

$$\langle IM' | \hat{Q}_{2m} | IM'' \rangle = \frac{Q}{p} \langle IM' | \hat{p}_{2m} | IM'' \rangle$$



$$\hat{Q}_{2m} = \frac{2Q}{3I^2 - I(I+1)} \hat{p}_{2m}$$

Az ETG - tenzor elemei:

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

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

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

Az ETG - tenzor főtengetel-rendszerében:

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

$$V_{2\pm 1} = 0$$

$$V_{2\pm 2} = \frac{\eta}{\sqrt{6}} V_{zz}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_Q &= \frac{e}{4} (V_{20} Q_{20} + V_{2-2} Q_{22} + V_{22} Q_{2-2}) = \\ &= \frac{e}{4} \underbrace{\frac{2Q V_{zz}}{3I^2 - I(I+1)}}_{I(2I-1)} \left[\underbrace{\hat{p}_{20}}_{\frac{1}{2}(3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2)} + \frac{\eta}{\sqrt{6}} \underbrace{(\hat{p}_{22} + \hat{p}_{2-2})}_{\sqrt{\frac{3}{8}}(\hat{I}_+^2 + \hat{I}_-^2)} \right] = \end{aligned}$$

$$= \frac{e Q V_{zz}}{4I(2I-1)} \left[3\hat{I}_z^2 - I(I+1) + \frac{\eta}{2} (\hat{I}_+^2 + \hat{I}_-^2) \right]$$

A vonalak helyzete

$3/2 \rightarrow 1/2$ átmenet (pl. ^{57}Fe):

$I = 3/2$:

$$\mathcal{H}_{MM'} = \langle IM | \hat{\mathcal{H}}_Q | IM' \rangle = \hbar \omega_E (3/2) \begin{pmatrix} 3 & 0 & \sqrt{3}\eta & 0 \\ 0 & -3 & 0 & \sqrt{3}\eta \\ \sqrt{3}\eta & 0 & -3 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}\eta & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

\downarrow

$$\frac{eQV_{zz}}{\hbar} \quad \frac{1}{4I(2I-1)}$$

Sajátérték-egyenlet:

$$\sum_{M'} \mathcal{H}_{MM'} e_{\beta M'} = E_{\beta} e_{\beta M}$$

Sajátérték: $E_i = \hbar \omega_E \varepsilon_i$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 3 \sqrt{1 + \eta^2/3}$$

$$|e_1\rangle = e_+ \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle + e_- \left| \frac{3}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle$$

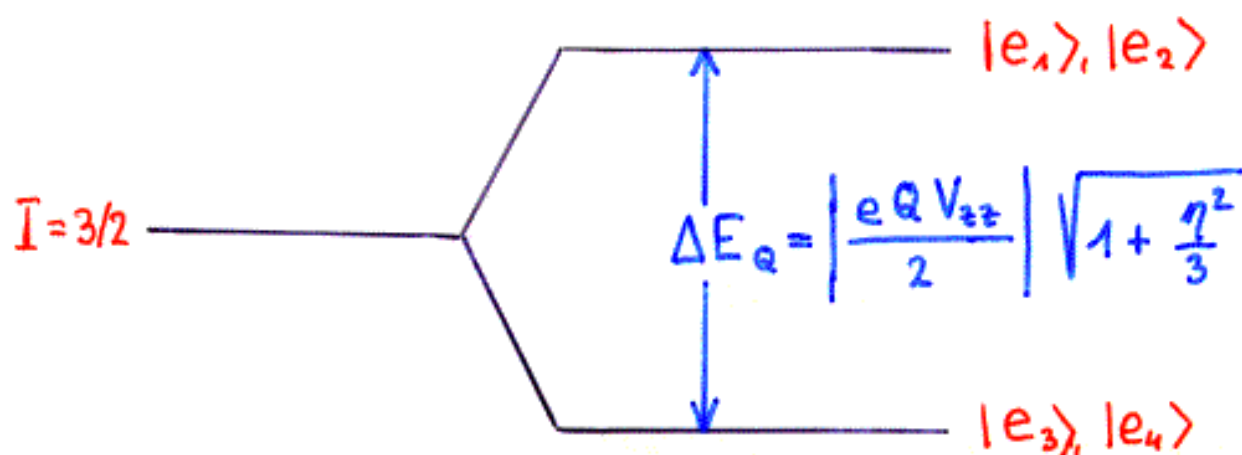
$$|e_2\rangle = e_+ \left| \frac{3}{2} -\frac{3}{2} \right\rangle + e_- \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\varepsilon_3 = \varepsilon_4 = -3 \sqrt{1 + \eta^2/3}$$

$$|e_3\rangle = e_- \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle - e_+ \left| \frac{3}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|e_4\rangle = e_- \left| \frac{3}{2} -\frac{3}{2} \right\rangle - e_+ \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$e_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\eta^2}{3}}}}$$



A vonalhelyekből nyerhető információ

$$\Delta_{ik} = E_i(I_g) - E_k(I_a)$$

\uparrow \uparrow
 gerjesztett alap-
 állapot

$$\begin{aligned} \Delta_{ik} &= \hbar [\omega_E(I_g) \varepsilon_i(I_g) - \omega_E(I_a) \varepsilon_k(I_a)] = \\ &= \hbar \omega_E(I_a) \left[\frac{Q_g}{Q_a} \varepsilon_i(I_g) - \varepsilon_k(I_a) \right] \end{aligned}$$

Teljes felhasadás (skalárátványzó) $\Rightarrow |V_{zz}|$

A spektrumot kell/nem kell tükrözni $\Rightarrow \text{sign}(V_{zz})$

Vonalhelyek (ha kettőnél több vonal van) $\Rightarrow \eta$

Az ETG-tenzor iránya csak a vonalhelyekből nem határozható meg; ehhez a vonalintenzitások irányfüggését is mérni kell.

