

Versuchsprotokoll:

Magnetische Kernresonanz (NMR)

Christian Buntin, Jingfan Ye

Gruppe 221

Karlsruhe, 22. November 2010

Inhaltsverzeichnis

1	Theoretische Grundlagen	2
1.1	Kernspin und magnetisches Moment	2
1.2	Kerne im Magnetfeld	2
1.3	Einfluss der Umgebung	3
1.4	Einfluss anderer Kerne	3
2	Versuchsaufbau	3
2.1	Das NMR-Gerät	3
2.2	Erfassung der Resonanzen	4
2.3	Skala	4
2.4	Intensitäten	4
3	Versuchsdurchführung	4
3.1	Justierung des Magnetfelds	4
3.2	Aufnahme der Spektren	5
4	Auswertung	5
4.1	Spektrum 1: Homo Adjust	5
4.2	Spektrum 2: Dichlor- und Trichlormethan	5
4.3	Spektrum 3: Essigsäure	6
4.4	Spektrum 4: Ethanol	6
4.5	Spektrum 5: Ethanol mit Salzsäure	6
4.6	Spektrum 6: Iso-Propanol	7
4.7	Spektrum 7: n-Propanol	7
4.8	Kopplungskonstante	8
4.9	Strukturformeln	8
4.10	Fazit	8

Einleitung

Magnetische Kernresonanz (engl. *Nuclear Magnetic Resonance* bzw. *NMR*) spielt insbesondere in der Chemie eine große Rolle, da mithilfe dieser der Aufbau von Molekülen untersucht werden kann. Mit diesem Versuch soll eine Einführung in diese Thematik gegeben werden.

1 Theoretische Grundlagen

1.1 Kernspin und magnetisches Moment

Atomkerne besitzen einen mechanischen Drehimpuls \vec{I} , welcher gequantelt ist:

$$|\vec{I}| = \hbar \sqrt{I(I+1)}, \quad (1.1)$$

mit der Quantenzahl I , welche ganz- oder halbzahlig ist, sich aber nicht berechnen lässt.

Wie auch bei Elektronen ist nur eine Komponente beobachtbar:

$$(\vec{I})_z = m_I \hbar, \quad (1.2)$$

wobei m_I Werte von I bis $-I$, mit einer Differenz von 1 annehmen kann.

Mit dem Drehimpuls ist wie beim Elektron ein magnetisches Moment μ_I verbunden, welches proportional zum Drehimpuls ist:

$$\vec{\mu}_I = \frac{g_I \mu_k}{\hbar} \vec{I}, \quad (1.3)$$

mit dem Kernmagneton $\mu_k = \frac{e}{2m_p} \hbar$, der Protonenmasse m_p und dem Kern-g-Faktor g_I des Atomkerns.

Auch von diesem magnetischem Moment lässt sich – wieder analog zum Elektron – nur die Komponente in einer Vorzugsrichtung beobachten:

$$(\vec{\mu}_I)_z = g_I \mu_k m_I \quad (1.4)$$

1.2 Kerne im Magnetfeld

Wird am Kern ein äußeres Magnetfeld \vec{B}_0 angelegt, so richtet sich die z-Komponente des magnetischen Moments $\vec{\mu}_I$ nach diesem aus. Die einzelnen $(\vec{I})_z$ -Zustände des Kerns spalten sich in die Energiezustände der verschiedenen Werte von m_I (Gleichung (1.4)) auf, deren Differenz nur von der Stärke B_0 des angelegten Magnetfelds abhängt:

$$E = -(\vec{\mu}_I)_z B_0 = -m_I B_0 g_I \mu_k \quad \Rightarrow \quad \Delta E = g_I \mu_k B_0 \quad (1.5)$$

Wie diese Energieniveaus besetzt sind, gibt uns die Boltzmann-Verteilung an. Eine erste Näherung für diese erhält man durch Taylorentwicklung:

$$\frac{N_b}{N_a} = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \approx 1 - \frac{\Delta E}{k_B T} = 1 - \frac{g_I \mu_k B_0}{k_B T} \quad (1.6)$$

Da die beobachteten Energiedifferenzen ΔE sehr klein sind, ist der Unterschied in der Besetzung in der Größenordnung 10^{-6} .

