

→ A monopólus - tag

$$E_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{g_n(r_n) g_e(r_e)}{r_{ne}} d^3r_e d^3r_n$$

Szférikusan átlagolt elektronsűrűség:

$$g'_e(r_e) := \frac{1}{4\pi} \int g_e(r_e) \sin\theta_e d\theta_e d\phi_e$$

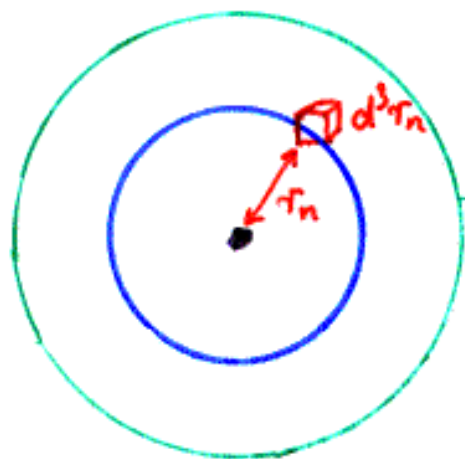
$$E_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int g_n(r_n) \left[\underbrace{4\pi \int_0^{r_n} \frac{g'_e(r_e)}{r_n} r_e^2 dr_e}_{\text{az } r_e < r_n \text{ gömb}} + \underbrace{4\pi \int_{r_n}^{\infty} \frac{g'_e(r_e)}{r_e} r_e^2 dr_e}_{\text{az } r_e > r_n \text{ gömbhöz}} \right] d^3r_n$$

az $r_e < r_n$ gömb
szférikusan átlagolt,
majd az origóban
egyessített elektron-
jainak potenciálja
a d^3r_n térfogat-
elemnél

az $r_e > r_n$ gömbhöz
szférikusan átlagolt
elektronjainak
potenciálja az
origóban

≡
az $r_e < r_n$ gömb
szférikusan átlagolt
elektronjainak po-
tenciálja a d^3r_n
térfogatelemnél

≡
az $r_e > r_n$ gömbhöz
szférikusan átlagolt
elektronjainak
potenciálja a d^3r_n
térfogatelemnél



a szférikusan átlagolt elektronok
potenciálja a d^3r_n térfogatelemnél

$$E_0 = \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho_n(\underline{r}_n) \left[\int_0^{r_n} \frac{g_e'(r_e)}{r_n} r_e^2 dr_e + \int_{r_n}^{\infty} \frac{g_e'(r_e)}{r_e} r_e^2 dr_e \right] d^3 r_n =$$

$$\uparrow$$

$$\int_0^{\infty} dr_e - \int_0^{r_n} dr_e$$

$$= \frac{1}{\epsilon_0} \int \rho_n(\underline{r}_n) \left[\int_0^{r_n} g_e'(r_e) \left(\frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_e} \right) r_e^2 dr_e \right] d^3 r_n +$$

$$+ \underbrace{\int \rho_n(\underline{r}_n) d^3 r_n}_{Ze} \cdot \underbrace{\frac{1}{\epsilon_0} \int_0^{\infty} \frac{g_e'(r_e)}{r_e} r_e^2 dr_e}_{\phi(0)} =$$

$$g_e'(r_e) = g_e(r_e) = g_e(0)$$

$$= Ze \phi(0) + \frac{1}{\epsilon_0} g_e(0) \int \rho_n(\underline{r}_n) \underbrace{\left[\int_0^{r_n} \left(\frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_e} \right) r_e^2 dr_e \right]}_{-\frac{1}{6} r_n^2} d^3 r_n =$$

$$= Ze \phi(0) - \frac{1}{6\epsilon_0} \underbrace{g_e(0)}_{-e|\psi(0)|^2} \underbrace{\int r_n^2 \rho_n(\underline{r}_n) d^3 r_n}_{Ze \langle r_n^2 \rangle} =$$

$$= \underbrace{Ze \phi(0)}_{E_p} + \underbrace{\frac{Ze^2}{6\epsilon_0} |\psi(0)|^2 \langle r_n^2 \rangle}_{E_c}$$

