

# Erklärung und Anwendung einer „schnellen“ Modulations-Nachweistechnik für die magnetische Kernresonanzspektroskopie

Von W. MÜLLER-WARMUTH und P. PARIKH \*

Aus dem Max-Planck-Institut für Chemie (Otto-Hahn-Institut), Mainz  
(Z. Naturforschg. 16 a, 1063—1068 [1961]; eingegangen am 13. Juli 1961)

Für den Nachweis von engen magnetischen Kernresonanzlinien eignet sich eine Modulations-Nachweistechnik, bei der die Modulationsperiode kleiner als beide Relaxationszeiten ist. Die komplizierten Modulationseffekte, die wiederholt mathematisch beschrieben worden sind, werden auf einfache Weise an Hand eines makroskopischen Modells zur Analyse des Bewegungsablaufes der Kernmagnetisierung verständlich gemacht. Mit der Methode des rotierenden Koordinatensystems lässt sich der Verlauf der Absorptionssignale in Abhängigkeit von den Versuchsbedingungen verstehen. Die gewonnenen Ergebnisse werden in einigen graphischen Darstellungen wiedergegeben, welche die praktische Anwendung erleichtern. Es wird weiter gezeigt, daß neben anderen Vorteilen die Empfindlichkeit besser als bei den sonst in der Kernresonanzspektroskopie meist üblichen Nachweismethoden ist.

Bei magnetischen Kernresonanzuntersuchungen werden makroskopische Substanzproben mit Atomkernen, die einen Spin  $I$  und ein magnetisches Moment  $\mu$  besitzen, in ein homogenes Magnetfeld  $H_z = H_0$  und ein dazu senkrecht angeordnetes zirkular polarisiertes Wechselfeld  $H_x = H_1 \cos \omega t$ ,  $H_y = -H_1 \sin \omega t$  (das sich durch ein linear polarisiertes Feld  $H_x = 2H_1 \cos \omega t$  realisieren lässt) gebracht. Da die quantenmechanischen Erwartungswerte eines aus hinreichend vielen Teilchen bestehenden nuklearen Systems mit den entsprechenden klassischen Größen übereinstimmen, kann zum Verständnis des Bewegungsablaufes der Kernmagnetisierung bei einem Durchgang durch die Resonanz

$$\omega_0 = \gamma H_0, \quad \gamma = \mu/I\hbar \quad (1)$$

eine makroskopische Beschreibung herangezogen werden<sup>1</sup>. Besonders übersichtlich werden die bei der Kernresonanz auftretenden Probleme gewöhnlich, wenn man auf ein mit der Frequenz  $\omega$  rotierendes Koordinatensystem ( $x'$ ,  $y'$ ,  $z' = z$ ) übergeht. BONERA und GIULOTTO haben kürzlich mit dieser Methode eine geometrische Erklärung für den langsamen adiabatischen Resonanzdurchgang erbracht<sup>2</sup>, die auch hier benutzt wird.

Die Durchgangszeit ist beim langsamen Durchgang lang gegen beide Relaxationszeiten  $T_1$  und  $T_2$ , die letztere wird als Maß für die Linienbreite unter Ausschluß der Sättigungsverbreiterung be-

trachtet. In Abb. 1 a beschreibt der Kernmagnetisierungsvektor dabei eine Ellipsenbahn

$$0 - 1 - 2 - \mathcal{M} - 3 - 0$$

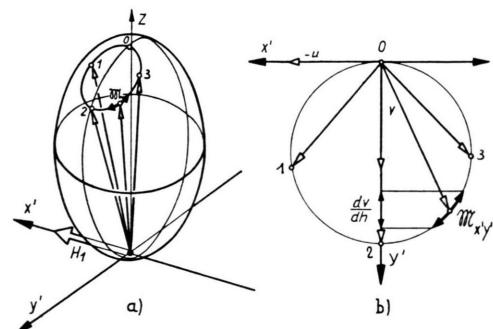


Abb. 1. Bewegungsablauf des Kernmagnetisierungsvektors bei langsamem adiabatischen Resonanzdurchgang, a) räumliche Darstellung, b) Projektion auf die  $x'$ ,  $y'$ -Ebene.

