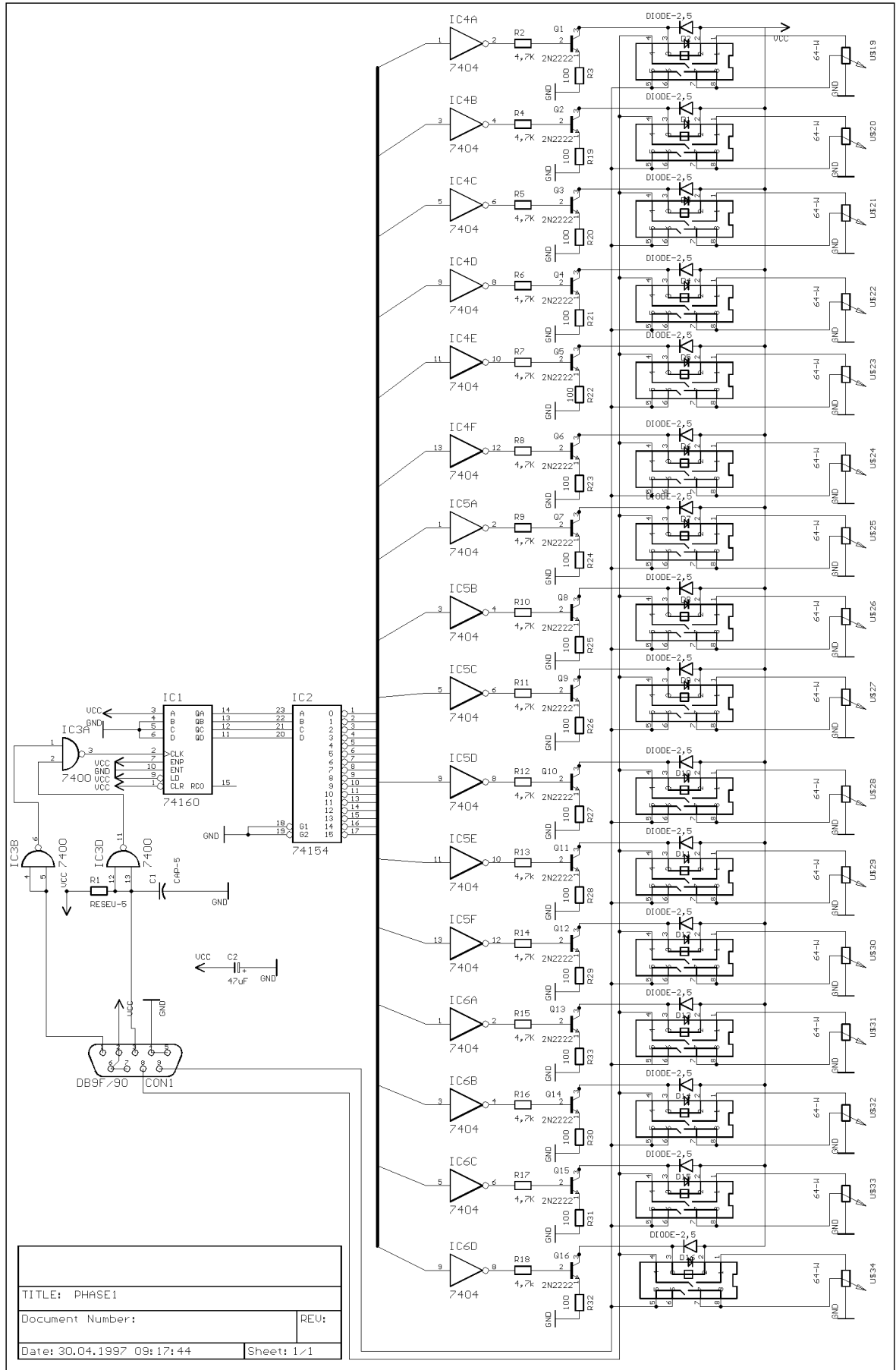


## VII. Anhang

### 7.1. Schaltbild der Gradient Unit-Modifikation

Die in Kapitel 3.3.3. beschriebene Modifikation der verwendeten Gradient Unit *Bruker Z 18B* der Firma *Bruker Meßtechnik GmbH* zur Realisation der Parallelaufnahmetechnik von PFG-NMR-Experimenten besteht im wesentlichen aus einer selbst konzipierten elektronischen Schaltung. Abbildung VII-1 zeigt das Schaltbild dieser elektronischen Schaltung, die so in die Gradient Unit eingebaut wurde, daß sie über einen extern angebrachten Schalter das manuell bedienbare 10-Gang-Potentiometer zur Einstellung der Spulenstromstärke wahlweise ersetzen kann.

