

**Zeitschrift:** Helvetica Physica Acta  
**Band:** 30 (1957)  
**Heft:** IV  
  
**Artikel:** Herstellung sehr homogener axialsymmetrischer Magnetfelder  
**Autor:** Primas, H. / Günthard, Hs.H.  
**DOI:** <https://doi.org/10.5169/seals-112818>

### **Nutzungsbedingungen**

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

### **Conditions d'utilisation**

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

### **Terms of use**

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

**Download PDF:** 07.01.2026

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>**

## Herstellung sehr homogener axialsymmetrischer Magnetfelder

von H. Primas und Hs. H. Günthard

Organ.-chem. Laboratorium der Eidg. Technischen Hochschule, Zürich.

(27. III. 1957.)

*Zusammenfassung.* Eine Methode zur Herstellung von extrem homogenen Magnetfeldern (Homogenität in der Grössenordnung  $1:10^{-8}$ ) wird diskutiert. Es wird theoretisch gezeigt, wie durch einfache Strom-Shims geeigneter Grösse der Randabfall bei axialsymmetrischen Magnetfeldern kompensiert werden kann. Die Theorie wird experimentell an einem praktischen Beispiel verifiziert. Der Einfluss der stochastischen Unebenheiten der Polschuhe auf die Homogenität des Magnetfeldes wird mittels statistischer Methoden berechnet und die Konsequenzen für den Fall eines Kernresonanz-Experimentes mit hoher Auflösung werden diskutiert.

Um die in der Kernresonanzspektroskopie durch die oft extrem kleine natürliche Linienbreite vieler Substanzen mögliche sehr hohe Auflösung experimentell erreichen zu können, werden Magnetfelder benötigt, die über ein Probenvolumen von ca.  $0,1 \text{ cm}^3$  eine Homogenität in der Grössenordnung von  $1:10^8$  aufweisen. Die bei der Realisierung eines solchen Magneten auftretenden Schwierigkeiten sind im wesentlichen durch die endliche Ausdehnung der Polschuhe (Randeffekte) und durch die Unebenheiten der Polschuhoberflächen bedingt. Die Korrektur der Randeffekte kann in einfacher Weise mittels geeignet konstruierter Current-Shims erzielt werden, worauf im 1. Kapitel näher eingegangen sei. Kapitel 2 gibt eine theoretische Analyse der Effekte der Unebenheiten der Polschuhe.

### 1. Inhomogenitäten eines Magnetfeldes im Grossen.

#### 11. Notwendigkeit der Verwendung von Korrektorschims.

In der vorangehenden Arbeit<sup>1)</sup> wurde ein für die hochauflösende Kernresonanzspektroskopie verwendeter Permanentmagnet beschrieben, der ein in der Nähe des Zentrums sehr genau axialsymmetrisches Magnetfeld liefert. Der Feldverlauf dieses Magneten ist

bei einer Messgenauigkeit von  $\pm 0,1$  mm und  $\pm 1$  mg im Bereich von  $0 \leq |z| \leq 5$  mm und  $0 \leq |x|, |y| \leq 20$  mm darstellbar als:

$$B(x, y, z) = B_0 + B_2(x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (1)$$

$$B_0 = 5873 \text{ Gauss}$$

$$B_2 = 1,01 \text{ m Gauss/mm}^2$$

Verwendet man einen solchen Magneten ohne Korrektur für Kernresonanzversuche, so kann eine Auflösung von  $10^{-7}$  kaum überschritten werden.

Von ROSE, ANDREW und RUSHWORTH<sup>2)</sup> wurden Shims vorgeschlagen, die durch eine Überhöhung der Polschuhe am Rande eine Feldverbesserung erzeugen sollen. Wir haben nach den Berechnungen von ANDREW und RUSHWORTH solche „Rose-type-shims“ aus reinem Nickelblech angefertigt, ebenso solche mit der doppelten Dicke als gerechnet. Die Ausmessung des Feldes in dem oben erwähnten Bereich des mit solchen Shims ausgestatteten Magneten ergab *keinerlei Verbesserung* des Magnetfeldes. Abgesehen von einer leichten Abweichung von der Axialsymmetrie (die auf kleine Fehler der Axialsymmetrie der Shims zurückzuführen war) konnte das Feld durch die oben erwähnte Relation 2. Ordnung mit derselben Konstanten  $B_2$  dargestellt werden. Wir schliessen deshalb, dass, im Gegensatz zu der oft geäusserten Ansicht, Rose-type-shims von Dimensionen in der Grössenordnung, die aus den Rechnungen von ROSE oder ANDREW und RUSHWORTH zu entnehmen sind, bei Magneten mit einem Verhältnis von Polschuhdurchmesser zu Polschuhabstand von grösser als 5:1 für die Zwecke der Kernresonanz von keinerlei Nutzen sind. Zwischen diesem experimentellen Resultat und den erwähnten Berechnungen besteht keine Diskrepanz, da jene Rechnungen unter absolut unzulässigen Annahmen durchgeführt wurden (Ersatz eines 3-dimensionalen axialsymmetrischen Potentialfeldes durch ein 2-dimensionales, unendliche Ausdehnung der Polschuhe).

Im Gegensatz zu den Rose-type-shims führen die von J. T. ARNOLD<sup>3)</sup> vorgeschlagenen sogenannten „Current-shims“ zu dem gewünschten Erfolg. ARNOLD verwendet je 9 flache, konzentrische Spulen verschiedenen Durchmessers, die vor den beiden Polschuhen angebracht werden. Durch langwieriges Probieren wurde versucht, die Ströme in den einzelnen Spulen so einzustellen, dass eine gute Homogenität erreicht wird. Uns erschien dieses Vorgehen nicht sehr zweckmässig, da infolge der vielen Variablen kaum je die beste Stromverteilung gefunden werden kann. Wir werden im folgenden zeigen, dass mit einem einzigen Spulenpaar und mit einem zum

voraus berechenbaren Strom ein Feld 2. Ordnung bis auf Korrekturen 6. Ordnung homogenisiert werden kann. Eine wesentliche Voraussetzung ist dabei nur, dass das ursprüngliche Feld sehr exakt axialsymmetrisch ist, was aber, wie erwähnt, erreicht werden kann.

