

P3 Kernphysik

2. Dezember 2009

NMR - nuclear magnetic resonance

Gruppe 58 - Saskia Meißner, Arnold Seiler

Inhaltsverzeichnis

1	Ziel des Versuchs	3
2	theoretische Grundlagen	3
2.1	Was ist NMR?	3
2.1.1	Kernspin im Magnetfeld	3
2.1.2	H^1 / Protonen Energieniveaus	3
2.1.3	Kernspinresonanz	3
2.1.4	chemische Verschiebung	4
2.1.5	Aufspaltung	4
3	experimenteller Aufbau	5
4	Durchführung des Versuchs	5
4.1	Justierung	5
4.2	Probe 5	6
4.3	Probe 1	8
4.4	Probe 2	8
4.5	Probe 8	9
4.6	Probe 3	10
4.7	Probe 9	11
5	Auswertung	12
5.1	Justierung	12
5.2	Probe 5	12
5.3	Probe 1	12
5.4	Probe 2	13
5.5	Probe 8	13
5.6	Probe 3	14
5.7	Probe 9	14

6 Anhang	16
6.1 Protokoll zu den Messungen	16
6.2 Abbildungen	17

1 Ziel des Versuchs

Die Untersuchung von organischen Verbindungen zur Aufklärung ihrer chemischen Struktur und der Stoffmengenverhältnisse in einer Probe. Dies wird mit einem NMR-Spektrometer für Protonen im CW-Verfahren erreicht. Es wird die Lage der Wasserstoffatome im Spektrum in Flüssigkeiten gemessen, wodurch ermittelt werden kann, wie diese chemisch gebunden sind.

2 theoretische Grundlagen

2.1 Was ist NMR?

2.1.1 Kernspin im Magnetfeld

Der Kern eines Atoms besteht aus Protonen und Neutronen, die je einen Spin $\frac{1}{2}$ haben. Besteht ein Kern nun aus einer ungeraden Zahl Neutronen oder Protonen, hat auch der Kern einen Spin und damit ein magnetisches Moment. Der Kernspin s ist von Isotop zu Isotop verschieden und hängt von der Konfiguration der Neutronen und Protonen ab. Ein Isotop eines Elements hat jedoch immer den gleichen Kernspin s .

Der Kernspin ist durch den Landé-Faktor g mit dem magnetischen Moment verknüpft $\vec{\mu} = g \cdot \mu_K \cdot \frac{\vec{I}}{\hbar}$ wobei μ_K das Kernmagneton, also der Betrag des normalen magnetischen Moment des Proton ist. In diesem Versuch ist nur wichtig, dass ein Zusammenhang $\vec{\mu} = \gamma \cdot \vec{I}$ zwischen dem Spin \vec{I} und dem magnetischen Moment $\vec{\mu}$ besteht und dass die Konstante γ vom Element und dem Isotop abhängig ist.

Legt man nun ein äußeres Magnetfeld \vec{B} an, legt man damit eine Quantisierungsachse z für den Kernspin fest und die z -Komponente des Spin und damit das magnetische Moment richtet sich so aus, dass die Energie $E = \vec{\mu} \cdot \vec{B}$ minimal wird. Die z -Komponente kann nur $2I+1$ diskrete Werte $|\vec{I}_z| = \hbar m_s$ annehmen, die im Bereich $m_s \in \{-I; -I+1; \dots; I-1; I\}$ liegen. Die Energie bezüglich eines äußeren Magnetfeldes in z -Richtung ist dann $E = -\gamma \hbar m_s B$ und hängt vom Betrag des äußeren Magnetfeldes B ab.

2.1.2 H^1 / Protonen Energieniveaus

Da in dem Versuch ein Spektrometer benutzt wird, das eine Resonanzfrequenz im Bereich von 60Mhz nachweisen kann (das EM-360-A Varian), werden wir in diesem Versuch nur den Kernspin von Protonen messen. Protonen bzw. H^1 -Kerne haben Spin $\frac{1}{2}$ und die z -Komponente kann daher nur $m_z = +\frac{1}{2}$ oder $-\frac{1}{2}$ werden. Es gibt also nur zwei verschiedene Energieniveaus, die von den Protonen eingenommen werden können. Die Energien der Zustände $E_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \hbar \gamma B$ hängen auch von der Stärke des äußeren Magnetfeldes ab. Da $\Delta E = E_+ - E_- = \gamma \hbar B \approx 4 \cdot 10^{-26} J \approx 2,5 \cdot 10^{-7} eV$ sehr klein ist, sind beide Zustände bei Raumtemperatur nahezu gleich besetzt: Vergleicht man die Anzahl der Kerne im energetisch höheren Niveau N_{\uparrow} mit der Zahl der Kerne im niedrigeren Energieniveau N_{\downarrow} , so erhält man $\frac{N_{\uparrow}}{N_{\downarrow}} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \approx 0,9999904$ ².

2.1.3 Kernspinresonanz

Da der Spin sich bei einem Übergang von E_- nach E_+ um $\Delta m_s = \pm 1$ ändert, sind optische Übergänge zwischen den Energien möglich. Die benötigte Photonenenergie $\hbar \omega = \Delta E \approx 2,5 \cdot 10^{-7} eV$ ergibt gerade die Resonanzfrequenz unseres Spektrometers $f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\Delta E}{h} \approx 6 \cdot 10^7 \frac{1}{s} = 60 MHz$. Damit die magnetische Komponente der Photonen an das magnetische Moment der

¹Quelle: „Protonen-Kernspinresonanz“, Wissenschaftliche Arbeit im Fach Physik von Patric Grube

²Quelle: wie 1)

Kerne koppeln kann, muss sie senkrecht zum äußeren, statischen Magnetfeld polarisiert sein. Die Kreisfrequenz ω wird auch Larmorfrequenz genannt.

Strahlt man nun elektromagnetische Strahlung passender Frequenz und Polarisierung ein, so wird ein Teil der Strahlung von der Probe absorbiert und wieder in alle Raumrichtungen gleichermaßen emittiert. Misst man nun z.B. die Transmission durch die Probe (die im Bereich der verwendeten Wellenlänge transparent sein muss) bei leicht variierten Frequenzen, so kann man sehr genau die Energiedifferenz ΔE messen. Dies wird als CW (continuous wave, kontinuierliche) Kernspinresonanz bezeichnet, man kann jedoch auch die Stärke des Magnetfeldes ändern und die Frequenz dabei konstant lassen - in diesem Versuch wird jedoch ein CW-Kernspinresonanzgerät verwendet.