*Abbildung VII-1: Schaltbild der elektronischen Schaltung zur Realisation der Parallelaufnahmetechnik für die Gradient Unit Bruker Z 18B. →*



## 7.2. Erstelltes Apple-Script-Computerprogramm

Die Durchführung der in Kapitel 3.3.3. erläuterten Parallelaufnahmetechnik zur Durchführung von PFG-NMR-Experimenten, unter Verwendung der dort beschriebenen Modifikation der „Gradient Unit“, ist mit der Computersoftware „Mac-NMR 5.5 PCI“, die das NMR-Spektrometer steuert, im Originalzustand nicht möglich. Zu diesem Zweck wurde ein Apple-Script-Programm geschrieben, das die Addition und Abspeicherung der aufgenommenen NMR-Daten in der gewünschten Art und Weise realisiert. Das Programm ist dem folgenden Abschnitt zu entnehmen.

```

tell application "MacNMR 5.5 PCI"
    activate

    Show Script Results with activating -- necessary for abort during an
    acquisition

    Get File Name -- allow user to choose file to be used
    set myGetFile to (Get File Specification) as string
    Get File Name {file myGetFile} with replacing -- replace existing file

    -- set some of the parameters
    -- Set NMR Parameter name "Auto Scale" value 1
    Set NMR Parameter name "Sequence Mode" value "Normal" -- normal for 1D

looping
    set max_2D_scans to Get NMR Parameter name "Scans 2D"
    Set NMR Parameter name "leave acq window open" value 1

    -- outer loop (1D*2D)*x
    set loop_counter_3_max to 100
    set loop_counter_3 to 1
    repeat while (loop_counter_3  $\leq$  loop_counter_3_max)

        -- inner loop 1D*2D
        Set Table Pointer "2D" value 1
        set loop_counter_2D to 1
        repeat while (loop_counter_2D  $\leq$  max_2D_scans)

            -- set the strings that can be viewed during
            experiment processing
            set my_script_string to "Block: " & loop_counter_2D
            & " Round: " & loop_counter_3
            Set NMR Parameter name "Script String 3" value
                my_script_string

            --perform the acquisition

```

---

```
Zero Memory
Go
repeat
    set acq_done to Check Acquisition
    if acq_done then exit repeat
end repeat
set stop_now to Get NMR Parameter name
"Acquisition Aborted" --check if canceled
if (stop_now = "FALSE") then
    Upload
    Add To File at record loop_counter_2D
    without replacing
    Increment Tables "2D"
    set loop_counter_2D to loop_counter_2D
    + 1
else
    display dialog "The acquisition was
canceled."
    exit repeat --kick out of the loop
end if
Wait 0.15
end repeat --end of inner loop

set loop_counter_3 to loop_counter_3 + 1
end repeat --end of outer loop

Set NMR Parameter name "leave acq window open" value 0
Show Script Results without activating --turn off the script processing
end tell
```

### **7.3. Verwendete Feldgradienten-Puls-Längen $\delta$ und experimentell ermittelte Signalintensitäten $E(q)$ bei den durchgeführten PFG-NMR-Experimenten**

Dieses Kapitel enthält die experimentell in dieser Arbeit verwendeten Feldgradient-Puls-Längen  $\delta$ , sowie die bei den PFG-NMR-Experimenten experimentell ermittelten Signalintensitäten der in Kapitel 4.2. und 4.3. untersuchten Proben bei den jeweils angegebenen Diffusionszeiten  $\Delta$ , in Abhängigkeit von der Feldgradientenstärke. Diese Signalintensitäten dienen zur Ermittlung der  $D(\Delta)$ -Werte von Xenon in den Siliciumimidonitriden (Kapitel 4.2.) und der hier untersuchten organischen Polymere (Kapitel 4.3.), gemäß Gleichung II-93.