## 12. Berechnung von Current-Shims.

Es soll das von zwei flachen, axialsymmetrischen Spulen, die symmetrisch zwischen zwei Polschuhen liegen, erzeugte Feld berechnet werden. Dazu setzen wir voraus, dass das gesamte System axialsymmetrisch sei und eine Spiegelebene bei  $z = 0$  besitze. Der Durchmesser der Polschuhe soll gross sein gegen den Spulendurchmesser und die Permeabilität der Polschuhe soll sehr gross sein, was in praxi hinreichend erfüllt ist. Der Polschuhabstand sei  $G$ , der Spulenradius  $A$  und der Abstand der Spulen von der Spiegelebene sei  $F = G/2$ . Zur Vereinfachung messen wir alle Längen in Einheiten von  $A$ , das magnetische Feld  $B$  Einheiten von  $\mu_0 n I / 2 A^*$  ( $n$  = Windungszahl einer Einzelspule,  $I$  Strom durch eine Einzelspule):

$$\begin{aligned} z &= Z/A & (P, Z \text{ resp. } \varrho, z \text{ sind Zylinderkoordinaten}) \\ \varrho &= P/A \\ g &= G/A \\ f &= F/A \\ b &= 2 BA/nI\mu_0 \end{aligned} \tag{2}$$

Um den ganzen Feldverlauf zu kennen, genügt es, von der  $z$ -Komponente  $b(\varrho, z)$  des Feldvektors die Funktion  $b(\varrho = 0, z)$  auszurechnen, da aus dieser mit den allgemeinen Relationen für axialsymmetrische Felder leicht das gesamte Feld berechnet werden kann. Die Randbedingungen dieses Potentialproblems können durch Mitberücksichtigung aller Spiegelbilder erfüllt werden. Man findet für das vorliegende Problem: (siehe Fig. 1)

$$b(\varrho, z) = \hat{b}(\varrho, f + z) + \hat{b}(\varrho, g - f + z) + \hat{b}(\varrho, -f - z) + \hat{b}(\varrho, -g + f - z) \tag{3}$$

wobei  $\hat{b}(\varrho, z)$  das Feld von einem axialsymmetrischen System von unendlich vielen Flachspulen vom Radius  $A$  ist, mit den Zentren bei  $\varrho = 0$  und  $z = 0, \pm 2g, \pm 4g, \dots$ . Somit findet man für  $\hat{b}$ :

$$\hat{b}(0, z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [1 + (z + 2mg)^2]^{-3/2} \tag{4}$$

\*) Alle Formeln sind in einem 4-dimensionalen rationalen Mass-System geschrieben (z. B. Giorgi's MKSQ-System).

Diese Reihe konvergiert für die praktische Auswertung unbequem langsam. Eine Reihenumformung nach Poisson erweist sich als sehr zweckmässig. Es gilt<sup>4)</sup>:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \varphi(m) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\tau/2\pi) \exp(in\tau) d\tau \quad (5)$$

Somit wird aus (4)

$$\hat{b}(o, z) = (\omega/2\pi) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-in\omega z) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(in\omega x) (1+x^2)^{-3/2} dx \quad (6)$$

mit

$$\omega = \pi/g.$$

Wegen

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(in\omega x) (1+x^2)^{-3/2} dx = -\pi H_1^{(1)}(i|n\omega|) \cdot |n\omega| \quad (7)$$

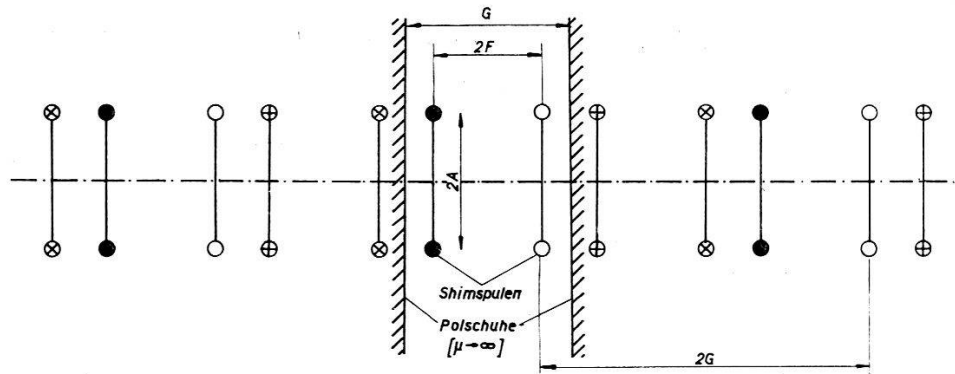


Fig. 1.

Zur Berechnung der Current-Shims

(eingezeichnet sind die Shimspulen und die ersten Spiegelbilder bezüglich der Spiegelung an den Polschuhen. Gleiche Motive haben die Periodizität  $2G$ .)

und wegen

$$\lim_{x \rightarrow 0} x H_1^{(1)}(ix) = -2/\pi \quad (8)$$

findet man

$$\hat{b}(o, z) = \omega/\pi - \omega \sum_{n=1}^{\infty} \cos(n\omega z) \cdot n\omega \cdot H_1^{(1)}(in\omega) \quad (9)$$

wobei  $H_1^{(1)}$  eine Hankel'sche Funktion ist.

