

MAGMÁGNESES REZONANCIA SPEKTROSZKÓPIA

TOMPA KÁLMÁN

TARTALOM

- A. Általános bevezetés
- B. Atommagok jellemzői
- C. A magmágneses rezonancia alapjai
- D. A magmágneses spektroszkópia kísérletek elve
- E. Spektrumok és jellemzőik
- F. Mérési feladatok

A. ÁLTALÁNOS BEVEZETÉS

A magmágneses rezonancia (továbbiakban: MMR) jellemzője, hogy a módszer a nukleáris energianívók szerkezetének vizsgálatán keresztül informál a szilárdtestek geometriai és kémiai rendjéről, azok elektron-szerkezetéről, atomi mozgásáról. A módszer szondái: az atommagok a szilárdtestben adottak, és a "kérdés-feltevés" és "válaszadás" elektromágneses sugárzás formájában történik.

Az MMR független felfedezéséért Purcell [A,1] és Bloch [A,1] 1952-ben Nobel-díjat kaptak. Purcell és munkatársai ^1H rezonanciát detektáltak szilárd paraffinban, Bloch és munkatársai ugyancsak proton rezonanciát vízben. A magmágneses rezonanciát Gorter előrejelzése [A,3] és sikertelen kísérletei óta (1936) tudatosan keresték. Felfedezése óta a módszer az anyagkutatás és anyagtudomány nélkülözhetetlen és széles körben elterjedt eszközévé vált; az MMR berendezések megtalálhatók az alapkutató laboratóriumoktól egészen a termelés ellenőrzéséig mindenütt: a gyógyszerkutatástól a gyógyszerbizonylatolásig, a biológiai rendszerekben lévő víz természetének a felderítésétől a növény-nemesítésig és tomográfiáig, a fémfizika területén a mennyiségi analízistől a finomabb szerkezeti kérdések megválasztásáig; az anyagkutatásban a folyadékkristályoktól a mágneses anyagokig, és így tovább; még a felsorolás sem lehet teljes, az irodalom kisebb könyvtárra terjed. Néhány bevezető jó könyvre és cikkekre hívnám fel a figyelmet [A4-6] az érdeklődő ezekben, az alapok mélyebb megismerésén túl, további utalásokat is talál.

B. ATOMMAGOK JELLEMZŐI

A kisméretű (10^{-14} m) atommagok jól definiált töltés- és mágnesezettség eloszlással rendelkeznek, az eloszlásokat multipólusaikkal jellemezhetjük. Az MMR szempontjából ezeket a tulajdonságokat az atommagok ismert tulajdonságainak tekintjük. Ezek a tulajdonságok: a magspin, a magmágneses dipól momentum, a mag elektromos kvadrupól momentum. Fontos még azt is megjegyeznünk, hogy az MMR módszer alapállapotú atommagokkal dolgozik.

A felsorolt tulajdonságokról részletesebben szólunk a következőkben.

1. Az impulzus momentumot $\hbar I$ -vel jellemezzük, $\hbar$ a 2π -vel osztott Planck állandó értéke $1.05 \cdot 10^{-34}$ J.s, I pedig az egész, illetve félegész számmal jellemzett magspin. Páros tömegszámú (A) és páros rendszámú (Z) atommagok spinje $I=0$, és így ezek az MMR spektroszkópia számára hozzáférhetetlenek. Fontos magok tartoznak ebbe az u.n. páros-páros kategóriába, pl. He^4 , C^{12} , O^{16} , Fe^{56} , Ni^{60} , stb.
2. A mágneses dipól momentum vektora $\vec{\mu} = \gamma \hbar \vec{I}$, a γ : giro-mágneses tényező értéke táblázatba rögzítetten megtalálható, példaképpen néhány izotrópra mi is megadjuk. Attól függően, hogy a két vektor (illetve annak maximális mérhető komponense) azonos, vagy ellenkező irányba mutat-e, $\gamma > 0$ ill. $\gamma < 0$. A mágneses momentum az a szonda, amelyen keresztül az atommag, illetve az MMR érzi a mag helyén lévő mágneses tereket.

3. Az elektromos kvadrupól momentum az atommag aszimmetrikus $\rho(r)$ töltéseloszlásából ered, és Q skalármennyiséggel jellemezzük:

$$Q = \frac{1}{e} \int (3z^2 - r^2) \rho(r) dv$$

(e : elektron töltés, z tengely a mag impulzus momentum irányába mutat és az integrált a mag térfogatára kell venni) $I \geq 1$ spinű atommagok rendelkeznek kvadrupól momentummal, ami a külső töltések által keltett elektromos tér gradiensével hat kölcsön. z tengely irányában megnyújtott töltéseloszlásu mag $Q > 0$ -val, ugyanabban az irányban összenyomott pedig $Q < 0$ -val jellemezhető.

Megközelítően 110 MMR izotópot ismerünk, pontosabban ennyi izotópnak detektálták az MMR spektrumát, közülük néhánynak az 1. táblázatban adjuk meg a jellemzőit, a többi izotóppal kapcsolatban a felsorolt irodalomra utalunk.

1. táblázat: Atommagok jellemzői

Izotóp	Spin $\hbar$ egys.	Előford. %	Kvadrupól mom.*	Rezonancia frekv. MHz egység 2.114 T térben**
^1H	1/2	99.98	-	90.00
^{27}Al	3/2	100	0.15	23.45
^{31}P	1/2	100	-	36.44
^{63}Cu	3/2	69.1	- 0.15	23.86
^{65}Cu	3/2	30.9	- 0.14	25.56

* 10^{-24} cm² egységekben

** A megadott értékből a 2π -vel osztott giromágneses faktor MHz/T egységekben könnyen számítható

C. AZ MMR MÓDSZER ÉS ALAPJAI

Reális anyagminták, így az általunk tanulmányozni kívánt szilárdtestek is nagyszámu atomot és így a felsorolt tulajdonságokkal rendelkező atommagot is tartalmaznak. Az atommagok egymással és környezetükkel is kölcsönhatásban állnak. A környezet fogalmát tágabban úgy értjük, hogy belefoglaljuk a kérdéses anyagminta minden idevonatkozó töltését, mágneses momentumát és áramát, valamint a kísérletekhez tudatosan alkalmazott külső tereket. A mag és környezete közti kölcsönhatást leíró Hamilton operátor két részre, egy $\bar{H}_M$ mágneses és egy $\bar{H}_e$ elektromos részre bontható. A mágneses részt

$$\bar{H}_M = - (\bar{\mu}, \bar{H}) \quad (C.1)$$

skalárszorzat, az elektromos részt pedig

$$\bar{H}_E = \bar{H}_G + \bar{H}_Q ; \quad \bar{H}_Q = (\tilde{Q}_{jk} \cdot \tilde{V}_{jk}) \quad (C.2)$$

formában tudjuk megadni, ahol $\bar{H}_G$ (a Mössbauer spektroszkópiában van szerepe) a gömb alaku atommag és az elektronok Coulomb kölcsönhatása, $\bar{H}_Q$ pedig a másodrendű tenzorok szorzatával megadott elektromos kvadrupól kölcsönhatás; továbbá $\bar{H}$ az összes (külső és belső) mágneses teret, $\tilde{Q}_{jk}$ a Q -val kifejezhető kvadrupól momentum tenzort és $\tilde{V}_{jk}$ pedig a magon kívüli töltésekből származó elektromos térgradiens tenzort jelenti. A pontosabb definíciókra visszatérünk.

A fellépő kölcsönhatások - természetesen a vizsgált anyag tulajdonságaitól függően - meghatározzák azt az energianívó rendszert, amelyen az atommagok elhelyezkednek és amelyen belül - a kiválasztási szabályoknak megfelelően - a lehetséges átmenetet létrehozuk, illetve létrejönnek.

A módszerekhez tartozó formalizmus energia sajátértékeket (nívók), betöltöttségeket és átmeneti valószínűségeket tartalmaz. Általában a kvantummechanika nyújtotta eredményeket vázoljuk, csak ott térünk el attól, ahol a klasszikus leírás azonos eredményt ad a kvantumossal és a jelenség könnyebb megértéséhez vezet.

