

魔角旋转情形下固体的非均匀相互作用

孙伯勤 叶朝辉

(中国科学院武汉物理研究所)

1985 年 6 月 18 日收到

提 要

各向异性非均匀相互作用的慢旋转 MAS-NMR 谱是一系列的旋转边带。这些边带的强度包含了该相互作用张量的全部信息。只要计算和分析少数几条边带就可以得到这些有用的结构信息。本文用不可约球谐张量算符表示非均匀相互作用,采用 Bessel 函数展开法分析计算非均匀相互作用产生的旋转边带。这种分析计算方法适用于各种非均匀相互作用。以化学位移和四极相互作用为例的实验与理论符合很好。

一、引 言

固体中存在着多种各向异性的核相互作用。在多晶或粉末情形下,这些各向异性相互作用使谱线增宽,常常形成没有什么结构特征的“粉末型”的宽谱。为了抑制或消除这些相互作用产生的谱增宽,已经研制和发展了几种固体高分辨 NMR 技术^[1],其中魔角旋转(MAS)应用得最广泛^[2,3]。

固体中的各种各向异性相互作用分成两类,即均匀和非均匀相互作用。它们在 MAS 情形下分别显示出不同的性质。

均匀相互作用的哈密顿量与待研究体系总的哈密顿量不对易;相反,非均匀相互作用的哈密顿量则与总的哈密顿量对易。按照平均哈密顿理论^[4],为了有效地抑制均匀相互作用产生的谱增宽,样品的转速必须大于该相互作用的强度。同种核的偶极相互作用是均匀相互作用的典型例子。对于含氢(^1H)和氟(^{19}F)的有机固体,它们的同核偶极相互作用强度大约为 50 kHz,而目前能达到的 MAS 最高转速为 10 kHz,通常转速为 5 kHz 以下。因此单用 MAS 技术不能得到它们的固体高分辨谱。这两种核常称为丰富核。

除上述两种元素外,固体中其它元素的同核偶极相互作用强度普遍处于 MAS 技术可以达到的范围。这些核则通常称为稀少核,尽管实际上往往并不稀少,有的天然丰度还高达 100%。稀少核与丰富核之间的偶极相互作用可以用异核大功率去耦消除。这样,在 MAS 情形下,稀少核系统的内部相互作用就往往只剩下非均匀性的相互作用了。典型情形即剩下核四极相互作用以及化学位移相互作用。可见,讨论 MAS 条件下固体中的非均匀相互作用是有普遍实际意义的。

Waugh 等人^[5-7]指出,对于非均匀相互作用,在 MAS 转速小于相互作用强度时,即所谓慢旋转条件下,NMR 谱分解成一系列的旋转边带。每一条边带对应于体系的相互

作用的各向同性部分, 边带的间隔就是样品的旋转频率. 分析和计算所测得的旋转边带谱可以得到非均匀相互作用张量的各个主值. 就我们所知, 至今只有 Herzfield 和 Borger^[8] 对化学位移各向异性产生的旋转边带作过计算分析.

本文用不可约球谐张量算符表示哈密顿量, 由 Bessel 函数展开法分析和计算了非均匀相互作用产生的边带强度, 其结果普遍地适用于各种非均匀相互作用. 我们分别对于化学位移及四极相互作用作了理论与实验谱的对照, 结果符合得很好.

二、慢旋转条件下非均匀相互作用的表述

核系统内部相互作用的哈密顿量通常可写为

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^D + \mathcal{H}^Q + \mathcal{H}^{CS} + \mathcal{H}^J, \quad (1)$$