Mit dieser Beziehung findet man nun mittels (4) für das gesuchte Feld der Spulenanordnung von Fig. 1:

$$b(o, z) = 4\omega/\pi - 4\omega \sum_{n=1}^{\infty} \cos(2n\omega z) \cdot \cos(2n\omega f) \cdot 2n\omega H_1^{(1)}(2in\omega) \quad (10)$$

welche Reihe für alle Werte von  $z$  konvergiert und die für eine numerische Auswertung sehr bequem ist. Experimentell ist die

Grösse  $b(\varrho, 0)$  meist leichter zu messen als  $b(0, z)$ . Mit Hilfe der für alle axialsymmetrischen Felder gültigen Beziehung<sup>5)</sup>:

$$B_z(\varrho, z) = (1/2\pi) \int_0^{2\pi} B_z(0, z + i\varrho \cos \varphi) d\varphi \quad (11)$$

kann man auch leicht eine Reihenentwicklung für  $b(\varrho, 0)$  erhalten, die aber nur für  $\varrho < 1$  konvergiert, was aber für die vorliegenden Zwecke durchaus genügt:

$$b(\varrho, z=0) = 4\omega/\pi - 4\omega \sum_{n=1}^{\infty} \cos(2n\omega f) \cdot 2n\omega \cdot H_1^{(1)}(2in\omega) J_0(2in\omega\varrho) \quad (12)$$

$$\omega = \pi/g$$

wobei  $H_1^{(1)}$  eine Hankel'sche,  $J_0$  eine Bessel'sche Funktion ist. Um das ursprüngliche quadratische Feld von Glg. (1) zu homogenisieren, ist es wünschenswert, in der Potenzreihenentwicklung des Korrektorfeldes

$$b(\varrho, z=0) = \sum_{m=0}^{\infty} b_{zm} \varrho^{2m} \quad (13)$$

die Koeffizienten  $b_{2m}/b_2$  für  $m > 1$  möglichst klein zu machen. Die numerische Auswertung zeigt, dass die vierte Ordnung  $b_4$  nur für  $f \approx g/2$  bei geeigneter Wahl von  $\omega$  verschwindet. Weiter findet man, dass, wenn  $\omega_0$  eine Nullstelle von  $b_4$  ist

$$b_4(\omega_0, f) = 0$$

die Grösse  $b_4(\omega_0 + \varepsilon, f)$  für festes  $\varepsilon$  im Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  für  $f = g/2$  ein Minimum ist. Somit sind die besten Resultate für  $f = g/2$  zu erwarten, d. h. *wenn die beiden Spulen direkt an den Polschuhen anliegen*. Für diesen Spezialfall erhält man:

$$b(\varrho, 0) = 4\omega/\pi - 4\omega \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n \cdot 2n\omega \cdot H_1^{(1)}(2in\omega) J_0(2in\omega\varrho) \quad (14)$$

oder wenn man  $b(\varrho, 0)$  nach Glg. (13) nach Potenzen von  $\varrho$  entwickelt:

$$b_0 = 4\omega/\pi - 8\omega^2 \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n n H_1^{(1)}(2in\omega) \quad (15)$$

$$b_2 = -8\omega^4 \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n n^3 H_1^{(1)}(2in\omega) \quad (16)$$

$$b_4 = -2\omega^6 \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n n^5 H_1^{(1)}(2in\omega) \quad (17)$$

Fig. 2 zeigt  $b_0$ ,  $b_2$ ,  $b_4$  in Funktion von  $\omega = \pi A/G$  aufgetragen. Bei  $\omega = 1,35$  hat  $b_4$  eine Nullstelle, dabei ist  $b_0 = 1,23$  und  $b_2 = 1,36$ . Wählt man somit für die Shimpulen einen Radius von  $A = 0,430G$ , so kann man den Shimstrom so dimensionieren, dass die 2. Ordnung des ursprünglichen Feldes exakt kompensiert wird, ohne dass dabei eine Inhomogenität 4. Ordnung eingeführt wird. Die Verwendung von mehr als nur einem Paar von Shimpulen hat somit nur dann einen Sinn, wenn man auch noch Feldinhomogenitäten 6. oder höherer Ordnung kompensieren will, was aber selbst für extremste Auflösungen unnötig sein dürfte.

Es sei noch erwähnt, dass das Feld eines Spulensystems im freien Raum sehr wesentlich verschieden ist von dem Feld desselben

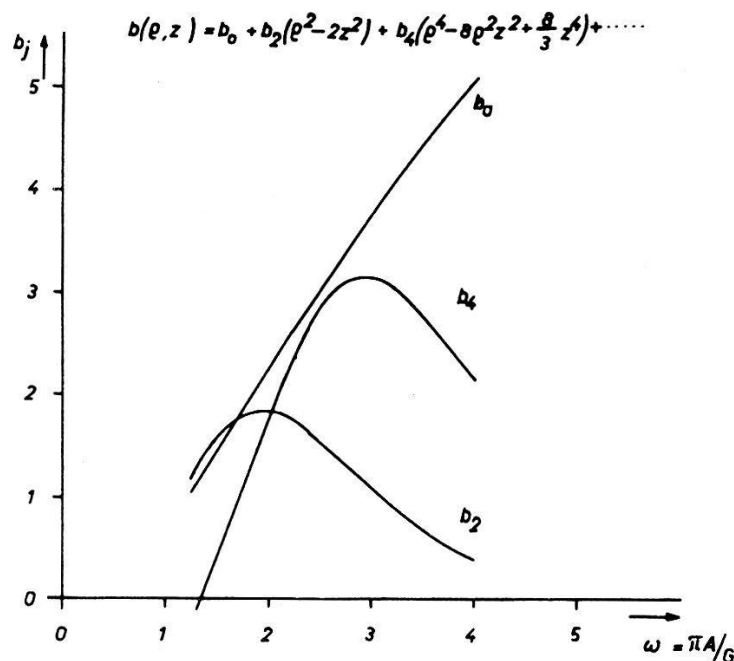


Fig. 2.

Verlauf der Entwicklungskoeffizienten  $b_0$ ,  $b_2$  und  $b_4$  des Magnetfeldes von an Polschuhen anliegenden Shims ( $F = G/2$ ). (Vgl. Glg. 1—15 bis 1—17.)

Spulensystems zwischen zwei Eisenpolschuhen. In der Entwicklung (Glg. 4) für das Feld der Spulen zwischen den Polschuhen stellt der erste Term das Feld der Spulen im freien Raum dar. Die oft sehr schlechte Konvergenz dieser Reihe und die gute Konvergenz der nach Poisson transformierten Reihe besagt, dass es keineswegs zulässig ist, den Einfluss der Polschuhe zu vernachlässigen.

