

Inhaltsverzeichnis:

1.	Einleitung	1
1.1.	Grundlagen der NMR-Spektroskopie	1
1.2.	Aufgabenstellung und Zielsetzung	2
1.3.	Apparatives	6
2.	Untersuchungen zur quantitativen ^{13}C -Festkörper-NMR-Spektroskopie	10
2.1.	Verwendete Techniken bei der ^{13}C -NMR-Spektroskopie von Festkörpern	10
2.2.	Anregungssequenzen zur Aufnahme gewöhnlicher ^{13}C -Festkörper-NMR-Spektren	13
2.3.	Problematik bei der quantitativen ^{13}C -Festkörper-NMR-Spektroskopie	19
2.4.	Einfluß der Kreuzpolarisationsdauer	24
2.4.1.	Untersuchungen zur Kreuzpolarisationsdauer an Modellsubstanzen	24
2.4.2.	Untersuchungen zur Kreuzpolarisationsdauer an Kohlen und Kohlenprodukten	36
2.5.	Untersuchungen zur Länge der Wartezeit D_0	44
2.6.	Effektivität der Kreuzpolarisation	49
2.6.1.	Vergleich der Ergebnisse aus der ^{13}C -NMR-Spektroskopie von Proben in Lösung und als Feststoffe	49
2.6.2.	Einfluß paramagnetischer Verunreinigungen	54
2.6.3.	Verwendung eines inneren Standards in der ^{13}C -CP/MAS-NMR-Spektroskopie und direkte Anregung der ^{13}C -Kerne im Festkörper	58

2.7.	Äußere Einflußgrößen bei der Aufnahme von ^{13}C -Festkörper-NMR-Spektren	68
2.7.1.	Einfluß der Probenrotation auf ^{13}C -CP/MAS-NMR-Spektren	68
2.7.2.	Vergleich der verwendeten Festkörpermeßsonden	72
2.7.3.	Stabilität der Festkörpermeßsonden	74
2.7.4.	Aufbereitung des Probenmaterials	76
2.7.4.1.	Einfluß der Korngröße	77
2.7.4.2.	Einfluß des Mahlmediums	78
3.	Differenzierung von Kohlenstoffatomen in ^{13}C -Festkörper-NMR-Spektren	79
3.1.	Verwendete Aufnahmetechnik zur Differenzierung von Kohlenstoffatomen	79
3.2.	Anwendung der Pulssequenz DDTOSS auf Modellverbindungen	85
3.3.	Anwendung der Differenzierungstechnik DDTOSS auf Kohlen und Kohlenprodukte	93
3.4.	Verkürztes DDTOSS-Verfahren	97
4.	Anwendung der Pulssequenzen TOSS und DDTOSS in der Kohleanalytik	102
4.1.	Untersuchung von fossilem Material unterschiedlichen Inkohlungsgrades	102
4.1.1.	Untersuchung von Kohlen	102
4.1.2.	Untersuchung von Maceralkonzentraten	118
4.2.	Untersuchung von Kohlen und Hydrierrückständen	130
4.2.1.	Lösungsmiteleinfluß auf die bei der Hydrierung von Kohle anfallenden Rückstände	130
4.2.2.	Untersuchung von Hydrierrückständen auf Lösungsmittelreste	137
4.2.3.	Untersuchung von verschiedenen Kohlen und deren pyridinunlösliche Hydrierrückstände	139
4.3.	Alterung von Kohlen	143

5.	Zusammenfassung	149
6.	Literaturverzeichnis	153
7.	Anhang	159