(1) 式右边各项依次为偶极(包括同核和异核)、四极、化学位移和自旋(或间接偶极)相互作用. 当样品绕与外加磁场 H_0 方向成 β' 角度的轴向以角频率 ω_r 旋转时, (1) 式各项可以用不可约球谐张量算符表示^[9] 为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^\lambda = C^\lambda \sum_{l=0}^{\lambda} \sum_{m=-l}^l (-1)^m T_{lm}^\lambda \sum_{m'} D_{m',-m}^l(0, \beta', \omega_r, t) \\ \cdot \sum_{m''} D_{m'',m'}^l(\alpha, \beta, \gamma) \rho_{lm''}^\lambda. \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\lambda = D, Q, J, CS$; C^λ 是与相互作用有关的常数; $\rho_{lm''}^\lambda$ 是晶体坐标系中相互作用张量的主轴元素; T_{lm}^λ 是相互作用力学量的张量元, 这是用核自旋算符来表示的; $D_{m',-m}^l(0, \beta', \omega_r, t)$ 和 $D_{m'',m'}^l(\alpha, \beta, \gamma)$ 是 Wigner 转动矩阵元, 前者对应于从转子的固定坐标系到实验室坐标系的转换, 后者对应于从晶体坐标系到转子固定坐标系的转换; $(0, \beta', \omega_r, t)$ 和 (α, β, γ) 是相应旋转变换的空间 Euler 角.

(2) 式中包含了 $l = 0, 1, 2$ 三种分量. $l = 0$, 即为张量的各向同性分量, 这是旋转不变的常数项. 这相应于通常的液体 NMR 中的情形. $l = 1$, 即为张量的反对称分量. $\lambda = D, Q$ 情形下反对称分量不存在. 而当 $\lambda = CS$ 时反对称分量对谱增宽只产生二阶小的影响, 在 MAS 条件下这一结论仍然成立^[10]. 因此, 通常可将反对称分量略去. $l = 2$, 即为对称分量, 通常可以用它在晶体坐标系中的各向异性 δ^λ 和不对称参数 η^λ 表示. 一般只需要讨论核相互作用的久期项, 即相互作用中与 Zeeman 相互作用对易的部分. 这是因为在 NMR 中, 各种核相互作用对 Zeeman 项来说都是微扰项, 非久期项只产生高阶小的效应. 对称分量的久期项对应于 $m = 0$ 的情形, 从而得到

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{sec}}^\lambda = C^\lambda \rho_{00}^\lambda T_{00}^\lambda + \sqrt{\frac{3}{2}} C^\lambda \delta^\lambda T_{20}^\lambda \left[\frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta' - 1) \right] \\ \cdot \left[\frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) + \frac{\eta^\lambda}{2} \sin^2 \beta \cos 2\gamma \right] \\ + \sqrt{\frac{3}{2}} C^\lambda \delta^\lambda T_{20}^\lambda \bar{\epsilon}(t), \end{aligned} \quad (3)$$

式中

$$\xi(t) = \frac{\omega_r}{\omega_0 \delta^\lambda} [A \cos(\omega_r t + \varphi_1 + \alpha) + B \cos 2(\omega_r t + \varphi_2 + \alpha)], \quad (4)$$

$$A = (A_1^2 + A_2^2)^{1/2}, \quad B = (B_1^2 + B_2^2)^{1/2}; \quad (5)$$

$$\varphi_1 = \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{A_2}{A_1} \right), \quad \varphi_2 = \frac{1}{2} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{B_2}{B_1} \right); \quad (6)$$

$$A_1 = \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{\omega_0 \delta^\lambda}{\omega_r} \sin 2\beta' \sin \beta \cos \beta (\eta^\lambda \cos 2\gamma - 3), \quad (7)$$

$$A_2 = \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{\omega_0 \delta^\lambda \eta^\lambda}{\omega_r} \sin 2\beta' \sin \beta \sin 2\gamma, \quad (8)$$

$$B_1 = \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{\omega_0 \delta^\lambda}{\omega_r} \sin^2 \beta' \left[\frac{3}{2} \sin^2 \beta + \frac{\eta^\lambda}{2} \cos 2\gamma (1 + \cos^2 \beta) \right], \quad (9)$$

$$B_2 = \sqrt{\frac{3}{8}} \frac{\omega_0 \delta^\lambda \eta^\lambda}{\omega_r} \sin^2 \beta' \cos \beta \sin 2\gamma. \quad (10)$$