**Tabelle VII-1:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **SI 36/64**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 30$ ms	$\Delta = 40$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms
	$\delta = 1,0$ ms	$\delta = 1,0$ ms	$\delta = 1,0$ ms	$\delta = 0,8$ ms	$\delta = 0,6$ ms
0	1098742	1051233	1088663	919645	871225
0,47	1078539	1031993	1069665	918616	858096
0,81	1042788	972285	1047941	845788	838696
1,17	1009638	101725	1075091	843320	831403
1,77	945911	897195	944003	768849	754365
2,17	963042	829050	865200	741649	759187
2,46	936616	820133	741962	706494	635543
3,16	744369	624830	607525	568033	615689
3,46	643776	522772	492893	516434	529579
3,98	448252	429657	387824	463944	395699
4,38	333962	329964	182566	355146	389288
$G$ [T/m]	$\Delta = 200$ ms	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 0,6$ ms	$\delta = 0,5$ ms	$\delta = 0,5$ ms	$\delta = 0,4$ ms	$\delta = 0,4$ ms
0	1589995	1163814	950122	809558	867554
0,47	1524051	1134916	934381	777744	849993
0,81	1443495	1098529	938964	780265	831005
1,17	1331263	1131850	919005	772122	803313
1,77	1118961	936727	819102	710086	691353
2,17	1089968	857944	806997	563644	682921
2,46	812457	771074	706436	529171	655766
3,16	809315	651544	596714	467501	500751
3,46	639368	520718	464883	397970	477640
3,98	584666	393658	366770	350335	384830
4,38	350701	351993	235039	280846	261194

**Tabelle VII-2:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **SI 28/72**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 30$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 40$ ms $\delta = 0,8$ ms	$\Delta = 50$ ms $\delta = 0,8$ ms	$\Delta = 100$ ms $\delta = 0,8$ ms
0	1051824	1040346	840070	969755	1549662
0,47	1017433	974156	805927	957268	1505657
0,81	1036473	913325	823037	943859	1470199
1,17	958718	902173	829779	929149	1432632
1,77	926512	891503	785160	910342	1360166
2,17	854408	771471	777871	859853	1307316
2,46	842884	753616	694416	790538	1252220
3,16	640615	590127	629458	689864	1031075
3,46	520096	510880	562300	592876	874420
3,98	316946	313606	474828	556453	725916
4,38	238810	239976	334928	464861	613342
$G$ [T/m]	$\Delta = 200$ ms $\delta = 0,6$ ms	$\Delta = 300$ ms $\delta = 0,6$ ms	$\Delta = 400$ ms $\delta = 0,5$ ms	$\Delta = 500$ ms $\delta = 0,4$ ms	$\Delta = 600$ ms $\delta = 0,4$ ms
0	1372415	941582	1055861	1003587	2511459
0,47	1352165	929822	1029913	973444	2468451
0,81	1323693	928172	1002120	939413	2333761
1,17	1274791	824036	961612	916697	2297158
1,77	1211933	791719	878722	882504	2130408
2,17	1115243	730291	816243	853020	1966269
2,46	1014757	705231	771462	803676	1812533
3,16	883609	560300	683045	732462	1599021
3,46	758847	551726	582942	648456	1430251
3,98	650040	454212	507795	563646	1225751
4,38	564008	286415	417904	470391	1080550

**Tabelle VII-3:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **SI 14/86**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 30$ ms	$\Delta = 40$ ms	$\Delta = 50$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 100$ ms $\delta = 1,0$ ms
0	1052364	-	-	1252143	1031289
0,47	941466	-	-	1250790	1013518
0,81	1023583	-	-	1188865	1010968
1,17	935535	-	-	1171071	1001334
1,77	899169	-	-	1137756	975007
2,17	887915	-	-	1140663	908668
2,46	815496	-	-	1085448	883259
3,16	729942	-	-	943551	802347
3,46	679930	-	-	921263	711108
3,98	593433	-	-	734596	598903
4,38	193591	-	-	634775	490505
$G$ [T/m]	$\Delta = 200$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 300$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 400$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 500$ ms $\delta = 1,0$ ms	$\Delta = 600$ ms $\delta = 1,0$ ms
0	934567	911256	853531	851235	1224561
0,47	920022	896861	822844	822080	1197475
0,81	908359	871051	820194	812875	1186172
1,17	888046	866353	822276	819688	1078853
1,77	857309	850831	807782	777234	1054626
2,17	818285	798399	783714	745453	1006335
2,46	776128	750938	708244	738510	971861
3,16	732936	676813	644482	672500	873393
3,46	654722	603288	605898	610752	808326
3,98	542287	574365	526654	543422	700872
4,38	449675	509465	470969	459113	597852