Wird der Kern nun mit elektromagnetischen Wellen der Energie $h\nu$, welche senkrecht zum Feld \vec{B}_0 polarisiert sind, bestrahlt, so tritt Resonanz auf, wenn gilt:

$$h\nu = \Delta E = g_I \mu_k B_0 \quad (1.7)$$

In diesem Falle werden Übergänge zwischen diesen Niveaus angeregt, wobei die Absorption der Wellen aufgrund der Boltzmann-Verteilung überwiegt.

1.3 Einfluss der Umgebung

Da Kerne in aller Regel von Elektronen oder auch von anderen Kernen umgeben sind, ist deren Auswirkung auch zu berücksichtigen. Diese äußeren Einflüsse haben in Summe zur Folge, dass das Magnetfeld B_{eff} , welches auf den Kern wirkt, um σB_0 abgeschwächt wird:

$$B_{\text{eff}} = (1 - \sigma) B_0 \quad (1.8)$$

Damit ändert sich die Resonanzbedingung in Gleichung (1.7) zu:

$$h\nu = g_I \mu_k B_0 (1 - \sigma) \quad (1.9)$$

Bei der Messung der magnetischen Kernresonanz wird also die Frequenz ν variiert, bis Resonanz auftritt. Mit der dadurch bestimmten *chemischen Verschiebung* σ lassen sich Rückschlüsse auf andere Kerne oder auf spezielle Elektronenkonfigurationen ziehen, was wiederum Aufschluss über die Struktur der Probe gibt.

1.4 Einfluss anderer Kerne

Wie eben beschrieben können auch benachbarte Kerne wechselwirken. Dabei spaltet sich das jeweilige Energieniveau weiter auf, wobei die Aufspaltungsdifferenz auch indirekte Kopplungskonstante J_{AB} genannt wird, welche unabhängig vom angelegten B -Feld ist. Folgende Wechselwirkungen sind möglich (indirekte *Spin-Spin-Kopplung*):

- Koppeln zwei benachbarte, chemisch nicht identische Kerne desselben Isotops, so werden die jeweiligen Energieniveaus in Dubletten der Differenz J_{AB} aufgespalten.
- Koppeln zwei äquivalente benachbarte Kerne, so hängt die Aufspaltung von der Einstellung der Spins ab. Stehen diese gerade entgegengesetzt, so heben sie sich gerade auf. Stehen sie parallel bzw. antiparallel zum \vec{B} -Feld, so verstärken sie das Feld bzw. schwächen es ab.
- Bei mehreren äquivalenten Kernen verläuft die Bestimmung der Aufspaltungsmöglichkeiten analog.
- Wenn mehrere nicht-äquivalente Kerne koppeln, so kommt es zu weiteren Aufspaltungen, da jeder Kern mit den anderen Kernen wechselwirkt. Die Anzahl der Aufspaltungen von äquivalenten Kernen entspricht dabei der Anzahl der nicht äquivalenten Kerne plus eins.

2 Versuchsaufbau

2.1 Das NMR-Gerät

Die Versuche wurden an einem Varian EM-360-A Spektrometer durchgeführt. Dieses besteht aus einer Spulenanordnung, welche ein möglichst homogenes und konstantes Magnetfeld (etwa $B_0 =$

1,41 T) erzeugt. In dieses Magnetfeld wird die Probe gebracht, wobei diese um die eigene Achse rotiert, um das Magnetfeld zusätzlich noch zu mitteln.

Auf diese Probe ist ein Radiowellensender gerichtet, welcher Frequenzen um $\nu = 60$ MHz leicht modulierend an die Probe strahlt. Das Signal von der Probe wird daraufhin mittels eines x-y-Schreibers über der Frequenz aufgetragen.

2.2 Erfassung der Resonanzen

Die Feldstärke des Magnetfelds und die Frequenz des Radiowellensenders sind genau so gewählt, dass für einen Wasserstoffkern, also für ein Proton, der Resonanzfall (Gleichung (1.9) auf der vorherigen Seite) eintritt. Je nach Größe der jeweiligen chemischen Verschiebung des Wasserstoffkerns tritt die Resonanz allerdings bei geringfügig höheren oder niedrigeren Frequenzen auf. Auch spalten sich die Resonanzmaxima durch Wechselwirkungen mit anderen Kernen (Abschnitt 1.4 auf der vorherigen Seite) auf.

