

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Peierls-Übergang . . . . .	5
2.2	Blochgleichungen . . . . .	7
2.3	Bewegungsinduzierte Relaxation . . . . .	8
2.4	Relaxation aufgrund eindimensionaler Elektronenbewegung . . . . .	12
2.5	Chemische Verschiebung . . . . .	14
2.6	Knight-Verschiebung . . . . .	16
2.7	Overhauser-Effekt . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Experimentelle Methoden</b>	<b>21</b>
3.1	Rotierendes Koordinatensystem . . . . .	21
3.2	Messung der longitudinalen Relaxationszeit $T_1$ . . . . .	22
3.3	$T_1$ -Messung mit Hilfe der Overhauser-Verschiebung . . . . .	25
3.4	Messung von $T_{1\rho}$ im rotierenden Koordinatensystem . . . . .	26
3.5	CP-MAS-Messmethode . . . . .	27
3.5.1	Schnelle Rotation unter dem magischen Winkel . . . . .	27
3.5.2	Doppelresonanzverfahren . . . . .	29
<b>4</b>	<b>(PY)<sub>12</sub>(SbF<sub>6</sub>)<sub>7</sub> und (NA)<sub>2</sub>AsF<sub>6</sub></b>	<b>33</b>
4.1	Herstellung der Kristalle . . . . .	33

4.2	Struktur der Kristalle . . . . .	35
4.2.1	(PY) <sub>12</sub> (SbF <sub>6</sub> ) <sub>7</sub> . . . . .	37
4.2.2	(NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> . . . . .	37
4.3	Spindichte und Bandstruktur . . . . .	37
4.4	Probenpräparation . . . . .	40
4.5	Spektren . . . . .	42
4.5.1	Einfluss des Lösungsmittels auf die Spektren . . . . .	43
4.6	Bestimmung des Peierls-Übergangs . . . . .	46
4.6.1	Mikrowellenleitfähigkeit . . . . .	47
4.6.2	Leitungselektronenssuszeptibilität . . . . .	47
<b>5</b>	<b><sup>13</sup>C-CP-MAS-Messung</b>	<b>51</b>
5.1	Berechnung der Knight-Verschiebung . . . . .	51
5.2	Linienzuordnung . . . . .	53
5.3	Knight-Verschiebung . . . . .	60
5.4	Leitungselektronenssuszeptibilität und Hyperfeinwechselw.-Konstante . . . . .	62
5.5	Spindichte . . . . .	66
5.6	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	69
<b>6</b>	<b>Longitudinale Relaxationsrate der Fluorkerne</b>	<b>71</b>
6.1	Fluorrelaxationsrate . . . . .	71
6.2	(NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> . . . . .	73
6.3	(PY) <sub>12</sub> (SbF <sub>6</sub> ) <sub>7</sub> . . . . .	75
6.4	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	78
<b>7</b>	<b>Longitudinale Relaxationsrate der Protonen</b>	<b>81</b>
7.1	T <sub>1</sub> in (NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> mit Hilfe von Overhauser-Verschiebungsmessungen . . . . .	81
7.2	Theoretische Beschreibung von T <sub>1</sub> <sup>-1</sup> (T,ν) . . . . .	83
7.3	Temperaturabhängigkeit von T <sub>1</sub> <sup>-1</sup> der Protonen . . . . .	85

7.3.1	(NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> . . . . .	86
7.3.2	(PY) <sub>12</sub> (SbF <sub>6</sub> ) <sub>7</sub> . . . . .	88
7.4	Frequenzabhängigkeit von $T_1^{-1}$ der Protonen . . . . .	89
7.4.1	(NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> . . . . .	90
7.4.2	(PY) <sub>12</sub> (SbF <sub>6</sub> ) <sub>7</sub> . . . . .	92
7.5	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	93
<b>8</b>	<b>Diskussion der Messergebnisse</b>	<b>95</b>
8.1	Fluorrelaxation . . . . .	95
8.1.1	Sockel der Fluorrate in (NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> . . . . .	95
8.1.2	Anionoktaederrotation und Peierls-Übergang . . . . .	96
8.2	Leitungselektronenssuszeptibilität und Spindichte in (NA) <sub>2</sub> AsF <sub>6</sub> .	99
8.3	Parameter der eindimensionalen Elektronenbewegung . . . . .	101
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>105</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>109</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>113</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>115</b>