**Tabelle VII-4:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **PBT/PTMO-Copolymer** „unbehandelt“.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms
	$\delta = 2,5$ ms	$\delta = 2,0$ ms	$\delta = 1,5$ ms	$\delta = 1,1$ ms
0	10250348	978613	869131	922245
0,47	1006773	963856	856152	916932
0,81	957518	915553	823533	912301
1,17	922863	867322	805830	874637
1,77	878056	821801	732513	783615
2,17	796296	781014	653187	691814
2,46	733097	700261	584170	644932
3,16	646465	638121	492834	580972
3,46	619428	566626	451694	521507
3,98	548890	478166	383216	454192
4,38	445813	380657	314204	358945
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 0,9$ ms	$\delta = 0,8$ ms	$\delta = 0,8$ ms	$\delta = 0,7$ ms
0	966581	923520	998211	1218454
0,47	953299	914760	972951	1209344
0,81	952514	910023	948094	1163765
1,17	864610	838090	907764	1088995
1,77	836433	766047	791234	947315
2,17	716146	692267	711990	852105
2,46	697351	674445	642524	772818
3,16	559358	520732	481788	492849
3,46	510445	458441	404173	480743
3,98	416595	382927	265850	336148
4,38	379211	288498	214921	249706

**Tabelle VII-5:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **PBT/PTMO-Copolymer** „behandelt“.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms
	$\delta = 2,5$ ms	$\delta = 2,0$ ms	$\delta = 1,5$ ms	$\delta = 1,1$ ms
0	1081687	1045710	1089455	1144652
0,47	1068592	1034500	1070300	1121008
0,81	1024660	993661	1036848	1071698
1,17	980016	942964	976649	1040350
1,77	923882	892793	870933	954966
2,17	882220	747418	785296	826031
2,46	786496	721184	705193	787947
3,16	669250	600777	596608	634880
3,46	620906	586389	489748	588027
3,98	493418	458349	371276	419916
4,38	397168	361964	316632	394663
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 0,9$ ms	$\delta = 0,8$ ms	$\delta = 0,7$ ms	$\delta = 0,7$ ms
0	1135567	1117233	1133756	1218259
0,47	1105923	1100551	1121837	1216651
0,81	1035641	1071071	1107455	1168796
1,17	996160	1022509	1054642	1078124
1,77	910113	917614	976557	940392
2,17	820772	817323	855543	851118
2,46	744455	726909	786188	720016
3,16	611849	585968	668443	515210
3,46	555113	495087	545731	483597
3,98	426951	398976	395992	388190
4,38	323596	307057	358933	290271

**Tabelle VII-6:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **EPDM**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms
	$\delta = 2,5$ ms	$\delta = 2,0$ ms	$\delta = 1,5$ ms	$\delta = 1,0$ ms
0	694552	668542	623144	771582
0,47	687965	657992	622553	762441
0,81	680043	645110	571068	755765
1,17	666584	585466	553166	738483
1,77	632905	532360	512171	651052
2,17	606292	481980	474807	557969
2,46	544121	479685	437107	531060
3,16	500680	405363	346933	424492
3,46	470407	377313	315594	392614
3,98	414096	318734	274289	348821
4,38	348121	254510	214896	278642
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 0,8$ ms	$\delta = 0,7$ ms	$\delta = 0,6$ ms	$\delta = 0,5$ ms
0	955487	889524	901125	617998
0,47	934097	874177	883814	609906
0,81	888814	862747	865124	596441
1,17	885600	805254	820516	533111
1,77	796071	735432	705993	516151
2,17	742548	684250	670248	452620
2,46	685788	634055	627944	447608
3,16	600055	545324	568456	368096
3,46	523156	450686	497188	321449
3,98	449353	404635	419816	276729
4,38	399452	330760	354581	246348

