

$$p_D(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}^{-1} \frac{Y'(k)}{L(k)} D(k)$$

Ha $D(k)$ elég kicsi $k \gg 1/\Gamma$ -ra, akkor a zajt hatásosan el tudjuk nyomni.

De a $D(k)$ szűrőfüggvény alkalmazásával $p(v)$ -t is torzítjuk!

$$p_D(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}^{-1} \frac{Y(k)}{L(k)} D(k)$$

$$P_D(k) = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{Y(k)}{L(k)}}_{P(k)} D(k)$$

$$p_D(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} p(v) * d(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} p(w) d(v-w) dw$$

\uparrow
 $p(v)$ szimitása $D(k)$ invert
 Fourier-transzformáltjával

Szűrőfüggvény alkalmazása vagy a mért spektrum szimitása egymással teljesen ekvivalens műveletek:

Simitott zajmentes spektrum:

$$y_D(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y(w) d(v-w) dw$$

$$\downarrow$$

$$Y_D(k) = Y(k) D(k)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}^{-1} \frac{Y_D(k)}{L(k)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}^{-1} \frac{Y(k)}{L(k)} D(k) = P_D(k)$$

Így is ugyanazt a $p_D(v)$ eloszlásfüggvényt kapjuk.

Milyen a jó szűrőfüggvény?

A k_0 leágási frekvencia felett elnyomja a zajt, alatta nem torzít túlságosan.

$$D(k) > \frac{1}{2}, \text{ ha } |k| < k_0$$

$$D(k) < \frac{1}{2}, \text{ ha } |k| > k_0$$

Lépcsőfüggvény:

$$D(k) = 1, \text{ ha } |k| < k_0$$

$$D(k) = 0, \text{ ha } |k| > k_0$$

$$\text{A megfelelő szűrőfüggvény: } \frac{1}{\sqrt{2\pi}} d(v) = \frac{1}{\pi} \frac{\sin v k_0}{v}$$

↑
lassan lecsengő
oszcillációk!

A lépcsőfüggvény rossz szűrőfüggvény, mert keskeny $p(v)$ ($\Gamma_p \ll 1/k_0$) esetén $p_D(v)$ oszcillál (ú.n.

Gibbs - oszcillációk).

Íó szűrő: • $D(k) \approx 1$, ha $k < k_0$

• $D(k) \approx 0$, ha $k > k_0$

①

$k_0 \approx 1/\Gamma_p$, ahol Γ_p $p(v)$ legfinomabb részletének szélessége
(ezt előre kell tudni/sejteni)

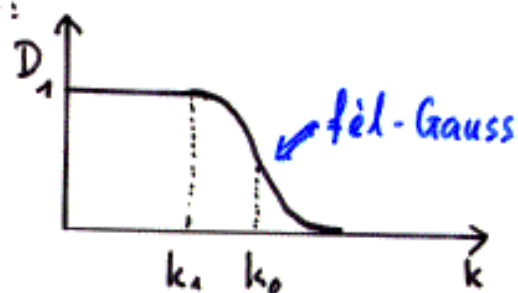
• $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{F}^{-1} D(k)$ -n nincsenek olyan oszcillációk, melyek a $p(v)$ -vel való konvolúció után is nagyobb amplitúdójúak $p'_0(v)$ zajánál. ②

Gauss-szűrő:

$$D(k) = e^{-\ln 2 \left(\frac{k}{k_0}\right)^2}$$

② jól teljesül, de ① csak igen gyengén.

Módosított Gauss- (Inouye-) szűrő:



Fermi-Dirac-szűrő:

Probléma az eddigi szűrőkkel:

$$\frac{D(k)}{L(k)} \rightarrow 0, \text{ ha } k \rightarrow \infty$$

$D(k) \approx 1$ és $L(k) \approx 1$, ha $k \approx 0$, viszont $L(k)$ monoton csökken. Ezért $D(k)/L(k)$ -nak mindig van egy maximuma $k \approx k_0$ körül. Ennek következtében

a zaj k_0 körüli része is túlhangsúlyozódik; $p'_0(v)$ -n $\approx k_0$ frekvenciájú oszcillációk jelennek meg. Ezért célszerű $D(k)$ -t úgy megválasztani, hogy aszimptotikusan ($k \rightarrow \infty$) egy pozitív állandóhoz tartson ③.