A kvadrupólus-tag

$$E_Q = \frac{1}{5\epsilon_0} \sum_{m=-2}^2 (-1)^m T_{2m} U_{2,-m}$$

$\eta = 0$ esetén:

$$E_Q = \frac{1}{5\epsilon_0} T_{20} U_{20} = \frac{1}{4} e Q_{20} V_{zz} =$$

$$= \frac{1}{4} e \langle IM | \hat{Q}_{20} | IM \rangle V_{zz} =$$

$$= \frac{1}{4} (-1)^{I-M} \frac{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} e Q V_{zz} =$$

$$= \frac{3M^2 - I(I+1)}{4I(2I-1)} e Q V_{zz}$$

Átmeneti energia:

$$E_Q(M) - E_Q(M') = \frac{3eQ V_{zz}}{4I(2I-1)} |M^2 - M'^2| =$$

$$= 3 |M^2 - M'^2| \hbar \omega_Q, \text{ ahol}$$

$$\omega_Q = \frac{eQ V_{zz}}{4I(2I-1)\hbar}$$

$$(M^2 - M'^2) = (M+M')(M-M') = \text{mindig egész szám}$$

→ Alapfrekvencia:

$$\omega_0 = 6 \omega_Q$$

(ha I feles)

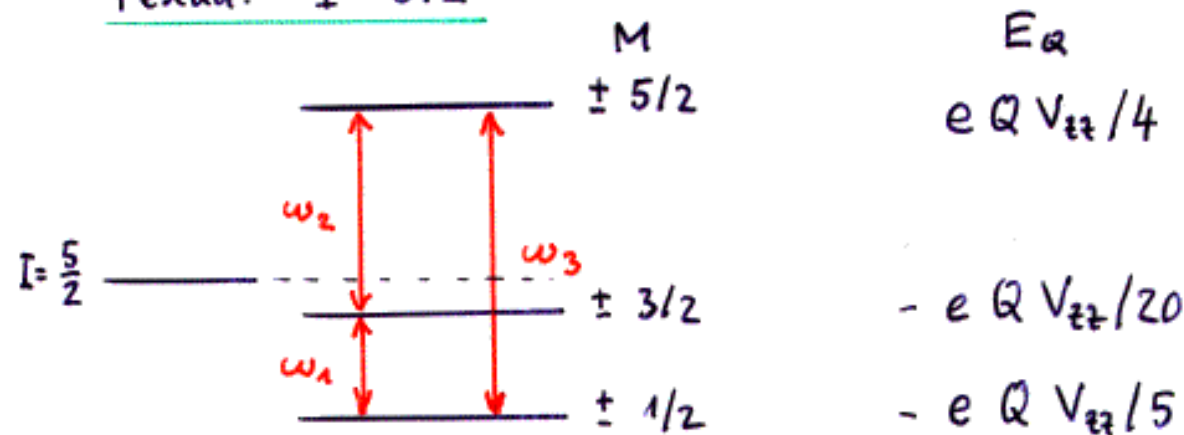
$$\omega_0 = 3 \omega_Q$$

(ha I egész)

Csatolási állandó:

$$\nu_Q = \frac{e Q V_{zz}}{\hbar}$$

Példa: $I = 5/2$



$$\omega_1 = \frac{3}{20} e Q V_{zz} = 6 \omega_Q$$

$$\omega_2 = \frac{6}{20} e Q V_{zz} = 12 \omega_Q$$

$$\omega_3 = \omega_1 + \omega_2 = \frac{9}{20} e Q V_{zz} = 18 \omega_Q$$

$\eta \neq 0$ esetén általában nincs analitikus megoldás!