2.1.4 chemische Verschiebung

Durch die Elektronen um den Kern wird das äußere Magnetfeld am Kernort abgeschwächt, was sich auf die Energie $\Delta E = \gamma \hbar B$ auswirkt. Je nach chemischer Umgebung des Wasserstoffatoms geschieht dies mehr oder weniger stark. Daher kann man unterscheiden, an welchen Partner das H-Atom gebunden ist.

Da die chemische Verschiebung sehr klein ist, definiert man ein handhabbares Maß δ . Die Abschwächung des Magnetfeldes lässt sich wie folgt ausdrücken: $\Delta E_{shift} = \gamma \hbar (B - \delta B) = (1 - \delta) \gamma \hbar B$ woraus $\delta = -\frac{\Delta E_{shift} - \gamma \hbar B}{\gamma \hbar B} = \frac{\Delta E_{shift} - \Delta E_{ref}}{\Delta E_{ref}}$, wobei ein Referenzpunkt im Spektrum ΔE_{ref} benötigt wird. Hierfür verwendet man gerne TMS (Tetramethylsilan, $Si(CH_3)_4$), das nur ein scharfes Signal, welches in der Regel getrennt von den anderen Signalen liegt, besitzt. Da δ immer noch sehr klein ist, gibt man es in parts per million (ppm) an, was $1 ppm = 10^{-6}$ entspricht.

Sind zwei Protonen chemisch identisch gebunden, so wie die 2 H-Atome in H_2O , so haben beide die gleiche chemische Verschiebung. Sind sie chemisch unterschiedlich gebunden, so wie in CH_3OH das H-Atom beim Sauerstoff eine andere Bindung besitzt als die beim Kohlenstoff, so haben sie verschiedene Verschiebungen.

2.1.5 Aufspaltung

Die einzelnen Linien, die durch die chemische Verschiebung entstehen, sind oft in mehrere, nahe beieinander liegende Peaks aufgespalten. Dies liegt daran, dass die Spins der Protonen miteinander wechselwirken. In Flüssigkeiten geschieht dies innerhalb eines Moleküls und wird durch die Elektronen vermittelt. Daher koppeln nur nahe beieinander liegende Kerne miteinander.

Wechselwirken nun chemisch äquivalente Kerne miteinander, so überlagern sich die Spektren. Zwei Protonen können so zu einem Triplett aufspalten, drei zu einem Quartett usw. Die Höhenverhältnisse verhalten sich dann beim Triplett 1:2:1, beim Quartett 1:3:3:1 usw. (die Zahlen im Pascalschen Dreieck).

Koppeln jedoch chemisch verschiedene Kerne aneinander, so überlagern sich die Spektren nicht, sondern es entstehen getrennte Aufspaltungen. Bei zwei Protonen entstehen so zwei Dubletts (ein Dublett-Dublett), bei drei Protonen zwei Triplets usw.

3 experimenteller Aufbau



Abbildung 1: Varian EM360 - das in diesem Versuch verwendete Spektrometer

3

Die Probe wird in ein möglichst homogenes Magnetfeld gebracht und dort mit einem Sender mit den benötigten Photonen bestrahlt. Typischerweise liegen die verwendeten Frequenzen im Radiobereich, in diesem Versuch bei 60Mhz. Nun kann entweder die Transmission durch die Probe oder die Streustrahlung messen. Ein Peak (positiv oder negativ) erlaubt es, den Energieunterschied ΔE zu berechnen.

4 Durchführung des Versuchs

Vor jeder Messung wird die Probe, die sich in einem dünnen Glasröhrchen befindet, mit einer Kunststoffhalterung in die Messöffnung eingelassen. Da in der Messöffnung ständig Pressluft eingblasen wird, rotiert das Glasröhrchen durch die Kunststoffhalterung um seine Längsachse. Durch die Rotation wird die gesamte Probe im zeitlichen Mittel die selbe Feldstärke durchlaufen.

Die Korrekturfelder zu dem Permanentmagneten haben wir nicht verändert, unter anderem da die entsprechenden Regler nur mit Werkzeug zu bedienen sind.

4.1 Justierung

Zunächst wird das Spektrometer mit H_2O justiert, da dieses nur einen scharfen Peak besitzt. Die verschiedenen Parameter des Spektrometers werden so eingestellt, dass der Peak ohne Unterschwingung möglichst symmetrisch und schmal aufgezeichnet wird. Die Einstellung „Phase“ hat auf großen Einfluß auf die Symmetrie, während die Einstellungen „sweep controls“ das Spektrum auf der Frequenz-Achse verschieben (end of sweep & sweep zero) bzw. die Auflösung ändern (sweep width). Das Rauschen lässt sich, vor allem bei stark vergrößerter Amplitude (spektrum

³Quelle: <http://www.labusednmr.com/prod01.htm>

amplitude coarse & fine), durch erhöhen der Mittelungs-Zeit (filter) und dadurch bedingt auch durch erhöhen der Messzeit (sweep time), besser unterdrücken.