1. MMR ALAPOK: ELEMI KVANTUMELMÉLET

a/ Helyezzünk egy I spinű atommagot H_0 állandó z irányú külső mágneses térbe. A mag Hamilton operátora:

$$\bar{H}_z = -\gamma \hbar H_0 \bar{I}_z,$$

$\bar{I}_z$: a magspin z komponensének operátora.

A $\bar{H}$ operátor sajátértékei pedig

$$E_m = -\gamma \hbar H_0 m, \quad (C.3)$$

ahol m az atommag mágneses kvantumszáma, és lehetséges értékei: $m = I, I-1; \dots -I$.

Az energianívók egyenlő távolságra helyezkednek el egymástól, a szomszédos nívók energiakülönbsége:

$$\Delta E = \gamma \hbar H_0. \quad (C.4)$$

Várható, hogy külső perturbáló tér hatására az energianívók között átmenet jön létre. A magrezonancia technikában alkalmazott, a H_0 térre merőleges x irányu változó H_1' amplitudójú mágneses tér esetén a perturbáló operátor

$$\bar{H}_{\text{pert}} = - \gamma \hbar H_1' \bar{I}_x \cos \omega t$$

alaku, ahol $\bar{I}_x$: a spin x komponensének operátora és ω pedig a gerjesztő tér körfrekvenciája.

A $(m'' | \bar{I}_x | m')$ mátrixelemek csak $m'' = m' \pm 1$ esetben különböznek zérótól, megengedett átmenetek csak szomszédos nívók között jöhetnek létre. Az energiamegmaradás törvénye alapján kapjuk a rezonancia feltételt:

$$\hbar \omega_0 = \Delta E = \gamma \hbar H_0, \text{ azaz } \omega_0 = \gamma H_0. \quad (C.5)$$

Ha a kiszemelt atommagnak a környezetében mágneses momentummal rendelkező szomszédok vagy mozgó töltések vannak, akkor az általuk keltett mágneses tér az atommag helyén különbözik zérótól (illetve az általuk alkalmazott H_0 tértől), és értéke a környezet tulajdonságaitól függ. Számítása úgy történik, hogy meghatározzuk az atommag Zeeman energiájának sajátértékeit és a (C.4) egyenletnek megfelelő

$$\Delta E = \gamma \hbar H; \quad H = H_0 + \Delta H \quad (C.6)$$

összefüggést az atommag helyén lévő mágneses tér definíciós egyenletének tekintjük. Ebben az esetben a

lehetséges energianívók közti megengedett átmenetek gerjesztéséhez szükséges váltakozó mágneses tér körfrekvenciájának és az atommag giromágneses faktorának az ω/γ hányadosa az atommag helyén lévő mágneses térrel lesz egyenlő,

$$\frac{\omega}{\gamma} = H. \quad (C.7)$$

Ez utóbbi összefüggésünk a tér MMR módszerrel történő kísérleti meghatározására is utal. (A C.6 és C.7) összefüggéseket a Knight eltolódás mérésnél használjuk fel.)

Nagyszámu atommagot tartalmazó ferro- vagy antiferromágneses, illetve külső mágneses térbe helyezett dia- vagy paramágneses minták esetén eleve nem lehetünk bizonyosak afelől, hogy az atommag helyén lévő tér értéke minden egyes atommagnál ugyanaz, a tapasztalat szerint a tér atommagtól atommagig változik.

A térerősség eloszlását a $g(H)$ sűrűségfüggvény írja le. Azonnal hozzá kell tennünk, hogy $g(H)$ nem minden esetben határozható meg elméletileg. Nagyszámu atommagból álló sokaságban az atommagoknál lévő tér jellemzésére a statisztikus fizikában szokásos mennyiségeket, a tér $\langle H \rangle$ várható értékét $\langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle$ szórásnégyzetét stb. vezetjük be. Ebben az esetben (C.6) és (C.7) definíciós egyenleteink az átlagértékekre vonatkoznak. E mennyiségek értéke a legtöbb esetben elméletileg is és kísérletileg is meghatározható.

A tapasztalat azt mutatja, hogy az atommag helyén lévő tér különböző eredetű járulékaiknak (pl. az atommagoktól vagy fémekben a vezetési elektronoktól származó térnek) a hatása eltérő lehet, pl. az egyik csak az átlagértékét a másik pl. csak a szórásnégyzetét változtatja meg. Ennek alapján a különböző effektusok szétválaszthatók, egy összetett jelenség szétbontása válik lehetővé, és az elemzés az anyag törvényeinek mélyebb megismeréséhez vezet.

b/ Termodinamikai egyensúlyban a (C.3) összefüggéssel jellemzett energianívókon N számú atommag esetén

$$N_m \sim \exp(-E_m/kT) \quad (C.8)$$

mag helyezkedik el a Boltzmann eloszlásnak megfelelően, ahol k a Boltzmann állandó és T pedig az abszolút hőmérséklet. A minta (N spinből álló sokaság) eredő mag mágnesezettsége $z||H_0$ irányu lesz és a mágnesezettség nagyságát a Curie törvény adja

$$M_0 = \frac{N\hbar^2\gamma^2 \cdot I(I+1)}{3kT} H_0 = \kappa_0 H_0 \quad (C.9)$$

és κ_0 a mag szuszceptibilitása. Tehát egyensúly esetén csak z komponense van a mágnesezettségnek és az egyensúly azt jelenti, hogy a spinrendszer önmagával is és környezetével is termodinamikai egyensúlyban van.

c/ Külső perturbáció, pl. H_0 -ra merőleges rádiófrekvenciás gerjesztés hatására elérhető, hogy a magmágnesezettség z komponense M_z eltér M_0 -tól és a z -re

merőleges komponensek $M_{x,y}$ értéke pedig zérótól. Az egyensúlyhoz való tartás időskáláját relaxációs időkkel jellemezzük: az $M_z M_0$ -hoz tartását T_1 spin-rács relaxációs idővel, az $M_{x,y}$ zéróhoz tartását pedig T_2 spin-spin relaxációs idővel. "Rács" elnevezéssel illetük a környezetet, és nem nehéz belátni, hogy a spin-rács relaxációs mechanizmus energiát cserél a környezettel, azaz a ráccsal, lehül vagy felmelegszi az eltérés irányától függően. A spin-spin relaxáció a spinrendszer energiáját változtatlanul hagyja, $M_{x,y}$ zéróvá válhat anélkül, hogy M_z változna. Mindkét relaxációs mechanizmust az anyag és nem a szabad spin tulajdonságai határozzák meg, így anyagvizsgálati szempontból fontos jellemzők, fenomenologikus bevezetésüket a következő fejezetben adjuk, konkrét formájukkal pedig később találkozunk.

2. MMR ALAPOK: VEKTORMODELL, IMPULZUS MMR ALAPJAI, BLOCH EGYENLETEK

a/ A klasszikus magmágneszettség vektorra, $\vec{M}$ -re H térben

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma |\vec{M} \times \vec{H}| \quad (C.10)$$

forгатónyomaték hat, az összefüggés az "impulzusmomentum deriváltja egyenlő a forгатónyomatékkal" törvényből egyszerűen származtatható. Az egyenlet forgó koordinátarendszerben ugyanilyen alakú, azzal a különbséggel, hogy $\vec{H}$ helyére

$$\vec{H}_{\text{eff}} = \vec{H} + \vec{\Omega}/\gamma \quad (C.11)$$

effektív tér lép, ahol $\bar{\Omega}$ a forgó koordinátarendszer szögsebesség vektora $\bar{H} = H_0 \bar{k}$ irányu állandó tér és $\bar{\Omega} = -H_0 \bar{k}$ választás esetén $H_{eff} = 0$; és $\bar{H}$ a forgó rendszerben állandó, azaz a forgó koordinátarendszerrel együtt forog; precesszál és a H_0 -lal bezárt szögét nem változtatja; (C.1)-nek megfelelően energiáját sem változtatja. A tér a momentumot nem "forgatja be" saját, vagy azzal antiparallel irányban. A precesszió körfrekvenciája $H_{eff} = 0$ -ból

$$\Omega_0 = \gamma H_0 \quad (C.12)$$

pontosan megegyezik az elemi kvantumelméletből számítottal. Itt legyen szabad felhívni a figyelmet, bár (C.12) levezetése során ez természetesnek tűnik, de a kvantummechanikai rezonancia feltétel (C.5) sem tartalmazza a Planck állandót, így várható a klasszikus megfontolások korrektsége.