Daher wird die Frequenz in sehr geringer Größenordnung variiert, um die verschiedenen Resonanzmaxima zu erfassen.

2.3 Skala

Um eine Skala für die Lage der Resonanzmaxima zu bekommen, wird der Probe Tetramethylsilan (TMS) zugesetzt. Dieser Stoff ist chemisch inert, magnetisch isotrop, wasserunlöslich und hat aufgrund seiner 12 stark abgeschirmten Protonen nur ein einziges scharfes Signal. Damit eignet es sich hervorragend als Referenzsignal.

Damit wird nun die chemische Verschiebung δ definiert:

$$\delta = \frac{\nu_{\text{Probe}} - \nu_{\text{TMS}}}{\nu_{\text{TMS}}} = \frac{\Delta\nu}{\text{Messfrequenz}} \quad \text{mit } \nu_{\text{TMS}} = \text{Messfrequenz} \quad \text{und } \delta(\text{TMS}) = 0 \quad (2.1)$$

Dieses Delta wird üblicherweise in Millionstel Teilen, also in „parts per million“ (ppm) angegeben.

2.4 Intensitäten

Um die Häufigkeiten der Kernanordnungen, welche die zugehörigen Resonanzsignale erzeugen, zu bestimmen, werden die Intensitäten der verschiedenen Resonanzmaxima verglichen. Diese sind durch die Fläche unter der Signalkurve gegeben. Diese kann auch grob über die Höhe der Resonanzsignale abgeschätzt werden.

3 Versuchsdurchführung

3.1 Justierung des Magnetfelds

Zu Beginn musste zunächst das Magnetfeld des Gerätes justiert werden. Da die Genauigkeit der Messungen stark von einem möglichst homogenem Magnetfeld abhängt, ist hierbei besondere Sorgfalt vonnöten.

Dazu haben wir die Probe „Homo Adjust“ eingesetzt, den x-y-Schreiber an der Stelle des Maximums positioniert und die verschiedenen Einstellmöglichkeiten der Spulen genutzt, um das Magnetfeld weitestgehend zu optimieren, sodass das Signal maximal wird. Diese so gefundenen Einstellungen wurden während der gesamten Versuchsreihe beibehalten.

3.2 Aufnahme der Spektren

Für jede Probe wurden Maßstab und Verstärkung so eingestellt, dass das gesamte Spektrum abgebildet werden konnte. Zusätzlich wurde die Phase des Radiosignals so eingestellt, dass die Resonanzmaxima im Spektrum möglichst symmetrisch waren.

4 Auswertung

4.1 Spektrum 1: Homo Adjust

Mit dieser Messung wurde die Homogenität des eingestellten Magnetfeldes überprüft. Bei einer Breite des Resonanzsignals auf halber Ausschlagshöhe von $s = 2,9$ cm erhalten wir bei einer Gesamtbreite des Plots von $l = 32,0$ cm, welche hier $R = 0,5$ ppm entsprechen, für die Halbwertsbreite:

$$\Delta\nu_{\text{HW}} = \Delta\delta_{\text{HW}} \cdot \nu = \frac{R}{l} \cdot s \cdot \nu = \frac{0,5 \text{ ppm}}{32 \text{ cm}} \cdot 2,9 \text{ cm} \cdot 60 \text{ MHz} = 2,7 \text{ Hz} \quad (4.1)$$

Mit der Gaußschen Fehlerfortpflanzung erhalten wir hierfür einen systematischen Fehler von:

$$\delta\Delta\nu_{\text{HW}} = \sqrt{\left(\frac{\partial\Delta\nu_{\text{HW}}}{\partial R}\delta R\right)^2 + \left(\frac{\partial\Delta\nu_{\text{HW}}}{\partial l}\delta l\right)^2 + \left(\frac{\partial\Delta\nu_{\text{HW}}}{\partial s}\delta s\right)^2 + \left(\frac{\partial\Delta\nu_{\text{HW}}}{\partial \nu}\delta \nu\right)^2} \quad (4.2)$$

$$= \Delta\nu_{\text{HW}} \sqrt{\left(\frac{\delta R}{R}\right)^2 + \left(\frac{\delta l}{l}\right)^2 + \left(\frac{\delta s}{s}\right)^2 + \left(\frac{\delta \nu}{\nu}\right)^2} \quad (4.3)$$

$$= 0,098 \text{ Hz} \approx 0,1 \text{ Hz} \quad (4.4)$$

Dabei haben wir den Fehler der Skalierung R auf 1%, die Ablesefehler für l und s aufgrund der Linienbreite auf 1 mm, sowie die Genauigkeit der Frequenz auf 0,005 MHz abgeschätzt.