$$D(k) = \frac{1 + C}{1 + \frac{C}{L(k)}} \quad (C \ll 1)$$

① $D(0) = 1$
 $D(k) \rightarrow 0$, ha $k \rightarrow \infty$

③ $\frac{D(k)}{L(k)} \rightarrow \frac{1}{C} + 1$, ha $k \rightarrow \infty$

② nem teljesül, de C választható úgy, hogy $p_0(v)$ oszcillációi és $p'_0(v)$ zaja összemérhető legyen.

$$D(k) = \frac{1 + e^{-k_0 \Gamma}}{1 + e^{(k - k_0) \Gamma}} \quad k_0 = -\frac{1}{\Gamma} \ln C$$

Afanaszjev - Cimbal - módszer

Bonyolult integráltranszformációs eljárás; megmutatható, hogy (egy viszonylag rossz mérőfüggvénnyel végrehajtott) Fourier - eljárással egyenértékű. Az alapvonal pontos értékeire - nemben a többi Fourier - eljárással - nem érzékeny.

Illesztéssel eljárások

$p(v)$ -t modellfüggvénynek tekintjük, mely az a_1, a_2, \dots, a_N paraméterektől függ. A χ^2 -et minimalizáljuk:

$$\chi^2 =: Q = \frac{1}{N_f} \sum_k (y_k - y'_k)^2 \cdot \frac{1}{y'_k}$$

↑ szabadságfokok száma

↑ $y(v_k)$

↑ Poisson-súlyozás; néha elhagyják

Window-módszer

$p(v)$ helyett $p(H)$ -t illesztjük.

↑
hiperfinom mágneses tér

$p(H)$ -t trigonometrihus sor alakjában keressük:

$$p(H) = \sum_{j=1}^N a_j f_j(H) \quad , \text{ ahol}$$

$$f_j(H) = \cos \frac{j\pi H}{H_{\max}} - (-1)^j$$

$$y(v) = \sum_{j=1}^N a_j \underbrace{F_j(v)}$$

↑ az $f_j(H)$ -hoz tartozó Mössbauer-spektrum

$p(H)$ „simasága” N megválasztásával állítható be.

Narret - módszer

$p(H)$ hisztogram: $p(H_j)$

(H_1, H_2, \dots, H_N ekvidisztans értékek.)

$$y(v) = \sum_{j=1}^N \underbrace{p(H_j)}_{\substack{\uparrow \\ \text{illesztési} \\ \text{paraméterek}}} \underbrace{L_c(H_j, v)}_{\substack{\uparrow \\ \text{a } H_j\text{-hez tartozó} \\ \text{6-vonalas spektrum}}}$$

Ha N elég nagy és a zaj kicsi, akkor egzakt megoldást ad.
Ez általában nem teljesül $\Rightarrow p(H_j)$ oszcillál; $j \neq k$ esetén
 $p(H_j)$ és $p(H_k)$ erősen korreláltak.

Büntetőfüggvényes Narret - módszerek

Ha $p(H)$ valamilyen tulajdonsága „nem tetszik”, a kívánatostól való eltérést a χ^2 -ben további taggal „büntetjük”:

$$Q_p = Q + \underbrace{\mu}_{\substack{\uparrow \\ \text{Lagrange-} \\ \text{multiplikátor}}} \underbrace{P[p(H)]}_{\substack{\nwarrow \\ \text{megfelelő alakú} \\ \text{funkcionál}}}$$

- Hesse - Rübarsch - módszer
- Brand - Le Caër - (maximális entrópia -) módszer

Hesse - Rübartsch - módszer

$$Q_H = Q + \mu \sum_{j=2}^{N-1} [2p(H_j) - p(H_{j-1}) - p(H_{j+1})]^2$$



ha μ elég nagy, a Jarret-féle hamis
oszillációk eltűnnek. Lokális simaságot biztosít.

Brand - Le Caër - (maximális entrópia-) módszer

$$Q_B = Q + \mu \underbrace{\sum_{j=1}^N p(H_j) \ln [p(H_j)]}$$

a $p(H_j)$ eloszlás negatív entrópiája
(információtartalma)

Globális simaságot biztosít.

