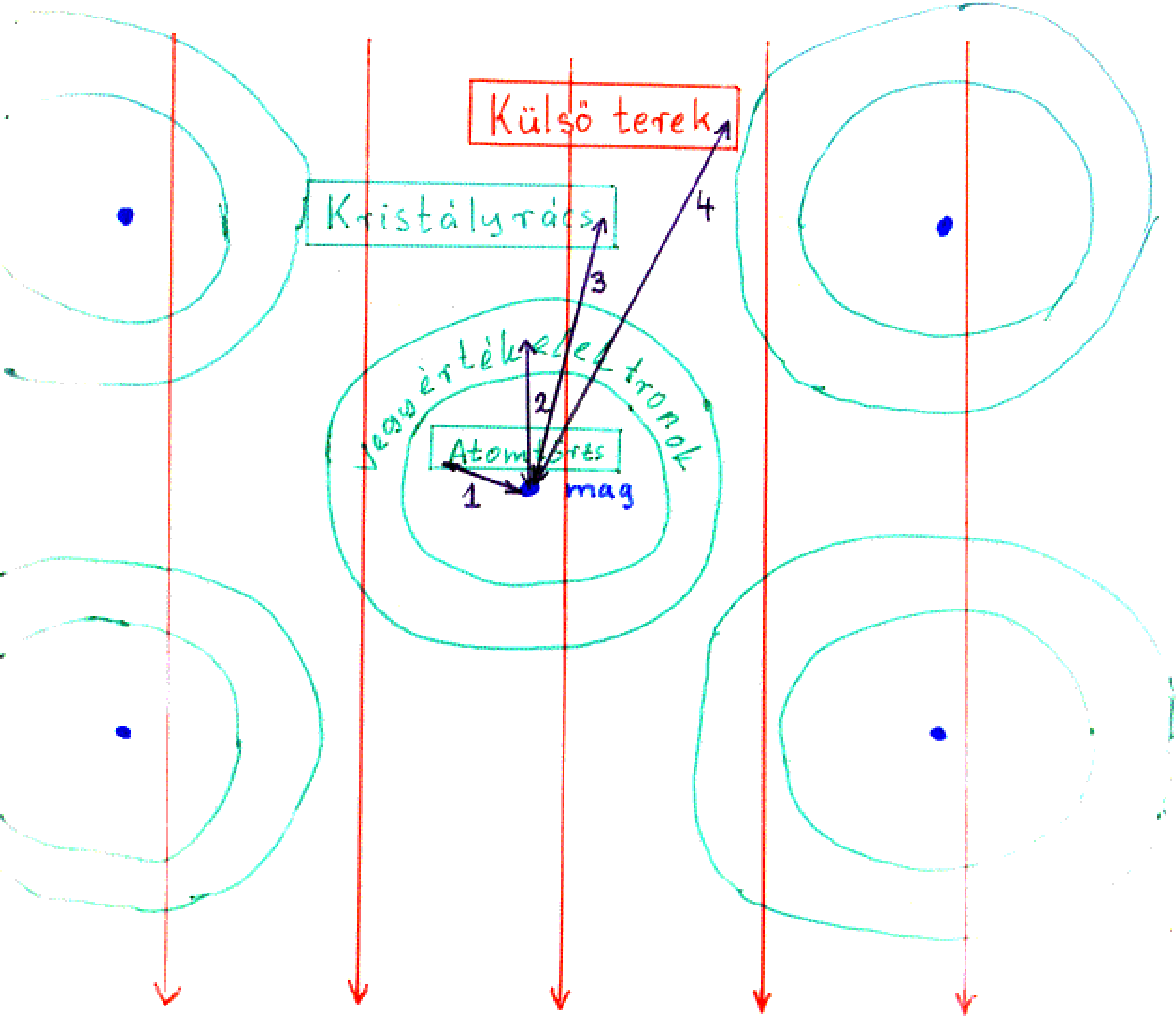
Hiperfinom kölcsönhatás



$$\hat{\mathcal{H}}_{hf} = \underbrace{\underbrace{\underbrace{\hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2}_{\text{héjfizika}} + \hat{\mathcal{H}}_3}_{\text{belsö terek}} + \hat{\mathcal{H}}_4}_{\text{teljes kölcsönhatás}}$$