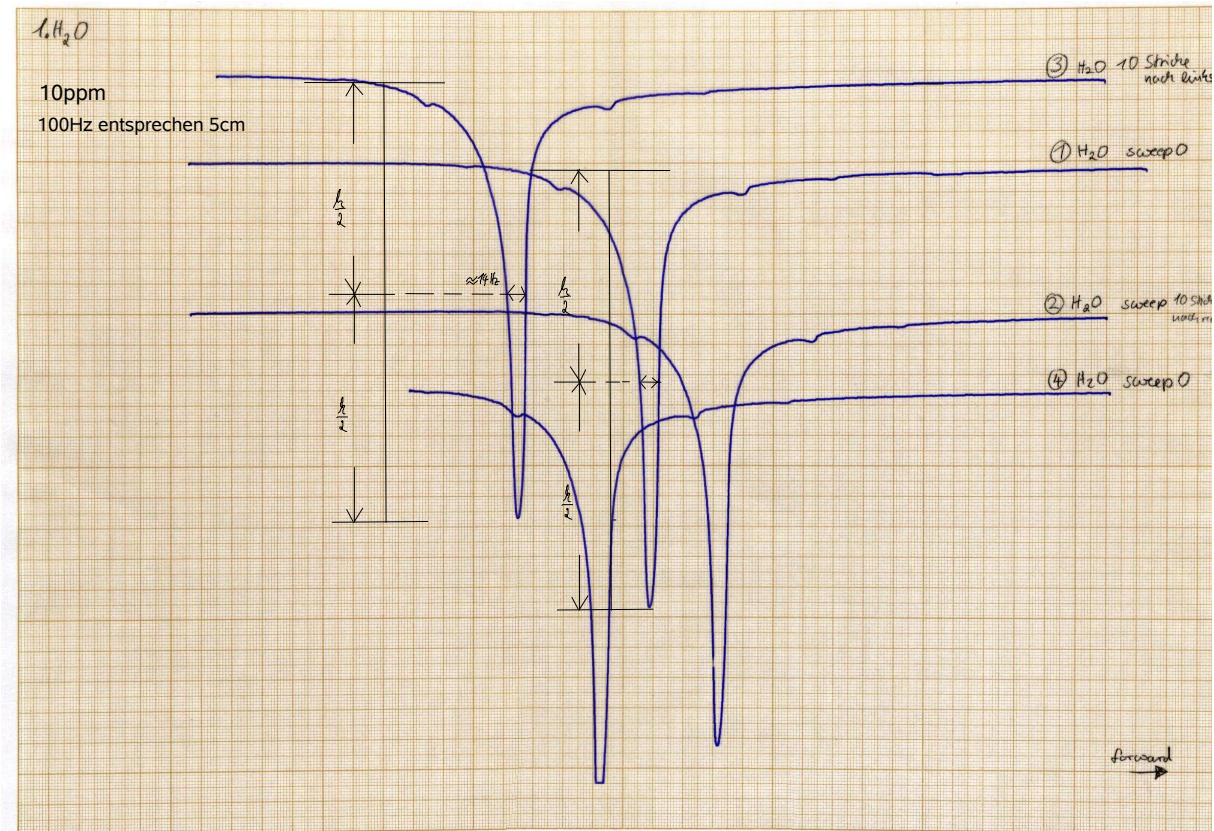


Abbildung 2: NMR Kalibrierung mit H_2O

Mehrere Spektren wurden gemessen, um die Frequenz-Achse zu kalibrieren, da die Verschiebung durch Einstellen ja bekannt ist. Leider hat die Feineinstellung offensichtlich eine Hysterese, weshalb das Zurückstellen nicht die gleiche Kurve reproduziert. Dieses Verfahren ist daher zur Eichung ungeeignet. Im Lauf des Versuchs konnten wir anderen Versuchsprotokollen, unter anderem aus der Vorbereitungsmappe, eine Eichung entnehmen.

Die FWHM (full width at half maximum) ist mit 14Hz etwa doppelt so breit, wie erwartet. Das kann ein Hinweis darauf sein, dass das Magnetfeld am Ort der Probe nicht sehr homogen ist, was das Spektrum natürlich aufweitet. Es kann jedoch auch sein, dass das Spektrometer nicht optimal eingestellt ist.

In der Vorbereitung ist der H_2O -Peak bei $350 Hz \approx 5,8 ppm$ mit 7 Hz Breite. Als Referenzfrequenz wurden ca. 60MHz verwendet (es sind mehrere Angaben von ν und δ gegeben - dann ist $\nu_{Ref} = \frac{\nu}{\delta} \in [58,6; 60] MHz$).

4.2 Probe 5

Nach etlichen Versuchen, symmetrische Peaks zu erhalten, haben wir die folgenden Spektren aufgezeichnet. Bei dem ersten wurden die Peaks leider abgeschnitten, weshalb ein zweites Spektrum aufgenommen wurde.

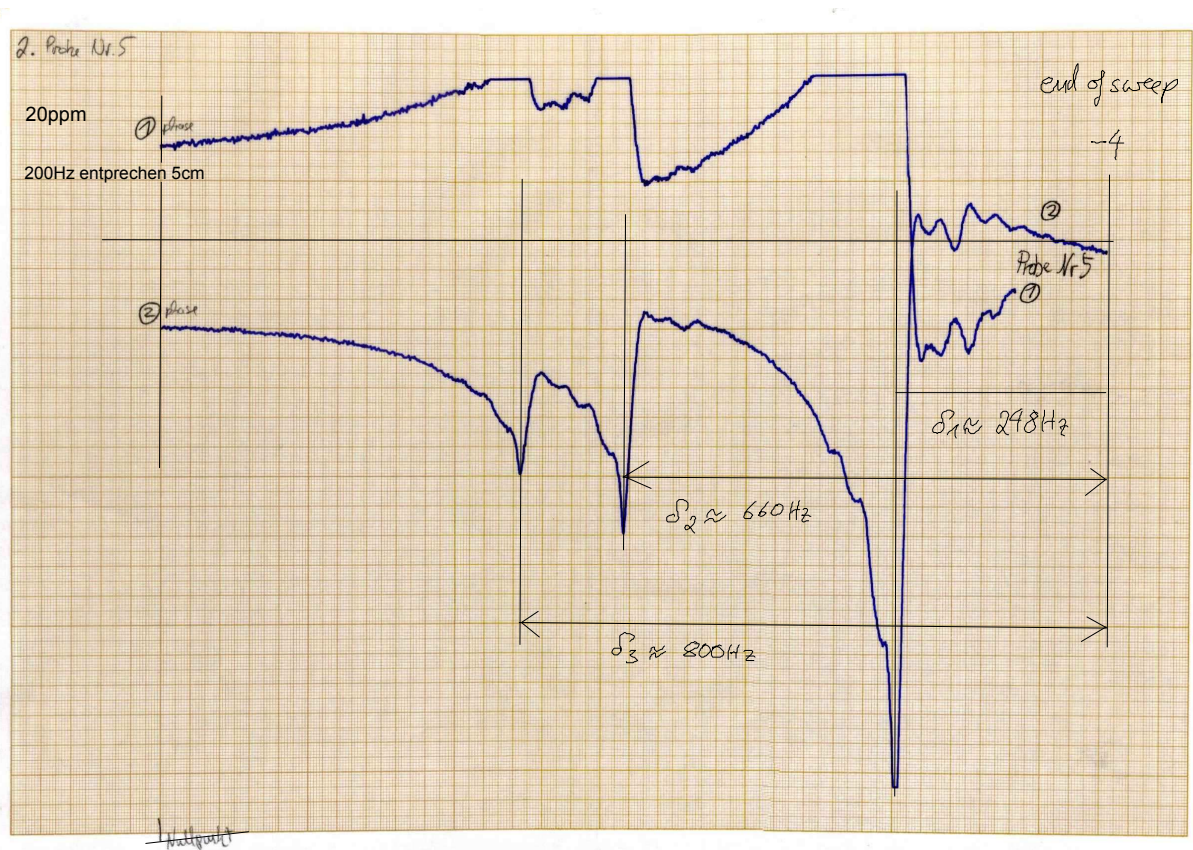


Abbildung 3: NMR der Probe 5

Hier fand sich keine vernünftige Einstellung der Phase, um symmetrische Peaks zu erhalten. Die eine Messung hat die Peaks nach oben, die zweite mit der gleichen Phaseneinstellung wie bei H_2O nach unten.

