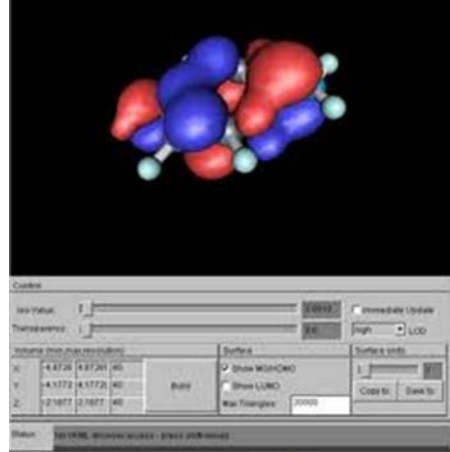


## Master-Arbeit:

### Substanzcharakterisierung mittels Breitband-Nuclear Quadrupole-Resonance (NQR)

NQR ist eine der Magnetresonanz-Spektroskopie verwandte Technik, bei der bestimmte Kerne NMR-Signale aussenden, ohne dass man ein statisches ( $B_0$ ) Magnetfeld anlegen muss.

Am Institut für Medizintechnik wird untersucht, ob bestimmte NQR-Kerne auch eine Rolle für die Magnetresonanz-Bildgebung spielen können. Dazu wurde ein experimentelles NQR-Spektrometer entwickelt, das im Frequenzband 80 – 140 MHz funktioniert. Im Zuge dieser Masterarbeit soll für bestimmte Moleküle die elektrische Interaktion zwischen eingebauten Quadrupolkernen und der Molekül-Elektronenwolke mithilfe einer kommerziellen Simulationssoftware modelliert werden, um so deren Resonanzfrequenzen simulieren und möglichst gezielt verändern zu können. Auf Basis der Simulationen werden im Zuge einer Kooperation von Chemikern geeignete Verbindungen synthetisiert, die wiederum in unserem Spektrometer untersucht und charakterisiert werden. Wenn eine geeignete Substanz vorliegt, sind in weiterer Folge bestimmte Bildgebungsexperimente geplant. Einzelaufgaben sind:



- Einarbeiten in das bestehende System
- Literaturstudium zum Thema Quadrupol-
- Einarbeiten in die Molekül-Simulationssoftware
- Nachbilden bereits bekannter Testsubstanzen und Vergleich mit NQR-Messdaten
- Modellierung neuer Substanzen / ‚Tunen‘ der Resonanzfrequenzen derselben
- Interaktion mit Chemikern
- Vermessung der synthetisierten Substanzen in unserem NQR-Spektrometer

Voraussetzungen: Interesse an Physik, numerischer Simulation und experimenteller Arbeit in einem stark interdisziplinären Umfeld.

Anfragen an: ao. Univ.-Prof. Hermann Scharfetter

e-mail: [hermann.scharfetter@tugraz.at](mailto:hermann.scharfetter@tugraz.at),

Tel: (0316) 873 7394