Mit unserem Ergebnis von $(2,7 \pm 0,1)$ Hz liegen wir deutlich unter dem Wert aus der Versuchsmappe von ca. 7 Hz. Daher sollten wir später bei den Aufspaltungen der Maxima eine gute Auflösung erreichen.

4.2 Spektrum 2: Dichlor- und Trichlormethan

Dichlormethan (CH_2Cl_2 , Abbildung 1a auf Seite 8) besteht aus einem Kohlenstoffatom, umgeben von zwei Chlor- und zwei Wasserstoffatomen. Trichlormethan (CHCl_3 , Abbildung 1b auf Seite 8) hat anstatt eines Wasserstoffatoms ein Chloratom mehr. Damit unterscheiden sich die Wasserstoffatome der Moleküle voneinander, weshalb wir für jedes Molekül einen eigenen Resonanzpeak erwarten. Da im CH_2Cl_2 doppelt so viele H-Atome wie im CHCl_3 vorhanden sind, erwarten wir für den Peak von CH_2Cl_2 auch die doppelte Intensität. Dies ist im Diagramm deutlich zu erkennen. Darüber hinaus ist ganz rechts im Diagramm der Resonanzpeak des TMS zu sehen. Dessen chemische Verschiebung δ ist definitionsgemäß 0.

Mit einer Skalierung von $R = 10$ ppm erhalten wir – auch später – wie in Gleichung (4.1) eine chemische Verschiebung und damit einen Frequenzunterschied $\Delta\nu$ zum TMS

- für CH_2Cl_2 von $\delta = 5,78$ ppm $\Rightarrow \Delta\nu = 347 \pm 4,1$ Hz,
- für CHCl_3 von $\delta = 7,94$ ppm $\Rightarrow \Delta\nu = 476 \pm 5,4$ Hz.

Der systematische Fehler wurde dabei – und wird auch im Folgenden – wie in Gleichung (4.3) auf der vorherigen Seite mit entsprechendem R und s berechnet.

Die Position des Maximums eines Peaks liegt immer weiter links als dessen Schwerpunkt, allerdings scheint dies bei jedem Peak gleich zu sein, sodass dieser Offset beim Bilden von Differenzen keine Rolle spielt.

4.3 Spektrum 3: Essigsäure

Essigsäure ($\text{CH}_3\text{--COOH}$, Abbildung 1c auf Seite 8) hat drei Arten von verschiedenen Wasserstoffatomen, weshalb wir hier drei Resonanzpeaks erwarten.

Da diese Atome räumlich weit voneinander weg liegen, treten keine Wechselwirkungen zwischen ihnen auf, weshalb es nicht zu Aufspaltungen kommt. In der CH_3 -Gruppe sind drei mal mehr H-Kerne als in der COOH -Gruppe vorhanden, weshalb wir hierfür eine etwa dreifach höhere Intensität erwarten. Die gemessenen Peaks sind

- für die CH_3 -Gruppe ein scharfes Resonanzsignal bei 2,83 ppm, was einer Frequenz von $\Delta\nu = 142 \pm 4,1$ Hz entspricht,
- sowie für die COOH -Gruppe ein scharfes Resonanzsignal bei 10,44 ppm, was einer Frequenz von $\Delta\nu = 626 \pm 7,6$ Hz entspricht. Dieses ist wie erwartet deutlich weniger intensiv als das der CH_3 -Gruppe.