4.3 Probe 1

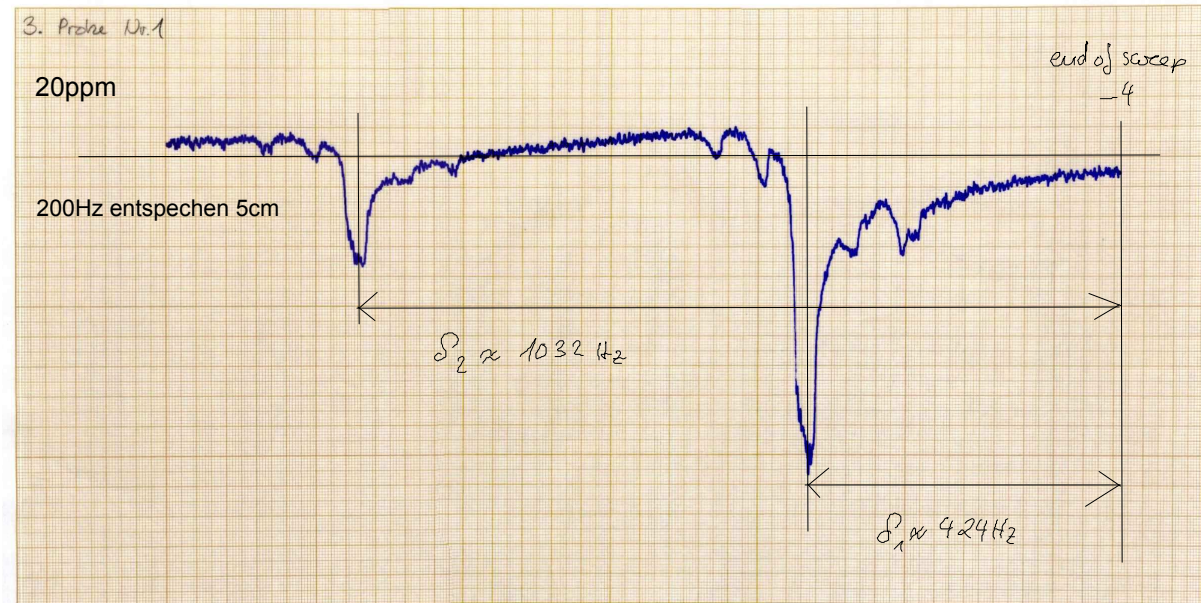


Abbildung 4: NMR der Probe 1

Auch hier sind die Peaks nicht optimal symmetrisch, jedoch lässt sich auch eine Substruktur erkennen.

4.4 Probe 2

Hier war zunächst gar kein Signal zu erkennen, nachdem die Verstärkung (spektrum amplitude coarse & fine) von 100 auf 30000 erhöht wurde, konnte dieses stark verrauschte Spektrum aufgenommen werden.

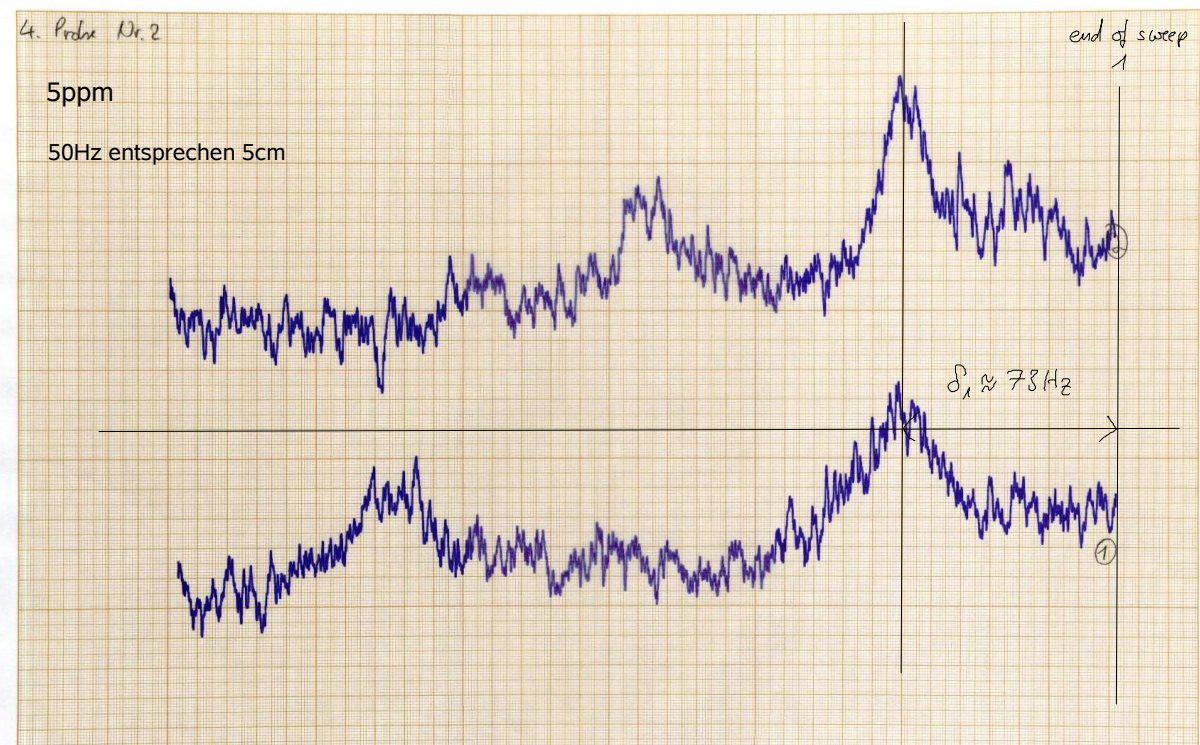


Abbildung 5: NMR der Probe 2

Da nur der rechte Peak auf beiden Spektren auftaucht, handelt es sich dabei wohl um mehr als eine Fluktuation.