**Tabelle VII-7:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **Polyisopren**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms
	$\delta = 2,0$ ms	$\delta = 1,3$ ms	$\delta = 0,9$ ms	$\delta = 0,7$ ms
0	1467558	1543559	1550122	1503664
0,47	1434152	1537693	1507417	1480240
0,81	1439798	1496065	1476592	1445393
1,17	1365200	1466495	1399410	1376586
1,77	1289230	1387962	1336695	1239193
2,17	1179819	1270140	1243571	1159737
2,46	1094621	1214290	1151686	1069741
3,16	983941	1036237	955973	883132
3,46	855732	925678	881271	761995
3,98	697453	728617	776657	649516
4,38	576553	643961	658843	540237
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 0,6$ ms	$\delta = 0,5$ ms	$\delta = 0,5$ ms	$\delta = 0,5$ ms
0	1488367	1714523	1599850	1742008
0,47	1464191	1682733	1563466	1688720
0,81	1458947	1661180	1522721	1623220
1,17	1400215	1582985	1453759	1549510
1,77	1242498	1444527	1355233	1319450
2,17	1130300	1317597	1190504	1221068
2,46	1068252	1231695	1097983	1084781
3,16	807223	932488	847150	740091
3,46	732790	844798	711469	605845
3,98	611945	716931	510113	432669
4,38	521874	476974	333191	371289

**Tabelle VII-8:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe  $C_2C_8$ -Copolymer.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms
	$\delta = 2,3$ ms	$\delta = 1,8$ ms	$\delta = 0,8$ ms	$\delta = 0,7$ ms
0	1349824	1341778	1554114	1811988
0,47	1328601	1337921	1530197	1794605
0,81	1305243	1237051	1530867	1742800
1,17	1250811	1241404	1473938	1724141
1,77	1188093	1141294	1364672	1598134
2,17	1086390	1081889	1325536	1475448
2,46	1042865	991252	1286691	1402345
3,16	840725	892714	1160026	1252249
3,46	752418	799890	1105223	1164531
3,98	649991	672904	981221	991134
4,38	617322	587467	891603	854304
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 0,6$ ms	$\delta = 0,5$ ms	$\delta = 0,5$ ms	$\delta = 0,5$ ms
0	1712201	1448294	1547669	1503400
0,47	1711148	1423532	1533451	1487527
0,81	1673198	1404778	1507465	1459559
1,17	1624910	1401218	1442468	1423264
1,77	1510042	1265647	1300897	1265024
2,17	1432855	1142360	1179263	1121373
2,46	1297057	1100907	1071283	1048797
3,16	1087069	938233	875482	797129
3,46	931266	833473	760756	682181
3,98	792612	745285	601173	538534
4,38	717058	685270	521225	440186

**Tabelle VII-9:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **LLDPE**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms
		$\delta = 2,0$ ms	$\delta = 2,0$ ms	$\delta = 1,4$ ms
0	-	1156778	1112775	1166852
0,47	-	1142621	1081820	1148474
0,81	-	1110113	1083027	1133980
1,17	-	1068480	1026925	1107256
1,77	-	1039684	968521	1026350
2,17	-	1023099	898813	941949
2,46	-	961842	853075	932939
3,16	-	925758	769552	822161
3,46	-	893671	737644	779813
3,98	-	861231	629676	710110
4,38	-	824111	599632	589913
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms	$\Delta = 400$ ms	$\Delta = 500$ ms	$\Delta = 600$ ms
	$\delta = 1,3$ ms	$\delta = 1,2$ ms	$\delta = 1,0$ ms	$\delta = 1,0$ ms
0	1177021	1157556	791552	1198547
0,47	1135581	1150071	780219	1161239
0,81	1131123	1132080	777771	1118870
1,17	1085446	1118533	753837	1075592
1,77	1014428	1068985	695321	987580
2,17	949874	993453	641655	929365
2,46	921631	912407	619213	860704
3,16	804518	794581	563432	709019
3,46	750939	725564	499063	652891
3,98	624157	638978	455444	531234
4,38	615753	515083	386371	413189

**Tabelle VII-10:** Experimentell ermittelte Signalintensitäten  $E(q)$  [a.u.] und verwendete Längen der Feldgradientenpulse  $\delta$  für die Probe **HDPE**.