auf dem „Gleichgewichtsellipsoid“, dessen Achsen durch die Gleichgewichtsmagnetisierung  $M_0$  bzw. durch  $M_0 \sqrt{T_2/T_1}$  gegeben sind. Abb. 1 b zeigt die Projektion dieser Bewegung auf die transversale  $x'$ ,  $y'$ -Ebene. Die Magnetisierungskomponenten im rotierenden System werden wie üblich  $u$  und  $v$  genannt. Beschränkt man sich auf den Nachweis der Kernresonanzabsorption, so erhält man beim Durchgang durch (1) eine Resonanzlinie, die  $v$  proportional und deren Form aus Abb. 1 b ersichtlich ist. Wenn nämlich zwischen Hochfrequenzfeld  $H_1$  und

\* Die vorliegende Arbeit enthält einen Teil der Dissertation von P. PARIKH (gegenwärtige Adresse: V. P. College, Vallabh-Vidyanagar, Gujarat, Indien).

<sup>1</sup> F. BLOCH, Phys. Rev. 70, 464 [1946].

<sup>2</sup> G. BONERA u. L. GIULOTTO, Nuovo Cim. 14, 435 [1959].



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Transversalmagnetisierung  $\mathfrak{M}_{xy}$  eine Phasenverschiebung besteht, findet eine Absorption von Hochfrequenzleistung durch das Kernspinsystem statt:

$$\Delta P = \frac{\omega}{2\pi} V_p \int_0^T H_x \frac{dM_x}{dt} dt = \omega V_p H_1 v. \quad (2)$$

$V_p$  bedeutet das Probenvolumen, die Leistung wird dem durch eine Schwingsspule in  $x$ -Richtung erzeugten Wechselfeld entzogen. In der Nachweistechnik bedient man sich gewöhnlich einer Modulation des Magnetfeldes  $H_0$  oder der Hochfrequenz  $\omega$ , damit sich die Absorption (2) periodisch wiederholt und einfach mit elektronischen Mitteln erfaßt werden kann.

Das Magnetfeld hat dabei den Wert

$$H_z = H_0 + h + H_m \cos \omega_m t, \quad (3)$$

worin  $H_0$  den Resonanzwert,  $H_m$  und  $\omega_m$  Amplitude und Frequenz einer Magnetfeldmodulation bedeuten.  $h$  wird zum Aufnehmen von Spektren langsam, d. h. unter Beachtung von

$$\gamma (dh/dt) \ll (1/T_2^*)^2 \quad (4)$$

variiert. Die Modulation wird „langsam“ genannt, wenn  $\omega_m T_1$ ,  $\omega_m T_2^* \ll 1$  gilt. In Abb. 1 durchläuft  $\mathfrak{M}$  in diesem Fall eine stetige Folge von Gleichgewichtszuständen. Bei großer Amplitude ( $\gamma H_m \gg 1/T_2^*$ ) beschreibt die Vektorspitze bei jedem der periodisch auftretenden Resonanzdurchgänge ihre Ellipsenbahn. Bevor ein nachfolgender Durchgang erfolgt, sind alle Wirkungen des vorhergehenden abgeklungen. Wenn  $\gamma H_m \ll 1/T_2^*$  („schwache Modulation“) ist, führt  $\mathfrak{M}$  in Abb. 1 a eine oszillierende Bewegung um die jeweilige durch  $h$  festgelegte Lage herum durch, die Resonanzabsorption ist eine periodische Funktion, deren Amplitude in guter Näherung der ersten Ableitung von  $v$  proportional ist.

Ein Merkmal der schwachen Modulation ist die Möglichkeit, das sinusförmige Absorptionssignal schmalbandig verstärken zu können, um bei Verwendung eines phasenempfindlichen Detektors ein gutes Signal-Rausch-Verhältnis zu erzielen. Will man diesen Vorteil auch bei engen magnetischen Resonanzlinien ausnutzen, muß man – da  $\omega_m$  nicht beliebig klein gewählt werden kann – zu Modu-

lationsperioden übergehen, die kleiner als die Relaxationszeiten sind („schnelle Modulation“). Das führt zu komplizierteren Modulationseffekten. Wenn