A $p(H_j)$ eloszlás entrópiája:

$$S = - \sum_{j=1}^N p(H_j) \ln [p(H_j)]$$

Minimum ($S=0$), ha $p(H_j) = \delta_{jj_0}$

H pontosan
meghatározott

Maximum ($S = \ln N$), ha $p(H_j) = \frac{1}{N}$ ($j=1, 2, \dots, N$)

H-ról nincs semmi
információnk

Normált entrópia:

$$S^* = \frac{1}{\ln N} \sum_{j=1}^N p(H_j) \ln [p(H_j)]$$

További fizikai információ nélkül
nem tudhatjuk, a csúcsok \Rightarrow
valódi fizikai jelentéssel bírnak-e,
vagy csak a zajból származnak.

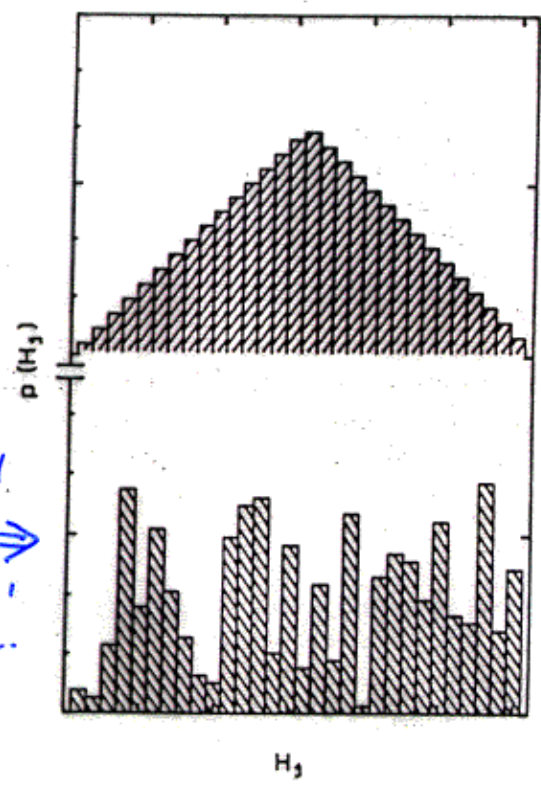


Fig. 1. Two hypothetical distributions $p(H_j)$ of the hyperfine magnetic field H having the same value of normalized entropy ($S^* = 0.948$) for $N = 30$.

Egy eloszlás entrópiája csak akkor van egyértelműen meghatározva, ha a kölcsönhatást ismerjük. Pl. ha $p_v(v)$ két δ -függvény összege, akkor ez lehet

- két különböző izomér eltolódási szingulett
- egy jól meghatározott kvadrupólus-dublett

Az első esetben $p_v(v)$ normált entrópiája

$$S_v^* = \frac{\ln 2}{\ln N} > 0,$$

a második esetben

$$S_q^* = 0$$

Meghatározott alakú eloszlások módszere

$p(v)$ -t vagy $p(H)$ -t többé-kevésbé önkényes alakú, néhány paramétertől függő formában vesszük fel, majd a χ^2 -et e paraméterek függvényében minimalizáljuk. Mivel általában a paraméterek száma csekély, büntető-függvény alkalmazására nincs szükség.

Shannon - Tsuei - (Gauss) módszer

$$p(H) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(H-H_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Shannon-Tsueri (módosított Lorentz-) módszer

$$p(H) = \begin{cases} \frac{1}{(H-H_0)^2 + \frac{\sigma^2}{4}} & , \text{ ha } 0 \leq H \leq H_0 \\ e^{-\frac{(H-H_0)^2}{2\sigma^2}} & , \text{ ha } H > H_0 \end{cases}$$

Logan-Sun (aszimmetrikus Gauss-) módszer

$$p(H) = \begin{cases} e^{-\frac{(H-H_0)^2}{2\sigma_0^2}} & , \text{ ha } 0 \leq H \leq H_0 \\ e^{-\frac{(H-H_0)^2}{2\sigma_1^2}} & , \text{ ha } H > H_0 \end{cases}$$