Második lépésben legyen a tér H_0 állandó és egy rá merőleges H_1 forgó mágneses tér eredője; a forgó tér a lineárisan poláros rádiófrekvenciás tér megfelelő irányban, azaz a forgó koordinátarendszer x' tengelyével együttforgó komponense, ekkor

$$\bar{H}_{eff} = (H_0 - \frac{\Omega}{\gamma}) \bar{k} + H_1 \bar{i}', \quad (C.13)$$

ahol $\bar{i}'$ a forgó koordinátarendszer x' tengelye irányába mutató egységvektor. Rezonancia esetén az első tag zéró és $\bar{H}_{eff} = H_1 \bar{i}'$ és az egyenlet strukturájából következik, hogy M vektor a forgó koordinátarendszerben

$$\omega_1 = \gamma H_1 \quad (C.14)$$

szögsebességgel processzál H_1 körül. A mozgás a laboratóriumi rendszerben természetesen a két precesszió eredője lesz. Ami számunkra most a leglényegesebb az az, hogy $\bar{M}$ változtatja az állandó térrel bezárt szögét - tehát energiát képes felvenni, illetve leadni. Az elfordulás mértéke, ha a H_1 tér τ ideig hat

$$\omega \tau = \gamma H_1 \tau \quad (C.15)$$

Az összefüggés az impulzus MMR spektroszkópia leglényegesebb összefüggése. A τ ideig tartó rádiófrekvenciás tér: a rádiófrekvenciás impulzus tetszőleges állapotba tudja forgatni a mágnesezettséget, ha eredetileg $\bar{M}_z || \bar{H}_0$ állapotban volt, azaz termodinamikai egyensúlyban és τ -t úgy választjuk meg, hogy $\omega_1 \tau = \gamma H_1 \tau = \pi/2$ legyen, akkor az impulzus után a mágnesezettségnek csak x, y komponense van és z nincs, ha τ -t kétszer ilyen hosszúra választjuk, úgy az elforgatás π , azaz 180° -os és $M_z = -M_0$ lesz az impulzus után.

A kétféle impulzus illetve ezek kombinációja adja az impulzus MMR-ben kidolgozott sokféle módszer alapját.

Nem kell különösebb termodinamikai jártasság ahhoz, hogy észrevegyük, hogy a $\pi/2$ -es ill. π -s impulzusokkal létrehozott magmágnesezettség állapotok "nagyon messze" vannak az egyensúlytól és nyomonkövetésük a relaxációs idők mérését teszi lehetővé.

b/ A megelőző pontban a szabad spinekből álló sokaság klasszikus mozgását vizsgáltuk. Reális anyagban a spinek egymás közötti és ráccsal való kölcsönhatásával kell számolni, a relaxációs folyamatok bevezetésénél már említést tettünk erről. Bloch volt az, aki a kölcsönhatásokat nagyon szellemesen beépítette a (C.10) klasszikus mozgásegyenletbe, formálisan úgy, mintha a kölcsönhatások a szabad precesszió "surlódását" okoznák. Pontosabban a Bloch egyenletek komponensekben felírva a következők:

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma |\vec{M} \times \vec{H}|_z - \frac{M_z - M_0}{T_1} \quad (C.16)$$

$$\frac{dM_{x,y}}{dt} = \gamma |\vec{M} \times \vec{H}|_{x,y} - \frac{M_{x,y}}{T_2}$$

A második egyenlet az x ill. y komponensekre vonatkozó egyenleteket összevontan tartalmazza. Az egyenletek felírásához szükséges tudnivalók nagyrészeről már szó esett: arról, hogy miért van két relaxációs idő; mihez tart a mágnesezettség a relaxáció során; felesleges lenne még egyszer megismételni. Új elem a felírás során, hogy a forgatónyomatékokat tartalmazó tag és a relaxációs tag összevonódik.

Az egyenletrendszer megoldása forgó koordinátarendszerben célszerű a megelőző pontban definiált körülmények között. Az egyenletrendszer stacionárius megoldását írjuk fel, amit

$$\frac{dM_x}{dt} = \frac{dM_y}{dt} = \frac{dM}{dt}$$

feltétel mellett kapunk, mégpedig úgy, hogy az M_x , M_y komponens helyett bevezetjük az alábbi transzformációval a komplex szuszceptibilitást

$$M_x + iM_y = (\kappa' - i\kappa'') 2H_1 e^{i\omega t}$$

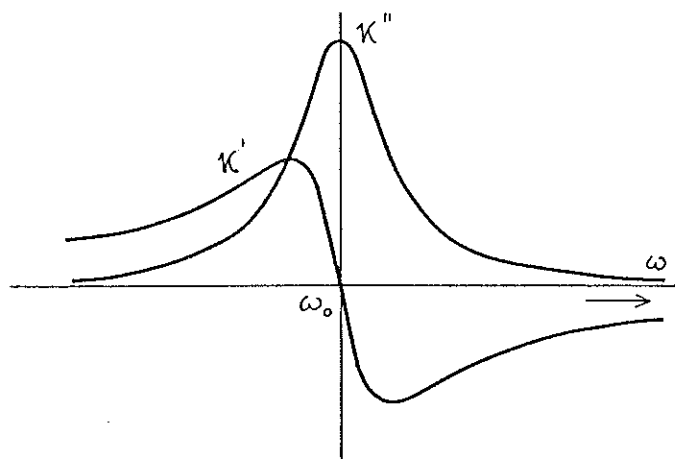
azaz a forgó koordinátarendszerbeli mágnesezettség komponensekkel arányos mennyiségeket a κ' diszperziót és κ'' abszorpciót adjuk meg

$$M_z = \kappa_0 H_0 \frac{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2}$$

$$\kappa' = \frac{1}{2} \kappa_0 \omega_0 T_2 \frac{(\omega_0 - \omega) T_2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \quad (C.17)$$

$$\kappa'' = \frac{1}{2} \kappa_0 \omega_0 T_2 \frac{1}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 T_2^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2}$$

Az összefüggésekben szereplő $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2$ mennyiséget telítési faktornak hívják, ha értéke lényegesen kisebb mint egy, úgy világosan látható, hogy Lorentz alaku jeleket kapunk a Bloch egyenletek megoldásaként, amit a C.1. ábrán be is mutatunk.



C.1. ábra: A Bloch egyenletek megoldásaként kapott abszorpció és diszperzió

A megfigyelt rezonancia jel $H_1 \kappa'$ illetve $H_1 \kappa''$ -vel vagy azok lineáris kombinációjával arányos a detektálás módjától függően, κ'' maximum $\omega = \omega_0$ -nál van és a telítés függvényében $\gamma^2 H_1^2 T_1 T_2 = 1$ értéknél. A diszperzió a telítési faktor végtelen értékével maximális értékhez tart.