Elektromos kölcsönhatás

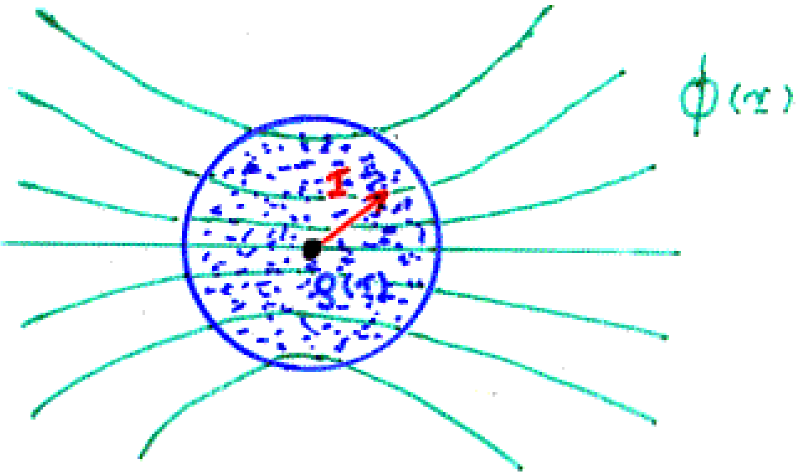
1. Taylor-sorfejtés

$\varrho(\underline{r})$: klasszikus mag-töltéseloszlás

$\phi(\underline{r})$: az elektronok, a többi ionok, stb. elektromos potenciálja

Az elektromos kölcsönhatási energia:

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



A mag belsejében a potenciált Taylor-sorba fejtjük:

$$\phi(\underline{r}) = \phi(\underline{0}) + \sum_{\alpha=1}^{3} \left.\frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha}\right|_{\underline{r}=\underline{0}} x_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{3} \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}\right|_{\underline{r}=\underline{0}} x_\alpha x_\beta + \ldots$$

$$E_e = \phi(\underline{0}) \underbrace{\int \varrho(\underline{r})\, d^3\underline{r}}_{Ze} + \sum_\alpha \left.\frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha}\right|_{\underline{r}=\underline{0}} \underbrace{\int \varrho(\underline{r})\, x_\alpha\, d^3 r}_{\text{a mag } \underline{D} \text{ elektromos dipólusnyomatéka}} +$$

1. 2.

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \underbrace{\left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}\right|_{\underline{r}=\underline{0}}}_{\phi_{\alpha\beta}(\underline{0})} \int \varrho(\underline{r})\, x_\alpha x_\beta + \ldots$$

3.

1. $\phi(\underline{0}) Ze$: egy pontszerű mag kölcsönhatása $\phi(\underline{r})$-rel.

Valamennyi magnivót ugyanolyan mértékben tol el.

(0-ad rendű monopólus-kölcsönhatás)

2. $\underline{D} = \underline{0}$

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

(dipólus-kölcsönhatás)

$$= \int \underline{r}\, \Psi^*(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_A) \sum_{i=1}^{A} e_i \delta(\underline{r}_i - \underline{r})\, \Psi(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_A)\, d^3r_1 \dots d^3r_A\, d^3r =$$

$$= \sum_i e_i \underbrace{\int \Psi^*(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_A)\, \underline{r}_i\, \Psi(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_A)\, d^3r_1 \dots d^3r_i \dots d^3r_A}_{} = 0$$

$= 0$, mivel az integrandus $\underline{r}_i$-ben páratlan

($\Psi(\underline{r}_1, \dots \underline{r}_A)$ vagy páros, vagy páratlan)

3.