Vincze (binomiális-) módszer

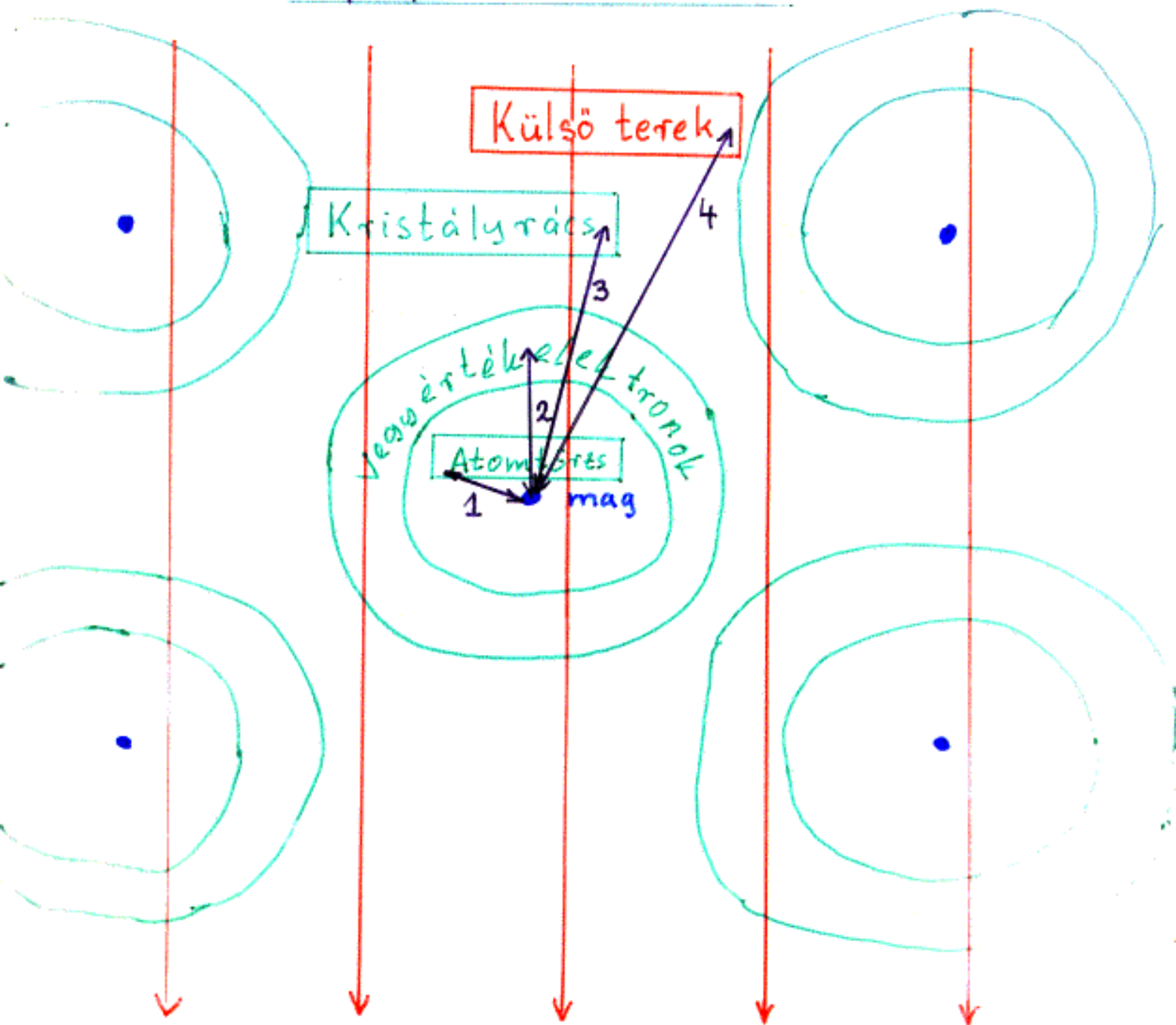
$$p(H(k)) = \frac{1}{\delta H} \frac{z!}{k!(z-k)!} x^k (1-x)^{z-k}$$

$$H(k) = H_0 + k \delta H$$

Illesztett paraméterek: H_0 , δH , x .

z nem illesztett paraméter, csak a $z+1$ hasázból álló hisztogram finomságát határozza meg.