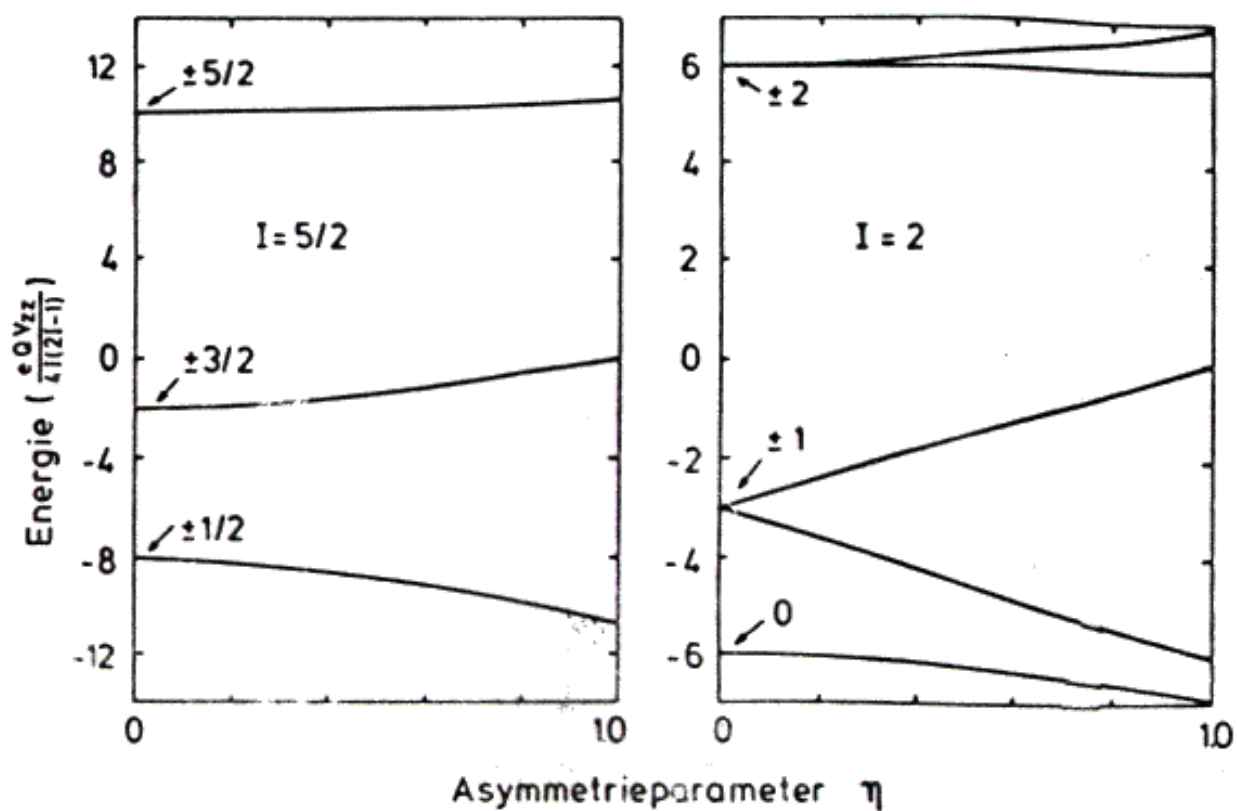


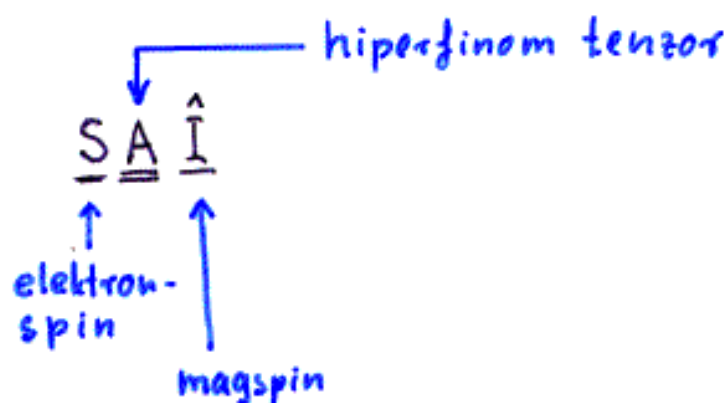
Abb. 3.5: Energieaufspaltung eines $I = 5/2$ und $I = 2$ Kernniveaus als Funktion des Asymmetrieparameters η . Die angegebenen M-Werte beziehen sich auf $\eta = 0$

Mágneses kölcsönhatás

Mágneses indukció a mag helyén: $\underline{B}$

A mag mágneses dipólusnyomatékának az elektronhéjjal való kölcsönhatása nem feltétlenül írható le egy effektív mágneses térrel!