4.4 Spektrum 4: Ethanol

Beim Ethanol ($\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--OH}$, Abbildung 1d auf Seite 8) kommt es nun zu Wechselwirkungen zwischen den 3 verschiedenen H-Kerne:

- Die CH_3 -Gruppe tritt in Wechselwirkung mit der CH_2 -Gruppe, weshalb es zu einer dreifachen Aufspaltung kommt, welche auch zu beobachten war. Dieser Peak befand sich bei 1,28 ppm, was $77 \pm 2,1$ Hz entsprach. Die OH -Gruppe ist anscheinend zu weit weg, um eine Wechselwirkung zu verursachen.
- Von der OH -Gruppe erwarteten wir Wechselwirkungen mit der CH_2 -Gruppe, allerdings ließ sich keine Aufspaltung feststellen, es war nur ein einziger Peak zu sehen. Dieser lag bei 5,78 ppm $\hat{=}$ $347 \pm 4,1$ Hz. Möglicherweise ist diese Gruppe weit genug von den anderen Gruppen entfernt, um keine Wechselwirkungen auszulösen.
- Da für die CH_2 -Gruppe sowohl die CH_3 -Gruppe als auch die OH -Gruppe in Reichweite lagen, haben wir eigentlich eine fünffache Aufspaltung erwartet. Allerdings waren nur 4 Peaks zu erkennen. Daher nehmen wir an, dass die OH -Gruppe hier keine Wechselwirkung erzeugt, da an deren Peak auch keine Aufspaltungen sichtbar waren. Somit würden die vier sichtbaren Peaks von der CH_3 -Gruppe stammen. Der Mittelpunkt dieser Peaks liegt dabei bei 3,97 ppm, was $238 \pm 3,2$ Hz entspricht.

4.5 Spektrum 5: Ethanol mit Salzsäure

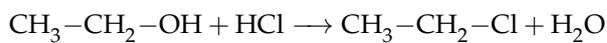
Im Gegensatz zur letzten Probe wurde hier noch Salzsäure (HCl) hinzugefügt. Der Vergleich mit dem letzten Diagramm ergibt:

- Die CH_3 -Gruppe spaltet auf wie zuvor beschrieben. Der Peak befand sich nun bei 1,38 ppm bzw. $82 \pm 2,1$ Hz. Dies entspricht grob dem Wert aus dem letzten Diagramm.

- Die CH_2 -Gruppe spaltet wieder nur vierfach auf. Der Peak befindet sich hier bei 4,09 ppm, was $246 \pm 3,2$ Hz entspricht. In etwa ist dies auch der Wert im letzten Diagramm.
- Der Peak, welcher im letzten Diagramm durch die OH-Gruppe erzeugt wurde, fehlt nun ganz.
- Stattdessen ist bei 8,50 ppm ($510 \pm 5,7$ Hz) ein scharfer Peak zu sehen. Dieser stammt vermutlich von der Salzsäure. Denn da der OH-Peak nicht mehr zu sehen ist, muss die OH-Gruppe komplett durch die Salzsäure entfernt werden, wozu ein großer Überschuss von dieser erforderlich ist. Damit ist auch die große Intensität dieses Peaks zu erklären.

Unglücklicherweise überlagern sich die Peaks der CH_3 -Gruppe und der CH_2 -Gruppe nicht mal mit ihren Fehlerbereichen mit den Peaks aus der reinen Ethanolmessung, obwohl wir bei diesem Gruppen sozusagen zweimal das gleiche gemessen haben. Vermutlich liegt das daran, dass das Gerät bei jeder Messung um einen nicht abschätzbaren Wert entlang der x-Achse driftet, was wir bei der Fehlerkalkulation nicht quantitativ berücksichtigen konnten. Im Fazit wird dieser Fehler noch genauer erläutert.

Die OH-Gruppe wurde also durch eine *nukleophile Substitution* vom Ethanol entfernt:



Damit ist zu erklären, warum wir die OH-Gruppe nicht nachweisen konnten. Das Reaktionsprodukt Wasser konnten wir allerdings auch nicht erkennen.

4.6 Spektrum 6: Iso-Propanol

Iso-Propanol (Abbildung 1e auf der nächsten Seite) besitzt drei Arten von H-Atomen:

- Die beiden CH_3 -Gruppen sollten nur mit der CH-Gruppe in der Mitte wechselwirken. Damit wird eine zweifache Aufspaltung erwartet. Da Insgesamt 6 gleichartige H-Kerne beteiligt sind, sollte dieser Peak im Vergleich zu den anderen eine sehr hohe Intensität zeigen. Dieser Peak findet sich im Diagramm bei 1,25 ppm $\hat{=} 75 \pm 2,1$ Hz, auch die zweifache Aufspaltung ist wie erwartet zu sehen.
- Die CH-Gruppe sieht die 6 H-Atome der CH_3 -Gruppe, sowie das H-Atom der OH-Gruppe, was zu einer achtfachen Aufspaltung führen sollte. Allerdings sind im Diagramm mit Mühe nur sieben Peaks zu erkennen. Möglicherweise ist hier, wie auch bei den vorherigen Proben, das H-Atom der OH-Gruppe zu weit von der CH-Gruppe entfernt, um für Aufspaltungen zu sorgen. Dann stammt die beobachtete siebenfache Aufspaltung von den verbleibenden 6 Atomen der beiden CH_3 -Gruppen. Diese Aufspaltungen befinden sich bei 4,31 ppm, was $259 \pm 3,3$ Hz entspricht.
- Der OH-Peak liegt bei 5,41 ppm $\hat{=} 324 \pm 3,9$ Hz. Dieser zeigt keinerlei Aufspaltung, weshalb wohl keine Wechselwirkungen mit der CH-Gruppe vorliegen.

4.7 Spektrum 7: n-Propanol

n-Propanol ($\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$, Abbildung 1f auf der nächsten Seite) besitzt 4 verschiedene H-Atome:

- Die OH-Gruppe bei 5,53 ppm $\hat{=} 332 \pm 4,0$ Hz zeigt wie auch vorher immer beobachtet keine Aufspaltung. Daher wird auch in der benachbarten CH_2 -(2)-Gruppe keine Aufspaltung durch diese erwartet.
- Damit sind in der näheren Umgebung der CH_2 -(2)-Gruppe nur noch die beiden H-Atome der CH_2 -(1)-Gruppe, wodurch wir eine dreifache Aufspaltung erwarten. Diese Aufspaltung befindet sich im Diagramm bei 3,81 ppm bzw. $229 \pm 3,1$ Hz.

- Die CH_3 -Gruppe hat nur die CH_2 -Gruppe als Nachbarn, weshalb durch deren H-Atome eine dreifache Aufspaltung erwartet wird. Diese ist auch mit Mühe zu erkennen und liegt bei $1,00 \text{ ppm} \hat{=} 60 \pm 2,0 \text{ Hz}$.
- Die CH_2 -(1)-Gruppe liegt zwischen der CH_2 -(2)- und der CH_3 -Gruppe, weshalb eine sechsfache Aufspaltung erwartet wird. Diese ist tatsächlich im Diagramm zu erkennen, wobei man allerdings ein paar Aufspaltungen nur erahnen kann.

4.8 Kopplungskonstante

Für die Kopplungskonstante J_{AB} (Abschnitt 1.4 auf Seite 3), also den Abstand einzelner Peaks bei Mehrfachaufspaltungen, erhielten wir in allen Spektren, bei denen wir Aufspaltungen beobachten konnten, einen Wert von 11 ppm, was einer Frequenz von $7 \pm 1,9 \text{ Hz}$ entspricht.

Möglicherweise liegt dies daran, dass wir – abgesehen von einer CH-Gruppe beim Iso-Propanol – immer nur Aufspaltungen bei Wechselwirkungen von CH_3 -Gruppen mit CH_2 -Gruppen gesehen haben. Die Kopplungskonstante für Wechselwirkungen mit der CH-Gruppe des Iso-Propanols scheint sich aber auch nicht messbar davon zu unterscheiden.

4.9 Strukturformeln

Alle Strukturformeln sind den Wikimedia Commons (<http://commons.wikimedia.org>) entnommen.