(3) 式是旋转固体相互作用的久期表达式。\$\omega_0\$ 为共振频率。第一项是各向同性项，固体高分辨 NMR 的目的常常是要测量这一项。第二项是各向异性的时间无关项，当

$$\beta' = \beta_M = \cos^{-1} \frac{1}{\sqrt{3}} \cong 54.7^\circ$$

时，这一项消失，\$\beta_M\$ 即称为魔角。当 \$\beta'\$ 偏离 \$\beta_M\$ 时，这一项表示为缩小了

$$F = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta' - 1)$$

倍的静态相互作用。利用这一性质，可以准确地测定魔角^[11]。第三项是各向异性的时间相关项，它反映了受到旋转调制的相互作用。显然，讨论在 MAS 条件下核自旋的相互作用的行为，主要讨论这一项。本文的目的就是试图阐明受到旋转调制的各向异性时间相关项对观测谱的影响。

密度矩阵的形式解为^[9]

$$\rho(t) = L(t) \rho(0) L^{-1}(t), \quad (11)$$

式中 \$\rho(0)\$ 是密度算符的初值。通常传播算符 \$L(t)\$ 写为

$$L(t) = T \exp \left[-i \int_0^t \mathcal{H}(t') dt' \right], \quad (12)$$

式中 \$T\$ 为 Dyson 时序算符。在我们的旋转固体情形下

$$L(t) = \exp \left[-i T_{00}^\lambda C^\lambda \rho_{00} t - i \sqrt{\frac{3}{2}} C^\lambda \delta^\lambda T_{20}^\lambda \theta(t) \right], \quad (13)$$

式中

$$\begin{aligned} \theta(t) = & A \sin(\omega_r t + \varphi_1 + \alpha) + B \sin 2(\omega_r t + \varphi_2 + \alpha) \\ & - A \sin(\varphi_1 + \alpha) - B \sin 2(\varphi_2 + \alpha). \end{aligned} \quad (14)$$

观测的 NMR 讯号，即自由感应衰减 (FID) 以 \$G(t)\$ 表示

$$G(t) = \operatorname{Tr} \frac{[\rho(t) \cdot I_x]}{\operatorname{Tr}(I_x^2)}. \quad (15)$$

对于各向异性的化学位移

$$\begin{aligned}
 G(t) &= g_0(t) \cdot g(t) \\
 &= g_0(t) \cdot \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^\pi \exp[-i\theta(t)] \sin\beta d\beta,
 \end{aligned} \quad (16)$$

式中 $g_0(t)$ 是各向同性分量产生的 FID,

$$g_0(t) = \exp(-i\sigma\omega_0 t), \quad (17)$$

σ 为各向同性的化学位移. 利用第一类 Bessel 函数的展开式

$$e^{iz\sin\theta} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(z) e^{im\theta}, \quad (18)$$

(16)式可以表示为

$$G(t) = g_0(t) \cdot \sum_{-\infty}^{\infty} I_n \exp(in\omega_r t), \quad (19)$$

式中

$$I_n = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^\pi \left| \sum_l J_l(B) J_{n-2l}(A) \exp[i2l(\varphi_1 - \varphi_2)] \right|^2 \sin\beta d\beta. \quad (20)$$

(19)式表明,在 MAS 情形下,旋转使 FID 分解为一系列振幅为 I_n , 基频为 ω_r 的 n 次谐波的简谐振动. $g(t)$ 应满足归一化条件

$$\sum_{-\infty}^{\infty} I_n = 1. \quad (21)$$

由于这些简谐振动都有 $2\pi/\omega_r$ 周期性,显然在 FID 讯号数字化过程中只要保证与 $2\pi/\omega_r$ 间隔相等的取数,则总有

$$\begin{aligned}
 G(t)_{\text{synch}} &= g_0(t) \cdot \sum_{-\infty}^{\infty} I_n \exp(i\phi) \\
 &= g_0(t) \exp(i\phi).
 \end{aligned} \quad (22)$$

相位因子 $\exp(i\phi)$ 是很容易在谱仪上得到修正的. (22) 式表明这种间隔取数得到的是非均匀相互作用的各向同性部分. 这种在时域中保持周期 $2\pi/\omega_r$ 的间隔取数,称为同步取数^[5,6,12].