$$\omega_m, \gamma H_m \gg 1/T_2^* \quad (5)$$

gilt, dreht ein erster Resonanzdurchgang den Vektor  $\mathfrak{M}$  in Abb. 1 um einen gewissen Winkel aus seiner Gleichgewichtslage heraus.  $\mathfrak{M}$  kehrt aber nicht in seine Ursprungslage zurück, bevor die nächste Resonanz stattfindet. Diese erteilt der Kernmagnetisierung eine neue Störung. Nach einer Anzahl von Durchgängen wird sich schließlich ein stationärer Zustand einstellen, der einem gewissen dynamischen Gleichgewicht zwischen Relaxationsmechanismus und Störmechanismus entspricht. Das Spinsystem vermag dabei den einzelnen schnellen Magnetfeldänderungen nicht mehr zu folgen, das durch die Quermagnetisierung erzeugte Signal ist nicht mehr mit der Feldmodulation in Phase.

Obwohl derartige Modulationseffekte in der Literatur wiederholt mathematisch behandelt worden sind<sup>3-11</sup>, bleiben die Ergebnisse aus zwei Gründen für die praktische Anwendbarkeit einer schnellen Modulation unbefriedigend:

1. Die meist umfangreichen Berechnungen sind unübersichtlich, das Zustandekommen der Signale unter bestimmten Bedingungen wird nur sehr unanschaulich verständlich. Vor allem bleibt etwas unklar, warum die absorbierte Leistung von  $u$  und von  $v$  abhängen kann.

2. Die Realisierung im Kernresonanzspektrometer stößt auf Schwierigkeiten, wenn man nicht sofort die Abhängigkeit der Signalform und -stärke von den Versuchsbedingungen übersieht.

Daher wird eine solche Modulation gewöhnlich als zu kompliziert und als wenig geeignet für die Kernresonanzspektroskopie hingestellt. Die vorliegende Diskussion will die aufgezeigten Lücken schließen und Charakter wie Verlauf der Resonanzlinien an Hand des makroskopischen Modells mit einer Analyse des Bewegungsablaufes der Kernmagnetisierung erklären. Es wird weiter gezeigt, daß neben anderen Vorteilen die praktische Anwendung nicht schwieriger, die Empfindlichkeit sogar besser als bei den sonst meist üblichen Nachweismethoden ist. Das Verfahren wurde z. B. mit Erfolg

<sup>3</sup> R. KARPLUS, Phys. Rev. **73**, 1027 [1948].

<sup>4</sup> E. SALPETER, Proc. Phys. Soc., Lond. **63**, 337 [1950].

<sup>5</sup> B. SMALLER, Phys. Rev. **83**, 813 [1951].

<sup>6</sup> R. GABILLARD, C. R. Acad. Sci., Paris **232**, 1477 [1951].

<sup>7</sup> J. BURGESS u. R. BROWN, Rev. Sci. Instrum. **23**, 334 [1952].

<sup>8</sup> K. HALBACH, Helv. Phys. Acta **27**, 259 [1954].

<sup>9</sup> K. HALBACH, Helv. Phys. Acta **29**, 37 [1956].

<sup>10</sup> J. ROCARD, Arch. Sci., Geneve **9**, 237 [1956].

<sup>11</sup> H. PRIMAS, Helv. Phys. Acta **31**, 17 [1958].

zur Messung von Vergrößerungsfaktoren durch dynamische Polarisation in sehr schwachen Magnetfeldern benutzt<sup>12, 13</sup>.

### Bewegungsablauf und Signalform

Die Aufnahme des Kernresonanzspektrums soll in einem Magnetfeld (3) durch langsame Veränderung von  $h$  gemäß (4) erfolgen. Die anschließende Diskussion lässt sich auf beliebige Werte von  $H_m$  und  $\omega_m$  anwenden, jedoch gewinnt die anschaulichkeit mit der Annahme (5). Für die einzelnen Magnetfelder gilt  $H_1, H_m \ll H_0$ . Von Sättigungseffekten wird zunächst abgesehen ( $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2 \ll 1$ ).