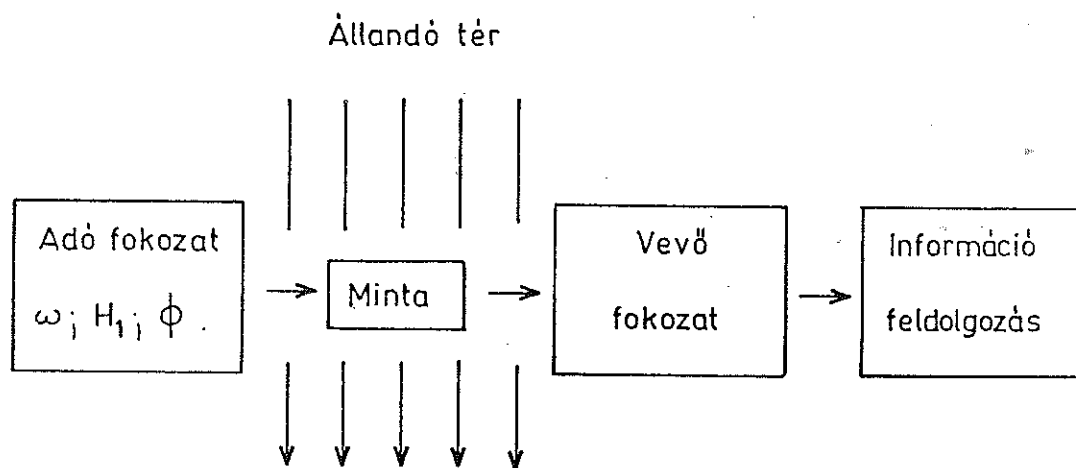
A Bloch egyenletek megoldása folyadékok esetén korrektil írja le a megfigyelt jelenségeket, beleértve a telítést is. Szilárd testek esetén a megfigyelt jel inkább Gauss alakú és a diszperzió telítése is eltér a (C.17)-ben

megjósolttól; ugyanakkor az abszorpció telítését jól írja le (C.17). Meg kell említeni, hogy természetes izotópösszetételű Fe és Ni mintákon a megfigyelt NMR vonalalakok megfelelnek a Bloch szuszceptibilitásoknak. Ha gyorsabban közlünk energiát a spinrendszerrel mint ahogy az a spin-rács mechanizmuson keresztül megtud szabadulni tőle ($\gamma^2 H^2 T_1 T_2 > 1$), úgy a rendszer további energiafelvételre képtelen: telítődött.

A relaxációs tagok exponenciális időfüggést adnak, konkrét megoldásukat a fejezet végén felírjuk. Fémek esetén T_2 általában rövidebb mint T_1 , és T_1 millisec. nagyságrendbe esik.

D. A MAGMÁGNESES REZONANCIA KISÉRLETEK ELVE

Az MMR kísérlet elvén a D.1. ábrán mutatjuk be. Teljesen általánosan egy ω körfrekvenciájú H_1 amplitudójú elektromágneses teret előállító adófokozatból egy ugyanolyan frekvenciatartományban üzemelő vevőfokozatból és az állandó mágneses teret nyújtó mágnesből áll (ez az utóbbi nem minden esetben szükséges; mágneses anyagokban a belső tér, egyes kristályokban az elektromos térgradiens pótolhatja).



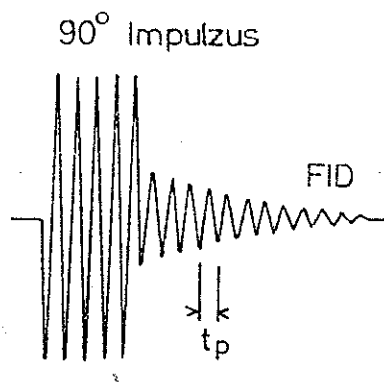
D.1. ábra: MMR mérés elvi sémája

A gerjesztő elektromágneses sugárzás H_1 amplitudója és ω frekvenciája mellett annak ϕ fázisa is könnyen kézbentartható és széles tartományban szabályozható, ami az MMR spektroszkópiának nagy előnye. A gerjesztő tértől függően az MMR spektroszkópia két ága különböztethető meg: folytonos gerjesztésű és impulzus gerjesztésű MMR spektroszkópia.

Folytonos gerjesztés esetén a gerjesztő tér végtelen szinuszhullámnak tekinthető; és a rezonancia átfogása ω kismértékű, ω_0 körüli hangolásával történik és a kapott információ $f(\omega)$ frekvencia spektrum (vagy a rezonancia feltétel következtében a vele ekvivalens $g(H)$ térerősség spektrum) formájában jelenik meg. A folytonos gerjesztés előnye az egyszerűsége, jelentősége az impulzusmódszerek fejlődésével csökken, relaxációs idők mérésére körülményesen alkalmazható.

Impulzus gerjesztésnél a gerjesztő tér rövid ideig esik a mintára, az impulzus hosszát a (C.15) összefüggésnek megfelelően a kívánt forgatást elérendő, állítjuk be, vagy több gerjesztő impulzus esetén az impulzus kombinációnak megfelelően. Az impulzus kombináció megkövetelheti az egymás után következő impulzusok ϕ fázisának a variálását is (részletek [A.5]-ben találhatók). A gerjesztő impulzus, mivel hossza véges, nem egyetlen frekvenciájú rezgést, hanem Fourier-sorainak megfelelően egy $\Delta\omega_p$ frekvenciaszélességű rádiófrekvenciás sugárzást jelent, és így rövid impulzus és keskeny rezonancia görbe esetén egyetlen impulzus az egész MMR spektrumot gerjeszti és a kapott $F(t)$ információ, az időtartományban $f(\omega)$ Fourier transzformáltjaként áll elő, tehát $f(\omega)$ és

$F(t)$ egymással Fourier transzformációs kapcsolatban vannak. A kérdés távolról sem ilyen egyszerű ha $\Delta\omega_p < \Delta\omega$, ahol $\Delta\omega$ az MMR spektrum szélessége. A különböző impulzus-kombinációk részben a relaxációs idők mérését teszik lehetővé, részben pedig a szilárdtestek nagyfelbontású MMR spektroszkópiájának (másnéven szelektív átlagolás [D.1] alapját jelentik. Az impulzus MMR spektroszkópia előnyét a felsoroltakon kívül még rövid mérési ideje, és ezen keresztül a rövidebb időre vonatkoztatott jobb stabilitás jelenti.



D.2. ábra: 90° -os gerjesztő impulzus és szabad precessziós MMR válasz (FID)

1. IDŐBELI VÁLASZ - SPEKTRÁLIS ELOSZLÁS

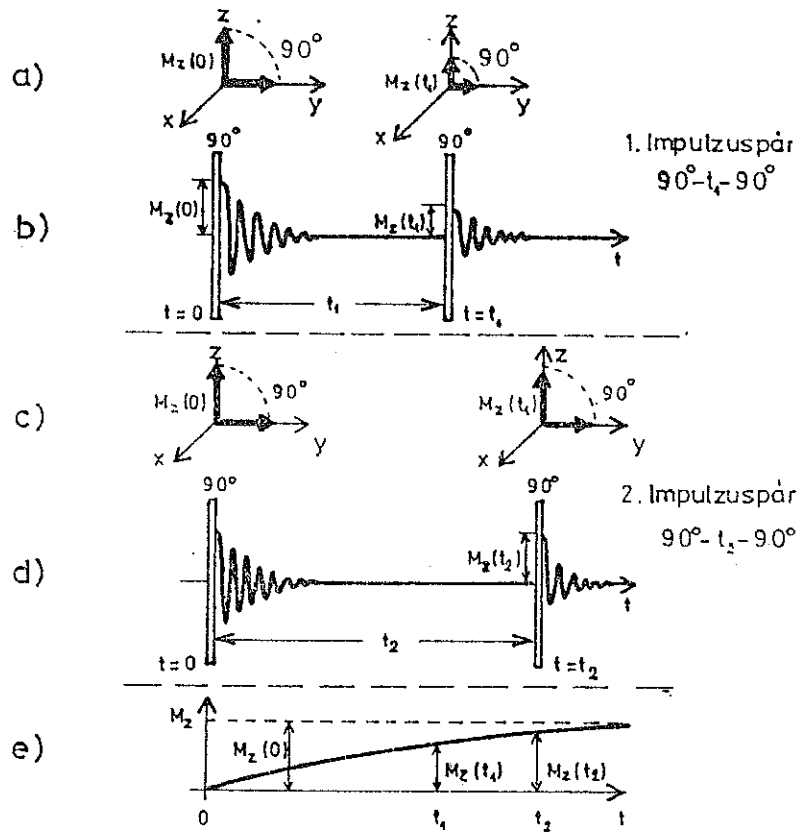
A D.2. ábrán azt mutatjuk be, hogy a 90° -os gerjesztő impulzus után a mérés x-y síkban, a vevőtekercsben milyen alakú feszültség indukálódik a precesszáló M_{xy} komponens hatására.