4.5 Probe 8

Nach der Kalibrierung ist dies die Probe mit dem am besten erkennbaren Spektrum.

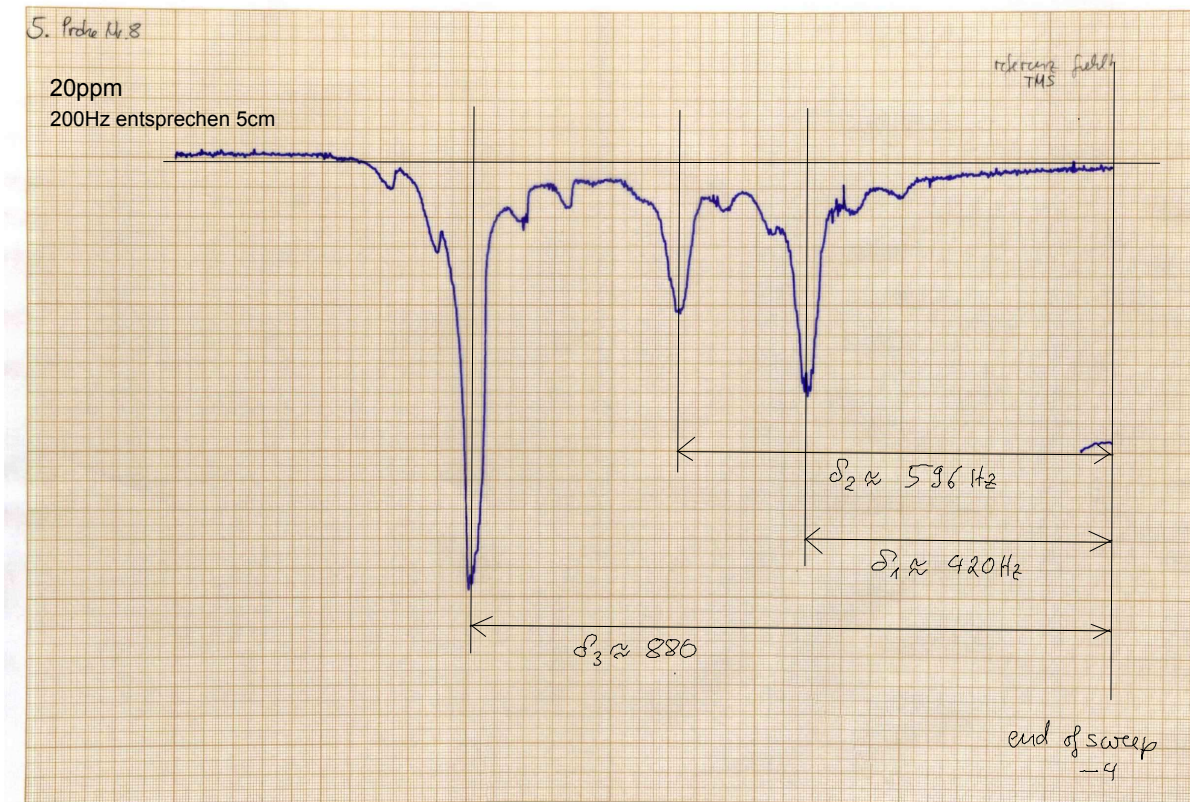


Abbildung 6: NMR der Probe 8

Es sind drei Peaks zu sehen, jedoch keine offensichtliche Aufspaltung. Die kleinen Erhöhungen neben den Hauptmaxima können auch Seitenbanden von der RF-Elektronik sein und sind für eine Aufspaltung des Spektrums viel zu klein. Ein ähnlicher Effekt war auch schon bei der Kalibrierung mit H_2O zu sehen.

4.6 Probe 3

Auch hier war zunächst kaum ein Signal zu erkennen, die oberen beiden Spektren halfen bei der Einstellung des richtigen Bereichs. Bei starker Verstärkung wurde folgendes Spektrum aufgenommen.