Der Sinusmodulation des Magnetfeldes entspricht eine Frequenzmodulation der LARMOR-Frequenz,

$$\omega_L(t) = \omega_0 + \gamma h + \gamma H_m \cos \omega_m t.$$

Durch den Übergang in ein rotierendes Koordinatensystem, in welchem das hochfrequente Drehfeld  $H_1$  ruht, erkennt man, daß Bewegungsablauf und Resonanzerzeugung unbeeinflusst bleiben, wenn an Stelle der Feldmodulation eine Frequenzmodulation des Drehfeldes tritt<sup>9, 14</sup>. Für das vorliegende Problem kann deshalb ebenso von einem festen Magnetfeld

$$H_z = H_0 + h$$

und einer Drehfeldfrequenz

$$\omega = \omega_0 + \gamma H_m \cos \omega_m t$$

ausgegangen werden. Diese wird durch ein Wechselfeld

$$\begin{aligned} H_x &= 2 H_1 \cos(\omega_0 + \gamma H_m \cos \omega_m t) t \quad (6 \text{ a}) \\ &= 2 H_1 \cos\left(\omega_0 t + \frac{\gamma H_m}{\omega_m} \sin \omega_m t\right) \end{aligned}$$

erzeugt. Das frequenzmodulierte Feld (6 a) lässt sich – wie in der HF-Technik oft üblich – als FOURIER-Reihe darstellen:

$$H_x = 2 H_1 \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l\left(\frac{\gamma H_m}{\omega_m}\right) \cos(\omega_0 + l \omega_m) t \quad (6 \text{ b})$$

und besitzt somit ein Spektrum nach Abb. 2.  $J_l$  sind BESSEL-Funktionen  $l$ -ter Ordnung vom Argument  $\gamma H_m / \omega_m$ . Resonanz tritt ein, wenn  $h$  einen der Werte

$$h = l \cdot (\omega_m / \gamma), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7)$$

<sup>12</sup> W. MÜLLER-WARMUTH, Z. Naturforschg. **15 a**, 927 [1960].

<sup>13</sup> P. PARIKH, Dissertation D 77, Mainz 1961 (unveröffentlicht).

<sup>14</sup> R. POUND, Rev. Sci. Instrum. **28**, 966 [1957].

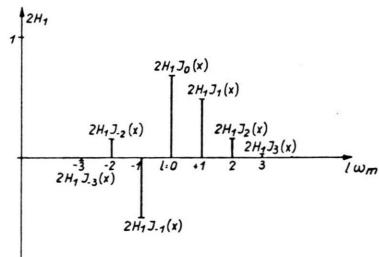


Abb. 2. Frequenzspektrum des Hochfrequenzfeldes für  $x=1,2$ .

nimmt. An Stelle der statischen Resonanzlinie ( $h=0$ ) erhält man also ein Spektrum mit Zentrallinie ( $l=0$ ) und Seitenbändern. Abb. 2 zeigt für einen speziellen Modulationsindex  $x = \gamma H_m / \omega_m$ , wie die Einflüsse der höheren Seitenbänder abnehmen.

Zur Erklärung der Signalform wird das Verhalten der Kernmagnetisierung in einem mit der Frequenz  $\omega_0 + l \omega_m$  rotierenden Koordinatensystem betrachtet. Die Magnetisierungskomponenten sind darin für den langsamen adiabatischen Durchgang die entsprechenden Lösungen der BLOCHSchen Gleichungen

$$\begin{aligned} u_l &= \frac{\gamma H_1 J_l(x) M_0 T_2^* (\gamma h + l \omega_m) T_2^*}{1 + (\gamma h + l \omega_m)^2 T_2^{*2} \gamma^2 H_1^2 J_l^2(x) T_1 T_2^*}, \quad (8) \\ v_l &= \frac{\gamma H_1 J_l(x) M_0 T_2^*}{1 + (\gamma h + l \omega_m)^2 T_2^{*2} + \gamma^2 H_1^2 J_l^2(x) T_1 T_2^*}. \end{aligned}$$

Die Hochfrequenzfeldkomponente  $H_1 J_l(x)$  ruht nämlich in diesem System und erzeugt bei langsamer Änderung von  $h$  um den Wert (7) herum Resonanz, sie dreht  $\mathcal{M}$  aus der  $z$ -Richtung heraus. Die Vektorspitze beschreibt eine der Abb. 1 entsprechende Ellipsenbahn, deren Projektion auf die  $x'$ ,  $y'$ -Ebene in Abb. 3 dargestellt ist. Die zugehörige Leistungsabsorption beträgt analog (2)