(19)式的 Fourier 变换 (FT) 为

$$G(\omega) = \delta(\omega - \omega_0) \otimes \sum_{-\infty}^{\infty} I_n \delta(\omega - n\omega_r), \quad (23)$$

这是频域中的 NMR 谱. (23)式中 $\otimes$ 表示卷积. NMR 谱是一系列强度为 I_n , 间隔为 ω_r 的旋转边带,显然这些边带都满足归一化条件(21)式.

由 (5)–(10) 式可知,边带强度 I_n 与相互作用强度 $\omega_0\delta^2$, 不对称参数 η^2 以及转速 ω_r 相关. 因此在给定的转速下,由所测得的旋转边带强度可以推测出相应的 δ^2 和 η^2 值来. 定性地说,由 Bessel 函数的性质可知

$$\lim_{\omega_r \rightarrow \infty} I_n = \begin{cases} 1 & n = 0 \\ 0 & n \neq 0; \end{cases} \quad (24)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} I_n = 0. \quad (25)$$

对于四极相互作用,上述分析过程也是适用的,运用虚拟自旋 $-1/2$ 算符^[13,14]可以得到比较简单的结果.事实上,可以证明,各种核相互作用都可以表示成虚拟自旋 $-1/2$ 算符的线性和的形式.在 MAS 情形下,可以证明四极相互作用的久期项可以写为

$$\mathcal{H}_{\text{sec}}^Q = \sum_{i=1}^{2I} \frac{1}{3} \omega_Q [I(I+1) - m_i(m_i-1)](2m_i-1) I_z^{i,i+1} \xi(t), \quad (26)$$

式中四极耦合常数 ω_Q 表为(频率单位)

$$\omega_Q = \frac{3eQ\delta}{4I(2I-1)}. \quad (27)$$

m_i 为第 i 个能级所对应的磁量子数, $m_i = I, I-1, \dots, -I+1$, $I_z^{i,i+1}$ 是虚拟自旋 $-1/2$ 算符 $I^{i,i+1}$ 的 z 分量.

如果令

$$\omega_Q^i = (2m_i-1)\omega_Q, \quad (28)$$

那么,四极相互作用的分析就与化学位移的分析完全相同,只是这里的 ω_Q^i 与化学位移的 $\omega_0\delta$ 相对应,即对于四极核 I ,有 $2I$ 个“化学位移”各向异性相互作用.体系的传播算符则表示成这些“化学位移”相互作用传播算符的积

$$L(t) = \prod_i L_i(t). \quad (29)$$

FID 讯号形如

$$G^Q(t) = \sum_n I_n^Q \exp(in\omega t), \quad (30)$$

其中

$$I_n^Q = \sum_i P_i I_{n,i}. \quad (31)$$

(31)式中

$$P_i = [I(I+1) - m_i(m_i-1)] / \frac{2}{3} I(2I+1)(I+1), \quad (32)$$

$I_{n,i}$ 由(20)式给出.

同样,(30)式的 FT 变换得到的 MAS 慢旋转条件下四极相互作用的 NMR 谱也是一系列间隔为 ω_r 的旋转边带,这是由 $2I$ 个等效的“化学位移”旋转边带组成的.边带的强度与四极耦合常数 ω_Q 、不对称参数 η^Q 以及转速 ω_r 相关.同样,分析实验谱可以求得我们所需要的结构参数 ω_Q 和 η^Q .

三、旋转边带的计算分析

如上所述,非均匀相互作用的旋转边带包含了相互作用强度、各向异性以及转速的信息.对于多晶或粉末,旋转边带的强度不能由简单的解析表达式表示.我们将通过数值分析来计算非均匀相互作用的旋转边带.