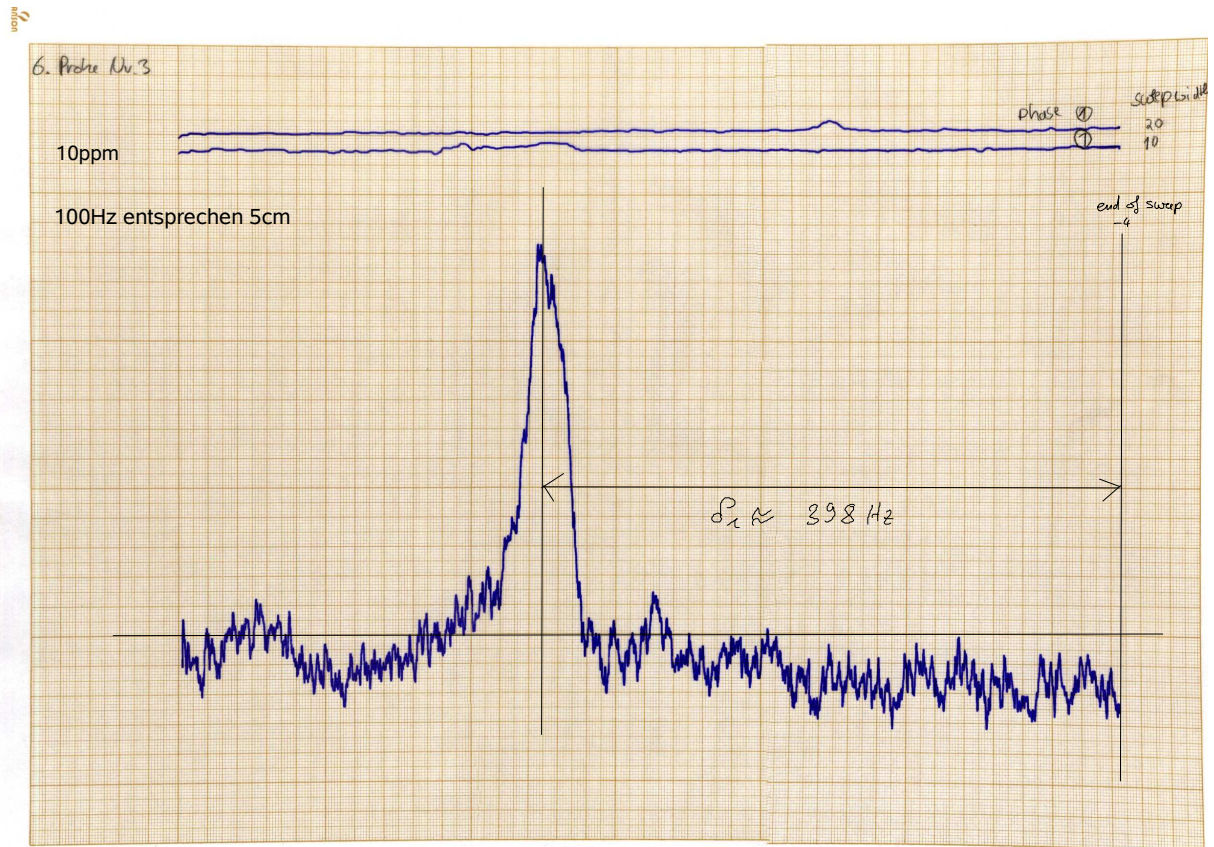


Abbildung 7: NMR der Probe 3

Bei dem Peak handelt es sich offensichtlich nicht nur um eine Fluktuation, allerdings macht es wenig Sinn, die Breite ausmessen zu wollen.

4.7 Probe 9

Hier war schlicht nichts zu sehen, auch ein Erhöhen der Verstärkung wäre sinnlos gewesen, da nicht einmal ein Ansatz eines Peaks wie in 4.6 erkennbar ist.

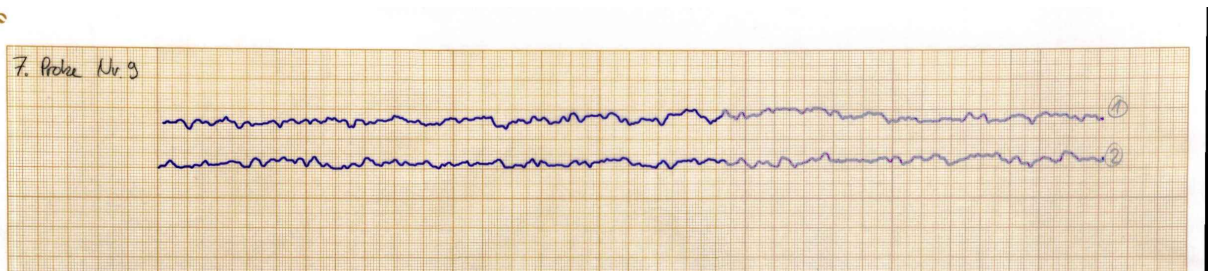


Abbildung 8: NMR der Probe 9

Die Substanz hat entweder keinen Peak im Messbereich des Spektrometers oder ist nur noch in nicht messbaren Mengen vorhanden.

5 Auswertung

5.1 Justierung

Da wir an den Feldeinstellungen nichts verändern konnten, mussten wir uns hauptsächlich auf die Einstellung der Phase beschränken. Diese konnte auch so eingestellt werden, dass der Peak symmetrisch wird. Auf die Breite hatten wir so jedoch keinen Einfluss.

5.2 Probe 5

Das Spektrum enthält drei Peaks, die möglicherweise Aufgespalten sind, was jedoch nicht eindeutig erkennbar ist. Als Referenzfrequenz wird $\nu_{Ref} = 60\text{MHz}$ verwendet, die eingezeichneten Frequenzen beziehen sich auf die Einstellung „end of sweep“, weshalb man von den erhaltenen Verschiebungen δ_x noch $\delta_{ref} = -4\text{ppm}$ addieren muss: $\delta_x = \frac{\nu_x}{60\text{MHz}} + \delta_{ref} = \frac{\nu_x}{60\text{MHz}} - 4\text{ppm}$

- $\nu_1 = 248\text{Hz} \implies \delta_1 = 0,1\text{ppm}$

- $\nu_2 = 660\text{Hz} \implies \delta_2 = 7\text{ppm}$

- $\nu_3 = 800\text{Hz} \implies \delta_3 = 9,3\text{ppm}$

Probe 5 enthält laut Vorbereitung CHCl_3 (Trichlormethan) mit $\delta_2 = 5,35\text{ppm}$ und CH_2Cl_2 (Dichlormethan) mit $\delta_3 = 7,35\text{ppm}$.

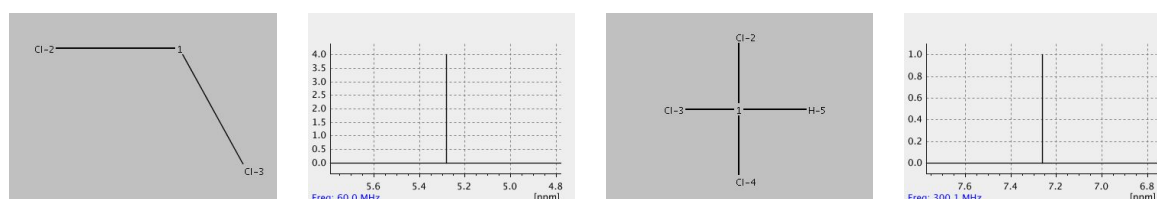


Abbildung 9: Dichlormethan und Trichlormethan: Bild und Spektrum (NMRShiftDB)

Die NMRShiftDB⁴ enthält für Trichlormethan den Peak $\delta_1 = 7,26\text{ppm}$ (1: CH) und für Dichlormethan $\delta_1 = 5,28\text{ppm}$ (1: CH_2).

5.3 Probe 1

Das Spektrum enthält zwei Peaks, auch hier sind mögliche Aufspaltungen nicht eindeutig zu erkennen. Die Frequenzen beziehen sich auf „end of sweep“ bei $\delta_{ref} = -4\text{ppm}$, daher ist $\delta_x = \frac{\nu_x}{60\text{MHz}} + \delta_{ref}$

- $\nu_1 = 424\text{Hz} \implies \delta_1 = 3,1\text{ppm}$

- $\nu_2 = 1032\text{Hz} \implies \delta_2 = 13,2\text{ppm}$

Probe 1 enthält laut Vorbereitung CH_3COOH (Essigsäure), wobei die CH_3 -Gruppe einen Peak bei $\delta_1 = 2\text{ppm}$ und die COOH -Gruppe einen Peak bei $\delta_2 = 11,24\text{ppm}$ erzeugt.