$$(\Delta P)_0 = \omega_0 V_p H_1 J_l(x) v_l. \quad (9)$$

Nun sind aber nach (6 b) gleichzeitig hochfrequente Drehfeldkomponenten  $H_1 J_k(x)$  zugegen, die in unserem Koordinatensystem mit den Winkelgeschwindigkeiten  $(l-k) \omega_m$  umlaufen. In Abb. 3 sind davon nur die benachbarten eingezeichnet, welche mit  $+\omega_m$  oder  $-\omega_m$  rotieren. Auch alle diese Komponenten tragen zur Leistungsabsorption bei. Zu (9) addieren sich also noch Anteile  $(\Delta P)_{l-k}$  für  $k \neq l$ . die harmonischen Charakter besitzen. Die Berechnung erfolgt wie bei (2), für Absorption verantwortlich sind die zu den  $H_1 J_k$  senkrechten Magnetisierungskomponenten. Nach Abb. 3 absorbiert z. B.

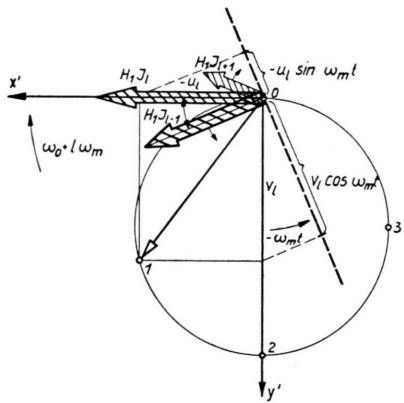


Abb. 3. Projektion des Bewegungsablaufes von  $\mathfrak{M}$  auf die  $x', y'$ -Ebene eines mit  $\omega_0 + l \omega_m$  rotierenden Koordinatensystems bei Durchgang durch die  $l$ -te Seitenbandresonanz unter Einwirkung der Drehfelder  $H_1 J_k(x)$ .

aus dem Feld  $H_1 J_{l-1}$  die Komponente

$$v_l \cos \omega_m t + u_l \sin \omega_m t,$$

aus  $H_1 J_{l+1}$  die Komponente

$$v_l \cos \omega_m t - u_l \sin \omega_m t.$$

Die Kernresonanzabsorption bei der Frequenz  $\omega_m$  beträgt somit

$$\begin{aligned} (\Delta P)_{\omega_m} &= (\Delta P)_{l+1} + (\Delta P)_{l-1} \\ &= \omega_0 \cdot V_p H_1 \{ [J_{l+1}(x) + J_{l-1}(x)] v_l \cos \omega_m t \\ &\quad - [J_{l+1}(x) - J_{l-1}(x)] u_l \sin \omega_m t \}. \end{aligned} \quad (10)$$

Ähnlich lassen sich die Absorptionsanteile  $(\Delta P)_{2\omega_m}$ ,  $(\Delta P)_{3\omega_m}$ , ... angeben. Die gesamte bei Durchfahren der Resonanzstelle (7) in Gegenwart einer Modulation absorbierte Leistung beträgt dementsprechend

$$(\Delta P)_l = \sum_k (\Delta P)_{(l-k)\omega_m}. \quad (11)$$

Sie wirkt sich bei Verwendung eines der üblichen Kernresonanzempfänger als Amplitudenmodulation der Hochfrequenz aus. In der Nachweistechnik siebt man nach der Demodulation vorteilhaft eine scharfe Frequenz, am besten  $\omega_m$  selbst oder  $2\omega_m$ , heraus. Durch Benutzung eines phasenempfindlichen Detektors arbeitet man dann nicht nur schmalbandig, mit Hilfe einer geeigneten Einstellung der Vergleichsphase lassen sich zudem Signale registrieren, die  $v$  (Absorptionstyp) oder  $u$  (Dispersionstyp) proportional sind.

In Abb. 4 ist ein Beispiel für die Spektralverteilung der relativen Signalamplituden bei der Zentral- und den ersten beiden Seitenbandresonanzen gege-