Eigenschaften:

1. $\frac{d\epsilon_i}{d\eta} = 0$ bei

$\eta = 0$ für

$I = \text{halbzahlig}$

2. Symmetrische

Aufspaltung

bei $\eta = 1$

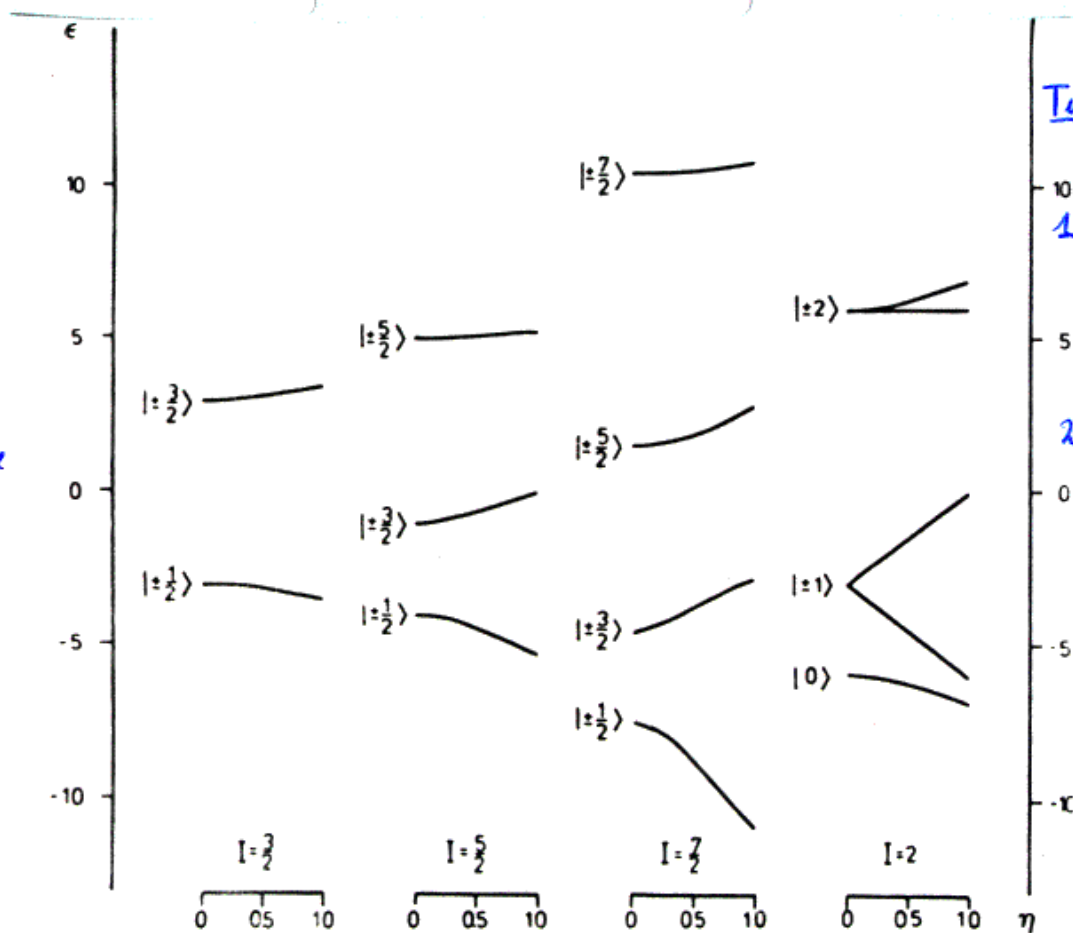


FIGURE 1. The energy splitting of the various spin states is plotted versus the asymmetry parameter η of the electric field gradient. The energies are given in units of $\mu_f = eQV_{zz}/4I(2I-1)$ for the $I = 3/2, 2$, and $2\mu_f$ for $I = 5/2, 7/2$.

Tulajdonságok:

1. $\frac{d\epsilon_i}{d\eta} = 0$

$\eta = 0$ -nál,

ha $I = \text{feles}$

2. A felhasadás

szimmetrikus,

ha $\eta = 1$

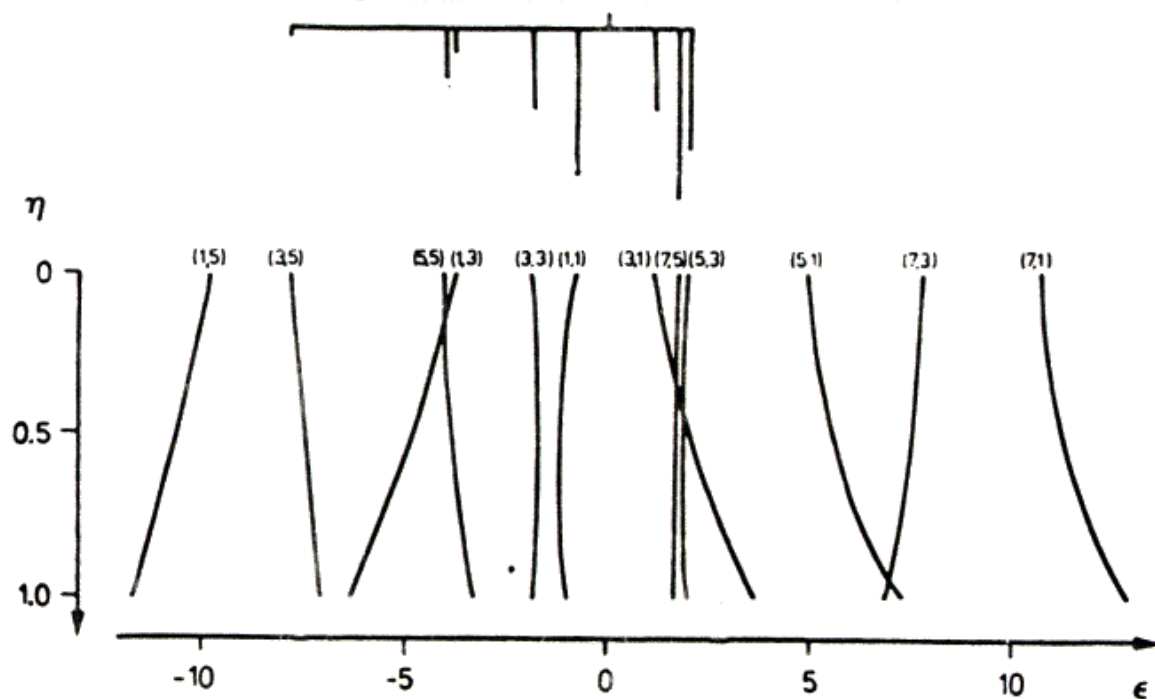


FIGURE 2. The dependence of the line positions δ_k on the asymmetry parameter η is shown for an ($I_e = 7/2 \rightarrow I_g = 5/2$) transition. The ratio $\mu_{I_e}/\mu_{I_g} = 0.638$ corresponds to the ratio of the quadrupole moments $Q_e/Q_g = 1.34$ of the 21.6-keV transition of ^{151}Eu . The velocity is given in units of $\mu_{I_g}c/E_0$. The symbols (n, m) stand for the transition $(\pm n/2 \rightarrow \pm m/2)$, where the $|\pm m/2\rangle$ are the eigenstates of an axial EFG. On the top of the figure is the stick diagram of the spectrum at $\eta = 0$ with the intensities of a thin powder absorber in the case of a $M1$ transition.

Vonalintenzitások

M1 átmenetre:

$$I(M_a, m, M_g) \sim |\langle I_a, M_a | \hat{M}(M1) | I_g, M_g \rangle|^2 F_{1m}(\theta)$$



elsőrendű szférikus tenzoroperátor

$$I(M_a, m, M_g) \sim \begin{pmatrix} I_a & 1 & I_g \\ -M_a & m & M_g \end{pmatrix}^2 F_{1m}(\theta) \quad 0, \text{ ha } M_a - M_g \neq m$$

● $I_a = 1/2, I_g = 3/2$ (pl. ^{57}Fe):

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1 & 3/2 \\ \mp 1/2 & \mp 1 & \pm 3/2 \end{pmatrix}^2 = \frac{3}{12}$$

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1 & 3/2 \\ \mp 1/2 & 0 & \pm 1/2 \end{pmatrix}^2 = \frac{2}{12}$$

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 1 & 3/2 \\ \pm 1/2 & \mp 1 & \pm 1/2 \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{12}$$

$$F_{1\pm 1}(\theta) = \frac{1}{4} (1 + \cos^2 \theta)$$

$$F_{10}(\theta) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta$$

● Tiszta kvadrupólus-kölcsönhatás, $\eta = 0$:

$$I_{\pi}(\theta) = \frac{3}{8} (1 + \cos^2 \theta)$$

$$(M_g = \pm 3/2, M_a = \pm 1/2)$$

$$I_{\sigma}(\theta) = \frac{1}{8} (5 - 3 \cos^2 \theta)$$

$$(M_g = \pm 1/2, \mp 1/2, M_a = \pm 1/2)$$

Textúra-mentes permintára: $I_1 = I_2$

Anomáliák oka:

- textúra
- a Mössbauer-Lamb (Debye-Waller)-faktor anizotropiája (Goldanskij-Karjagin-effektus)

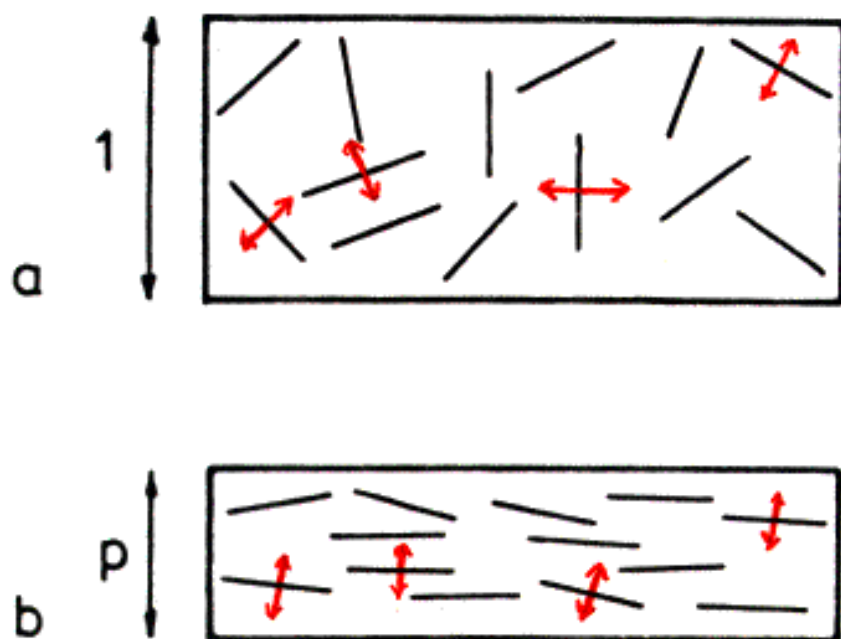


Fig. 1a and b. The appearance of texture in a non-oriented polycrystalline sample of height unity (a) after a compression to height p (b)