Általános kölcsönhatás:



Ha $\underline{A}$ diagonális:

$$E_{\text{magn}} = -\underline{\mu} \underline{B}$$

Következmények:

a magállapotok
felhasadása
M szerint

a magspin
precessziója
 $\underline{B}$ körül

A magállapotok felhasadása ($\underline{B} \parallel$ a z-tengellyel)

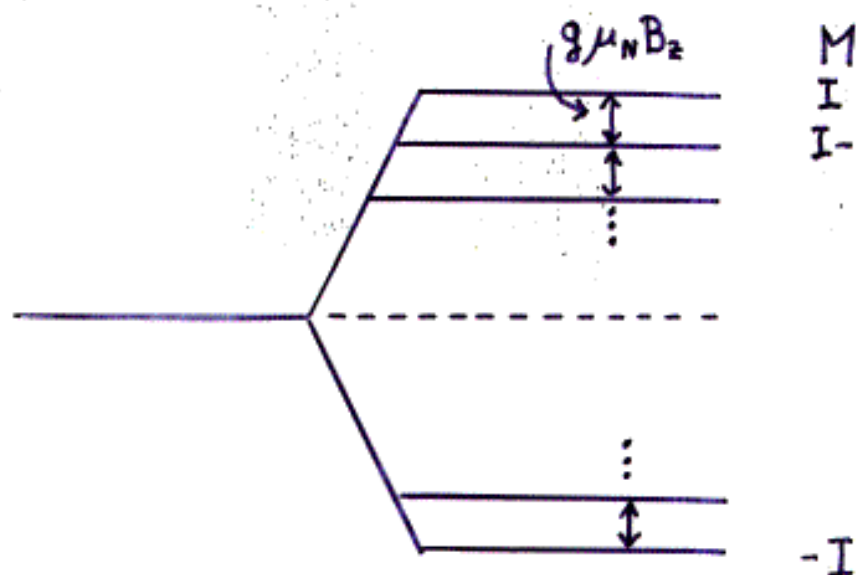
$$\begin{aligned} E_{\text{magn}} &= \langle IM | -\hat{\mu}_z B_z | IM \rangle = -\gamma B_z \langle IM | \hat{I}_z | IM \rangle = \\ &= -\gamma B_z \hbar M = -g \mu_N B_z M = -\mu B_z \frac{M}{I} \end{aligned}$$

ahol $\mu = \langle III | \hat{\mu}_z | III \rangle$

$\hat{\mu}_z = \gamma \hat{I}_z$ miatt az energiamátrix diagonális:

$$\langle IM | -\hat{\mu}_z B_z | IM' \rangle = -g \mu_N B_z M \delta_{MM'} = -\omega_B \hbar M \delta_{MM'}$$

$$\omega_B := \frac{g \mu_N B_z}{\hbar}$$



$$\langle IM | \hat{I}_x | IM \rangle = \langle IM | \hat{I}_y | IM \rangle = 0 \quad , \quad \text{mivel}$$

$$\hat{I}_x = \frac{1}{2} (\hat{I}_+ + \hat{I}_-)$$

$$\hat{I}_y = \frac{1}{2i} (\hat{I}_+ - \hat{I}_-) \quad \text{és } \hat{I}_+, \hat{I}_- \text{ léptető operátorok}$$

Magspin - precesszió

A kvantummechanikában is valódi precesszió!
(Lásd az NMR-nél.)