### 13. Konstruktion von Current-Shims und experimentelle Resultate.

Auf Grund dieser Rechnungen wurden nun Current-Shims hergestellt. Auf einem Plexiglasspulenkörper der Gesamtdicke 1,0 mm (Wandstärke 0,3 mm, Wickelraum 0,4 mm) wurden auf einen Zy-



linder von 20 mm Durchmesser 30 Windungen Cu-Draht 0,1 mm Durchmesser maschinell gewickelt, wobei peinlich auf gute Axialsymmetrie geachtet werden muss. Dabei empfiehlt es sich speziell eisenfreien Kupferdraht zu verwenden. Dies ergab einen mittleren Windungsdurchmesser von 21,25 mm, was bei unserem Polschuhabstand von 24,778 mm gerade das gewünschte  $\omega = 1.35$  ergibt. Um das ursprüngliche  $B_2 = 1,01 \text{ mG/mm}^2$  zu kompensieren, werden nach Rechnung und nach Experiment 10,3 mA benötigt, dabei erniedrigt sich das  $B_0$ -Feld um ca. 0,2 Gauss. Fig. 3 zeigt das so kompensierte Feld, wie ersichtlich sind die gemessenen Feldstärken in bester Übereinstimmung mit den theoretisch erwarteten.

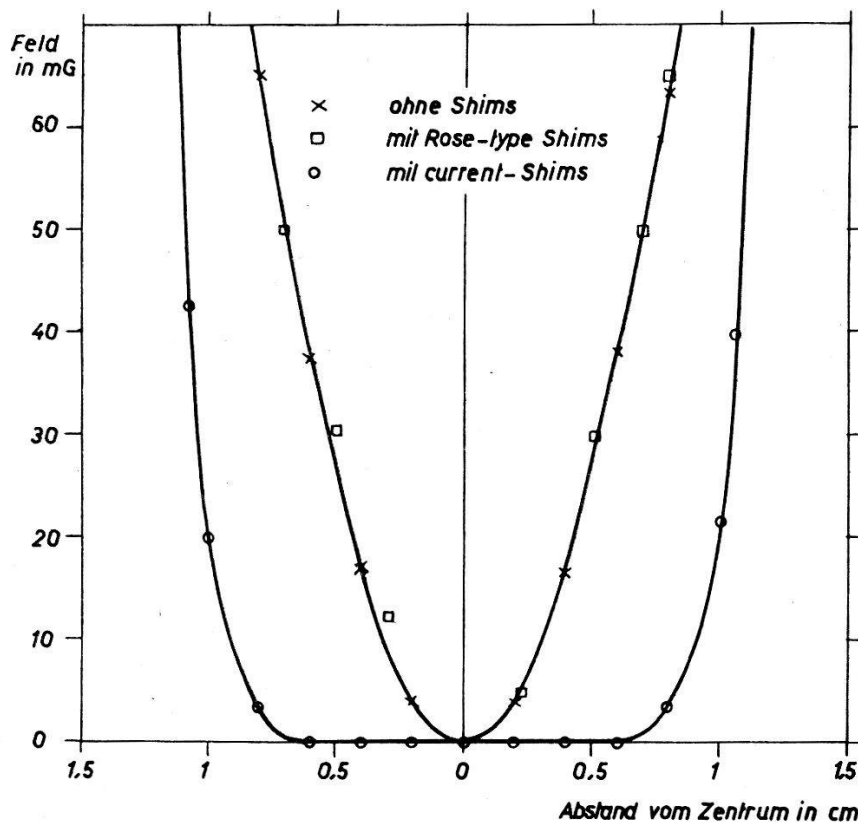


Fig. 3.

Verlauf des Magnetfeldes ohne Shims, mit Rose-type-Shims und mit Current-Shims mit  $\omega = 1,35$ .

Wir möchten noch auf eine Schwierigkeit hinweisen, die die Montage der Shims betrifft. Sind nämlich die Shims nicht exakt zentriert, d. h. fällt die Shimachse nicht exakt mit der Achse des Magnetes zusammen, so treten lineare Feldverzerrungen auf, die sehr unangenehm sind. Um dies zu vermeiden, wurden die Shims in eine 1 mm dicke runde Plexiglasplatte eingekittet, die dann sehr genau zentriert werden konnte. Arbeitet man mit einer in der  $y$ -Richtung rotierenden Probe<sup>9)</sup>, so mitteln sich lineare Terme der



Feldentwicklung in der  $x$ - und in der  $z$ -Richtung vollständig heraus, so dass man dann nur für die Abwesenheit linearer Terme in der  $y$ -Richtung sorgen muss, was natürlich viel leichter zu erreichen ist.

## 2. Inhomogenitäten eines Magnetfeldes im Kleinen.

### 20. Statische stochastische Magnetfelder.

Im folgenden werden wir die durch kleine statistisch verteilte Unebenheiten der Polschuhe verursachte Inhomogenität genauer untersuchen. Dabei werden wir immer annehmen, dass das Magnetfeld im Mittel homogen sei, die praktisch immer vorliegende Inhomogenität im Grossen (die durch die Randeffekte der Polschuhe bedingt ist) kann man in sehr guter Näherung von den kleinen, stochastischen örtlichen Schwankungen der magnetischen Feldstärke separieren. Ebenso gehen wir hier nicht auf die zeitlichen stochastischen Schwankungen des Magnetfeldes ein, da wir diese an anderer Stelle behandelt haben<sup>8)</sup>.

### 21. Darstellung statischer stochastischer Potentialfelder.

Mit der einzigen Ausnahme des Potentials  $\Phi(x, y, z) = z$  nehmen wir im folgenden immer an, dass die zugelassenen Potentialfunktionen bezüglich der Variablen  $x, y$  zur Lebesgue'schen Klasse  $L^2$  gehören und dass sie gegenüber Translationen und Rotationen in der  $(x, y)$ -Ebene stochastisch invariant seien. Dabei nennen wir eine Funktion gegenüber einer Operation stochastisch invariant, falls die transformierte Funktion dieselbe Spektraldichte hat wie die Originalfunktion. Bezüglich der Abhängigkeit der Potentialfunktion von  $z$  machen wir keine Voraussetzungen, denn diese folgt aus der Potentialgleichung. Es wird sich zeigen, dass  $\Phi$  dann auch in der Variablen  $z$  einen stochastischen Prozess darstellt, der aber im allgemeinen nicht invariant gegenüber einer Translation in der  $z$ -Achse ist. Weiter nehmen wir an, dass die Potentialfunktionen  $\Phi(x, y, z)$  bezüglich der Variablen  $x$  und  $y$  ergodisch seien. Dann dürfen wir den Ensemblemittelwert  $\langle F \rangle$  einer Funktion  $F$  immer durch den Mittelwert über eine  $(x, y)$ -Ebene ersetzen.

$$\langle F(x, y, z) \rangle_{x, y} = \lim_{\substack{p \rightarrow \infty \\ q \rightarrow \infty}} \frac{1}{4pq} \int_{-p}^p dx \int_{-q}^q dy F(x, y, z) \quad (1)$$

Die Ergodizitätsvoraussetzung ist sicher immer dann korrekt, wenn die Autokorrelationsfunktion im Unendlichen mindestens wie eine reziproke  $e$ -Funktion verschwindet.