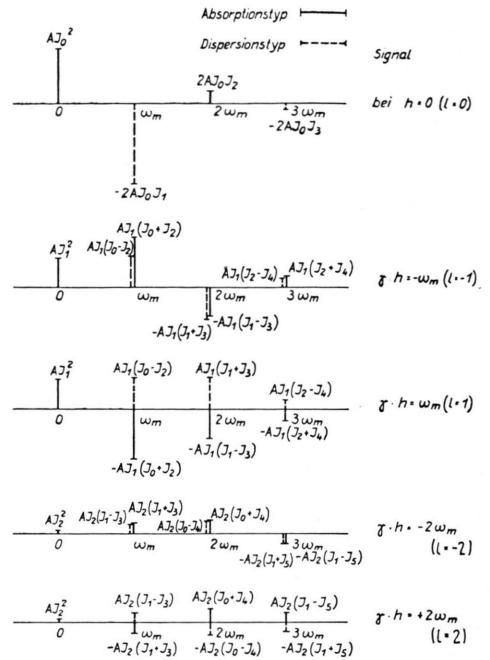


Abb. 4. Spektralverteilung der Signalamplituden für  $l=0$ ,  $\pm 1, \pm 2$ ; Modulationsindex  $x=1,2$ .

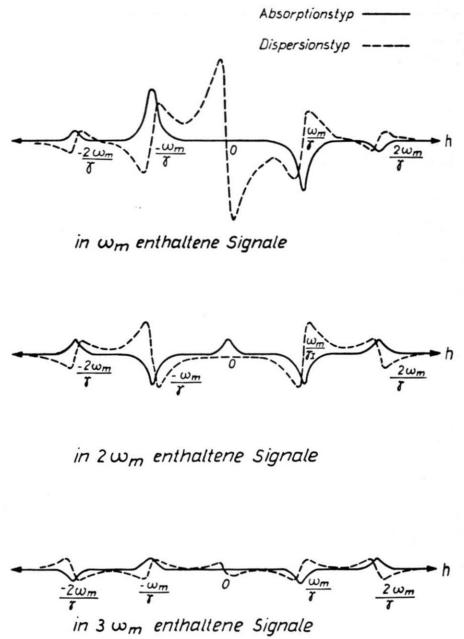


Abb. 5. Kernresonanzsignale nach phasenempfindlicher Gleichrichtung in Umgebung der Zentrallinie ( $h=0$ ), gerechnet für  $x=1,2$  und  $2/T_2^* = 4/25 \omega_m$ .

ben. Abb. 5 zeigt die Kurvenformen für den gleichen Fall in Abhängigkeit von  $h$ , die man nach schmalbandiger Verstärkung und phasenempfindlicher Gleichrichtung erhält. Die in  $\omega_m$  enthaltenen Signale

wurden aus (10) mit (8), die in  $2\omega_m$  und  $3\omega_m$  enthaltenen aus den entsprechenden Gliedern von (11) mit (8) berechnet. Die schnelle Modulation weist den Vorteil auf, daß rein sinusförmige Signale verarbeitet und trotzdem an Stelle der Ableitung die  $v$ - und (auch mit einem Kernabsorptionsempfänger)  $u$ -Kurven selbst registriert werden können.

Die durch Analyse des Bewegungsablaufes im rotierenden Koordinatensystem gewonnenen Ergebnisse (10) und (11) für die Kernresonanzabsorption stimmen mit den durch Lösung der Blochschen Gleichungen berechneten überein. Wenn man z. B. in Gl. (13) von Anm.<sup>11</sup> unsere Bezeichnungen einführt, ergibt sich ein Absorptionsanteil

$$v = \sum_{k,l} J_k(x) \{ v_l \cos \omega_m t(k-l) - u_l \sin \omega_m t(k-l) \} \quad (12)$$

(12) enthält als Glieder die hier für jede Seitenbandresonanz und für jede Harmonische gesondert abgeleiteten Absorptionsanteile. Diese Zerlegung erleichtert nicht nur das Verständnis, sie wird auch durch die experimentellen Bedingungen nahegelegt.

### Praktische Anwendung und Empfindlichkeit

Die Wahl der Versuchsbedingungen ( $\omega_m$ ,  $H_m$ ,  $H_1$ ) in Abhängigkeit der Relaxationszeiten  $T_1$  und  $T_2^*$  hängt von der Art der zu untersuchenden Kernresonanzen ab. Die Modulationsfrequenz ist größer als die Linienbreite  $2/T_2^*$ . Bei größeren Linienkomplexen sorgt man dafür, daß die Seitenbänder der Modulation außerhalb des Hauptlinienspektrums liegen. Kommt es allein auf Empfindlichkeit einer Einzelresonanz an, so erscheint es vorteilhaft, Zentrallinie und dicht beiliegende erste Seitenbandresonanzen zu registrieren. Im übrigen bestimmt der Modulationsparameter  $x$  wesentlich die Größe der Signale.