Hiperfinom kölcsönhatás



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

Elektromos kölcsönhatás

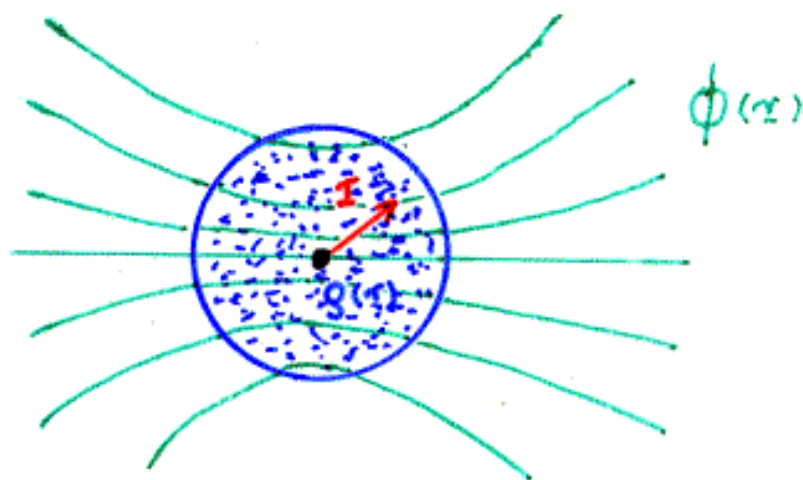
1. Taylor - sorfejtés

$g(\mathbf{r})$: klasszikus mag-töltéeloszlás

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

Az elektromos kölcsönhatási energia:

$$E_e = \int g(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$$



A mag belsejében a potenciált Taylor-sorba fejtjük:

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

$$E_e = \underbrace{\phi(0) \int g(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}}_{\text{1. } Ze} + \sum_{\alpha} \underbrace{\left. \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha}} \right|_{\mathbf{r}=0} \int g(\mathbf{r}) x_{\alpha} d^3\mathbf{r}}_{\text{2. a mag D elektromos dipólusnyomatéka}} +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \underbrace{\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_{\alpha} \partial x_{\beta}} \right|_{\mathbf{r}=0}}_{\text{3. } \phi_{\alpha\beta}(0)} \int g(\mathbf{r}) x_{\alpha} x_{\beta} + \dots$$

- ① $\phi(0)Ze$: egy pontszerű mag kölcsönhatása $\phi(r)$ -rel.
Valamennyi magnitűd ugyanolyan mértékben tol el.
 (0-ad rendű monopólus-kölcsönhatás)

② $\underline{D} = 0$

$$\begin{aligned} \underline{D} &= \int \underline{r} \rho(\underline{r}) d^3r = \quad \text{(dipólus-kölcsönhatás)} \\ &= \int \underline{r} \Psi^*(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_A) \sum_{i=1}^A e_i \delta(\underline{r}_i - \underline{r}) \Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_A) d^3r_1 \dots d^3r_A d^3r = \\ &= \sum_i e_i \underbrace{\int \Psi^*(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_A) \underline{r}_i \Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_A) d^3r_1 \dots d^3r_i \dots d^3r_A}_{= 0, \text{ mivel az integrandus } \underline{r}_i \text{-ben páratlan}} = 0 \\ &\quad (\Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_A) \text{ vagy páros, vagy páratlan}) \end{aligned}$$

③ Definíció: elektromos térergradiens (ETG):

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

↑
 pongyola elnevezés!
 • előjel
 • nyom-mentes

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \phi_{\alpha\beta}(0) \int \rho(\underline{r}) x_\alpha x_\beta d^3r &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left[V_{\alpha\beta}(0) + \frac{1}{3} \Delta\phi|_{\underline{r}=0} \delta_{\alpha\beta} \right] \cdot \\ &\cdot \left[\int \rho(\underline{r}) (x_\alpha x_\beta - \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta}) d^3r + \int \rho(\underline{r}) \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta} d^3r \right] = \\ &= \frac{1}{6} \underbrace{\Delta\phi|_{\underline{r}=0}}_{-\frac{1}{\epsilon_0} \sigma(0) \leftarrow \text{külső töltések sűrűsége}} \int r^2 \rho(\underline{r}) d^3r + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta}(0) \int \rho(\underline{r}) (x_\alpha x_\beta - \frac{r^2}{3} \delta_{\alpha\beta}) d^3r \end{aligned}$$