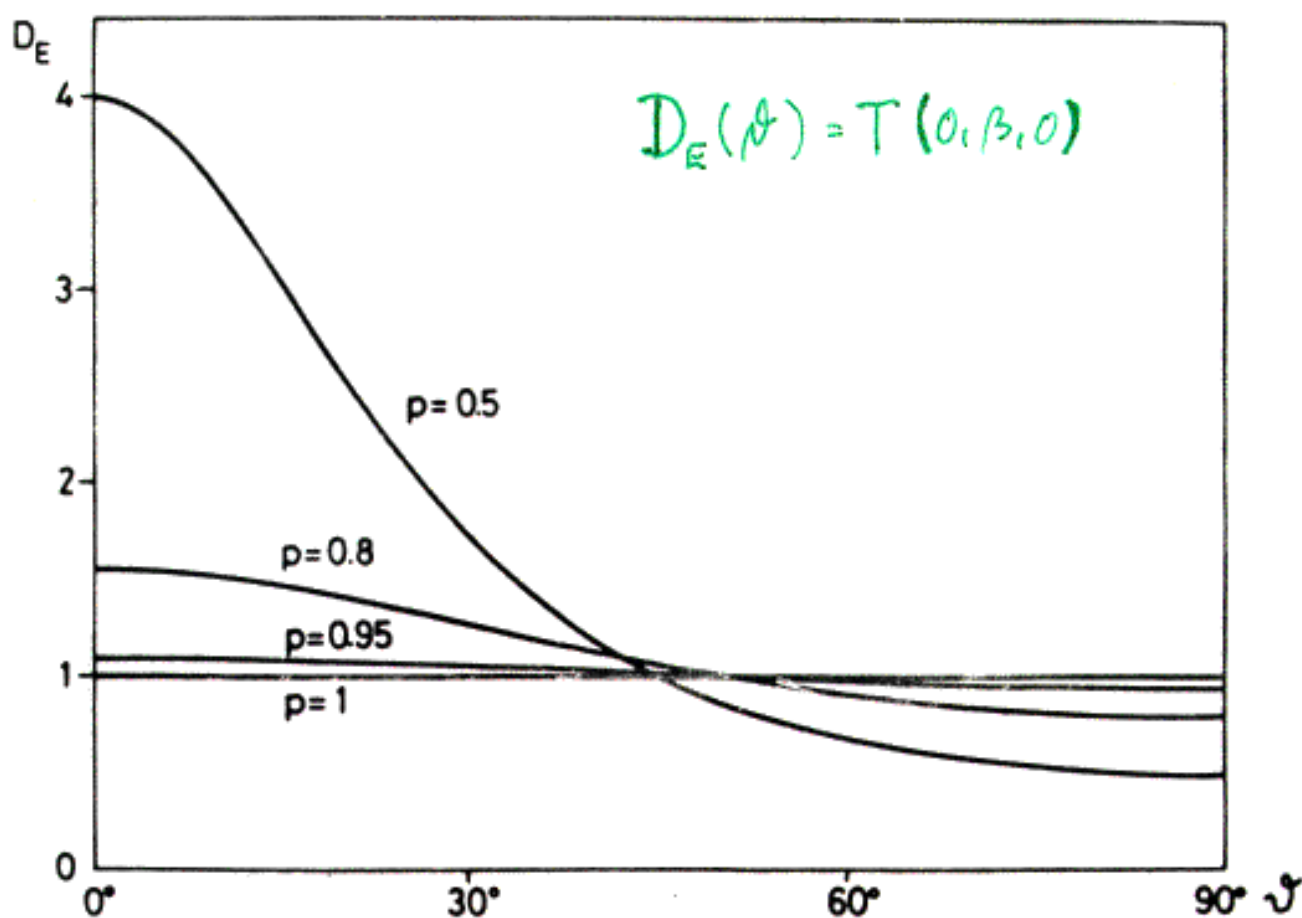


Fig. 5. The texture function $D_E(\theta)$ of planes after a compression from the original height of unity to p

