.4.6 Direktes Produkt
- 4.4.7 FID und Spektrum für das gekoppelte Spinsystem
- 4.4.8 Berechnung ohne Matrixdarstellung