Definíció: elektromos térgradiens (ETG):

$$V_{\alpha\beta}(\underline{r}) := \phi_{\alpha\beta}(\underline{r}) - \frac{1}{3} \underbrace{\mathrm{Tr}\,(\underline{\underline{\phi}}(\underline{r}))}_{\Delta\phi(\underline{r})} \delta_{\alpha\beta}$$

⇑ pongyola elnevezés!

- előjel
- nyom-mentes

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \phi_{\alpha\beta}(\underline{0}) \int \varrho(\underline{r})\, x_\alpha x_\beta\, d^3r = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left[V_{\alpha\beta}(\underline{0}) + \frac{1}{3} \Delta\phi\Big|_{\underline{r}=\underline{0}} \delta_{\alpha\beta} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[\int \varrho(\underline{r}) \left(x_\alpha x_\beta - \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) d^3r + \int \varrho(\underline{r}) \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta}\, d^3r \right] =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{6} \underbrace{\Delta\phi\Big|_{\underline{r}=\underline{0}}}_{-\frac{1}{\varepsilon_0}\sigma(\underline{0})} \int r^2 \varrho(\underline{r})\, d^3r}_{E_C} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta}(\underline{0}) \int \varrho(\underline{r}) \left(x_\alpha x_\beta - \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) d^3r}_{E_Q}$$

⇐ külső töltések sűrűsége

E_C (másodrendű monopólus-kölcsönhatás) E_Q (kvadrupólus-kölcsönhatás)

Mindkettő másodrendű effektus ($\sim x_\alpha x_\beta$)!

A másodrendű monopólus-tag nem egy pontszerű mag (vagyis egy elektromos monopólus) elektrosztatikus kölcsönhatását írja le a külső elektronokkal, hanem egy kiterjedt mag elektrosztatikus kölcsönhatását a mag helyén lévő elektronokkal.

Miért monopólus-kölcsönhatás? ⇒ l. multipólus-sorfejtés

$$\boxed{E_c = \frac{1}{6}\Delta\phi \int r^2 \rho(\underline{r})\, d^3r = -\frac{1}{6\varepsilon_0}\, \sigma(\underline{0})\, Z e \langle r^2 \rangle =}$$

$$\boxed{= \frac{Z e^2}{6\varepsilon_0} |\Psi(\underline{0})|^2 \langle r^2 \rangle}$$

a magot homogén töltéssűrűségű, R sugarú gömbnek tekintve:

$$\boxed{= \frac{Z e^2}{10\,\varepsilon_0} |\Psi(\underline{0})|^2 R^2}$$

E_c tulajdonságai:

- az $|I, M\rangle$ állapotok M szerinti elfajulását nem szünteti meg ⇒ PAC, PAD, ... nem mutatja ki. Nem jelentkezik közvetlenül a szinkrotron-Mössbauer-spektroszkópiában sem.
- csak olyan átmenetben jelentkezik, amelynek során R változik ⇒ nem figyelhető meg NMR-ben, NQR-ben.