$G$ [T/m]	$\Delta = 20$ ms	$\Delta = 50$ ms	$\Delta = 100$ ms	$\Delta = 200$ ms $\delta = 2,5$ ms
0	-	-	-	674581
0,47	-	-	-	672249
0,81	-	-	-	638941
1,17	-	-	-	596215
1,77	-	-	-	574268
2,17	-	-	-	554516
2,46	-	-	-	510577
3,16	-	-	-	428831
3,46	-	-	-	386233
3,98	-	-	-	364083
4,38	-	-	-	315715
$G$ [T/m]	$\Delta = 300$ ms $\delta = 2,0$ ms	$\Delta = 400$ ms $\delta = 1,5$ ms	$\Delta = 500$ ms $\delta = 1,5$ ms	$\Delta = 600$ ms $\delta = 1,4$ ms
0	717432	1033269	1044579	1136220
0,47	708698	1017900	1029056	1124516
0,81	669134	1015231	980019	1088161
1,17	648244	1011456	992131	1032501
1,77	623804	929769	921556	991435
2,17	514444	899029	875431	887077
2,46	509133	880086	835572	831329
3,16	490882	789477	742098	766050
3,46	427252	726539	694512	702878
3,98	358442	682241	609073	614889
4,38	281152	582414	501531	574698

## 7.4. Verwendete Abkürzungen und Symbole

1D	eindimensional
2D	zweidimensional
3D	dreidimensional
Å	Ångström
$\alpha$	„tortuosity-Faktor“
$a$	Aktivität
$A$	Fläche
$\beta$	Polymerketten-Immobilisierungs-Faktor
$\beta_1, \beta_2$	Konstanten, die von der Mikrostruktur des Systems abhängen
$b$	Konstante, die die Hohlraumgeometrie quantifiziert
$B_0$	statisches Magnetfeld
$B_{eff}$	effektive B-Feldstärke
$B_i$	Amplitude des eingestrahnten B-Feldes
$c$	Konzentration
$C$	Konstante, die von der Atompolarisierbarkeit abhängt
$C_{ges.}$	Gesamtkonzentration an Edelgas im Polymer
$C_H$	Edelgaskonzentration an Edelgas im „first mode“
$C_L$	Edelgaskonzentration im „second mode“
$C'_L$	Edelgaskonzentration in der vollständig gefüllten Pore
CP	<u>C</u> ross <u>P</u> olarization (Kreuzpolarisation)
$\delta$	Länge der Feldgradienten-Pulse
$\delta$	chemische Verschiebung
$\delta_a$	chemische Verschiebung adsorbierten Xenons
$\delta_f$	chemische Verschiebung freien Xenons
$\delta_A$	Beitrag der magnetischen Anisotropie des Lösemittels zu $\delta$
$\delta_{Dis}$	dispersiver Anteil von $\delta$ an den van-der-Waals-Wechselwirkungen
$\delta_e$	experimentell ermittelte chemische Verschiebung eines Xenon-Adsorptionssignals
$\delta_E$	Beitrag des induzierten Dipols des Lösemittels zu $\delta$
$\delta_{PD}$	Beitrag des permanenten Dipols des Lösemittels zu $\delta$