Kombinált kölcsönhatás

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{komb}} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{magn}} + \hat{\mathcal{H}}_Q$$

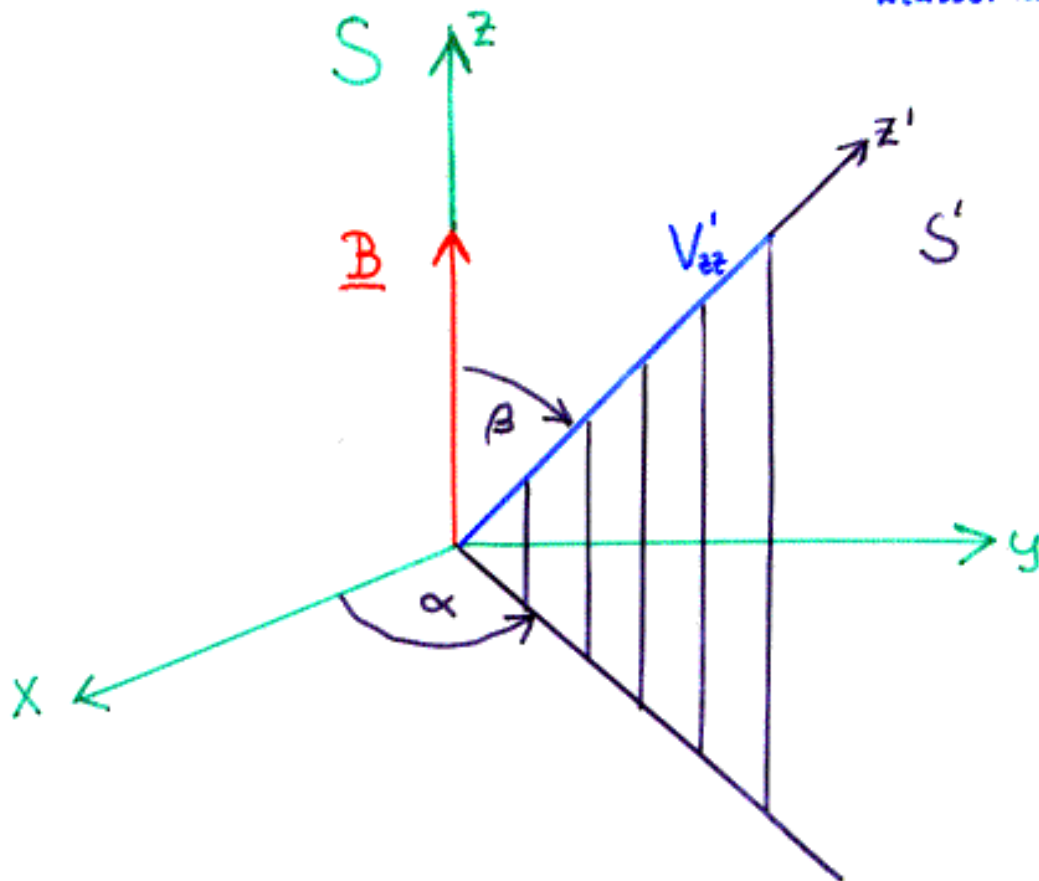
$$\text{Általában } [\hat{\mathcal{H}}_{\text{magn}}, \hat{\mathcal{H}}_Q] \neq 0$$

$$\hat{H}_{\text{magn}} = -\hat{\mu}_z B_z$$

$$\hat{H}_Q = \frac{1}{5\epsilon_0} \sum_{m=-2}^2 (-1)^m \hat{T}_{2m} U_{2,-m}$$

$$\hat{T}_{2m} = e\tau^2 Y_2^m(\theta, \phi) \quad \begin{array}{l} \text{tenzoroperátor} \\ \text{(mag: kvantummechanikai rendszer)} \end{array}$$

$$U_{2m} = \int \rho_{el}(\tau) \frac{1}{\tau^3} Y_2^m(\theta, \phi) d^3\tau \quad \begin{array}{l} \text{tenzor} \\ \text{(elektronok potenciálja:} \\ \text{klasszikus tér)} \end{array}$$



