Az ETG-tenzor Czjzek-féle ábrázolása

A $\varrho(\underline{r})$ töltéseloszlású magra ható elektrosztatikus potenciál: $\phi(\underline{r})$

Az elektrosztatikus kölcsönhatási energia:

$$E_e = \int \varrho(\underline{r})\, \phi(\underline{r})\, d^3\underline{r} =$$

$$= \phi(\underline{0}) \underbrace{\int \varrho(\underline{r})\, d^3\underline{r}}_{Ze} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \phi_{\alpha\beta}(\underline{0}) \int \varrho(\underline{r})\, x_\alpha x_\beta\, d^3\underline{r} + \ldots$$

ETG: $V_{\alpha\beta}(\underline{r}) := \phi_{\alpha\beta}(\underline{r}) - \frac{1}{3} \Big(\underbrace{\sum_{\gamma} \phi_{\gamma\gamma}(\underline{r})}_{\Delta\phi(\underline{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\varrho(\underline{r})} \Big) \delta_{\alpha\beta}$

$$\boxed{\sum_{\alpha} V_{\alpha\alpha} = 0}$$

$$E_e = \phi(\underline{0}) Ze - \frac{1}{6\varepsilon_0} \varrho(\underline{0}) \int r^2 \varrho(\underline{r})\, d^3\underline{r} + \qquad E_0$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta}(\underline{0}) \underbrace{\int \varrho(\underline{r}) \left(x_\alpha x_\beta - \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) d^3\underline{r}}_{\frac{e}{3} Q_{\alpha\beta}} \qquad E_Q$$

A mag kvadrupólusnyomaték-tenzora:

$$Q_{\alpha\beta} := \frac{1}{e} \int \varrho(\underline{r}) \left(3 x_\alpha x_\beta - r^2 \delta_{\alpha\beta} \right) d^3\underline{r}$$

$\Phi_{\alpha\beta}$ szimmetrikus (Young-tétel)

$\Downarrow$

$V_{\alpha\beta}$ szimmetrikus

$\Downarrow$

$V_{\alpha\beta}$ diagonalizálható

$V_{\alpha\beta}$ főtengely-rendszerében:

$$\boxed{E_Q = \frac{e}{6} \sum_{\alpha} V_{\alpha\alpha} Q_{\alpha\alpha}}$$

$$V_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 \end{pmatrix}$$

$$V_1 + V_2 + V_3 = 0$$

Eddig a kifejezések a koordinátákban szimmetrikusak voltak. Most rontjuk el!

V_1, V_2, V_3 közül az egyiktől szabadulni akarunk. De ezért feláldozzuk a szimmetriát!

A két független paraméter:

$$\boxed{\begin{array}{l} V_{zz} \\ \eta = \dfrac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \end{array}}$$

A tengelyek választása:

- $|V_{zz}| \geq |V_{yy}| \geq |V_{xx}|$
- (x, y, z) jobbsodrású

$$V_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(1-\eta) & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}(1+\eta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} V_{zz}$$

Következmény: a (V_1, V_2, V_3)-tér leképezése a (V_{zz}, η)-síkra nem folytonos! A (V_1, V_2, V_3)-térben egymáshoz közeli pontok a (V_{zz}, η)-síkon távol kerülhetnek egymástól, ugyanakkor a (V_{zz}, η)-sík két látszólag közeli pontja a (V_1, V_2, V_3)-térben két távoli pont lehet. $\Rightarrow$ A (V_{zz}, η)-sík nem alkalmas az ETG-tenzor eloszlásának leírására.

$\eta = 1$ esetén V_{zz} előjelének nincs értelme; ez a (V_{zz}, η) síkon nem látszik.