Lefutásáról (C.16) összefüggés alapján már tudjuk, hogy exponenciális, periódusa megfelel a precessziós frekvenciának és a lecsengés időállandója a T_2 spin-spin relaxációs időnek; kezdeti amplitudója pedig M_0 -val arányos, mivel a 90° -os impulzus azt forgatja le az x-y síkba. T_2 mérésére csak bizonyos esetben használható a módszer, mert a mágneses tér inhomogenitásából származó látszólagos T_2^* is gyorsítja a lecsengést. A kapott szabad precessziós MMR jel a 90° -os gerjesztésre az idő függvényében adott válasz a spinek közti csatolásról.

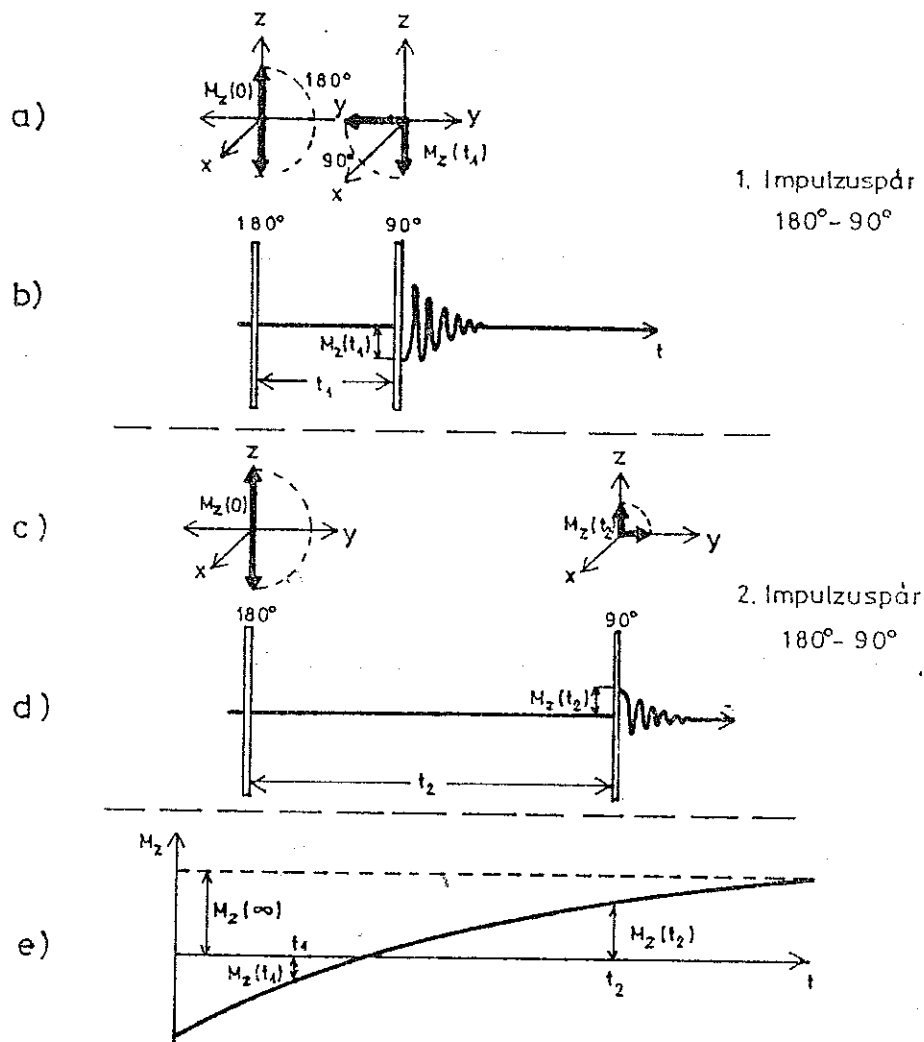
Ismeretes [A.4], hogy az impulzusgerjesztésre kapott időfüggő válasz, és az MMR frekvencia spektrum között Fourier transzformációs kapcsolat van, így a szabad precessziós jel és a spektrum Fourier transzformációval egymásba átvihető, és megfordítva.

2. T_1 RELAXÁCIÓS IDŐ MÉRÉSI MÓDSZEREI

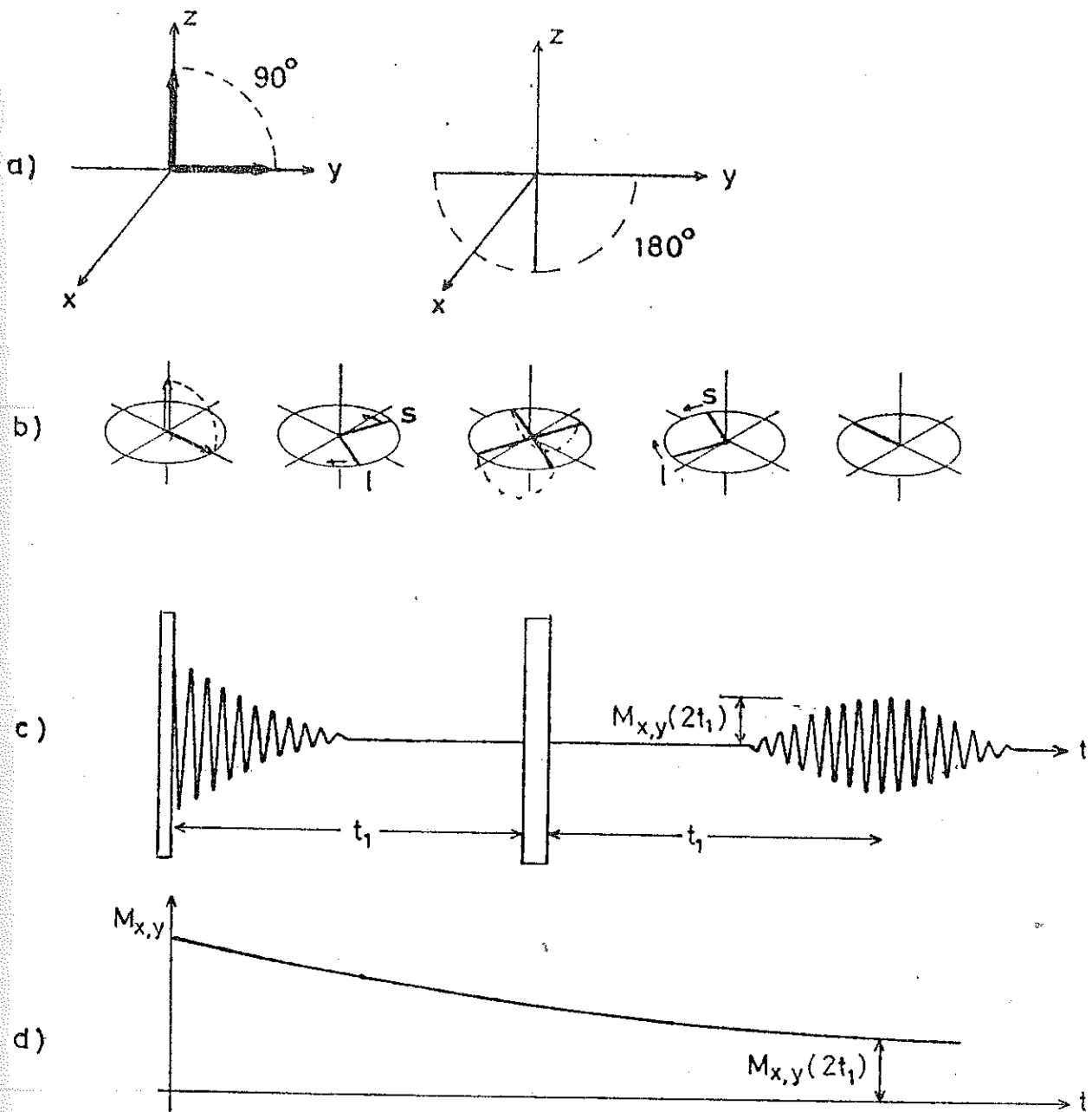
A fejezetben két spin-rács relaxációs idő mérési módszerrel ismerkedünk meg a 90° - 90° -os és 180° - 90° -os impulzus kombinációkkal, amelyek alapját jelentik a "saturation recovery (SR)" és "Inversion-recovery (IR)" tomográfiai módszereknek.