$\delta_{\text{Rep}}$	repulsive Anteil von $\delta$ an den van-der-Waals-Wechselwirkungen
$\Delta$	Diffusionszeitintervall
$d$	Abstand vom Atom(mittelpunkt) zur Porenwand
$D$	Xenon-Diffusionskoeffizient, Diffusionskoeffizient allgemein
$D_0$	Diffusionskoeffizient der beobachteten Teilchenspezies ohne Hinderung
$D_a$	Xenon-Diffusionskoeffizient eines vollständig amorphen Polymers
$D_{\text{gesamt}}$	Diffusionskoeffizient, falls die zurückgelegte freie Wegstrecke in der selben Größenordnung liegt wie der Porendurchmesser
$D_K$	Diffusionskoeffizient unter Knudsen Bedingungen
$D_P$	Diffusionskoeffizienten additiv aus ungehinderter Diffusion und Knudsen-Diffusion
$D_S$	Diffusionskoeffizient der Oberflächendiffusion
$D_{sk}$	Xenon-Diffusionskoeffizient in einem semi-kristallinen Polymer
$\varepsilon$	Porösität
$\varepsilon^*$	Lennard-Jones-Energieparameter
$\varepsilon_K$	dielektrische Konstante
$\varepsilon_{K0}$	durchschnittliche dielektrische Konstante
$E$	Energie
ENB	5-Ethyliden-2-norbornen
EPDM	Ethylen-Propylen-Dien-Copolymer
$E(q)$	Größe des NMR-Echosignals in Abhängigkeit vom $q$ -Faktor
$E_{vdW}$	van-der-Waals-Energie
$\phi$	Winkel der Phasenverschiebung
$\Phi$	Lennard-Jones 6-12 Potential für eine Polymerkettenkonfiguration ohne eingelagertes Xenon
$\Phi_{Xe}$	Lennard-Jones 6-12 Potential für eine Polymerkettenkonfiguration mit eingelagertem Xenon
$f$	Reibungskoeffizient
$f(\omega)$	Signal in der Frequenzdomäne
$F$	Kraft
$F_G$	amorphe Gewichtsfraktion in einem Polymer
$F_V$	amorphe Volumenfraktion in einem Polymer

---

FID	<u>F</u> ree <u>I</u> nduction <u>D</u> ecay
FT	Fourier Transformation
$\gamma$	gyromagnetische Verhältnis
$G$	Feldgradient
$\hbar$	Planck'sches Wirkungsquantum / $2\pi$
$\hat{H}$	Hamilton Operator
HDPE	High Density Polyethylen
HF	Hochfrequenz
$i$	Kernsorte
$I$	Kernspinquantenzahl
$\hat{I}_z, \hat{I}_y, \hat{I}_x$	Drehimpuls-Operatoren
$J$	Kopplungskonstanten von Kernspins
$J$	Diffusionsstromdichte
$\vec{k}$	reziproken Raumvektor
$\vec{k}_i$	Wellenvektor
$k_H$	Henry'sche Konstante
$\lambda$	mittlere freie Wegstrecke, Wellenlänge
$\lambda^*$	Abstand zwischen $N$ äquivalenten Zellen einer Polymerkette
$l$	Anzahl der Diffusionsschritte der betrachteten Teilchen
$l_A$	Länge einer Pore, gemessen durch die Porenachse
$l_L$	Länge einer gedachten Linie vom Anfang bis zum Ende einer Pore
LDPE	<u>L</u> ow <u>D</u> ensity Polyethylen
LLDPE	<u>L</u> inear <u>L</u> ow <u>D</u> ensity Polyethylen
$\mu$	chemisches Potential
$\vec{\mu}$	magnetisches Moment
$m$	Masse
$m_I$	magnetische Quantenzahl
$M$	makroskopische Magnetisierung
$M_0$	Gleichgewichtsmagnetisierung
MHz	Mega Hertz
MDPE	<u>M</u> iddle <u>D</u> ensity Polyethylen
$M_S$	Anzahl der Teilchen pro Sektion

---

$M(t)$	Signal in der Zeitdomäne
$\nu$	Frequenz
$\nu_i$	Frequenzkomponente
$\nu_L$	Larmor-Frequenz
$\nu_{\text{Referenz}}$	Frequenz der als Referenz verwendeten Kerne der Kernsorte $i$
$\nu_{\text{Substanz}}$	Frequenz der observierten Kerne der Kernsorte $i$
$n_a$	Anzahl der adsorbierten Xenonatome
$n_f$	Anzahl der freien Xenonatome
$N$	Amplitude des Rauschen in einem NMR-Spektrum (engl. noise)
$N$	Gesamtzahl der Xenonatome in einer Pore (Teilchendichte)
$N_\alpha$	Anzahl der Teilchen im energetisch niedrigeren Besetzungszustand
$N_a$	Anzahl der Xenonatome im energetisch niedrigeren Zustand
$N_\beta$	Anzahl der Teilchen im energetisch höheren Besetzungszustand
$N_f$	Anzahl der Xenonatome im energetisch höheren Zustand
NMR	<u>N</u> uclear <u>M</u> agnetic <u>R</u> esonance
$\omega$	zentralen Einstrahlfrequenz (Kreisfrequenz)
$\omega_0$	Larmor-Frequenz der beobachteten Spinsorte (Kreisfrequenz)
$p$	Partialdruck
$\vec{p}$	Eigendrehimpuls
$\bar{P}$	Propagator
PBT	Polybutylenterephthalat
PC	Polycarbonat
PE	Polyethylen
PFG	<u>P</u> ulsed <u>F</u> ield <u>G</u> radient
PFGSE	<u>P</u> ulsed <u>F</u> ield <u>G</u> radient <u>S</u> timulated <u>E</u> cho
PP	Polypropylen
PTMO	Polytetramethylenoxid
PVC	Polyvinylchlorid
$\vec{q}$	reziproker Raumvektor
$\rho$	Dichte, Spindichte
$\theta^*$	Belegungsgrad
$r$	Porenradius