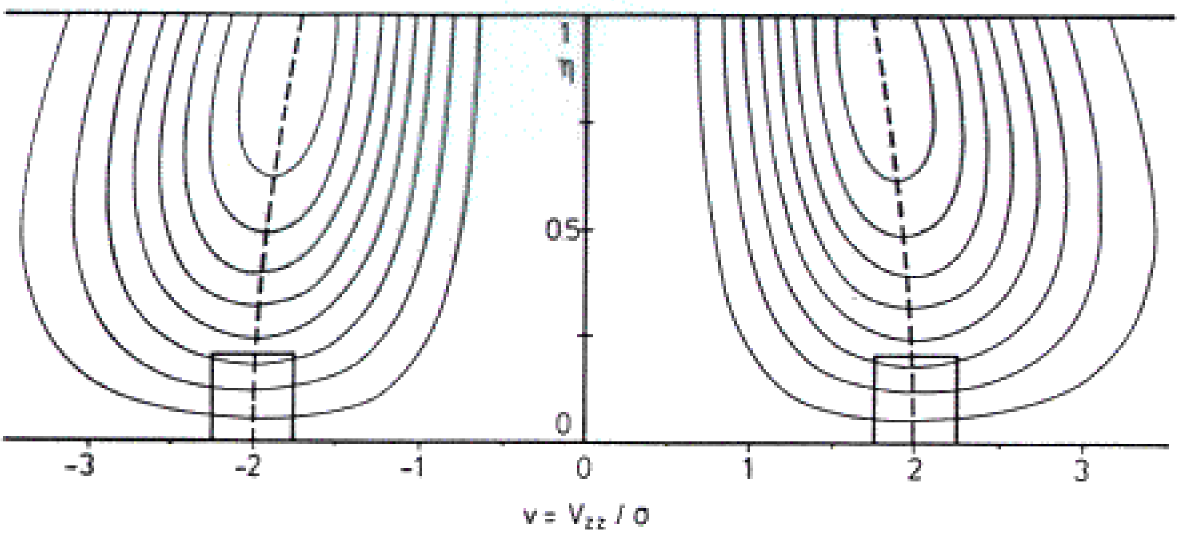


Fig.1. Contour map of the probability density, $P(v,\eta)$, eq.(5), with $\beta = 0$, $v = V_{zz}/\sigma$, corresponding to a randomly packed structure in conventional presentation. Intervals between contour lines: $\delta P = 0.05$. $P = 0$ along the lines $v = 0$ and $\eta = 0$. The dashed line marks the ridge of $P(v,\eta)$ formed by the points (v,η) with $v = 2(1 + \frac{1}{3}\eta^2)^{-1/2}$. At these points $|\partial P/\partial v|_{\eta=\mathrm{const}} = 0$. The squares indicate schematically results reported in ref.[4] for some amorphous Eu alloys.

Hogyan jellemezzük az ETG-tenzor eloszlását pl.

- rendezetlen kristályban,
- fémüvegben,
- amorf oxidban,
- lefagyasztott oldatban,

stb. ?

Fizikailag nem értelmezhető eloszlások:

$$P\,(V_{zz})$$

$$P\left(V_{zz}\sqrt{1+\frac{\eta^2}{3}}\right)$$

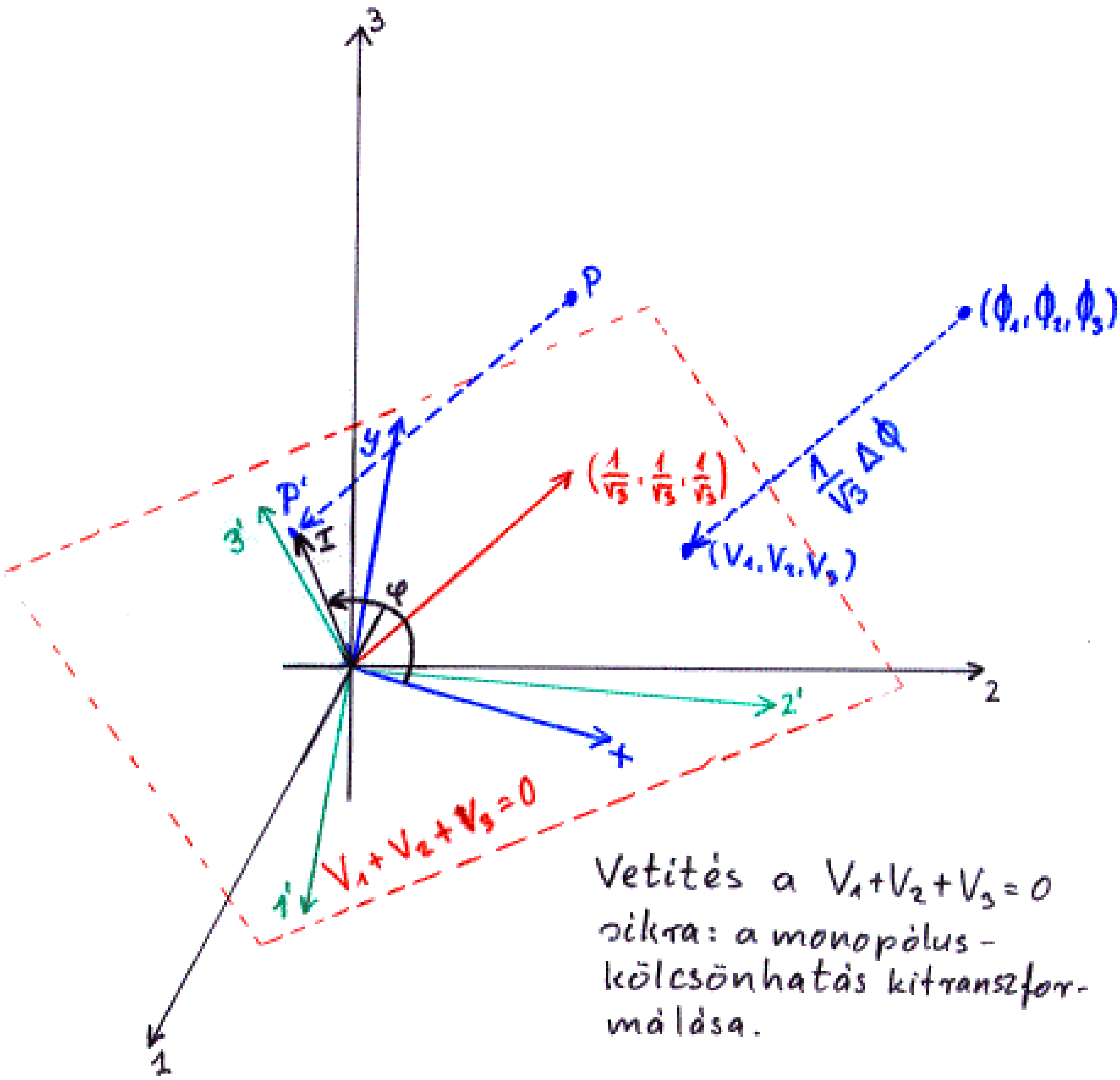
(kvadrupólus-felhasadás $1/2 \rightarrow 3/2$ átmenet esetén)

$$P\,(V_{zz}, \eta)$$

A gyakorlatban szinte mindenki ezeket használja.

A megoldás (G. Czjek, 1983): a (V_1, V_2, V_3)-teret a $V_1 + V_2 + V_3 = 0$ síkra kell vetíteni.

Az 1, 2, 3 tengelyek egyenértékűek



Vetítés a $V_1+V_2+V_3=0$ síkra: a monopólus-kölcsönhatás kitranszformálása.

A sík egy P' pontját az (x, y) derékszögű vagy az (r, φ) polárkoordinátákkal jellemezzük.