Für die praktische Anwendung kommen fast ausnahmslos die Kernresonanzsignale (10) bei der Frequenz  $\omega_m$  in Frage, die in Abb. 5 oben dargestellt sind. Je nach Einstellung der Modulationsphase lassen sich in (10)  $u$ -Typ und  $v_l$ -Typ trennen. Der günstigste Arbeitspunkt wird aus den Darstellungen der relativen, (10) proportionalen Signalgröße als Funktion von  $x$  entnommen. Abb. 6 gilt für Zentral- und erste Seitenresonanzen des Dispersions( $u_l$ )-Typs, Abb. 7 für die Seitenbänder des Absorptions( $v_l$ )-Typs. Parameter ist in beiden Abbildungen  $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^*$ . Bei der Festlegung der Mo-

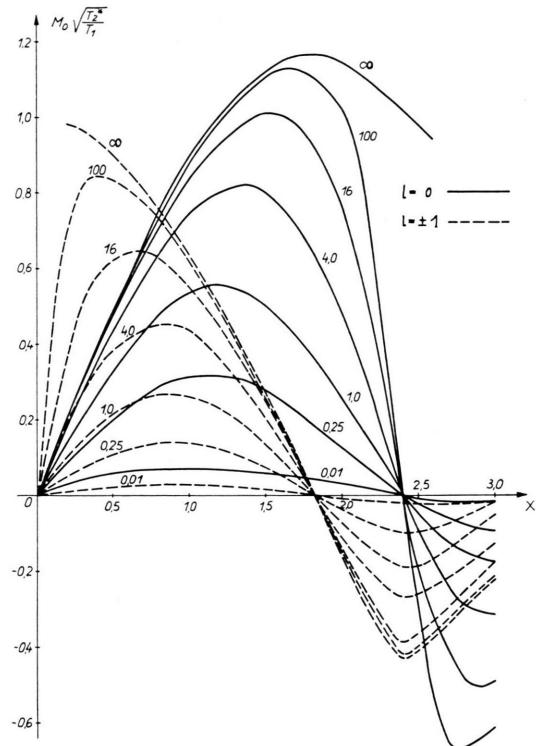


Abb. 6. Relative Signalamplitude im Resonanzmaximum für  $u_0$ - und  $u_{\pm 1}$ -Typ als Funktion des Modulationsindex  $x$  mit  $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^*$  als Parameter.

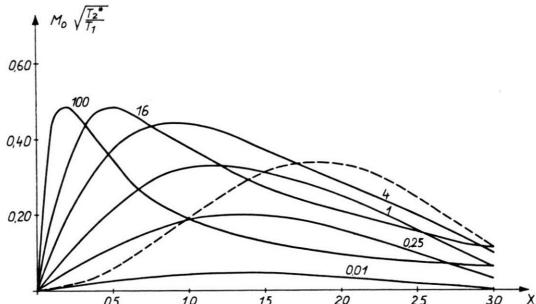


Abb. 7. Relative Signalamplitude im Resonanzmaximum für  $v_{\pm 1}$ -Typ ( $v_0=0$ ) als Funktion des Modulationsindex  $x$  mit  $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^*$  als Parameter. Die gestrichelte Kurve ist  $J_1^2(x)$ , sie wird zur Ermittlung der Linienbreite benutzt.

dulationsamplitude muß zusätzlich beachtet werden, daß eine Sättigungsverbreiterung der Linien auftritt, welche auch von  $x$  abhängt. Nach (8) beträgt die Linienbreite

$$\Delta\omega = (2/T_2^*) \sqrt{1 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^* J_l^2(x)} \quad (13)$$

mit  $l=0,1$ . Für die Arbeitspunkte der Abb. 6 sinkt die Linienbreite mit steigenden  $x$  für die Zentrallinie bis  $x=2,42$ , sie wächst für die Seitenlinien. Die un-

terschiedliche Verbreiterung der Seitenbandresonanzen läßt sich für eine Messung von  $T_1$  ausnutzen.