$\langle r \rangle$	mittlere freie Wegstrecke
$r^*$	ist gleich $r_d$ bei der Temperatur $T_g$
$r_d$	van-der-Waals-Durchmesser der Polymerkette
$r_0$	Gleichgewichtsabstand zwischen den Polymerketten
$R_1, R_2$	Parameter zur Quantifizierung der Oberflächenkrümmung von Poren
RF	Radio-Frequenz
$\sigma$	Abschirmungskonstante
S	Amplitude eines Signals in einem NMR-Spektrum
$S$	Oberfläche
$S(Q, \omega)$	Selbst-Korrelationsfunktion
SI	Siliciumimidonitrid
$\tau$	Wartezeit zwischen RF-Pulsen bei Echo-NMR-Experimenten
$\tau'$	geometrischer Faktor, der die Hinderung für die Diffusion durch kristalline Bereiche in einem Polymer quantifiziert
$t_p$	Impulslänge
$t$	Zeitintervall (allgemein)
$T$	Temperatur
T	Tesla
$T_1$	Spin-Gitter-Relaxationszeit
$T_2$	Spin-Spin-Relaxationszeit
$T_2^*$	Spin-Spin-Relaxationszeit und B-Feldinhomogenitäten, additiv
$T_g$	Glasübergangstemperatur
$v$	Geschwindigkeit
$v_m$	mittlere Geschwindigkeit der Teilchen
$v_{mz}$	mittlere Geschwindigkeit der Teilchen in z-Richtung
$V$	Volumen
$V^*$	„hard core“ Volumen eines Polymers
$V_f$	freies Volumen in einem Polymer
VLDPE	<u>V</u> ery <u>L</u> ow <u>D</u> ensity Polyethylen
Z	Stoßrate diffundierender Teilchen pro Flächeneinheit

## Lebenslauf

---

### Persönliche Daten

Name	Friedhelm Junker
Geburtsdatum	26.05.1970
Geburtsort	Duisburg
Familienstand	ledig
Staatsangehörigkeit	deutsch

### Schulischer und beruflicher Werdegang

Sept. 1976 - Juli 1980	<b>Gemeinschafts-Grundschule</b> Rheinberg-Budberg
Sept. 1980 - Mai 1990	<b>Amplonius-Gymnasium Rheinberg</b>
Mai 1990	Erwerb der allgemeinen Hochschulreife
Juli 1990 - Juni 1991	<b>Grundwehrdienst</b> 3./Fm. Btl. 11 in Oldenburg
Oktober 1991	<b>Gerhard-Mercator-Universität Duisburg</b> Immatrikulation im Diplomstudiengang Chemie
Dezember 1993	Abschluß des Grundstudiums
Februar 1996	Abschluß der mündlichen Diplomprüfungen
bis November 1996	Diplomarbeit, angefertigt im Fachgebiet Physikalische Chemie der Gerhard-Mercator-Universität bei Prof. Dr. W.S. Veeman
Feb. 1997 - Nov. 1999	Dissertation im Fachgebiet Physikalische Chemie der Gerhard-Mercator-Universität bei Prof. Dr. W.S. Veeman
April 1997 - Feb. 2000	Wissenschaftlicher Angestellter im Fachgebiet Physikalische Chemie der Gerhard-Mercator-Universität
Okt./Nov. 1998	Vom DAAD geförderter Forschungsaufenthalt am <b>Massachusetts Institute of Technology</b> bei Prof. David Cory