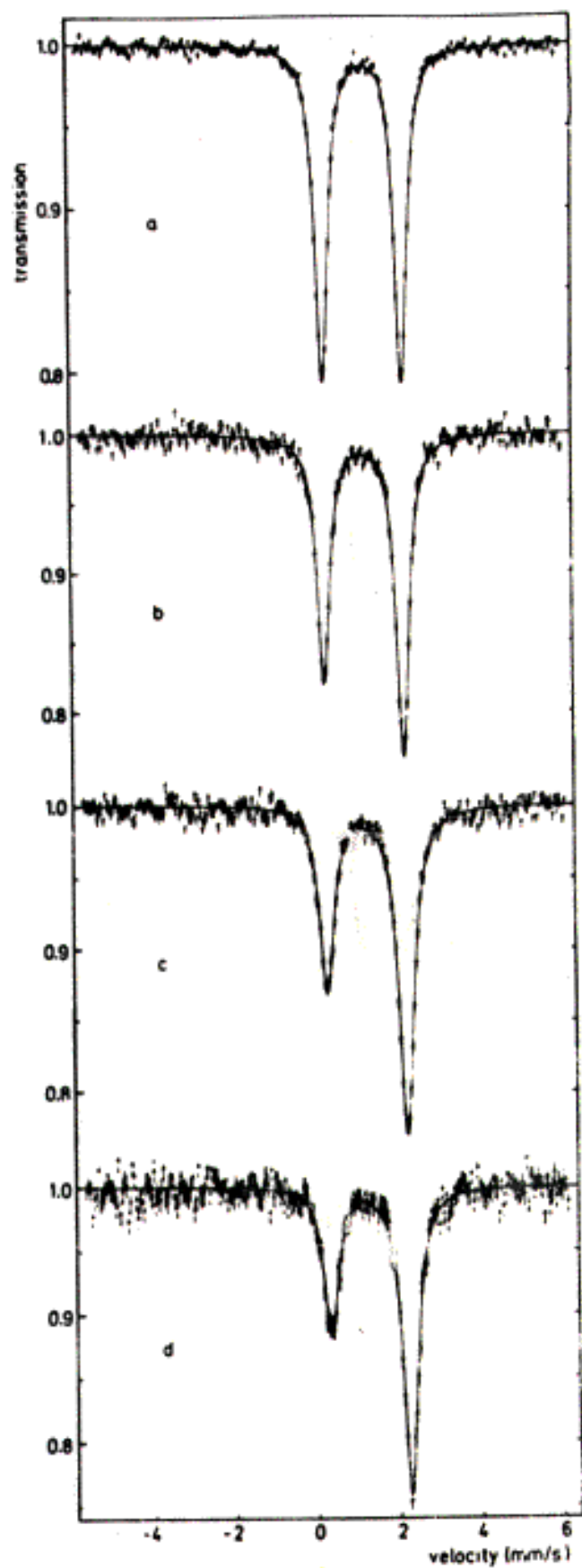


Fig. 2. Some typical Mössbauer spectra of polycrystalline FeCO_3 mixed with active carbon powder at 185 K after applying various longitudinal magnetic fields. (a) Original spectrum, (b) after 5 kG, (c) after 10 kG, (d) after 50 kG.

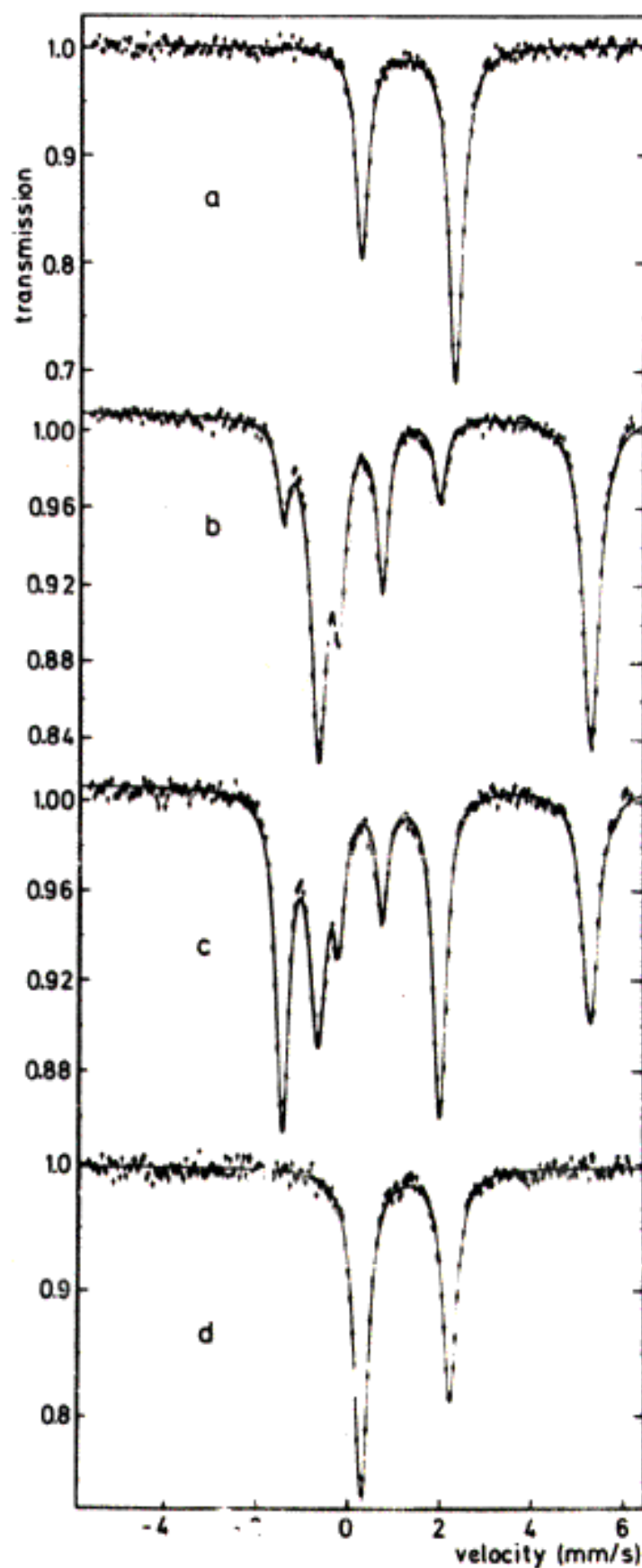


Fig. 4. The reversal of the induced texture: Mössbauer spectra of polycrystalline FeCO_3 mixed with active carbon powder. (a) Spectrum at 60 K after 7.5 kG at 60 K, (b) spectrum at 5 K after 7.5 kG at 60 K, (c) spectrum at 5 K after 50 kG at 5 K, (d) spectrum at 185 K after 50 kG at 5 K.

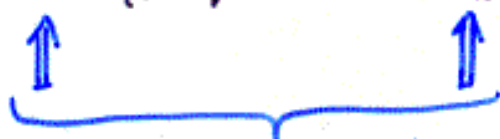
Az ETG eredete

$$q = \frac{V_{zz}}{e}$$

$$\eta q = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{e}$$

$$q = (1 - R_s) q_{\text{ion}} + (1 - \gamma_\infty) q_{\text{rács}}$$

$$\eta q = (1 - R_s) \eta_{\text{ion}} q_{\text{ion}} + (1 - \gamma_\infty) \eta_{\text{rács}} q_{\text{rács}}$$



Sternheimer-tényezők

$$0 \lesssim R_s \lesssim 1$$

$$-100 \lesssim \gamma_\infty \lesssim +100$$

Ponttöltés - modell:

$$q_{\text{rács}} = \frac{1}{e} \sum_i e_i \frac{3 \cos^2 \theta_i - 1}{r_i^3}$$

$$\eta_{\text{rács}} q_{\text{rács}} = \frac{1}{e} \sum_i e_i \frac{3 \sin^2 \theta_i \cos 2\varphi_i}{r_i^3}$$