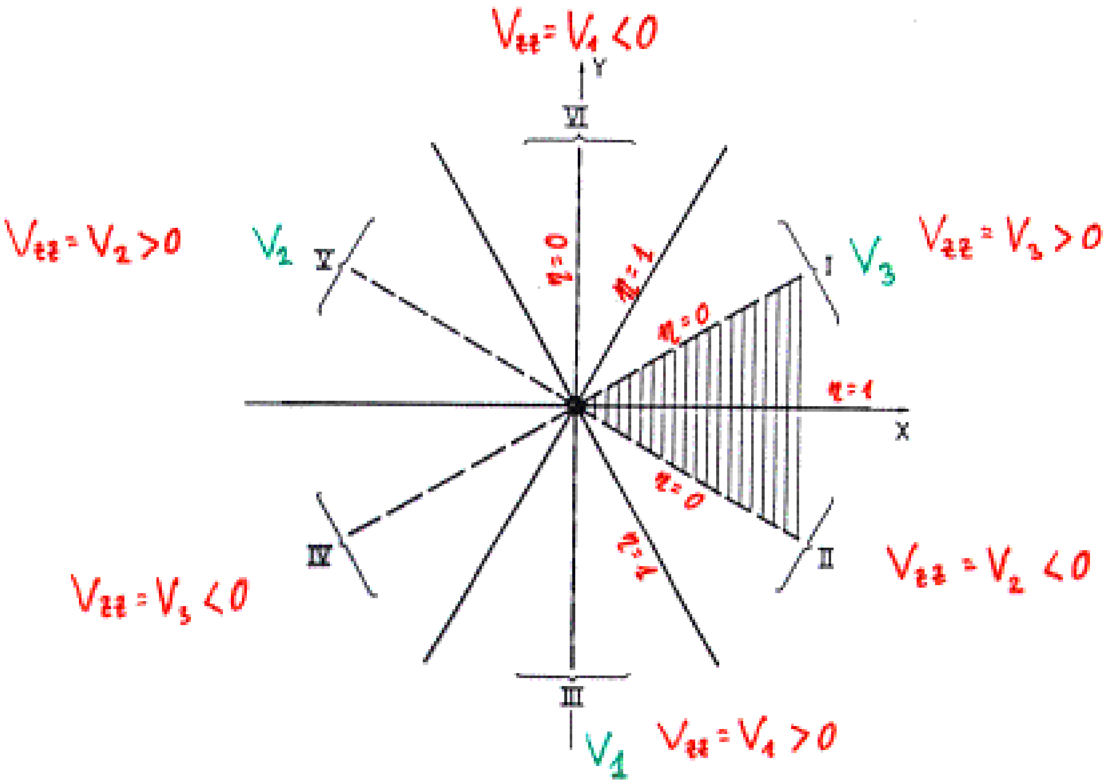


Fig.2. General view of the plane $V_1 + V_2 + V_3 = 0$ in the (V_1, V_2, V_3)-parameter space. Heavy lines correspond to $\eta = 1$ $(V_i = 0)$, dashed lines correspond to $\eta = 0$. See text for the meaning of sectors I through VI. The hatched sector contains all physical parameter values $-\infty < V_{zz} < \infty$, $0 \leq \eta \leq 1$.

$$V_1 = -y$$

$$V_2 = -\frac{1}{2}(\sqrt{3}x - y)$$

$$V_3 = \frac{1}{2}(\sqrt{3}x + y)$$

Egy alkalmasan választott 60°-os szektorban valamennyi, egymástól fizikailag lényegesen különböző esetet megtaláljuk.

Table 1
Expressions for the parameters V_{zz}, η in terms of cartesian coordinates (x,y) and of polar coordinates (r,ϕ) in the presentation of the (V_{zz},η)-plane shown in fig.3.

$V_{zz} < 0$	$V_{zz} > 0$
$V_{zz} = -\frac{1}{2}(\sqrt{3}\,x - y)$	$V_{zz} = \frac{1}{2}(\sqrt{3}\,x + y)$
$= -r\cos(\frac{1}{6}\pi + \phi)$	$= r\cos(\frac{1}{6}\pi - \phi)$
$\eta = \sqrt{3}(x + \sqrt{3}\,y)/(\sqrt{3}\,x - y)$	$\eta = \sqrt{3}(x - \sqrt{3}\,y)/(\sqrt{3}\,x + y)$
$= \sqrt{3}\tan(\frac{1}{6}\pi + \phi)$	$= \sqrt{3}\tan(\frac{1}{6}\pi - \phi)$