四极相互作用产生的旋转边带可等效于 $2I$ 个“化学位移”各向异性产生的边带的组

合, 因此我们将通过对化学位移边带的分析计算来阐明四极相互作用的情形。

以下引述我们已经得到的几种典型情况。

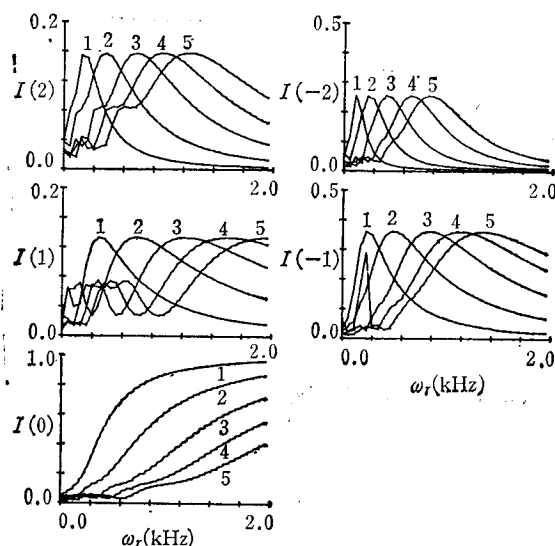


图1 化学位移相互作用各阶边带相对强度与转速的关系 纵坐标为相对于总讯号强度的各阶边带强度 $I(n)$, 括号中的数字表示边带指数; 横坐标为旋转速度 ω_r , 以 kHz 为单位; 曲线 1, 2, 3, 4, 5 相应于 $\omega_0\delta$ 取值分别为 1, 2, 3, 4, 5 kHz 的情形

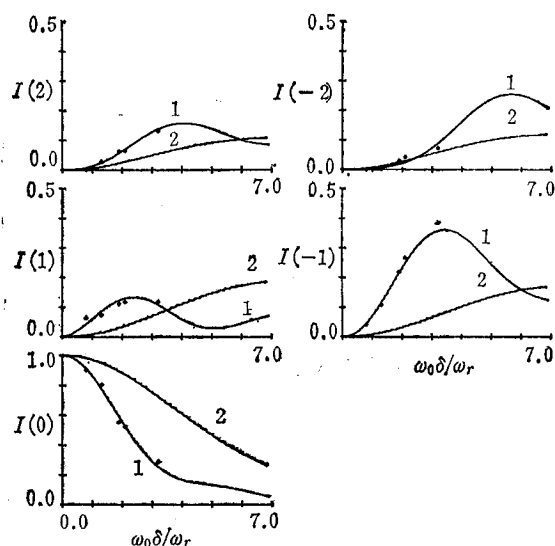


图2 化学位移相互作用各阶边带相对强度与相互作用强度和转速比值的关系 纵坐标为相对强度; 横坐标为 $\omega_0\delta/\omega_r$ 相对值; 曲线 1 上的离散数据点对应于图 4 中 ^{207}Pb 的实验谱

轴对称化学位移产生的旋转边带有较为简单的形式。由(5)–(10)式可知, A 与 B 和 γ 无关, 且 $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$, 因此

$$I_n = \frac{1}{2} \int_0^\pi \left| \sum_l J_l(B) J_{n-2l}(A) \right|^2 \sin \beta d\beta. \quad (33)$$

可以采用五点高斯积分法或两重高斯积分法^[27] 作数值计算. 这两种方法计算速度都相近, 精度均在 0.001 以内. 图 1 示出了相互作用强度 $\omega_0\delta$ 分别取 1 kHz, 2 kHz, 3 kHz, 4 kHz 和 5 kHz 时的 0, ± 1 和 ± 2 级边带强度随 ω_r 的变化. 有如下的定性结论:

(1) 零级边带强度随 ω_r 基本上是单调上升, 只是在 ω_r 很小时才显示出起伏的变化. $\omega_0\delta$ 越大, 零级边带强度增加越缓慢.

(2) 高阶边带的强度在很慢的转速情形下先随转速增大而迅速增强, 达到某一极大值后又随转速增大而下降. 通常, 相互作用强度越大, 达到这些极大值的转速也越大.

(3) 当转速接近相互作用的强度时, 零级边带集中了大约 90% 的总强度. 转速越高高阶边带相对强度越小. 实际上边带强度的值取决于相对强度与转速的比值 $\omega_0\delta/\omega_r$. 各阶边带强度随这一比值的变化曲线示于图 2. 其中曲线 1 表示轴对称情形, 曲线 2 表示 $\eta = 0.5$ 的不对称情形.

对于不对称情形, 可对 (20) 式作二重高斯积分. 图 2 中仅示出 $\eta = 0.5$ 的典型情形, 结果由曲线 2 表示. 我们得出以下定性结论:

(1) 随着 η 的增大, 正、负阶边带强度的差别减小, 当 η 达到极大值 1 时, 这种差别已经消失. 这一结论从静态粉末谱型上也可以看到.