↑
probléma: mekkorák az effektív töltések?

$$q_{\text{ion}} = - \sum_i \int \Psi^*(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_Z) \frac{3 \cos^2 \theta_i - 1}{r_i^3} \Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_Z) d^3 r_1 \dots d^3 r_Z$$

$$\eta_{\text{ion}} q_{\text{ion}} = - \sum_i \int \Psi^*(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_Z) \frac{3 \sin^2 \theta_i \cos 2\varphi_i}{r_i^3} \Psi(\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_Z) d^3 r_1 \dots d^3 r_Z$$

Elegendő az integrálokat a nem lezárt héjakra számolni.

Az egyes elektronállapotok járuléka (példa: Fe^{2+}):

		q	η
E_g	$d_{x^2-y^2}$	$+(4/7)\langle r^{-3} \rangle$	0
	d_{z^2}	$-(4/7)\langle r^{-3} \rangle$	0
Szabad ion	d_{xy}	$+(4/7)\langle r^{-3} \rangle$	0
	d_{xz}	$-(2/7)\langle r^{-3} \rangle$	+3
	d_{yz}	$-(2/7)\langle r^{-3} \rangle$	-3
			\uparrow
			$ V_{zz} < V_{xx} , V_{yy} $

- Gyors átmenet (relaxáció) az elektron-nívók között ($\tau \ll 1/\omega_E$): a mag az alnívók által keltett ETG termikus átlagát látja.



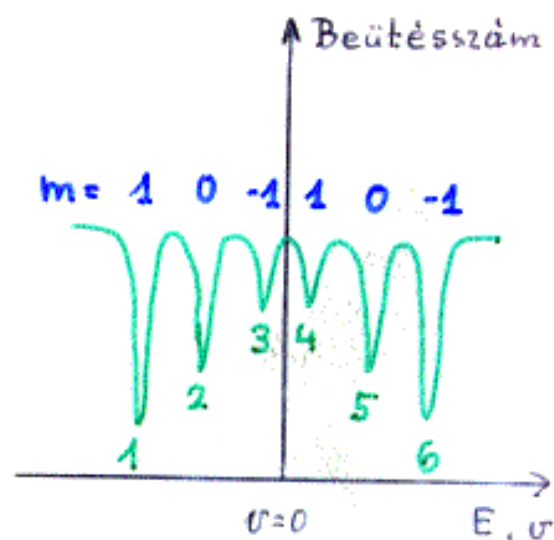
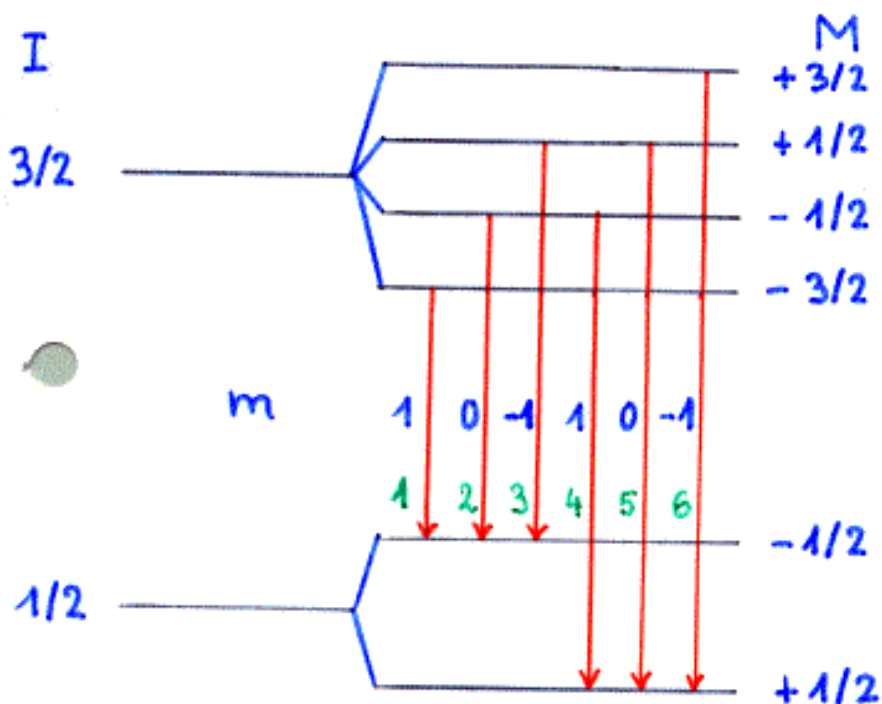
a megfigyelt ETG hőmérsékletfüggő.

- Lassú átmenet ($\tau \gg 1/\omega_E$): a megfigyelt spektrum az egyes elektron-nívókhoz tartozó sztatikus alspektrumok Boltzmann-súlyozott átlaga.
- Átmeneti tartomány ($\tau \approx 1/\omega_E$): "relaxációs" spektrumok

Mágneses felhasadás

$|I, M\rangle: E_{\text{magn}} = -g \mu_n B M$

Pl.: $I_g = 3/2, I_a = 1/2, M1$ átmenet (^{57}Fe)



$B \sim \nu_6 - \nu_1$

$$\underline{B} = \underline{B}_0 - \frac{D \mu_0}{4\pi} \underline{M} + \frac{\mu_0}{3} \underline{M} + \underline{B}_d + \underline{B}_s + \underline{B}_L + \underline{B}_D$$

↑ külső tér

↑ Lemágnesezési tér (gömbre: $D = \frac{4\pi}{3}$)