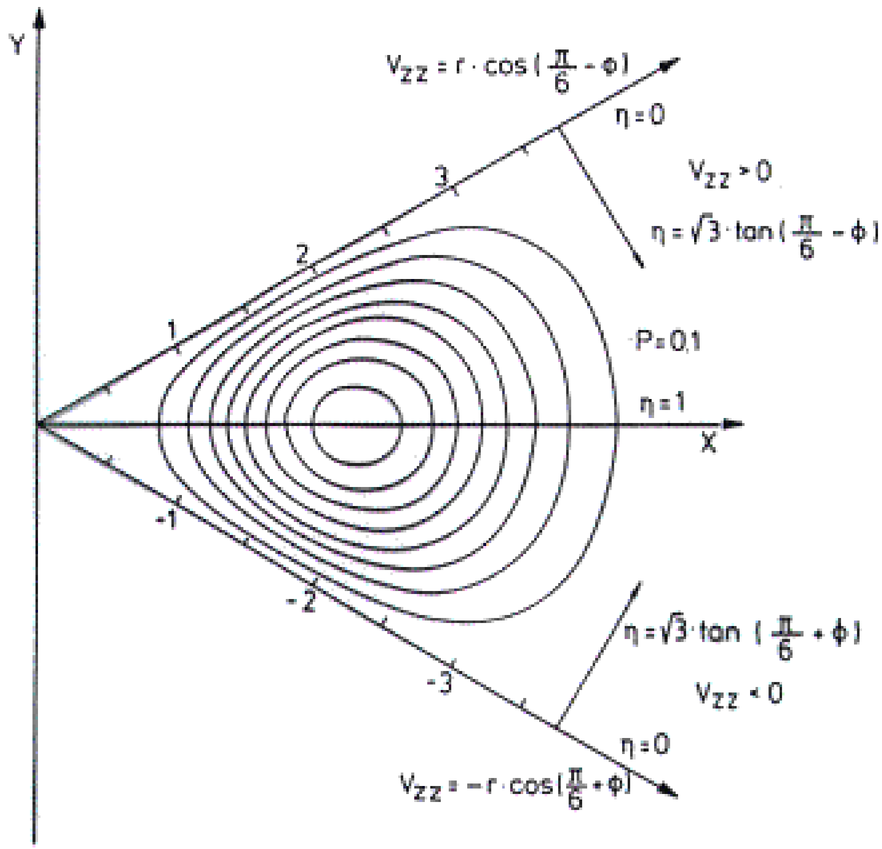


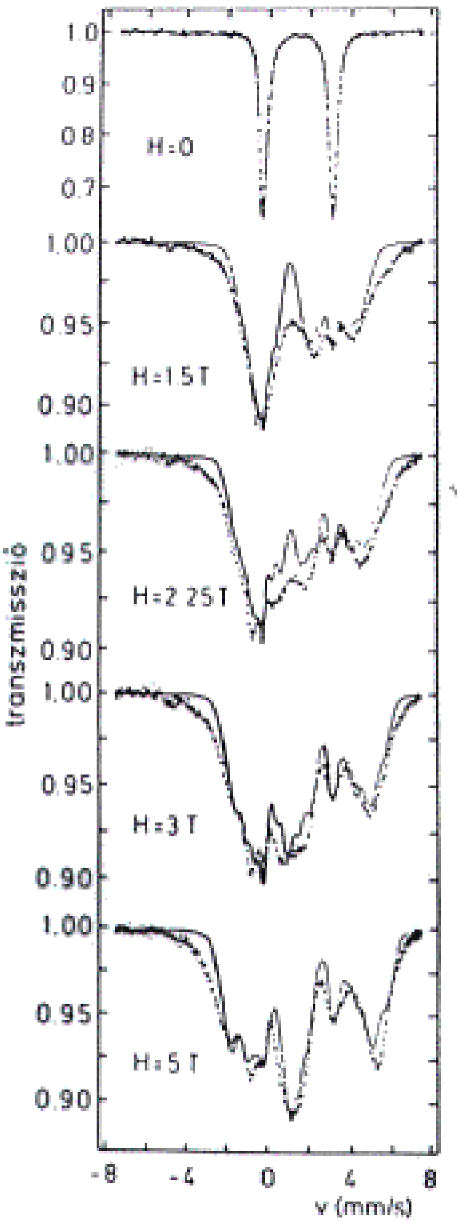
Fig.3. Same as fig.1. Presentation as specified in the text and in table 1.

Tenzorinvariánsok:

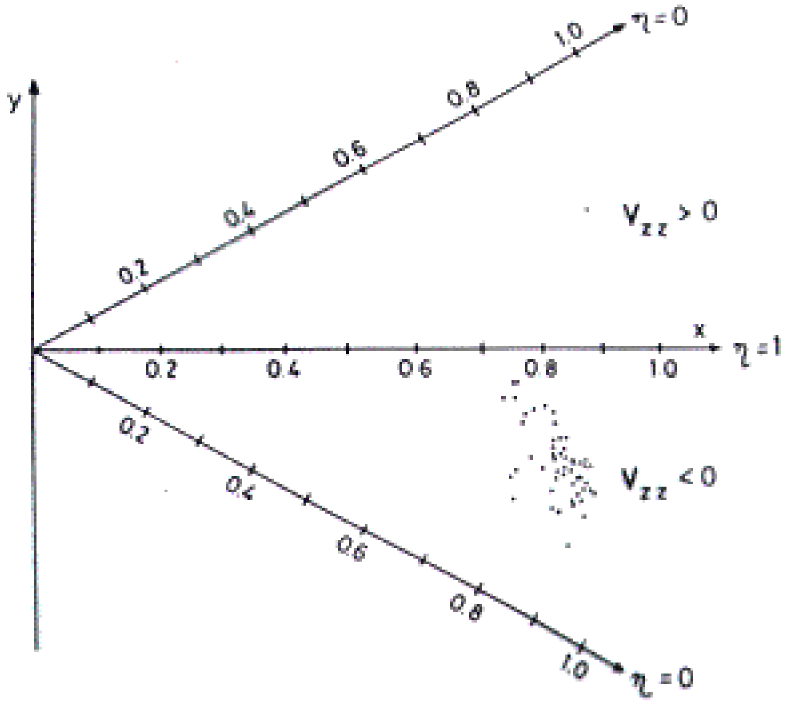
$$S = \frac{2}{3} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta}^2 = V_{zz}^2 \left(1 + \frac{1}{3}\eta^2\right) = r^2$$

$$D = 4 \det(V_{\alpha\beta}) = V_{zz}^3 (1 - \eta^2) = r^3 \sin(3\varphi)$$

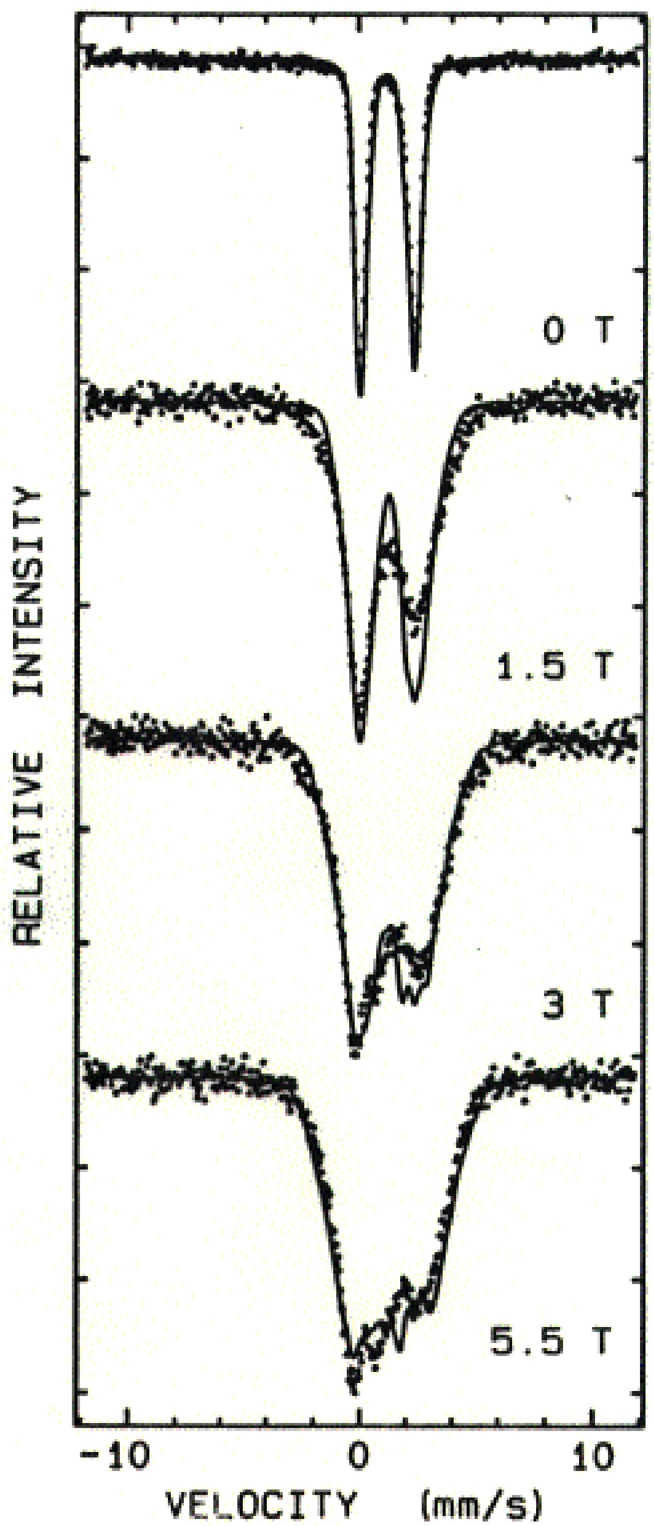
$\boxed{\text{Az } 1/2 \to 3/2 \text{ kvadrupólus-felhasadás} \sim r}$