Unsere Messung stimmt erstaunlich gut mit diesen Werten überein, die Probe enthält wohl tatsächlich Essigsäure, jedoch kein TMS, da bei $\delta \approx 0\text{ppm}$ ist kein Peak zu erkennen. Möglicherweise ist das TMS bereits entwichen, was bei einem Siedepunkt von 26°C durchaus möglich ist, die Essigsäure mit ihrem Siedepunkt von 128°C aber noch vorhanden.

⁴Erreichbar unter <http://www.ebi.ac.uk/nmrshiftdb/portal/>

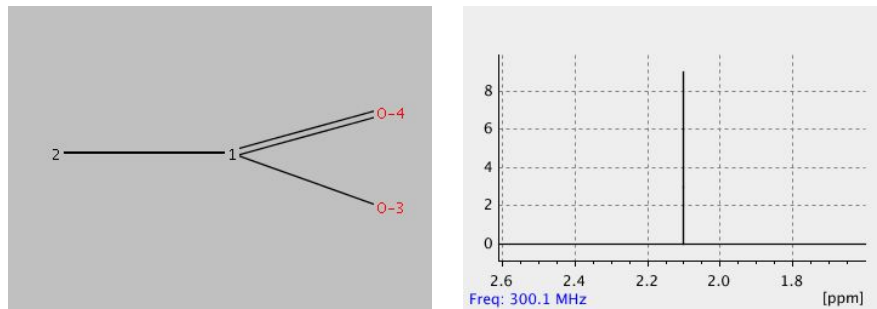


Abbildung 10: Essigsäure Bild und Spektrum (NMRShiftDB)

Die NMRShiftDB enthält für Essigsäure den Peak $\delta_1 = 2,1ppm$ (2: CH_3).

5.4 Probe 2

Das Spektrum enthält nur einen eindeutig erkennbare Peak, die Referenz ist hier $\delta_{ref} = 1ppm$.

- $\nu_1 = 78Hz \implies \delta_1 = 2,3ppm$

Laut Vorbereitung enthält Probe 2 CH_3CH_2OH (Ethanol), wobei die CH_3 -Gruppe einen Peak bei $\delta_1 = 1,1ppm$, die CH_2 -Gruppe einen Peak bei $\delta_2 = 3,15ppm$ und die OH -Gruppe einen Peak bei $\delta_3 = 4,9ppm$ erzeugt.

Von diesem Spektrum ist bei uns nicht viel zu sehen, ob der einzige sichtbare Peak nun zu der CH_3 oder zu der CH_2 -Gruppe gehört oder von einer anderen Substanz stammt, ist so auch nicht eindeutig zu sehen.

Bei genauerem Betrachten ist in dem Spektrum jeweils noch ein kleinerer Peak zu erkennen, der möglicherweise zu der CH_2 und dem OH -Gruppe passt - da die beiden Spektren jedoch nicht die selben Peaks reproduzieren, ist dies reine Spekulation.

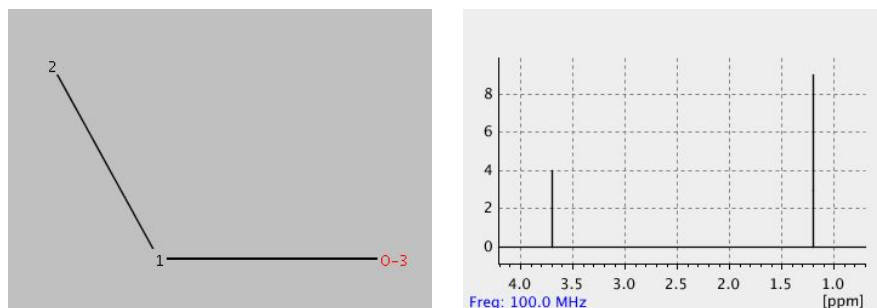


Abbildung 11: Ethanol Bild und Spektrum (NMRShiftDB)

Die NMRShiftDB enthält für Ethanol die Peaks $\delta_1 = 1,2ppm$ (1: CH_2) und $\delta_2 = 3,7ppm$ (2: CH_3).

5.5 Probe 8

Das Spektrum enthält drei Peaks, die Referenz liegt bei $\delta_{ref} = -4ppm$. Die Probe soll TMS enthalten, um einen Referenzpeak zu haben. Dieser Peak fehlt jedoch in unseren Spektren, daher verwenden wir den Nullpunkt des Spektrometers, der zumindest in der Nähe des TMS-Peaks liegen sollte. Da TMS eine leicht flüchtige Substanz ist, vermuten wir, dass unsere Proben aufgrund ihres Alters kein TMS mehr enthalten. Ähnliches gilt wohl für die Probe 2 und 9, die nur ein sehr schwaches Signal zeigen.

- $\nu_1 = 420\text{Hz} \implies \delta_1 = 3\text{ppm}$
- $\nu_2 = 596\text{Hz} \implies \delta_2 = 5,9\text{ppm}$
- $\nu_3 = 880\text{Hz} \implies \delta_3 = 10,7\text{ppm}$

Die Probe enthält laut Vorbereitung wieder Ethanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) und dazu Salzsäure (HCl). Durch die Salzsäure soll die Aufspaltung der OH-Gruppe verschwinden, die jedoch bei Probe 2 (5.4) leider nicht zu sehen war. Die Peaks sollen wieder bei $\delta_1 = 1,1\text{ppm}$ von der CH_3 -Gruppe und bei $\delta_2 = 3,66\text{ppm}$ von der CH_2 -Gruppe liegen. Auf dem Spektrum ist auch noch ein Peak bei $\delta_3 \approx 6,5\text{ppm}$ erkennbar, der jedoch nicht beschriftet ist.

Auf dem von uns aufgenommenen Spektrum sind zwar auch drei Peaks zu erkennen, jedoch nicht die typische Aufspaltung. Die chemische Verschiebung passt auch nicht direkt zu den angegebenen Werten, wobei eine Verschiebung ($\delta_{ref} \pm 1$) durchaus möglich ist. Doch selbst wenn man die ersten beiden Peaks auf die CH_3 und die CH_2 -Gruppe schiebt, passt der dritte Wert nicht besonders gut zu der OH-Gruppe.