↑ Lorentz-tér

↑ külső dipólusok tere

↑ Fermi-féle kontakt-tér

↑ spin-dipólus-tér

↑ pálya-impulzus-nyomaték-tér

spontán mágnesezettség
hiányában elhangagolható

$\underline{B}_s \sim \langle \underline{S} \rangle$

$\underline{B}_L \sim \langle \underline{L} \rangle$

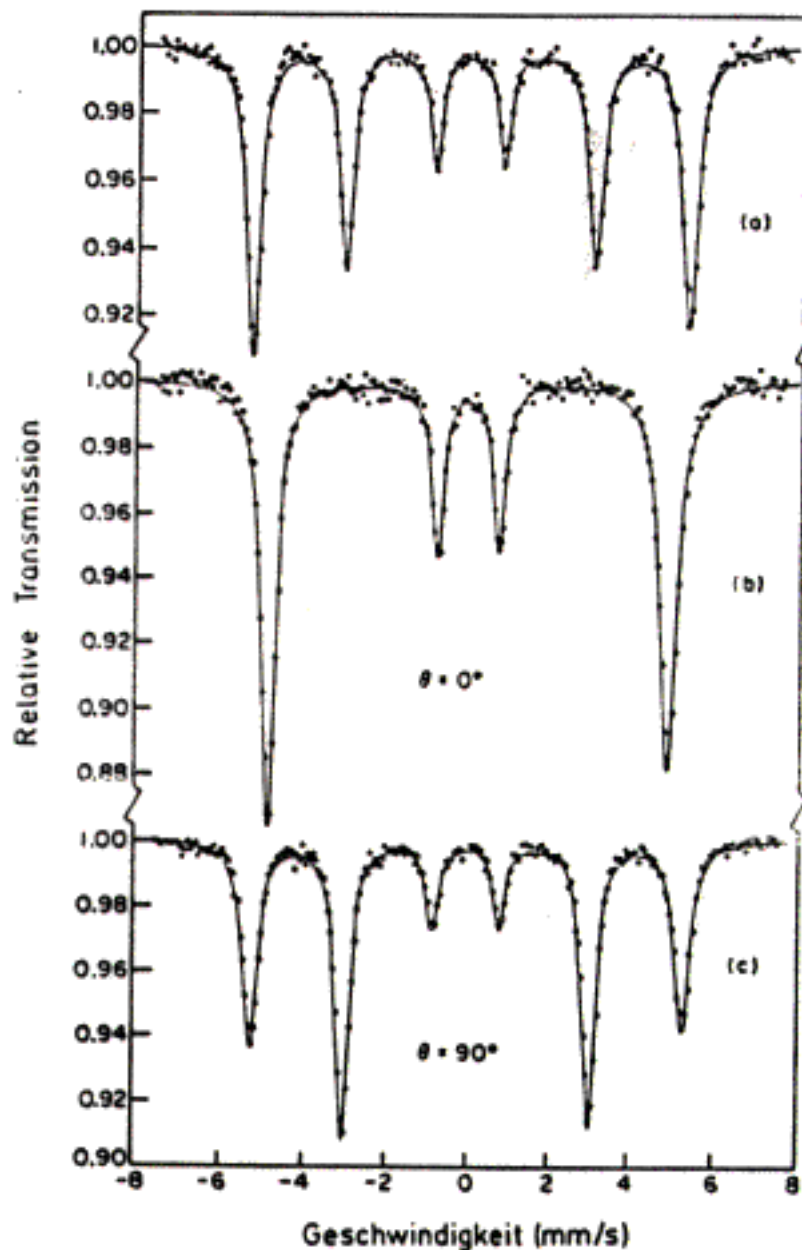
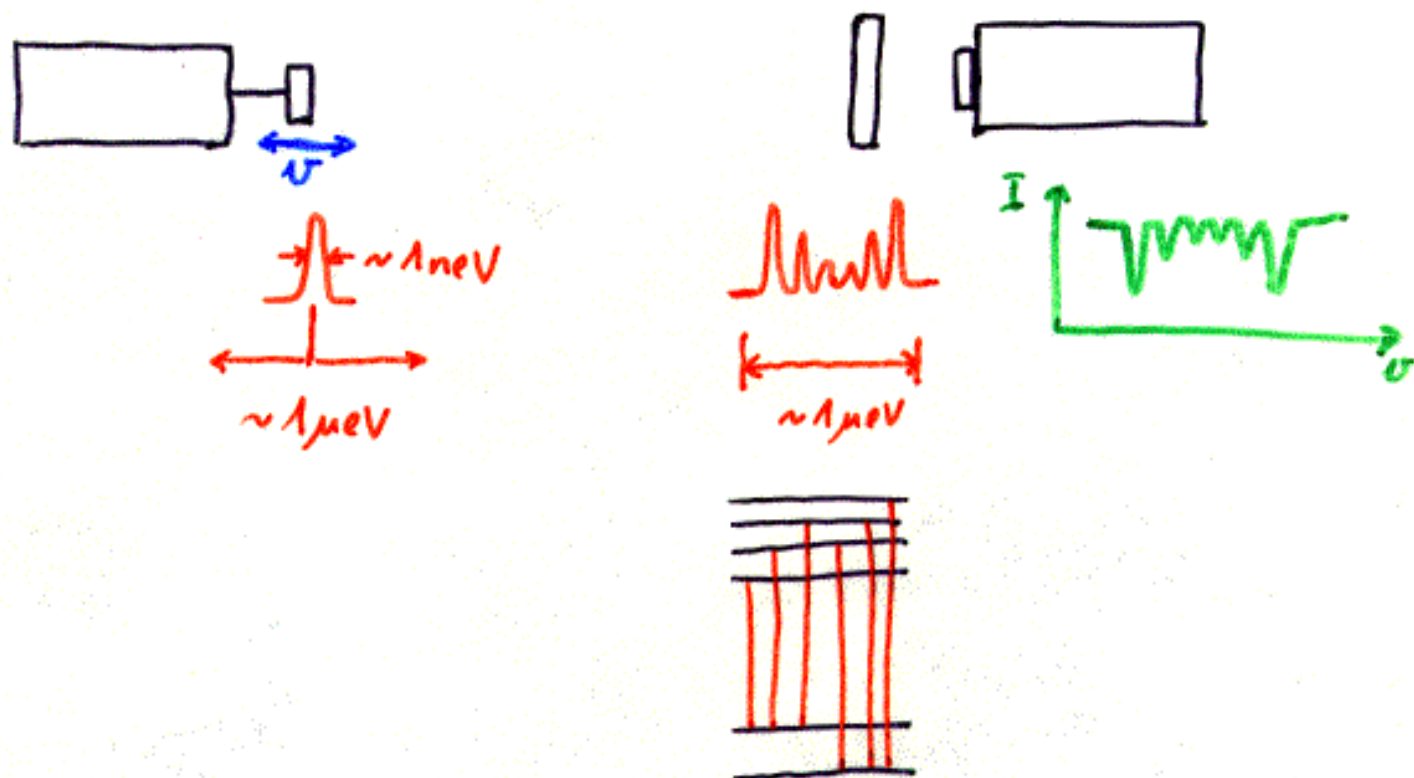