$$\boxed{\text{A Mössbauer-spektrumok izomér-eltolódásában nyilvánul meg.}}$$

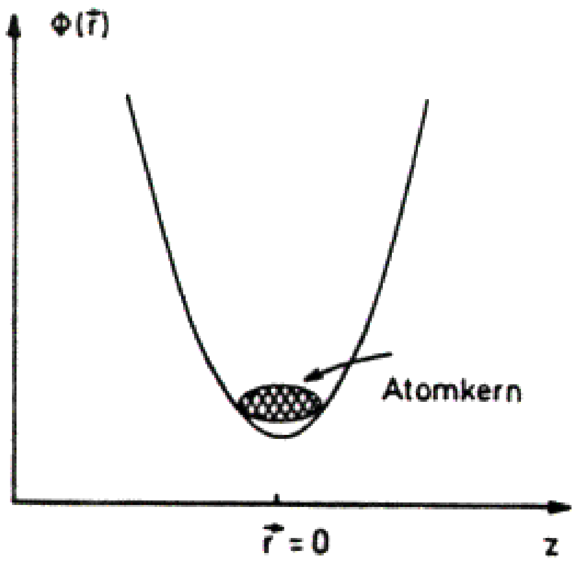


Abb. 3.3: Anschauliche Erklärung des Monopol- und Quadrupolterms. Der Atomkern befindet sich in einem Potentialminimum. Der Rand des Atomkerns ist dabei auf einem etwas höheren Potential als der zentrale Bereich (oder eine Punktladung). Die Energieanhebung im Vergleich zu einer Punktladung hängt von der Krümmung des Potentials und von der Ausdehnung des Kerns ab (Monopolterm). Falls die Krümmung des Potentials in den drei Raumrichtungen nicht gleich ist, spielt die Orientierung eines deformierten Atomkern im Potential eine Rolle (Quadrupolterm). Die tiefste Energie erhält man, falls die Längsachse des Kerns in Richtung der schwächsten Krümmung des Potentials weist.

A kvadrupólus-tag:

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

az ETG főtengely-transzformációja után:

$$\boxed{= \frac{e}{6} \sum_{\alpha} V_{\alpha\alpha}(\underline{0})\, Q_{\alpha\alpha}}$$

Az ETG-tenzor tulajdonságai:

- $\sum_\alpha V_{\alpha\alpha}(\underline{r}) = \Delta V(\underline{r}) = 0$ (per definitionem)
- $\sum_\alpha V_{\alpha\alpha} = 0$ miatt a diagonalizált ETG-tenzor két paraméterrel írható le:

$$\boxed{\begin{array}{l} V_{zz} \\ \eta = \dfrac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \end{array}} \quad (|V_{zz}| \geq |V_{yy}| > |V_{xx}|)$$

$Q_{\alpha\beta} = \frac{3}{e}\int (x_\alpha x_\beta - \frac{1}{3} r^2 \delta_{\alpha\beta})\, \varrho(\underline{r})\, d^3 r$ egy másodrendű, nyom-mentes, szimmetrikus tenzor. A hozzá tartozó másodrendű szférikus tenzor:

$$\boxed{Q_{2m} = \frac{1}{e}\sqrt{\frac{16\pi}{5}} \int r^2\, Y_2^m(\theta,\phi)\, \varrho(\underline{r})\, d^3 r}$$

$V_{\alpha\beta}$ szintén másodrendű, nyom-mentes, szimmetrikus tenzor. Hozzá tartozik:

$$V_{20} = V_{zz}$$

$$V_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{2}{3}}\, (V_{xz} \pm V_{yz})$$

$$V_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{1}{6}}\, (V_{xx} - V_{yy} \pm 2i V_{xy})$$

Ezekkel kifejezve:

$$E_Q = \frac{e}{6} \sum_{\alpha,\beta} V_{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} = \frac{e}{4} \sum_m (-1)^m Q_{2m} V_{2\,-m}$$

Ez valóban a kvadrupólus-kölcsönhatás?

2. Multipólus-sorfejtés

$\varrho_n(\underline{r}_n)$: a mag töltéssűrűsége

$\varrho_e(\underline{r}_e)$: az elektronok töltéssűrűsége

$$E_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\varrho_e(\underline{r}_e)\,\varrho_n(\underline{r}_n)}{|\underline{r}_e - \underline{r}_n|} d^3r_e\, d^3r_n$$

$\Uparrow$

nem retardált potenciál $\Rightarrow$ nem-relativisztikus közelítés!

$$\frac{1}{|\underline{r}_e - \underline{r}_n|} = \sum_{\ell,m} (-1)^m \frac{4\pi}{2\ell+1} \left(\frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}}\right) Y_\ell^m(\theta_n,\phi_n) Y_\ell^{-m}(\theta_e,\phi_e)$$

$$\boxed{Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}}$$

$$4\pi\varepsilon_0 E_e = \int \frac{\varrho_e(\underline{r}_e)\,\varrho_n(\underline{r}_n)}{r_>} d^3r_e\, d^3r_n +$$