D.3. ábra: $90^\circ - 90^\circ$ gerjesztésű T_1 mérési módszer elve



D.4. ábra: 180°-90° gerjesztésű T_1 mérés elve



D.5. ábra: Spin-echo mérés elve

A D.3. ábra a/ sorában az első 90° -os impulzus előkészíti a spinrendszert, 90° -kal leforgatva a mágnesezettséget; t_1 idő múlva még nem áll helyre a termodinamikai egyensullynak megfelelő $M_z(0)$ mágnesezettség, hanem annál kisebb, amit $M_z(t_1)$ -gyel jelöltünk. A második impulzus tehát egy mintavevő impulzus, segítségével azt szondázzuk, hogy t_1 idő alatt a mágnesezettség hányad része regenerálódott a spin-rács relaxáció következtében; az ábra b/ része a gerjesztő impulzusokat és az oszcilláló M_{xy} komponenst ábrázolja. Az ábra c/ és d/ része a/ és b/ ismétlése $t_2 > t_1$ időpontban. Az ábra e/ részében a relaxációs görbe látható, amit úgy nyerünk, hogy a mérést sok, egymástól különböző impulzustávolsággal megismételtük, és mértük a második impulzus után kapott amplitudót.

A 180° - 90° impulzuspárokkal történő mérést a D.4. ábrán követhetjük nyomon. Az ábra a/ részén a második a mintavevő impulzus még az egyensulyival ellentétes irányu mágnesezettséget talál, és a 90° -os forgatás után az x-y síkban lévő mágnesezettség negatív lesz. A b/ részen ismét a két impulzus, és az x-y sík eseményei láthatók; felhívjuk a figyelmet arra, hogy 180° -os impulzus után az x-y síkban nincs mágnesezettség, és detektálható MMR jel sem. c/ és d/ az a/ és b/ későbbi időpontban, az $M_z(t_2)$ mágnesezettség már pozitív, e/ a relaxációs görbe tetszés szerinti sok impulzuspárral felvéve.

3. A T_2 RELAXÁCIÓS IDŐ MÉRÉSI MÓDSZEREI

Mivel a szabad precessziós jel csak bizonyos feltételek teljesülése esetén használható spin-spin relaxációs idő meghatározására, ezért olyan módszereket

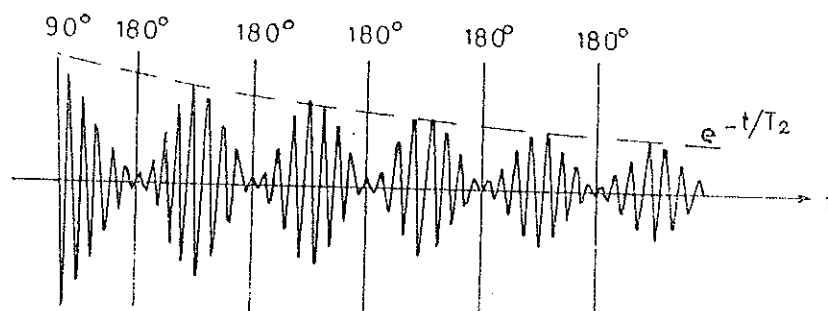
dolgoztak ki, amelyek mentesek a mágneses tér inhomogenitásából származó perturbáció következményeitől; ilyen módszer a spin-echo, és annak továbbfejlesztett változatai: a Carr-Purcell impulzuskombináció, és a Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG) impulzuskombináció.

A D.5. a/ ábrán az impulzus hatására a mágnesezettség lefordul az x-y síkba, ott a térhomogenitás miatt különböző sebességgel precesszálnak az egyes spinek, így a lassúk (l) lemaradnak, a sebesen forgók (s) előre sietnek, amint azt a b/ sor második képén látjuk; ekkor alkalmazzuk a második rádiófrekvenciás impulzust, ami koherensen mozgó eredő mágnesezettséget nem talál az x-y síkban, a/ ábra második része, de az x tengely körül 180° -kal átfordítja az összes precesszáló spint; ez a transzformáció a sebeseket hátrányos, a lassúakat előnyös helyzetbe hozza, mert szögsebességüket megtartva hosszabb, illetve rövidebb köríveket kell befutniuk. Amennyiben t_1 a két rádiófrekvenciás impulzus közti idő, úgy $2t_1$ időben a precesszáló spinek ismét együtt lesznek és maximális feszültséget produkálnak a vevőtekercsben, ez előtt az időpont előtt a szabad precesszáló jellel ellentétes folyamat, az M_{xy} mágnesezettség felépülése, $2t_1$ után pedig ismét a szabad precessziós jel jelenik meg (c/ ábra). Ez a tükröképével együtt megjelenő szabad precessziós jel az u.n. spin-echo jel; lényeges előnye, hogy a közelében nincs gerjesztő rádiófrekvenciás impulzus, és így a vevő holtidejében nem veszik el az információ legintenzívebb része. Változó t_1 -gyel többször megismételve az impulzuspárral történő gerjesztést, az ábra d/ részén látható görbe mérhető ki, amire $\exp \{ -t/T_2 \}$ függvényt illesztve, T_2 meghatározható. Az inhomogenitásból származó effektusok

azért esnek ki, mert a spineknek precesszáva oda-vissza kell megtenniük az általuk befutott utat, így időbeli nyeresége nincs a gyorsaknak, legföljebb többet futottak oda és vissza. Az exponenciális függvény így csak a valódi T_2 miatt csökken. A módszernek az a hátránya, hogy időigényes, hasonlóan mint a T_1 méréseknél minden pont felvétele a relaxációs görbén két impulzus alkalmazását és egy teljes mérést jelent. Ugyanis a következő méréshez meg kell várni, amíg a magspinek újra termodinamikai egyensúlyba jutnak, ehhez T_1 -nél hosszabb idő kell, így az egész mérés időigényes, ami mindenütt hátrány, a tomográfiában különösen.

Ez a hátrány kiküszöbölhető egy a 90° -os impulzusból és utána következő 180° -os impulzusokból álló sorozattal (lásd *D.6. ábra*), az impulzusok újra és újra átforgatják a precesszálo spineket, és minden 180° -os impulzus után kapunk egy echo jelet T_2 -nek megfelelő csökkenő amplitúdóval. Ezt a gondolatot Carr és Purcell fogalmazták meg és alkalmazták. Látható, hogy egyetlen impulzussorral az egész relaxációs görbe felvehető és T_2 meghatározható. Ha pontosan rajzoltuk volna a *D.6. ábrát*, látni lehetne, hogy minden második spin-echo jól azonos, a köztük lévő pedig 180° -kal eltolt fázisu.

A Meiboom-Gill által kidolgozott módosítás szerint a 90° -os és 180° -os impulzusok között 180° -os fázistolás van; ekkor az echók mind azonos fázisban jelennek meg. Mivel itt találkozunk először a rádiófrekvenciás jel fázisának a fontosságával, ezért itt hangsúlyozzuk először, hogy az MMR spektroszkópia modern ágaiban a fázis ugyanolyan fontos információt hordoz, mint az amplitúdó.