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? \Rightarrow l. multipólus-sorfejtés

$$E_c = \frac{1}{6} \Delta \phi \int r^2 g(r) d^3 r = -\frac{1}{6 \epsilon_0} \sigma(0) Z e \langle r^2 \rangle =$$

$$= \frac{Z e^2}{6 \epsilon_0} |\psi(0)|^2 \langle r^2 \rangle$$

a magot homogén töltéssűrűségű, R sugarú gömbnek tekintve:

$$= \frac{Z e^2}{10 \epsilon_0} |\psi(0)|^2 R^2$$

E_c tulajdonságai:

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

A Mössbauer-spektrumok izomér-eltolódásában nyilvánul meg.

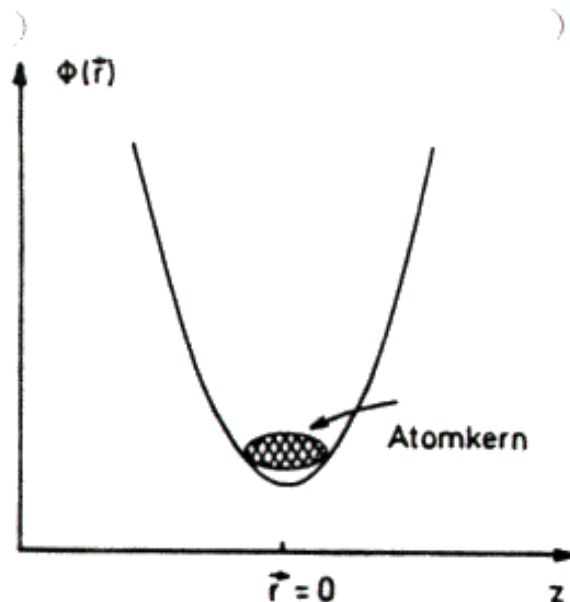


Abb. 3.3: Anschauliche Erklärung des Monopol- und Quadrupolterms. Der Atomkern befindet sich in einem Potentialminimum. Der Rand des Atomkerns ist dabei auf einem etwas höheren Potential als der zentrale Bereich (oder eine Punktladung). Die Energieanhebung im Vergleich zu einer Punktladung hängt von 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:

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

az ETG főtengely-transzformációja után:

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

Az ETG-tenzor tulajdonságai:

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

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \quad (|V_{zz}| \geq |V_{yy}| > |V_{xx}|)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$E_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho_e(\underline{r}_e) \rho_n(\underline{r}_n)}{|\underline{r}_e - \underline{r}_n|} d^3r_e d^3r_n$$

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

$$\frac{1}{|\underline{r}_e - \underline{r}_n|} = \sum_{l,m} (-1)^m \frac{4\pi}{2l+1} \left(\frac{r_n^l}{r_e^{l+1}} \right) Y_l^m(\theta_n, \phi_n) Y_l^{-m}(\theta_e, \phi_e)$$

$$4\pi\epsilon_0 E_e = \int \frac{\rho_e(\underline{r}_e) \rho_n(\underline{r}_n)}{r_e} d^3r_e d^3r_n +$$

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

E_0 : monopólus-kölcsönhatás ($l=0$)

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

E_1 : dipólus-kölcsönhatás ($l=1$)

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

E_2 : kvadrupólus-kölcsönhatás ($l=2$)

$$\left. \begin{array}{l} \tau_z = \tau_e \\ \tau_z = \tau_n \end{array} \right\} l > 0 \text{ esetén}$$