Unter diesen Voraussetzungen folgt, dass sich eine solche stochastische Potentialfunktion immer darstellen lässt als Linearkombination von  $\Phi^+$  und  $\Phi^-$ -Funktionen:

$$\Phi^\pm(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 Q(k) e^{i\chi(k_1|k_2)} e^{ik_1 x + ik_2 y} e^{\pm kz} \quad (2)$$

mit

$$k = |\sqrt{k_1^2 + k_2^2}|$$

wobei  $Q$  und  $\chi$  reelle Funktionen sind. Die Darstellbarkeit folgt aus den bekannten Sätzen der Theorie des Fourierintegrals, die Invarianzeigenschaften und die Potentialeigenschaft sind evident<sup>6)</sup>.

Bestehen die Quellen für das stochastische Potential aus zwei rauhen planparallelen Polschuhen in der  $(x, y)$ -Ebene bei  $z = \pm z_0$  und hat das System eine stochastische Symmetrieebene bei  $z = 0$  (dies ist genau der Fall, der für die Anwendungen wichtig ist), so folgt die Darstellbarkeit eines solchen Potentials als:

$$\Phi = \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 Q(k) e^{ik_1 x + ik_2 y} \{ e^{i\chi_1 - (z_0 - z)k} - e^{-i\chi_2 - (z_0 - z)k} \} \quad (3)$$

wobei  $\chi_1$  und  $\chi_2$  voneinander stochastisch unabhängige Funktionen sind. Für die Autokorrelationsfunktion<sup>7)</sup>  $K(\xi, \eta, \zeta; z)$

$$K(\xi, \eta, \zeta; z) = \langle \Phi(x, y, z) \Phi(x + \xi, y + \eta, z + \zeta) \rangle_{x, y} \quad (4)$$

der Funktionen  $\Phi^+$ ,  $\Phi^-$  von Glg. (2) erhält man

$$K^\pm(\xi, \eta, \zeta; z) = (2\pi)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 G(k) e^{ik_1 \xi + ik_2 \eta \pm (2z + \zeta)k} \quad (5)$$

mit der zu  $\Phi^\pm$  gehörigen, gleichen Spektraldichte  $G(k)^*$

$$G(k) = \lim_{\substack{p \rightarrow \infty \\ q \rightarrow \infty}} \frac{1}{4pq} |Q(k)|^2 \quad (6)$$

Durch Einführung von Polarkoordinaten kann eine Integration in (5) sofort ausgeführt werden und man erhält:

$$K(\xi, \eta, \zeta; z) = K(\varrho, \zeta; z) = (2\pi)^3 \int_0^\infty G(k) e^{-2kz} J_0(k\varrho) e^{-k\zeta} k dk \quad (7)$$

mit

$$k^2 = k_1^2 + k_2^2 \text{ und } \varrho^2 = \xi^2 + \eta^2$$

wobei  $J_0$  die nullte Besselsche Funktion ist.

\*) Bequemlichkeitshalber definieren wir die Spektraldichte  $G(k)$  ohne den eigentlich dazugehörigen Faktor  $\exp(\pm 2kz)$ .

Da in Glg. (3) zwischen den Funktionen  $\chi_1$  und  $\chi_2$  keine Korrelation besteht, findet man für die Autokorrelationsfunktion des Potentials eines Magneten mit einer stochastischen Spiegelebene bei  $z = 0$  und mit Polschuhen in der  $(x, y)$ -Ebene bei  $z = \pm z_0$ :

$$K(\varrho, \zeta; z) = (2\pi)^3 \int_0^\infty G(k) e^{-2kz_0} J_0(k\varrho) \operatorname{Sinh}[k(2z + \zeta)] k dk \quad (8)$$

## 22. Die Berechnung des Spektrums des Feldes aus den Randbedingungen.

Im allgemeinen stellt die Berechnung des Spektrums des Feldes aus den Randbedingungen ein schwieriges mathematisches Problem dar. Falls aber — wie das bei den in der hochauflösenden Kernresonanzspektroskopie verwendeten Magneten immer der Fall ist — das resultierende Magnetfeld relativ homogen ist und gewissen Regularitätsanforderungen genügt, kann man in einfacher Weise das Spektrum des Magnetfeldes aus dem Spektrum der Randbedingungen erhalten. Die Randflächen seien je eine „stochastische  $(x, y)$ -Ebene“ bei  $z = z_0$  resp. bei  $z = -z_0$  und auf diesen Randflächen sei das Potential konstant. Dabei verstehen wir unter einer stochastischen  $(x, y)$ -Ebene bei  $z = z_0$  eine Fläche, die durch eine stochastische Funktion  $\zeta(x, y; z_0)$  beschrieben werde, die den Ensemblemittelwert  $z_0$  besitze:

$$\langle \zeta(x, y; z_0) \rangle = z_0$$

und deren Korrelationsfunktion  $C$  und Spektraldichte  $S$  gegenüber Translationen und Rotationen invariant sei:

$$C(\varrho) = C(\sqrt{x^2 + y^2}) = \langle \zeta(\xi, \eta) \zeta(\xi + x, \eta + y) \rangle_{\xi, \eta} \quad (10)$$

$$S(k) = (1/2\pi)^3 \int_0^\infty C(\varrho) J_0(\varrho k) \varrho d\varrho$$

Das Potential  $\Psi(x, y, z)$  eines solchen Feldes lässt sich dann darstellen als