E_0 : monopólus-kölcsönhatás ($\ell=0$)

$$+ \frac{4\pi}{3} \sum_{m=-1}^{1} (-1)^m \int \frac{r_<}{r_>^2} \varrho_n(\underline{r}_n) Y_1^m(\theta_n,\phi_n)\, \varrho_e(\underline{r}_e) Y_1^{-m}(\theta_e,\phi_e)\, d^3r_e\, d^3r_n +$$

E_1 : dipólus-kölcsönhatás ($\ell=1$)

$$+ \frac{4\pi}{5} \sum_{m=-2}^{2} (-1)^m \int \frac{r_<^2}{r_>^3} \varrho_n(\underline{r}_n) Y_2^m(\theta_n,\phi_n)\, \varrho_e(\underline{r}_e) Y_2^{-m}(\theta_e,\phi_e)\, d^3r_e\, d^3r_n + \dots$$

E_2 : kvadrupólus-kölcsönhatás ($\ell=2$)

Közelités : $\left.\begin{array}{l} r_> = r_e \\ r_< = r_n \end{array}\right\}$ $\ell > 0$ esetén

Ezzel elhanyagoljuk a magon belül az elektronok anizotrópiáját (nem-relativisztikusan jogos).

$$4\pi\varepsilon_0 E_e = \int \frac{\varrho_e(\underline{r}_e)\,\varrho_n(\underline{r}_n)}{r_>}\, d^3r_e\, d^3r_n +$$

$$+ \frac{4\pi}{3}\sum_{m=-1}^{1}(-1)^m \int \varrho_n(\underline{r}_n)\, r_n\, Y_1^m(\theta_n,\phi_n)\, d^3r_n \int \varrho_e(\underline{r}_e)\frac{1}{r_e^2}\, Y_1^{-m}(\theta_e,\phi_e)\, d^3r_e +$$

$$+ \frac{4\pi}{5}\sum_{m=-2}^{2}(-1)^m \int \varrho_n(\underline{r}_n)\, r_n^2\, Y_2^m(\theta_n,\phi_n)\, d^3r_n \int \varrho_e(\underline{r}_e)\frac{1}{r_e^3}\, Y_2^{-m}(\theta_e,\phi_e)\, d^3r_e + \ldots$$

Definició: a $\varrho(\underline{r})$ töltéseloszlás általánositott elektromos multipólusnyomatéka (ℓ-ed rendű szférikus tenzor):

$$\boxed{T_{\ell m} = \int \varrho(\underline{r})\, r^\ell\, Y_\ell^m(\theta,\phi)\, d^3r}$$

Jelentése	Szférikus	Derékszögű
Töltés		$Ze = \sqrt{4\pi}\, T_{00}$
Dipólusnyomaték	$D_{1m} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, T_{1m}$	$D_z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, T_{10}$
$D_{10} = D_z$		$D_x \pm i D_y = \pm\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\, T_{1,\mp 1}$
Kvadrupólus-nyomaték	$Q_{2m} = \frac{1}{e}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\, T_{2m}$	$Q_{zz} = \frac{1}{e}\sqrt{\frac{16\pi}{5}}\, T_{20}$
		$Q_{xz} \pm i Q_{yz} = \mp\frac{1}{e}\sqrt{\frac{24\pi}{5}}\, T_{2,\pm 1}$
		$Q_{xx} - Q_{yy} \pm 2i Q_{xy} = \frac{1}{e}\sqrt{\frac{96\pi}{5}}\, T_{2,\pm 2}$

$$\boxed{\begin{array}{l} Q_{20} = Q_{zz} \\ Q_{2,\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{2}{3}}\,(Q_{xz} \pm i Q_{yz}) \\ Q_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{1}{6}}\,(Q_{xx} - Q_{yy} \pm 2i Q_{xy}) \end{array}}$$