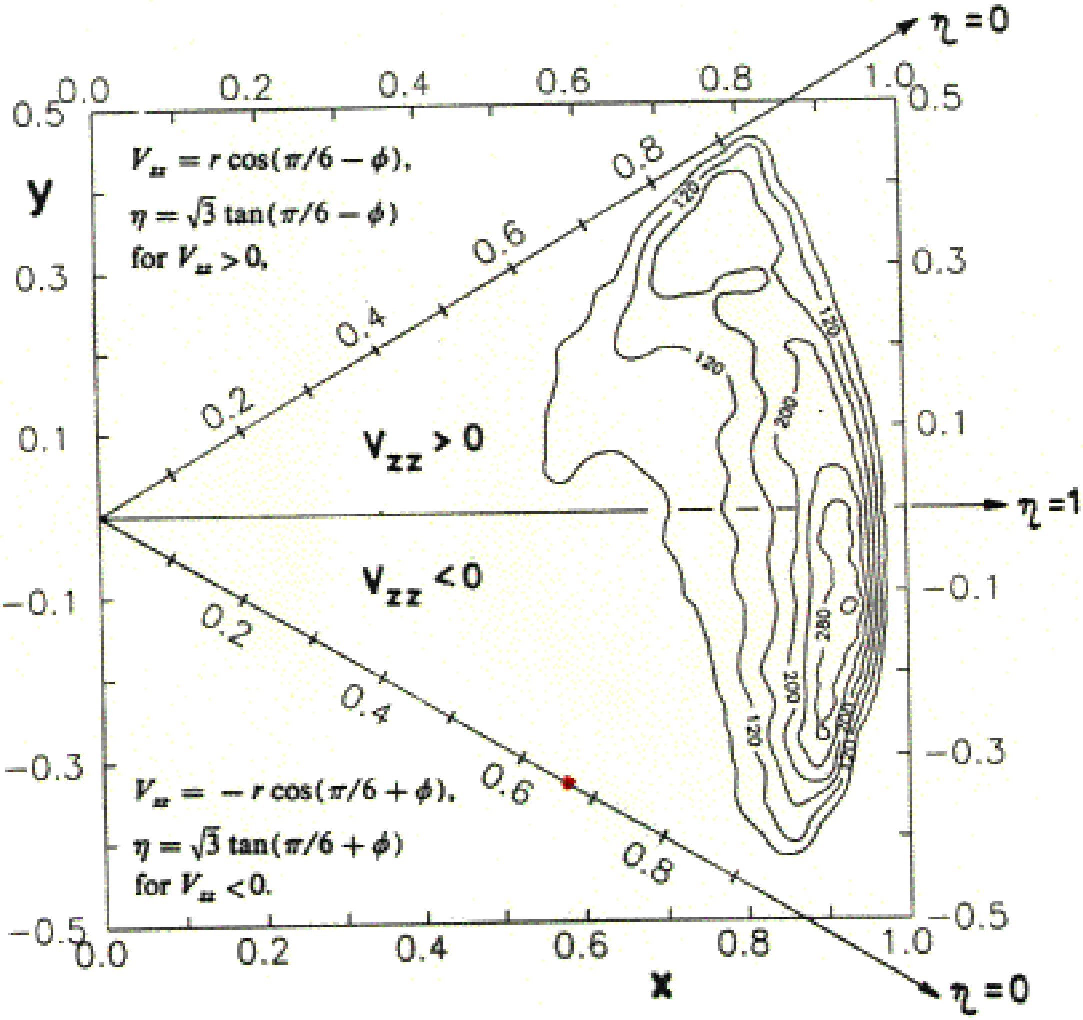


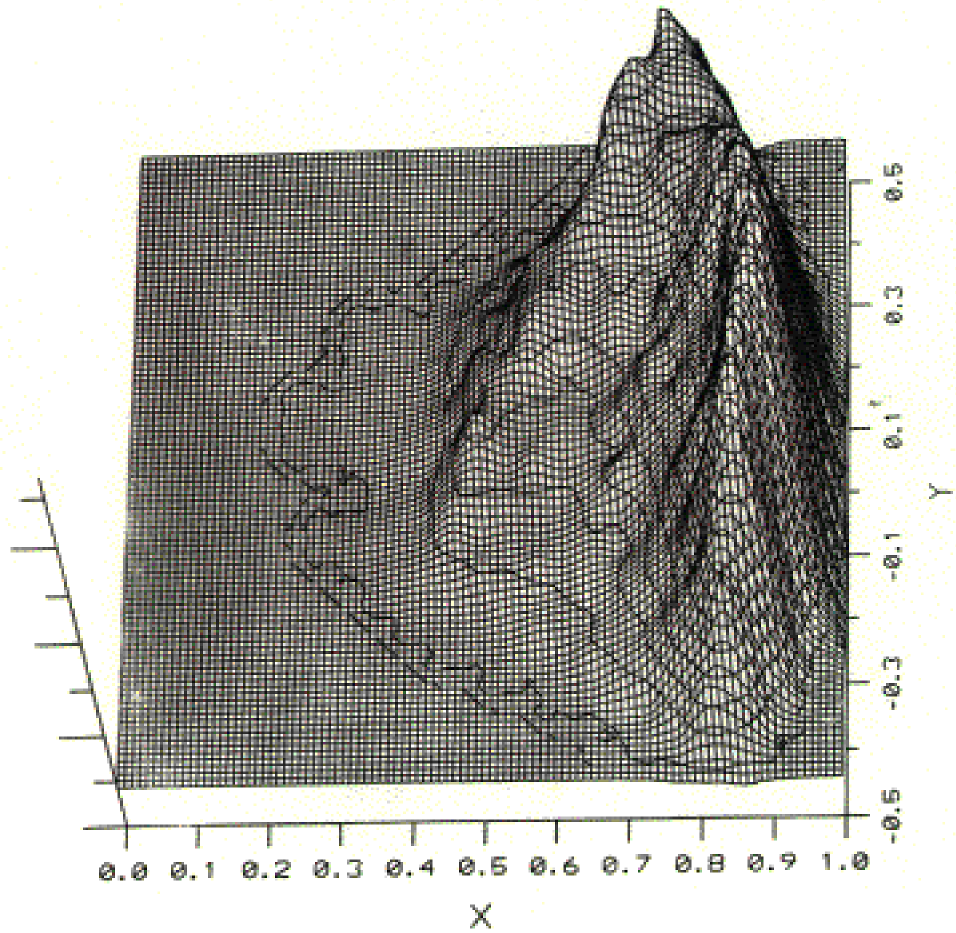
3.2 ábra: $Fe(ClO_4)_2$ eutektikus koncentrációjú lefagyasztott vizes oldatának Mössbauer-spektrumai 4.2 K-en, különböző longitudinális mágneses terekben. A folyamatos görbék a C_{2h}-τ-modellben számított spektrumok ($L_T\xi_0=950\ cm^{-1}$, $L_T\zeta_0=0$, $L_T\sigma_\tau=150\ cm^{-1}$).



3.3 ábra: Az $Fe(ClO_4)_3$ lefagyasztott vizes oldata elektromos térgradiensének eloszlása egy "Czjzek-ábrán" |59|.


RELATIVE INTENSITY
0 T
1.5 T
3 T
5.5 T
-10
0
10
VELOCITY (mm/s)


$V_{zz} = r\cos(\pi/6 - \phi)$,
$\eta = \sqrt{3}\tan(\pi/6 - \phi)$
for $V_{zz} > 0$.
$V_{zz} > 0$
$V_{zz} < 0$
$V_{zz} = -r\cos(\pi/6 + \phi)$,
$\eta = \sqrt{3}\tan(\pi/6 + \phi)$
for $V_{zz} < 0$.
$\eta = 0$
$\eta = 1$
$\eta = 0$
x
y


0.0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1.0
X
0.5 0.3 0.1 -0.1 -0.3 -0.5
Y