$$\Psi(x, y, z) = B_0 z + \Phi(x, y, z) \quad \text{mit} \quad \langle \Phi \rangle = 0 \quad (11)$$

wobei  $\Phi$  eine durch Glg. (3) beschriebene stochastische Potential-

funktion ist. Da  $\Psi$  eine Potentialfunktion ist, existieren die zweiten Ableitungen und man kann entwickeln:

$$\Psi(x, y, z_0 + \zeta) = \Psi(x, y, z_0) + \zeta B_z(x, y, z_0) + \frac{1}{2} \zeta^2 [\partial B(x, y, z) / \partial z]_{z=z_0 + \vartheta_1 \zeta} \quad (12)$$

$$B_z(x, y, z_0) = B_0 + \vartheta_2 \text{Max} | B_0 - B(x, y, z_0) |$$

wobei:

$$0 \leq \vartheta_{1,2} \leq 1, \quad B_z = \partial \Psi / \partial z$$

Sind die Korrekturglieder hinreichend klein, so definiert die Lösung  $\zeta(x, y)$  der Gleichung

$$B_0 z_0 = \Psi(x, y, z_0) + \zeta(x, y) B_0 \quad (13)$$

eine Randfläche, auf der das Potential konstant und gleich  $B_0 z_0$  ist. Diese Approximation ist offensichtlich immer dann gerechtfertigt, wenn

$$\text{Max} | B_0 - B(x, y, z_0) | \ll B_0$$

$$\text{Max} | \partial B(x, y, z_0 + \zeta) / \partial \zeta | \ll 2 B_0 / \zeta_M \quad \text{auf der Randfläche} \quad (14)$$

mit  $\zeta_M = \text{Max} | \zeta(x, y) | \dots \dots \dots$  auf der Randfläche

Diese Bedingungen schränken die zugelassenen Inhomogenitäten etwas ein und verbieten vor allem das Auftreten beliebig hoher Wellenzahlen  $k$  im Spektrum der Randfläche. Bei Magneten, die zur Herstellung homogener Felder gebaut wurden, bedeuten sie jedoch keine praktisch wichtige Einschränkung; so verbietet etwa die zweite Forderung das Auftreten von Feldgradienten in der Grössenordnung von  $10^8$  Gauss/cm (falls  $\zeta_M = 1 \mu$  und  $B_0 = 10000$  Gauss).

Glg. (13) ordnet jedem Potential  $\Psi$  eine Randfläche  $\zeta(x, y)$  zu. Da jedes Randwertproblem der Potentialgleichung eine eindeutige Lösung besitzt, erlaubt uns Glg. (13) auch die Berechnung des Potentials  $\Psi$  aus den Randwerten  $\zeta$  und damit die Berechnung der Spektraldichte  $G(k)$  von  $\Psi$  aus der Spektraldichte  $S(k)$  von  $\zeta$ :

$$G(k) = B_0^2 S(k) \quad (15)$$

Unter den angegebenen Regularitätsvoraussetzungen haben wir also das wichtige Resultat, dass das *Spektrum des Potentials proportional dem Spektrum der Randflächen ist*.

### 23. Folgerungen für die Realisierung sehr homogener Magnetfelder.

Im folgenden soll am Beispiel der Kernresonanz die Bedeutung der Unebenheiten der Randflächen (Polschuhe) auf die Inhomogenität des Magnetfeldes genauer diskutiert werden.

Wie wir in einer früheren Arbeit<sup>8)</sup> gezeigt haben, ist der Erwartungswert der Linienform  $L(B)$  eines Kernresonanzsignals mit einer hinreichend kleinen natürlichen Linienbreite für ein räumlich stochastisches Magnetfeld gegeben durch

$$\langle L(\bar{B}) \rangle = (1/V) \int_V d\tau \frac{1}{\sqrt{2\pi} |\beta(\mathbf{r})|} e^{-\bar{B}^2 / 2\beta^2(\mathbf{r})} \quad (16)$$

wobei die Integration über das Probenvolumen  $V$  zu erstrecken ist und wobei

$$\begin{aligned} \beta^2(\mathbf{r}) &= \langle [B(\mathbf{r}) - B(0)]^2 \rangle \\ &= \langle B(\mathbf{r})^2 \rangle + \langle B(0)^2 \rangle - 2\langle B(\mathbf{r}) B(0) \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

Ist  $2R$  eine obere Grenze für den Probendurchmesser und ist das Spektrum  $S(k)$  der Randflächen (Abstand der Probe von den Randflächen ist  $z_0$ ) so beschaffen, dass für  $m = 5, 7, 9, \dots$  gilt:

$$\left| \int_0^\infty S(k) k^m e^{-2kz_0} dk \right| \gg \left| \int_0^\infty S(k) k^{m+2} e^{-2kz_0} dk \right| R^2 \quad (18)$$

dann kann man die aus (8) und (15) folgende Korrelationsfunktion für  $B = \partial\Phi/\partial z$

$$\begin{aligned} &\langle B(x, y, z) B(x + \xi, y + \eta, z + \zeta) \rangle \\ &= (2\pi)^3 B_0^2 \int_0^\infty S(k) k^3 J_0(\varrho k) e^{-2kz_0} \text{Cosh}[(2z + \zeta)k] dk \end{aligned} \quad (19)$$

$$(\varrho^2 = \xi^2 + \eta^2)$$

nach Potenzen von  $\varrho$  und  $\zeta$  entwickeln und nach den quadratischen Termen abbrechen. Dabei erhält man für  $\beta^2$  von Glg. (17)

$$\beta^2 = (z^2 + \varrho^2/2) \kappa^2 \quad (20)$$

wobei

$$\kappa^2 = B^2 (2\pi)^3 \int_0^\infty S(k) k^2 e^{-2kz_0} dk \quad (21)$$

Für die Halbswertsbreite eines Kernresonanzsignals einer kugelförmigen Probe mit dem Radius  $R$  folgt dann (vgl.<sup>8)</sup>) der Wert  $\kappa R$  (genauer:  $1,034 \kappa R$ ), sofern die natürliche Linienbreite viel kleiner ist. Unter der Annahme (18), die wie weiter unten gezeigt wird, fast

immer berechtigt ist, folgt also, dass in einem Kernresonanzexperiment nicht etwa die Streuung von  $B$ , sondern das  $\varkappa$  von Glg. (21) eine für die Inhomogenität des Magnetfeldes massgebende Grösse ist. Um zu beurteilen, welche Wellenzahlen im Spektrum von  $S(k)$  einen wesentlichen Beitrag zu  $\varkappa$  liefern, diskutieren wir den Fall, wo die *Spektraldichte*  $S(k)$  eine *Deltafunktion* ist.