Zum Vergleich der Empfindlichkeit werden die relativen Signalamplituden unter entsprechenden Voraussetzungen für die in der Einführung aufgeführten Kernresonanznachweismethoden angegeben. Die Signale werden bei optimaler Einstellung von  $H_1$  (Sättigungsverbreiterung höchstens  $\sqrt{2}$ ) in Magnetisierungseinheiten berechnet. Dann ergibt sich folgendes Bild:

(I) *Statischer Nachweis (lineare Abtastung oder langsame Modulation großer Amplitude)*

Signal  $\sim (M_0/2) \sqrt{T_2^*/T_1}$ ;  $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^* = 1$ , natürliche Linienform um  $\sqrt{2}$  verbreitert; breitbandige Verstärkung erforderlich.

(II) *Lineare Abtastung mit schwacher Modulation*

$$(\gamma H_m T_2^*, \omega_m T_2^*, x \ll 1)$$

damit Modulationsverbreiterung  $\leq 1\%$ :

$$\gamma H_m T_2^* \leq 0,2.$$

Signal  $\sim (M_0/2) \gamma H_m T_2^* \sqrt{T_2^*/T_1} = 0,1 M_0 \sqrt{T_2^*/T_1}$ ,  $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^* = 1/2$ ,

Linienform entspricht der 1. Ableitung der Resonanz, um  $\sqrt{3}/2$  verbreitert; schmalbandige Verstärkung möglich.

(III) „*Schnelle Modulation*

$$u_0\text{-Signal} \sim 0,82 M_0 \sqrt{T_2^*/T_1},$$

$$\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^* = 4, \quad x = 1,48,$$

$$u_{\pm 1}\text{-Signal} \sim 0,71 M_0 \sqrt{T_2^*/T_1},$$

$$\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^* = 16, \quad x = 0,52,$$

$$v_{\pm 1}\text{-Signal} \sim 0,5 M_0 \sqrt{T_2^*/T_1},$$

$$\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2^{*''} = 16, \quad x = 0,52,$$

natürliche Linienformen um  $\sqrt{2}$  verbreitert, schmalbandige Verstärkung möglich.

Diese Überlegungen zeigen, daß die schnelle Modulationsmethode nicht nur für Anwendungen in Frage kommt, bei denen (I) zu unempfindlich ist und für (II) die Linien zu eng sind, sondern auch neben (II) für die Spektroskopie breiterer Linien. Außer der besseren Empfindlichkeit bestehen von Fall zu Fall besondere Vorteile – wie die Eichmöglichkeit der Linienbreite, die Vermeidung einer Integration von Ableitungskurven, der Nachweis von  $u$ -Signalen, eine leichtere Meßmöglichkeit für  $H_1$  und die Relaxationszeiten – welche eine schnelle Modulation nahelegen. Ihre Verwendung und die Deutung der Signale erscheint unter Benutzung der hier gegebenen Ergebnisse kaum schwieriger als die anderer Verfahren.

## Zur Theorie der Kernrotationen\* I

Von HANS HACKENBROICH

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München  
(Z. Naturforsch. 16 a, 1068–1076 [1961]; eingegangen am 9. Oktober 1958)

In das INGLiSSche Modell rotierender Kerne wird der von NILSSON vorgeschlagene Ausdruck für das Potential im Kern eingeführt. Aus dem Modell werden dann Eigenzustände, Gleichgewichtsdeformationen und Trägheitsmomente von g–g–Kernen aus dem Bereich der seltenen Erden sowohl störungstheoretisch wie numerisch „exakt“ berechnet. Die berechneten Trägheitsmomente sind zwar stets größer als die gemessenen, aber der Gang der berechneten Verformungen und Trägheitsmomente stimmt mit der Erfahrung befriedigend überein.

In den vergangenen Jahren sind die im wesentlichen auf BOHR und MOTTELSON<sup>1</sup> zurückgehenden Vorstellungen über die kollektiven Bewegungen

schwerer Kerne durch zahlreiche Experimente<sup>2</sup> gestützt worden.

Den einfachsten Zugang zu einer genaueren Be-

\* Der Aufsatz beruht auf einer der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät zu Göttingen im Winter 1957/58 vorgelegten Diplomarbeit.

<sup>1</sup> A. BOHR, K. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd. 26,

14 [1952]; A. BOHR u. B. MOTTELSON, K. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-fys. Medd. 27, 16 [1953].

<sup>2</sup> K. ALDER, A. BOHR, T. HUUS, B. MOTTELSON u. A. WINTER, Rev. Mod. Phys. 28, 432 [1956].