(2) 各阶边带强度相对于 $\omega_0\delta/\omega_r$ 显现的起伏随 η 增大而趋平缓.

此外, 前述的有关对称情形所得到的结论也同样适用于非对称情形.

由 (31) 和 (32) 式, 利用图 2 的结果, 就可以得到任意自旋的四极相互作用所产生的边带强度. 图 3 给出了 $I = 1$ 情形的计算结果. 曲线 1 为轴对称情形, 曲线 2 为 $\eta = 0.5$ 的情形. 所得结果与化学位移情形稍有不同: 在这里不论是轴对称情形还是不对称情形, 正、负同级边带强度都是一样的. 这是因为每一个 ω_Q 的跃迁总对应一个 $-\omega_Q$ 的跃迁, 从而对正、负级边带的起伏产生了补偿.

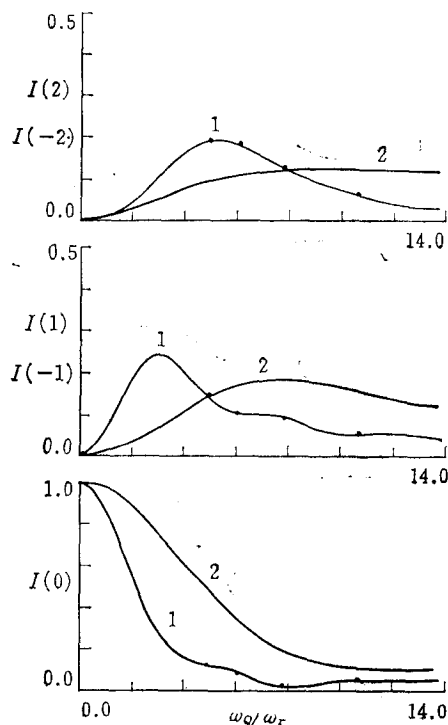


图 3 四极相互作用旋转边带相对强度与相互作用强度对转速比值的关系
纵坐标表示各阶旋转边带相对于总信号的强度 $I(n)$; 横坐标为四极相互作用强度 ω_Q 与转速 ω_r 的比值; 曲线 1 上的离散数据点对应于图 4 中 ^2D 的实验谱

四、与实验结果的对照

MAS 实验谱是在超导 NMR 谱仪 Varian XL-200 上测量的. 恒定磁场强度为 4.7

T. MAS 探头是一种双空气轴承型的旋转机构, 旋转速度在 3kHz 以下连续可调. 谱仪最大谱宽为 50 kHz.

对于化学位移相互作用, 我们选硝酸铅中的 ^{207}Pb , 其核自旋 $I = 1/2$. 对于核四极相互作用, 我们选择了氘代六甲苯的 ^2D , 其核自旋 $I = 1$. 两种样品都具有轴对称性.

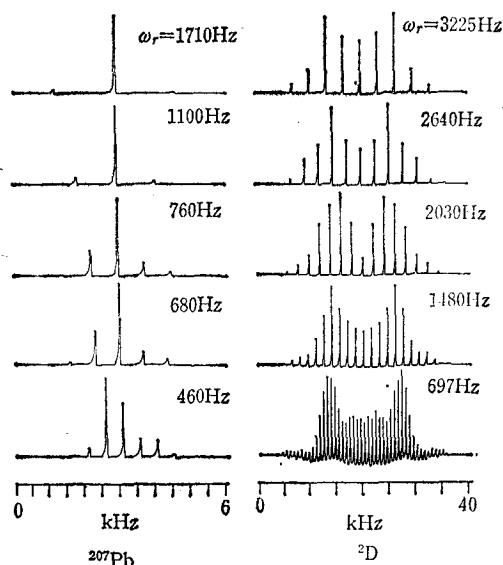


图 4 不同转速情形下 ^{207}Pb 化学位移(左)和 ^2D 四极相互作用(右)的 MAS 实验谱
由于不满足快旋转条件, NMR 谱分解为一系列的旋转边带; 横坐标为谱宽; $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ 中的 ^{207}Pb , 化学位移相互作用强度 $\omega_0\delta = 1.46 \text{ kHz}$, 轴对称; $\text{C}_6(\text{CD}_3)_6$ 中的 ^2D , 四极相互作用强度 $\omega_Q = 15.8 \text{ kHz}$, 轴对称