$$S(k) = \sigma_R^2 \delta(k - k_0) / (2\pi)^3 k_0 \quad (22)$$

wobei  $\sigma_R$  die Streuung der Unebenheiten der Randflächen ist

$$\sigma_R^2 = (2\pi)^3 \int_0^\infty S(k) k dk \quad (23)$$

Damit folgt für die Linienbreite  $\Delta B = \varkappa R$

$$\Delta B/B_0 = \sigma_R R k_0^2 \exp(-k_0 z_0) \quad (R k_0 \ll 1) \quad (24)$$

Diese Relation ist wegen der Voraussetzung (18) nur für  $R k_0 \ll 1$  gültig.

Falls  $R k_0 \gg 1$  ist, folgt aus Glg. (19), dass

$$| \langle B(0) B(\mathbf{r}) \rangle | \ll \langle B(\mathbf{r})^2 \rangle \cong \langle B(0)^2 \rangle = \sigma_B^2$$

also ist  $\beta^2(\mathbf{r}) = 2 \sigma_B^2$  und somit folgt aus Glg. (16), dass die Linienform  $\langle L(\bar{B}) \rangle$  unabhängig von der Form der Probe ist, sofern deren Durchmesser nur wesentlich kleiner als  $2 z_0$  (= Polschuhabstand) ist:

$$\langle L(\bar{B}) \rangle = \frac{1}{2\sqrt{\pi} \sigma_B} \exp(-\bar{B}^2/4 \sigma_B^2)$$

Die Linienform ist in diesem Falle also eine Gauss'sche Fehlerkurve mit der Halbwertsbreite

$$\Delta B = 3,33 \sigma_B \quad \text{oder} \quad \Delta B/B = 3,33 \sigma_R k_0 \exp(-k_0 z_0)$$

Fig. 4 zeigt die Linienbreite  $\Delta B$  in Funktion der Wellenzahl  $k_0$  gemäss Glg. (23) in logarithmischer Darstellung. Daraus ist zu ersehen, dass die wesentlichsten Beiträge zur Linienbreite von Unebenheiten mit reziproken Wellenzahlen in der Grössenordnung des Polschuhabstandes kommen. Damit folgt auch, dass in den meisten praktisch vorkommenden Fällen die Voraussetzung (18) erfüllt sein dürfte. Fig. 5 gibt ein numerisches Beispiel mit plausiblen Werten: Polschuhabstand  $2 z_0 = 2$  cm, Probenradius  $R = 0,1$  cm, relative Linienbreite  $\Delta B/B_0 = 10^{-8}$ . Aufgetragen sind die dann zulässigen Streuungen der Unebenheiten der Polschuhe gegen ihre Wellenzahl.

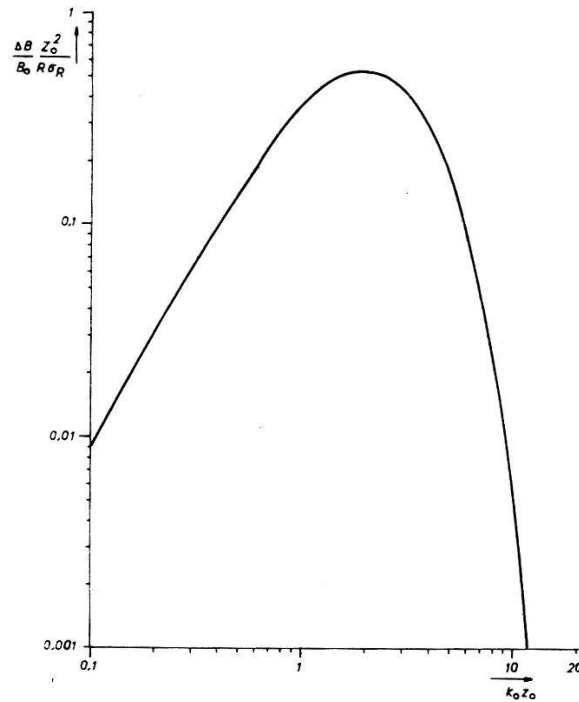


Fig. 4.

Linienbreite  $\Delta B$  eines Kernresonanzsignals in Funktion der Wellenzahl  $k_0$  der Unebenheiten der Polschuhe. ( $2z_0$  = Polschuhabstand,  $\sigma_R$  = Streuung der Randfläche,  $R$  = Probenradius,  $B_0$  = Feldstärke des Magneten) (ohne Rotation der Probe).

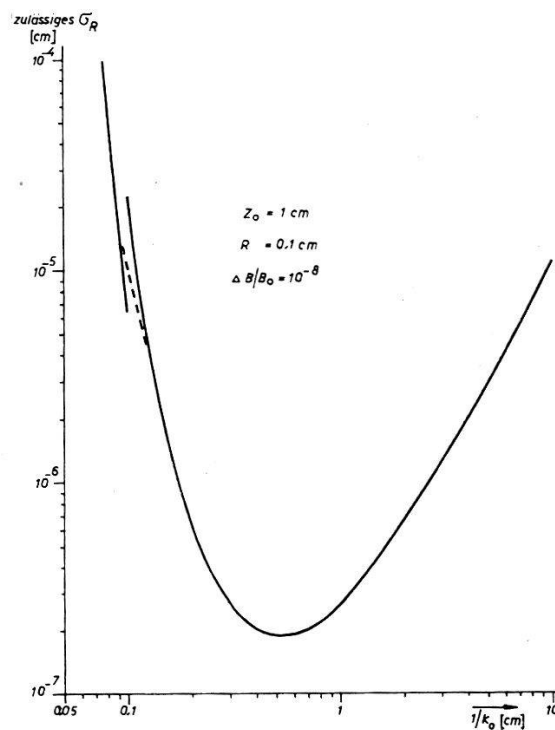


Fig. 5.