D.6. ábra: 90°-180°-os impulzussorozat után kapott spin-echo jelek

2. táblázat: Az MMR spektroszkópia fontos jellemzői

J e l l e m z ő	Dimenzió	M e g j e g y z é s
ω_0 - Rezonancia frekvencia	Hz $\sim$ sec $^{-1}$	$\omega_0 = \gamma B_0$ -al definiált
ρ - Mag és spin-sűrűség	mag/cm 3	a magspinek száma cm 3 -enként
M_0 - Makroszkópikus mágnesezettség	A/m $^{-1}$	$M_0 \sim \rho$ - a mágnesezettség egyensúlyi értéke
T_1 - Spin-rács relaxációs idő	sec	$M_z(t) = M_0(1 - e^{-t/T_1})$ összefüggés alapján mérhető
T_2 - Spin-spin relaxációs idő	sec	$M_{x,y}(t) = M_0 e^{-t/T_2}$ alapján mérhető

E. A MAGREZONANCIA SPEKTRUM JELLEMZŐI

A szilárdtestek rezonancia spektroszkópiájában a gerjesztésre adott válasz, pl. az optikai spektroszkópiához szokott szemlélő számára egyszerűnek tűnhet: egy vagy néhány Gauss jellegű jel, vagy azok szuperpozíciója, illetve azok időbeli változása hordozza a kívánt információt. Így a jel helyzete (eltolódások), annak jellemzői (intenzitás, integrális intenzitás, momentumok) a felhasadása (finomszerkezet) és az időbeli változásokat leíró relaxációs idők a magrezonancia spektroszkópusok által használt paraméterek.

1. KNIGHT ELTOLÓDÁS EGYSZERŰ FÉMEKBEN

Knight [E.1] felfedezése szerint adott állandó mágneses térben az MMR nem a (C.5) rezonancia feltételnek megfelelő frekvencián, hanem annál nagyobb értéknél,

$$\omega' = \gamma(H_0 + \Delta H) \quad (E.1)$$

összefüggésnek megfelelően jelenik meg, ahol a ΔH a Fermi-féle kontakt kölcsönhatás következtében fellépő lokális mágneses tér. A Knight eltolódás kísérleti meghatározása a

$$K = \frac{\omega' - \omega_{\text{ref}}}{\omega_{\text{ref}}} \quad (E.2)$$

összefüggés alapján történik, azaz az eltolódás egy jól megválasztott nemfémes referencia mintán mért ugyanazon izotóp rezonancia jelének középpontjához viszonyítva mérjük és láthatóan százalékban fejezzük ki. A mért értékek néhány század százaléktól (Li) néhány százalékgig terjed-

nek (Hg, Pt). A referencia minta használata, mivel csupasz (elektronfelhő nélküli) atommagok e célra nem állnak rendelkezésre, némi gondot is jelent, mivel a fémes eltolódás (Knight eltolódás) mellett a törzselektronok diamágnességnek megfelelően egy más típusu árnyékoló, azaz a külső teret csökkentő eltolódást is okoznak, amit kémiai eltolódásnak neveznek. A kémiai eltolódás kulcs szerepet játszik a nemfémes anyagok, különösen a szerves anyagok MMR spektroszkópiájában. Mindkét eltolódás lineárisan változik (általában ellentétesen) a külső térrel, pontos szétválasztásuk nem könnyű, többféle referencia minta használatával közelíthető. Általában nagyságrendi eltérés van a Knight eltolódás javára, így a kémiai eltolódással a továbbiakban nem foglalkozunk.

A Fermi-féle kölcsönhatásból származó Knight eltolódás

$$K_S = \frac{8\pi}{3} \langle |\psi_k(0)|^2 \rangle_F \Omega \kappa_S$$

alakban írható, ahol $\langle |\psi_k(0)|^2 \rangle_F$ az s szimmetriájú vezetési elektronok mag helyén vett valószínűség sűrűségének Fermi felületre átlagolt értéke; Ω : atomtérfogot és κ_S : a vezetési elektronok Pauli spin szuszceptibilitása.

Egyszerű fémek esetén ez a tag a domináns, azonban a pontos számolásoknál már itt is figyelembe veszik az u.n. "törzspolarizációs járulékot", ami onnan adódik, hogy a vezetési elektronok polarizálják a belső lezárt s héjakat és így az ellentétes spinű s elektronok valószínűség sűrűsége nem lesz pontosan ugyanaz az atommag helyén és az is nem zéró járulékot ad a Knight eltolódáshoz, azaz a mag helyén lévő hiperfinom térhez. Ez az

indirekt effektus minden kompenzálatlan spin esetén fel-
lép, így átmeneti fémekben is, igazi jelentőségre azon-
ban mágneses fémekben tesz szert, ahol a hiperfinom tér
lényeges járulékát adja.

Az izotróp s elektroneltolódás mellett azon elektronok,
amelyek a Fermi nívónál el nem tűnő impulzusmomentum-
mal rendelkeznek, azaz a p-, d-, f elektronok az elektron
spin-mag spin dipól-dipól kölcsönhatáson keresztül köl-
csönhatnak az atommaggal és ez a kölcsönhatás nem-köbös
szimmetriájú fémekben egy anizotróp Knight eltolódás já-
rulékot ad, ami polikristályos mintákon az MMR spektrum
aszimmetriáját idézi elő. A Knight eltolódás anizotrópi-
ájából a hely szimmetriájára lehet következtetni.

2. KNIGHT ELTOLÓDÁS ÉS HIPERFINOM BELSŐ TÉR ÁTMENETI FÉMEKBEN.

A Knight eltolódásra felírt (E.3) egyszerű összefüggést
átmeneti fémekre tovább kell bővíteni a $K_{\text{törzs}}(T)$ törzs-
polarizációs és a $K_{\text{pálya}}$ pályamomentumból származó tagok-
kal. így

$$K(T) = K_s + K_{\text{törzs}}(T) + K_{\text{pálya}} \quad (\text{E.4})$$

alakura módosul az (E.3) kifejezés.

A törzspolarizáció általánosan onnan ered, hogy a párat-
lan s (vezetési), p, d, f szimmetriájú elektronok a ki-
cserélődési kölcsönhatáson keresztül polarizálják a be-
töltött s héjakat. Ez az effektus mágnesesen rendezett
ferro-, ferri- és antiferromágneses anyagokban a külső
mágneses tér nélkül is létező u.n. "hiperfinom tér" leg-

lényegesebb járulékát adja. d és f járulékok esetén ez a tag hőmérsékletfüggő, mivel a Fermi energia mozog az állapotsűrűség-hőmérséklet diagramon.

A pályamágnességéből származó tag a vezetési sáv összes elektronjától függ, nemcsak a Fermi nívónál lévő kT szélességű sávban lévőktől, így az hőmérsékletfüggetlen.

A Knight eltolódás tagok és a megfelelő szuszceptibilitás járulékok között fellépő kapcsolatról a már idézett irodalomból [A.4] kapunk felvilágosítást.

3. SPIN-RÁCS RELAXÁCIÓ ÉS KNIGHT ELTOLÓDÁS

Fémek és ötvözetek esetén a legfontosabb spin rács relaxációs mechanizmus a vezetési elektron spinekkel való kölcsönhatáson keresztül működik. Egyszerű fémek esetén a vezetési elektronok hatásának sztatikus eredője a Knight eltolódás, ugyanakkor az elektronok által keltett tér időbeli fluktuációi felelősek a relaxációs mechanizmusért. A két mennyiség kapcsolatát a Korringa összefüggés

$$K_S \cdot T_1 \cdot T = \frac{1}{\pi k \hbar} \left(\frac{\mu_B}{\gamma} \right)^2 \quad (E.7)$$

fejezi ki, ahol μ_B a Bohr magneton és a többi mennyiség ismert, tehát a jobb oldalon univerzális állandók ill. magfizikai jellemző (γ) áll. A lineáris hőmérsékletfüggés a relaxációs mechanizmus jellemzője.

Átmeneti fémekre többféle relaxáció és (E.7)-nél bonyolultabb összefüggés igaz.

4. DIPÓL-DIPÓL KÖLCSÖNHATÁS AZ ATOMMAGOK KÖZÖTT:
VAN VLECK ELMÉLET

Van Vleck elmélete alapján az MMR spektrum jellemzői számolhatók elméletileg kölcsönható atommagok esetén; első principiumokból kiindulva ugyanis nem határozható meg a spektrum alakja, a Bloch elmélet a jelenség fenomenológikus leírását adja és az általa megjósolt Lorentz alaku MMR jelalak nem mágneses fémek esetén nem adja vissza a kísérleti eredményeket. A momentumokat

$$M_n = \int_0^{\infty} (\omega - \omega_0)^n f(\omega) d\omega \quad (E.8)$$

alakban adjuk meg, ahol ω_0 a rezonancia görbe középpontja. Szimmetrikus görbe páratlan momentumai eltűnnek, Lorentzalaku görbe momentumai végtelenek. Csonkított Lorentz alaku görbére végesek és ennek, vagy a Gauss alaku görbének a második momentuma és a jelszélessége között pedig egyszerű összefüggés áll fenn.