$\hat{H}_{\text{magn}}$: diagonális S -ben; $\hat{H}_Q$: diagonális S' -ben

Wigner-féle forgásmátrixok:

$$(Y_\ell^m(\theta, \phi))' = \sum_{m'} D_{m'm}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma) Y_\ell^{m'}(\theta, \phi)$$

$$\langle I M | \hat{H}_{\text{comb}} | I M' \rangle =$$

$$= \hbar \omega_B M \delta_{MM'} +$$

$$+ \hbar \omega_E \frac{(-1)^{I-M'}}{2} \begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M & m & M' \end{pmatrix} \sqrt{(2I+3)(2I+2)(2I+1)(2I)(2I-1)} \quad *$$

$$* \left[D_{0,-m}^{(2)}(\alpha, \beta, \gamma) + \frac{\eta}{\sqrt{6}} (D_{2,-m}^{(2)}(\alpha, \beta, \gamma) + D_{-2,-m}^{(2)}(\alpha, \beta, \gamma)) \right]$$

$$m = M - M'$$

$$\omega_B = \frac{g \mu_N B_z}{\hbar}$$

$$\omega_E = \frac{1}{4I(2I-1)} \frac{eQ V_{zz}}{\hbar}$$

A sajátértékprobléma általában csak numerikusan oldható meg.

Ha $\omega_B \ll \omega_E$ vagy $\omega_E \ll \omega_B$, akkor célszerű lehet a perturbációszámítás első rendjét használni.

Bonyolultabb esetek

$$\bullet \hat{H}_{\text{magn}} = \underline{S} \underline{A} \underline{I}$$

ilyenkor az S rendszer az $\underline{A}$ tenzor főtengely-rendszere

- Több elektron-állapot van, és $E_{el} \gg E_{hf}$. Az elektron-állapotok statikusak. $\Rightarrow$ a problémát minden elektron-állapotra külön-külön megoldjuk, majd átlagolunk.

- $E_{el} \approx E_{hf}$

Az egész rendszer együtt kell kvantummechanikailag vizsgálni. Ez egy $(2I+1) \cdot (2S+1)$ rendű matrix sajátértékproblémává vezet.

- az elektronállapotok nem statikusak $\Rightarrow$ időfüggő perturbációszámítás $\Rightarrow |IM\rangle \leftrightarrow |IM'\rangle$ átmenetek indukálódnak. (Relaxációs jelenségek.)

A nukleáris szilárdtestfizika módszerei

1. Lokális (mikroszkópikus) módszerek

- hiperfinom kölcsönhatás
- Mössbauer-spektroszkópia (MS, ME)
 - perturbált γ - γ szöghkorreláció (PAC)
 - perturbált γ -szögeloszlás (PAD)
 - mag-mágneses rezonancia (NMR)
 - mag-kvadrupólus-rezonancia (NQR)
 - magorientáció (NO)
 - mag-mágneses rezonancia orientált magokon (NMR/ON)
 - müon-spin-rotáció (μ SR)
 - pozitron-annihiláció (PA) : rácshibák

2. Fel-lokális módszerek (elhajlási módszerek)

- $n \rightarrow$ - rugalmas neutronszerzés (neutrodiffrakció)
- $n \rightarrow$ - kvázielasztikus neutronszerzés
- $hf. \rightarrow$ - Mössbauer-diffrakció
- $hf. \rightarrow$ - kvázielasztikus γ -szerzés

3. Nem-lokális módszerek

a) lokális információ a k -térben:

- pozitron-annihiláció (PA) : Fermi-felületek
- $n \rightarrow$ - rugalmatlan neutronszerzés
- rugalmatlan fotonyszerzés

b) egydimenziós szerkezeti információ a valós térben:

- IBA { - Rutherford-visszaszerzés (RBS)
- rugalmas visszalökődési spektroszkópia (ERD)
- csatornázás (channeling)
- $n \rightarrow$ - neutron-reflektometria