Zulässige Streuung  $\sigma_R$  der Randflächen in Funktion der reziproken Wellenzahl der Unebenheiten der Polschuhe für eine Auflösung  $\Delta B/B_0 = 10^{-8}$ , Probenradius  $R = 0,1$  cm und Polschuhabstand  $2z_0 = 2$  cm (ohne Rotation der Probe).



Im Gegensatz zu Fig. 4 zeigt Fig. 5 die Funktion auch im Gebiet  $Rk_0 \gg 1$ , das Zwischengebiet bei  $Rk_0 \approx 1$  wurde lediglich interpoliert. Dieses Beispiel zeigt, wie wichtig die Oberflächengüte der Polschuhe für eine gute Feldhomogenität ist. In dem erwähnten Beispiel ergeben sich für  $1/k_0 \approx 0,5$  cm beinahe unerfüllbare Forderungen für die Polschuhe. In einem Kernresonanzexperiment mit rotierender Probe<sup>9)</sup> liegen aber die Verhältnisse etwas günstiger, wir werden im Anhang kurz darauf zurückkommen.

## ANHANG.

### *Effekt der Rotation der Probe*

Verwendet man in einem Kerninduktionsexperiment eine um die  $y$ -Achse rotierende Probe<sup>9)</sup> mit dem Mittelpunkt bei  $x_0, z_0$ , so ist bei genügend grosser Rotationsfrequenz die wirksame Feldstärke  $BR$  der Rotationsmittelwert um die  $y$ -Achse

$$BR(P, Z) = (1/2\pi) \int_0^{2\pi} B d\varphi \quad (\text{A } 1)$$

wobei

$$\begin{aligned} x &= x_0 + P \cos \varphi \\ y &= Z \\ z &= z_0 + P \sin \varphi \end{aligned}$$

Geht man von einem stochastischen Magnetfeld  $B(x, y, z)$

$$B(x, y, z) = B_0 \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 k^2 S(k) e^{i\chi(k_1/k_2) + ik_1 x + ik_2 y - kz} \quad (\text{A } 2)$$

$$(k^2 = k_1^2 + k_2^2)$$

aus, so erhält man mit (A 1) nach kurzer Rechnung für den Rotationsmittelwert

$$BR(P, Z) = \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 k^2 S(k) e^{i\chi(k_1/k_2) + ik_1 x_0 - kz_0 + ik_2 Z} J_0(ik_2 P) \quad (\text{A } 3)$$

wobei  $J_0$  die nullte Besse'sche Funktion ist. Damit erhält man für die Korrelationsfunktion folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} &\langle BR(P_1, Z_1) BR(P_2, Z_2) \rangle = \\ &= (2\pi)^2 \int_0^{\infty} dk k^3 S(k) e^{-2kz_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot e^{ik(Z_1 - Z_2) \cos \varphi} J_0(ikP_1 \cos \varphi) J_0(ikP_2 \cos \varphi) \end{aligned} \quad (\text{A } 4)$$

Der für Kernresonanzexperimente massgebliche Ausdruck (16) wird damit

$$\begin{aligned} \langle [BR(0,0) - BR(P, Z)]^2 \rangle &= \kappa^2 Z^2 / 2 \\ (\kappa \text{ siehe Glg. 20}) \end{aligned} \quad (\text{A } 5)$$

falls man Terme der Ordnung  $Z^4, P^4, Z^2 P^2$  vernachlässigen darf, was wiederum wegen der meist gültigen Gleichung (18) oft zulässig ist.

Wie zu erwarten war, ergibt die Rotationsmittelung des Feldes eine wesentlich höhere Korrelation des Feldes (vgl. Glg. A5 mit Glg. 19). Auf die Linienform eines Kernresonanzsignals für diesen Fall sei wiederum auf <sup>8)</sup> verwiesen.

Wir danken der Emil-Barell-Stiftung, Basel, der Firma Hoffmann-La Roche & Cie. AG., Basel sowie dem Schweiz. Nationalfonds zur Förderung der Wissenschaften (Projekt Nr. 201, 721) für die Unterstützung dieser Arbeit.

**Literaturverzeichnis.**

- <sup>1)</sup> H. PRIMAS und Hs. H. GÜNTHARD, *Helv. Phys. Acta*, **30**, 315 (1957).
  - <sup>2)</sup> M. E. ROSE, *Phys. Rev.* **53**, 715 (1938); E. R. ANDREW, F. A. RUSHWORTH, *Proc. Phys. Soc. B* **65**, 801 (1952).
  - <sup>3)</sup> J. T. ARNOLD, CERN-Rapport 55—18, Genf (Sept. 1955), *Phys. Rev.* **102**, 136 (1956).
  - <sup>4)</sup> R. COURANT, D. HILBERT, *Methoden der mathematischen Physik*, Bd. 1, S. 65 (Berlin 1931).
  - <sup>5)</sup> Vgl. z. B. W. GLASER, *Handbuch der Physik*, Bd. **33**, S. 161 (Springer 1956).
  - <sup>6)</sup> Vgl. z. B. S. BOCHNER, K. CHANDRASEKHARAN, *Fourier Transforms* (Princeton 1949).
  - <sup>7)</sup> Die im folgenden verwendeten Begriffe der Korrelationsfunktion und der Spektraldichte sind Verallgemeinerungen der bekannten Begriffsbildungen auf mehrdimensionale, nichtstationäre Prozesse. Für den Fall eindimensionaler stationärer Prozesse vergleiche man etwa J. L. LAWSON, G. E. UHLENBECK, *Threshold Signals* (Rad. Lab. Ser. Vol. 24) (New York 1950).
  - <sup>8)</sup> H. PRIMAS, *Helv. Phys. Acta*, **30**, 297 (1957).
  - <sup>9)</sup> Die Verwendung einer rotierenden Probe in Kernresonanzexperimenten zur partiellen Eliminierung der Magnetfeldinhomogenitäten wurde von H. Y. CARR, Thesis, Harvard University 1952; F. BLOCH, W. A. ANDERSON, J. T. ARNOLD, *Phys. Rev.* **94**, 497 (1954) vorgeschlagen.
-