图 4 是上述两种粉末样品的 MAS 实验谱. 左图为硝酸铅中的 ^{207}Pb 化学位移旋转边带实验谱, 右图为氘代六甲苯中 ^2D 的四极相互作用旋转边带的实验谱. 从上至下, 我们选择了五种不同转速下的典型谱. ^{207}Pb 的化学位移相互作用强度 $\omega_0\delta$ 为 1.46 kHz , ^2D 的四极相互作用强度 ω_Q 为 15.8 kHz . 实验谱表明, 当 ω_r 接近各向异性相互作用强度时, 高阶旋转边带强度已经很小. 随着 ω_r 减小, 边带的包络趋近于静态粉末谱.

在图 2 和图 3 的曲线 1 上分别标出了图 4 实验谱所测得的边带强度的数据点. 这些实验数据与理论曲线符合得很好, 偏差不超过 3%. 若能进一步提高实验探测谱的信噪比, 偏差会进一步减小.

五、结 语

MAS 慢旋转条件下非均匀相互作用产生的旋转边带强度包含了相互作用强度、各向异性的信息. 这些信息对于晶体和分子结构的研究有重要意义. 实际上, 仅仅计算少数几条旋转边带的强度就可以获得这些信息, 从而导出非均匀相互作用的各张量主值. 理论与实验结果符合很好, 证明这种分析方法是合理的. 遵循这一路线可以开展实际应用

的研究,有关的工作正在进行中。

实验中得到李丽云、裘鉴卿同志的协助;何显茂同志给予了计算工作的方便。谨此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] M. Mehring, Principles of High Resolution NMR in Solids, Springer Verlag, Berlin, Heiderberg, New York, (1983).
- [2] E. R. Andrew, *Inter. Rev. Phys. Chem.*, **1**(1981), 195.
- [3] 叶朝辉, 波谱学杂志, **1**(1984), 415.
- [4] U. Haebleren and J. Waugh, *Phys. Rev.*, **175**(1968), 458.
- [5] J. Waugh, M. Maricq and r. Cantor, *J. Mag. Res.*, **29**(1978), 183.
- [6] M. Maricq and J. Waugh, *Chem. Phys. Lett.*, **47**(1977), 327.
- [7] M. Maricq and J. Waugh, *J. Chem. Phys.*, **70**(1979), 3300.
- [8] J. Herzfield and A. Borger, *J. Chem. Phys.*, **73**(1980), 6027.
- [9] U. Haebleren, High Resolution NMR in Solids, Academic Press, New York, (1976).
- [10] 孙伯勤、叶朝辉, 已投物理学报.
- [11] 叶朝辉、裘鉴卿、李丽云、孙伯勤, 物理学报, **33**(1984), 1680.
- [12] 叶朝辉、裘鉴卿、李丽云, 科学通报, **29**(1984), 1164.
- [13] A. Wokaun and R. Ernst, *J. Chem. Phys.*, **67**(1977), 1752.
- [14] S. Vega, *J. Chem. Phys.*, **68**(1978), 5518.
- [15] 李庆扬、王能超、易大义, 数值分析, 华中工学院出版社, (1982).

INHOMOGENEOUS INTERACTIONS OF SOLIDS UNDER MAS

SUN BO-QIN YE CHAO-HUI

(Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The inhomogeneous anisotropic interactions of solids under MAS of slow rotation break up the NMR spectra into a series of spinning sidebands which contain all the information about the interaction tensors. This structural useful information can be extracted by computing and analysing only a few of ths sidebands. This method ,which is applicable for various inhomogeneous interactions and is based on an expansion of the Bessel functions using the irreducible spherical tensor and operator representation of the spin interactions, is reported in the paper. The experimental spectra of typical samples dominated respectively by chemical and quadrupolar interaction agree well with the theoretical ones.