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

$$\begin{aligned} 4\pi\epsilon_0 E_e &= \int \frac{\rho_e(\tau_e) \rho_n(\tau_n)}{\tau_z} d^3\tau_e d^3\tau_n + \\ &+ \frac{4\pi}{3} \sum_{m=-1}^1 (-1)^m \int \rho_n(\tau_n) \tau_n Y_1^m(\theta_n, \phi_n) d^3\tau_n \int \rho_e(\tau_e) \frac{1}{\tau_e^2} Y_1^{-m}(\theta_e, \phi_e) d^3\tau_e + \\ &+ \frac{4\pi}{5} \sum_{m=-2}^2 (-1)^m \int \rho_n(\tau_n) \tau_n^2 Y_2^m(\theta_n, \phi_n) d^3\tau_n \int \rho_e(\tau_e) \frac{1}{\tau_e^3} Y_2^{-m}(\theta_e, \phi_e) d^3\tau_e + \dots \end{aligned}$$

Definíció: a $\rho(\tau)$ töltéseloszlás általánosított elektromos multipólusnyomatéka (l -ed rendű szférikus tenzor):

$$T_{lm} = \int \rho(\tau) \tau^l Y_l^m(\theta, \phi) d^3\tau$$

Jelentése

Szférikus

Derékszögű

Töltés

$$Ze = \sqrt{4\pi} T_{00}$$

Dipólusnyomaték

$$D_{1m} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} T_{1m}$$

$$D_z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} T_{10}$$

$$D_{10} = D_z$$

$$D_x \pm i D_y = \pm \sqrt{\frac{8\pi}{3}} T_{1, \pm 1}$$

Kvadrupólus-nyomaték

$$Q_{2m} = \frac{1}{e} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} T_{2m}$$

$$Q_{zz} = \frac{1}{e} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} T_{20}$$

$$Q_{20} = Q_{zz}$$

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

$$Q_{xy} \pm i Q_{yz} = \mp \frac{1}{e} \sqrt{\frac{24\pi}{5}} T_{2, \pm 1}$$

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

$$Q_{xx} - Q_{yy} \pm 2i Q_{xy} = \frac{1}{e} \sqrt{\frac{96\pi}{5}} T_{2, \pm 2}$$

A megfelelő tenzoroperátor (a mag-hullámfüggvényekre hat):

$$\hat{T}_{lm} = e \tau^l Y_l^m(\theta, \phi)$$

Definíció: a $g(r)$ töltéeloszlás potenciáljának általánosított multipólus-deriváltja:

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

Jelentése	Szférikus	Derékszögű
Potenciál		$\phi(0) = \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} U_{00}$
Elektromos térerősség	$E_{1m} = \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{12\pi}} U_{1m}$	$E_z = \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{12\pi}} U_{10}$ $E_x \pm i E_y = \pm \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{6\pi}} U_{1,\mp 1}$
ETG	$V_{2m} = \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{5\pi}} U_{2m}$	$V_{zz} = \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{1}{5\pi}} U_{20}$ $V_{xz} \pm i V_{yz} = \mp \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{3}{10\pi}} U_{2,\pm 1}$ $V_{xx} - V_{yy} \pm 2i V_{xy} = \frac{1}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{6}{5\pi}} U_{2,\pm 2}$

A megfelelő tenzoroperátor (az elektron-hullámfüggvényekre hat):

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

Magok általánosított elektromos multipólus-nyomatekainak tulajdonságai:

függvény	paritás
$g_n(r)$	$+1$
r^l	$+1$
$Y_l^m(\theta, \phi)$	$(-1)^l$

Ezért

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

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

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

Ezért írható le a kvadrupólus-nyomaték egyetlen mennyiséggel.

$$E_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{g_e(\underline{r}_e) g_n(\underline{r}_n)}{r_{>}} d^3\tau_n d^3\tau_e + \\ + \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\ell=2,4,6,\dots} \frac{1}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} (-1)^m T_{\ell m} U_{\ell-m}$$

Közelítések: • nem-relativisztikus

• az elektronok esetleges magon belüli anizotrópiája nincs figyelembe véve

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

$$E_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{g_e(\underline{r}_e) g_n(\underline{r}_n)}{r_{>}} d^3\tau_e d^3\tau_n + \\ + \frac{1}{5\epsilon_0} \sum_{m=-2}^2 (-1)^m T_{2m} U_{2-m}$$

E_0

E_2

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

Azonos a Taylor-sorfejtés kvadrupólus-tagjával.