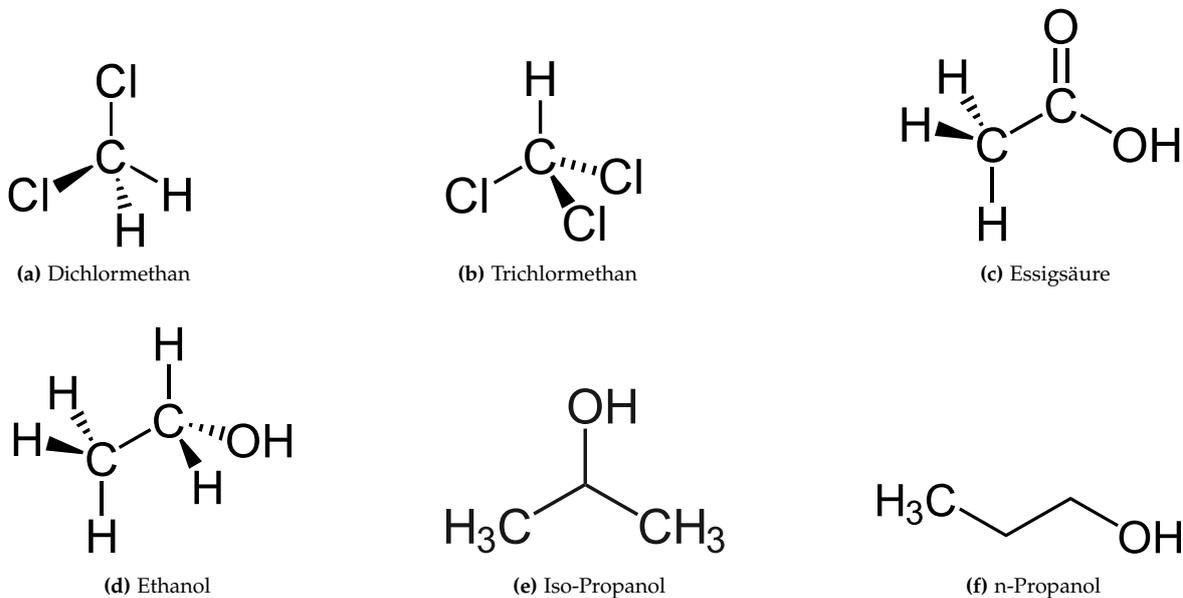


Abbildung 1: Strukturformeln

4.10 Fazit

Wir konnten mithilfe der magnetischen Kernresonanz tatsächlich die Struktur der Moleküle in den Proben bestimmen. Es war sogar eine Unterscheidung von Iso- und n-Propanol möglich, welche die

gleiche Summenformel besitzen. Somit ist diese Methode sehr gut zur Strukturbestimmung geeignet.

Allerdings hat das Gerät auch seine Tücken. Die Peaks drifteten nach und nach teilweise um einige Millimeter ab, wobei dieses Phänomen einige Tage vor unserem Versuch noch wesentlich stärker aufgetreten ist. Auch ist uns aufgefallen, dass die Grundlinie unserer Diagramme immer etwas schief ist, obwohl wir das Papier exakt ausgerichtet haben. Insgesamt kommen dadurch hohe Ungenauigkeiten zustande. Damit lässt sich auch erklären, weshalb unsere Messdaten nur sehr grob mit denen aus der Versuchsmappe übereinstimmen, welche hier daher nicht mit aufgeführt wurden.

Auch beim Ablesen traten Schwierigkeiten auf. Es ist nicht immer ersichtlich, ob ein Knick im Diagramm einen Peak darstellt oder von anderen äußeren Einflüssen herrührt. Auch war es nicht einfach, bei ausgedehnten und aufgespaltenen Peaks den Schwerpunkt zu bestimmen. Dadurch kommen auch wieder Ungenauigkeiten auf. Da sich unsere Fehlerrechnung aber nur auf die Ablesegenauigkeit von Punkten und nicht darauf, wo sich dieser Punkt befindet, bezieht, sind solche Fehler dort nicht berücksichtigt.

Dennoch konnte die Lage der Peaks immer gut den einzelnen Gruppen des Moleküls zugeordnet werden, auch die meisten erwarteten Aufspaltungen konnten beobachtet werden. Lediglich die OH-Gruppe zeigte keinerlei Wechselwirkungen mit Aufspaltungswirkung – weder bei sich noch bei benachbarten Gruppen.

Die Messung hätte sich noch durch zwei Möglichkeiten verbessern lassen können: Zum Einen könnte man das Gerät die Peaks integrieren lassen, um ein genaues Verhältnis der Anzahl der beteiligten Kerne zu erhalten. Zum Anderen hätte man einzelne Peaks noch mit höherer Verstärkung und genauerer Auflösung auf Aufspaltungen untersuchen können.

Eine andere interessante Aufgabe wäre noch gewesen, quasi als Abschluss mit all dem Vorwissen aus den vorherigen Proben, die Struktur eines unbekanntes Moleküls mit bekannter Summenformel zu untersuchen.