A megfelelő tenzoroperátor (a mag-hullámfüggvényekre hat):

$$\boxed{\hat{T}_{\ell m} = e\, r^\ell\, Y_\ell^m(\theta,\phi)}$$

Definició: a $\varrho(\mathbf{r})$ töltéseloszlás potenciáljának általánosított multipólus-deriváltja:

$$\boxed{U_{lm} = \int \varrho(\mathbf{r}) \frac{1}{r^{l+1}} Y_l^m(\theta,\phi)\, d^3r}$$

Jelentése	Szférikus	Derékszögű
Potenciál		$\phi(0) = \frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,U_{00}$
Elektromos térerősség	$E_{1m} = \frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{1}{12\pi}}\,U_{1m}$	$E_z = \frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{1}{12\pi}}\,U_{10}$ $E_x \pm i E_y = \pm\frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{1}{6\pi}}\,U_{1,\mp 1}$
ETG	$V_{2m} = \frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{1}{5\pi}}\,U_{2m}$	$V_{zz} = \frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{1}{5\pi}}\,U_{20}$ $V_{xz} \pm i V_{yz} = \mp\frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{3}{10\pi}}\,U_{2,\pm 1}$ $V_{xx} - V_{yy} \pm 2i V_{xy} = \frac{1}{\varepsilon_0}\sqrt{\frac{6}{5\pi}}\,U_{2,\pm 2}$

A megfelelő tenzoroperátor (az elektron-hullámfüggvényekre hat):

$$\boxed{\hat{U}_{lm} = -e\,\frac{1}{r^{l+1}}\,Y_l^m(\theta,\phi)}$$

Magok általánosított elektromos multipólus-nyomatékainak tulajdonságai:

-

függvény	paritás
$\varrho_n(\mathbf{r}_n)$	$+1$
r^l	$+1$
$Y_l^m(\theta_n,\phi_n)$	$(-1)^l$

Ezért

$$\boxed{\langle IM|\hat{T}_{lm}|IM\rangle = T_{lm} = 0, \quad \text{ha } l \text{ páratlan}}$$

- $\langle I M | \hat{T}_{2m} | I M \rangle = (-1)^{I-M} \underbrace{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M & m & M \end{pmatrix}}_{\substack{0, \text{ ha } I < 1 \\ 0, \text{ ha } m \neq 0}} \langle I \| T_2 \| I \rangle$

$$Q = \frac{1}{e} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \langle I I | \hat{T}_{20} | I I \rangle = \frac{1}{e} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix} \langle I \| T_2 \| I \rangle$$

Ezért írható le a kvadrupólus-nyomaték egyetlen mennyiséggel.

$$\boxed{E_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\varrho_e(\underline{r}_e)\, \varrho_n(\underline{r}_n)}{r_>} d^3 r_n\, d^3 r_e + \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{\ell = 2,4,6,\ldots} \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (-1)^m T_{\ell m} U_{\ell -m}}$$

Közelítések:
- nem-relativisztikus
- az elektronok esetleges magon belüli anizotrópiája nincs figyelembe véve

További közelítés: $\ell \geq 4$ esetén elhanyagoljuk a 2^ℓ-pólus-kölcsönhatást.

$$\boxed{E_e = \underbrace{\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\varrho_e(\underline{r}_e)\, \varrho_n(\underline{r}_n)}{r_>} d^3 r_e\, d^3 r_n}_{E_0} + \underbrace{\frac{1}{5\varepsilon_0} \sum_{m=-2}^{2} (-1)^m T_{2m} U_{2-m}}_{E_2}}$$

$$E_2 = \frac{e}{4} \sum_m (-1)^m Q_{2m} V_{2-m} = E_Q$$

Azonos a Taylor-sorfejtés kvadrupólus-tagjával.