5.6 Probe 3

Hier scheint die Stoffmenge ebenfalls sehr gering zu sein, da nur mit hoher Verstärkung ein Spektrum gewonnen werden konnte. Die Referenz liegt hier bei wieder bei $\delta_{ref} = -4\text{ppm}$.

- $\nu_1 = 398\text{Hz} \implies \delta_1 = 2,6\text{ppm}$

Laut Vorbereitung enthält Probe 3 Iso-Propanol mit einem deutlichen Peak bei $\delta_1 \approx 1,2\text{ppm}$ der wieder von der CH_3 -Gruppe kommt. Bei $\delta_2 \approx 3,8\text{ppm}$ ist ein stark aufgespaltenet Peak von der CH-Gruppe und bei $\delta_3 \approx 3,6\text{ppm}$ ein Peak von der OH-Gruppe zu erkennen.

Der von uns gemessene Peak dürfte am ehesten zu dem CH_3 -Peak passen, eine Verschiebung des Spektrums ist durchaus möglich, da wir keine Referenzsubstanz (TMS) im Spektrum erkennen und uns daher auf die Geräteskala verlassen müssen.

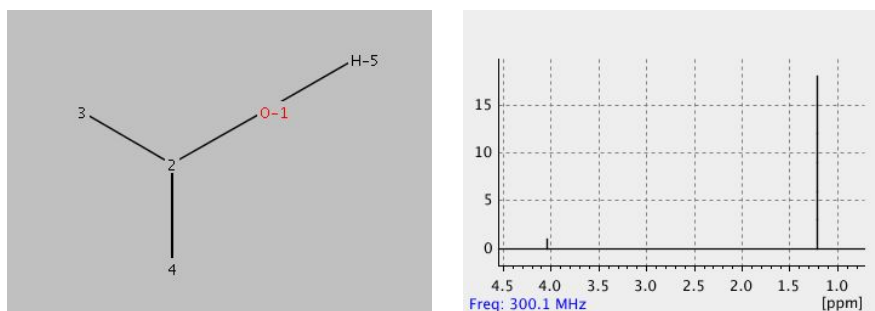


Abbildung 12: Iso-Propanol Bild und Spektrum (NMRShiftDB)

Die NMRShiftDB enthält für Iso-Propanol Peaks bei $\delta_1 = 1,22\text{ppm}$ (3 und 4: CH_3) und $\delta_2 = 4,04\text{ppm}$ (2: CH).

5.7 Probe 9

Dieses Spektrum ist nicht schwer zu interpretieren - es sind keine Resonanzen im gemessenen Frequenzbereich zu erkennen.

Laut Vorbereitung handelt es sich hier um n-Propanol, das dem Iso-Propanol recht ähnlich ist, jedoch ein deutlich verschiedenes NMR-Spektrum aufweist.

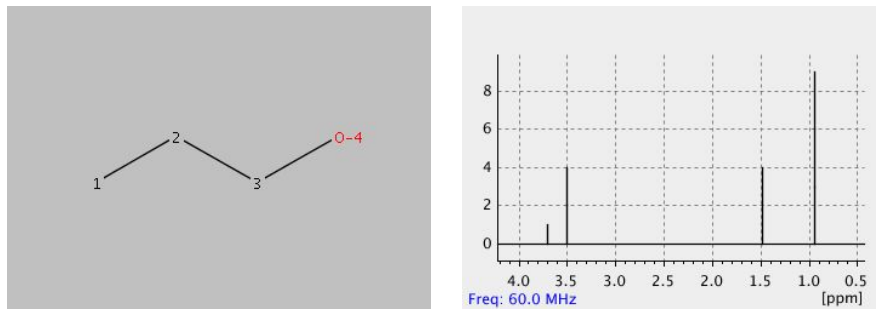


Abbildung 13: n-Propanol Bild und Spektrum (NMRShiftDB)

Die NMRShiftDB enthält für n-Propanol Peaks bei $\delta_1 = 0,94ppm$ (1: CH_3), $\delta_2 = 1,49ppm$ (2: CH_2), $\delta_3 = 3,5ppm$ (3: CH_2) und $\delta_4 = 3,71ppm$ (4: OH)

6 Anhang

6.1 Protokoll zu den Messungen

Protokoll zu den Messungen

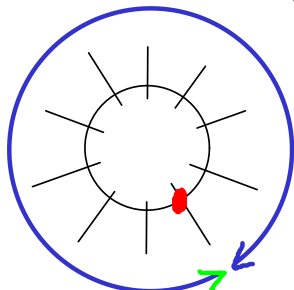
1. H₂O 2. Probe Nr.5 3. Probe Nr.1 4. Nr.2 5. Nr.8 6. Nr.3 7. Nr.3
 Spektrum Amplitude

- coarse 10 100 10 10 und 100 10
- fine ~ 8 10 30 und 28 ~ 10 ~ 10 und 30 20
- Filter 0,1 s 1 0,1 0,1 und 1 0,1

Sweep Controls

- sweep width [ppm] 10 20 20 5 20 20 und 10 20
- end of sweep [ppm] 0 -4 -4 1 -4 -4 -4 und 0
- sweep time [min] 5 0,5 und 5 0,5
- sweep zero

1 ppm = 10 Striche
 1 Umdrehung



H₂O

- 1. Messung
- 2. Messung (bezüglich 1. Messung)
- 3. Messung (bezüglich 1. Messung)

RF Field

- power [milligauss] 0,05 0,3 0,3 0,4 0,3 0,5 0,5
- Phase

Resolution

- Y
- Curvature

6.2 Abbildungen

Abbildungsverzeichnis

1	Varian EM360 - das in diesem Versuch verwendete Spektrometer	5
2	NMR Kalibrierung mit H_2O	6
3	NMR der Probe 5	7
4	NMR der Probe 1	8
5	NMR der Probe 2	9
6	NMR der Probe 8	10
7	NMR der Probe 3	11
8	NMR der Probe 9	11
9	Dichlormethan und Trichlormethan: Bild und Spektrum (NMRShiftDB)	12
10	Essigsäure Bild und Spektrum (NMRShiftDB)	13
11	Ethanol Bild und Spektrum (NMRShiftDB)	13
12	Iso-Propanol Bild und Spektrum (NMRShiftDB)	14
13	n-Propanol Bild und Spektrum (NMRShiftDB)	15