A 2. táblázatban összefoglalva adjuk a két említett alakfüggvényt, azok Fourier transzformáltjait - mivel az impulzusgerjesztésű MMR spektroszkópiában azok jelennek meg - és a jelszélességeket.

2. táblázat: Gauss és Lorentz alakfüggvények, Fourier transzformáltjaik és félszélességük

J e l l e m z ő	G a u s s	Csonkított Lorentz ⁺
Alakfüggvény	$F(t) = \exp(-\frac{M_2}{2} t^2)$	$F(t) = \exp(-\frac{t}{T_2}), t > t^*$
Spektrum $F(t)$ cos. Fourier transzf.	$f(\omega) = \frac{1}{(2\pi M_2)^{1/2}} \exp(-\frac{\omega^2}{2M_2})$	$f(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\theta_0}{\omega^2 \theta_0^2}, \omega < \omega^*$
Félszélesség a félintenzitásnál	$\theta_0 = (2 \cdot \ln 2 \cdot M_2)^{1/2} = 1.18 \cdot M_2^{1/2}$	$\theta_0 = \frac{1}{T_2}$

⁺ Az alakfüggvényt $t > t^*$ és a spektrum $\omega < \omega^*$ esetén különbözik zérustól

Láttuk, hogy a Bloch elmélet Lorentz alakú jelekre vezetett, ugyanakkor a szilárdtestekben detektált MMR spektrumok inkább a Gauss alakot közelítik meg; de attól is eltérnek. Általában az alábbi alakfüggvény írja le a spektrumot szimmetrikus esetben.

$$F(t) = 1 - \frac{M_2}{2!} t^2 + \frac{M_4}{4!} t^4 - + \dots \quad (E.9)$$

Az NMR vonalak alakjával kapcsolatban tett kitérő után visszatérhetünk az atommagok közötti mágneses dipól-dipól kölcsönhatásra. A dipólok kölcsönhatását ismertnek tételezzük fel, az idézett irodalomban is megtalálható; azonban az N kölcsönható atommagokból álló sokaság (sok-spinrendszer) H_0 térben lévő energianívóinak és azok kiszélesedésének (spektrum) meghatározása jelen ismereteink alapján egzaktul lehetetlen. A Van Vleck elmélet szellemessége (zsenialitása!) éppen abban rejlik, hogy a momentumokban egzaktul számolható mennyiségekre talált, és így a spektrum is (E.9)-nek megfelelően közelíthető, ténylegesen ugyan hallatlanul fáradságosan.

A második momentum az amit általában meghatároznak és sok szilárdtest esetén ismertnek tételezhetünk fel. A Van Vleck elmélet erre vonatkozó eredményét idézzük egyféle atommagot tartalmazó rendszerre: |E.1|:

$$M_2 = \frac{3}{4} \gamma^4 \hbar^2 I \cdot (I+1) \cdot \frac{1}{N} \cdot \sum_{j,k} \frac{(1-3 \cos^2 \theta_{jk})}{r_{jk}^3} \quad (E.10)$$

Az összefüggés első része az atommagra jellemző mennyiségeket és univerzális állandót, a második része pedig, pontosabban a kettős összeg az atommagok elrendeződésére vonatkozó rácsösszegeket tartalmaz, ahol r_{jk} a j és k magot összekötő radiuszvektor abszolút értéke és θ_{jk} pedig ezen vektor és a külső mágneses tér H_0 által bezárt szög. Az egyféle atommag magfizikai szempontból jelent azonosat, és a kettős összeg pedig arra utal, hogy kémiai (kötés), vagy fizikai (szerkezet) szempontból ugyanaz az atommag többféle környezetben helyezhet el, és így az összes minden lehetséges helyre való átlagolást jelent.

Amennyiben többféle atommag van a rendszerben, úgy a tőlük származó M_2 járulékok összeadódnak, a konstans értéke eltér az azonos magok közötti járulékból szereplőtől;

amennyiben azonos helyen lévő atommagokat tartalmaz a rendszer pl. köbös fémek, úgy a kettős összeg egy-szeres összegzéssé redukálódik. Ismeretes az (E.10) összefüggés pormintára vonatkozó alakja is, ezekkel kapcsolatban is az irodalomra utalunk.

Még két fogalmat kell röviden említenünk, először a *mozgási keskenyedés* fogalmát. Fordított ahhoz az esethez viszonyítva, ahol élettartamból származó vonalszélesség a domináns; ott a mozgás pl. termikus mozgás hatása, csökken az állapot élettartama és nő a vonalszélesség; itt a magok mozgása (pl. diffúzió, atomcsoportok forgása stb.) következtében (E.10) összefüggésben a kettős összegben a θ_{jk} és r_{jk} mennyiségek mozgás következtében fellépő minden lehetséges értékére kell átlagolni, és az átlag a pillanatnyi értéknél kisebb, izotróp mozgás esetén akár zero is lehet. Ez a magyarázata annak, hogy a folyadékok, így a fémolvadékok MMR spektruma sok (4-5) nagyságrenddel keskenyebb a szilárdtestek MMR spektrumánál.

Másodszor az *inhomogén spektrumkiszélesedésekről* kell szólnunk.

Az egyféle spint tartalmazó minta MMR spektruma viszonylag egyszerű kiszélesedése homogén. A valóság természetesen általában bonyolultabb, mert a spektrumban többféle hatás együtt léphet fel, pl. porminták esetén a szögfüggő eltolódások is kiszélesedést okozhatnak, vagy átmeneti fématomokban környezetében, vagy nem azonos szerkezeti és kémiai környezetben lévő magoknál, pl. amorf

anyagokban a lokális tér eloszlása lép fel és akkor inhomogén kiszélesedésről beszélünk; ennek a fellépést legegyszerűbben spin-echo módszerrel bizonyíthatjuk. A spektrumok kiértékelése ilyenkor nem triviális feladat, a tisztán azonosítható jelenség nagy öröm a kutató számára; ebben segít a külső paraméterektől való függés elméleti ismerete és kísérleti azonosítása is.

F. MÉRÉSI FELADATOK*

1. Mérje meg fém Al-on a ^{27}Al mag Knight eltolódását és spin rács relaxációs idejét. Határozza meg a $K^2 T_1 T$ Korringa szorzatot, és vesse össze a szabad elektronmodell alapján kapott értékkel.
2. Regisztrálja fém Al-on a ^{27}Al mag MMR spektrumát és/vagy szabadprecessziós MMR jelét, határozza meg a spektrum második momentumát, számolja ki a második momentum elméleti értékét és hasonlítsa össze a kísérleti értékkel.

* Alternatív mérési feladatként kidolgozandó

- egy mozgási keskenyedéssel (^1H)
- egy inhomogén kiszélesedéssel (^{31}P)

kapcsolatos feladat.

IRODALOM

- |A,1| E.M. Purcell, H.C. Torrey, R.V. Pound
Phys. Rev. 69, 37 (1946)
- |A,2| F. Bloch, W.W. Hansen, E.M. Packard
Phys. Rev. 70, 474 (1946)
- |A,3| C.J. Gorter, Physica 3, 995 (1936)
- |A,4| C.P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance,
2. kiadás, Springer-Verlag, Solid State Sciences 1.
- |A,5| T.C. Farrar, E.P. Becker, Pulse and Fourier
Transform NMR, Academic Press 1971.
- |A,6| C. Kittel, Bevezetés a szilárdtestfizikába
(kiegészítő fejezetek p:240 ill. 257), Műszaki
Könyvkiadó, 1966.
- |E,1| Tompa K., Magyar Fizikai Folyóirat, XVI, 1,
19 (1968)