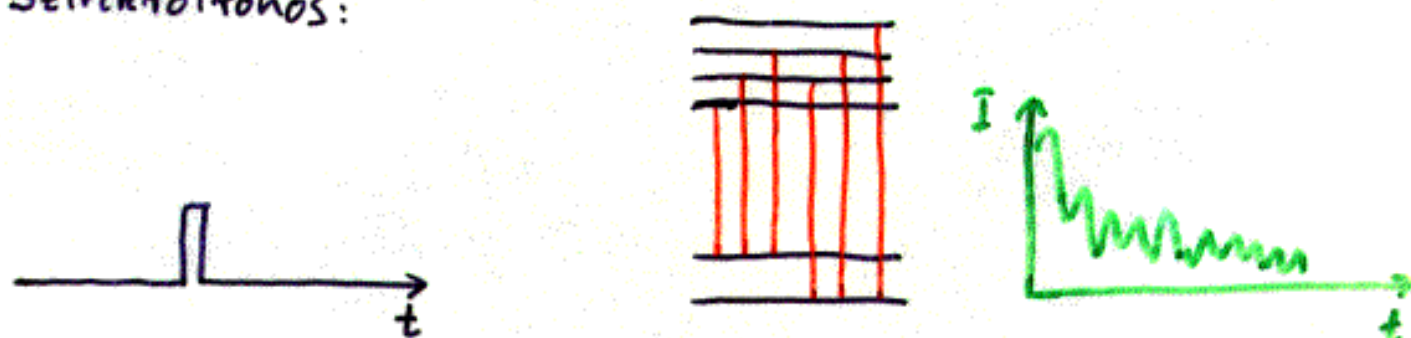
Abb. 4.23: ^{57}Fe Mößbauer-Spektrum für Eisen. Quelle: ^{57}Co in Pt.
 a) Für Absorber aus unmagnetisiertem Eisen (die Richtungen des inneren \vec{B} -Felds sind statistisch verteilt).
 b) Für Absorber aus magnetisiertem Eisen bei dem die Magnetisierung und damit das B-Feld parallel zur Ausbreitungsrichtung \vec{k} des γ -Quants steht.
 c) Für Absorber aus magnetisiertem Eisen bei dem die Magnetisierung und damit das B-Feld senkrecht auf der Ausbreitungsrichtung \vec{k} des γ -Quants steht (GON 75)

Szinkrotronos vs. hagyományos Mössbauer-spektroszkópia

• Hagományos:



• Szinkrotronos:

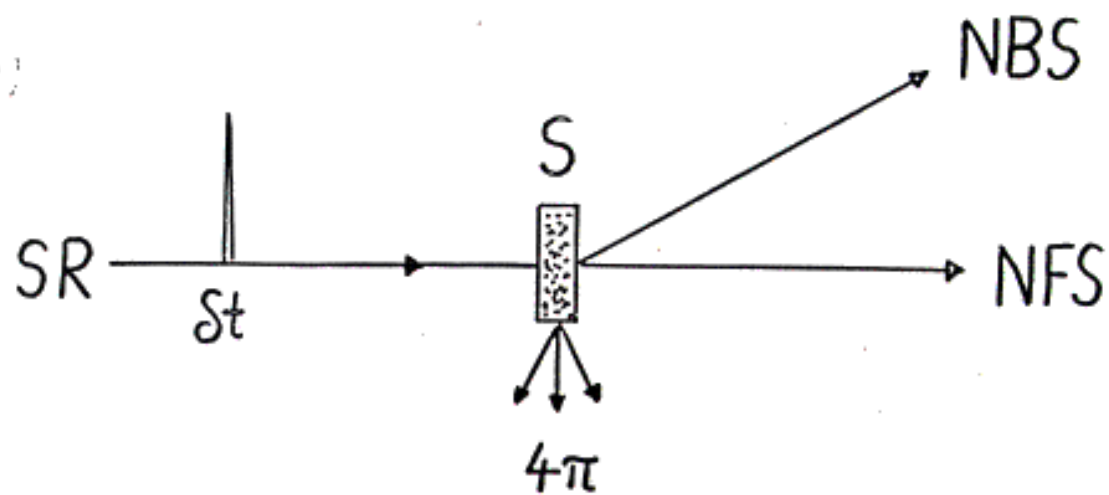


koherens gerjesztés, koherens bomlás

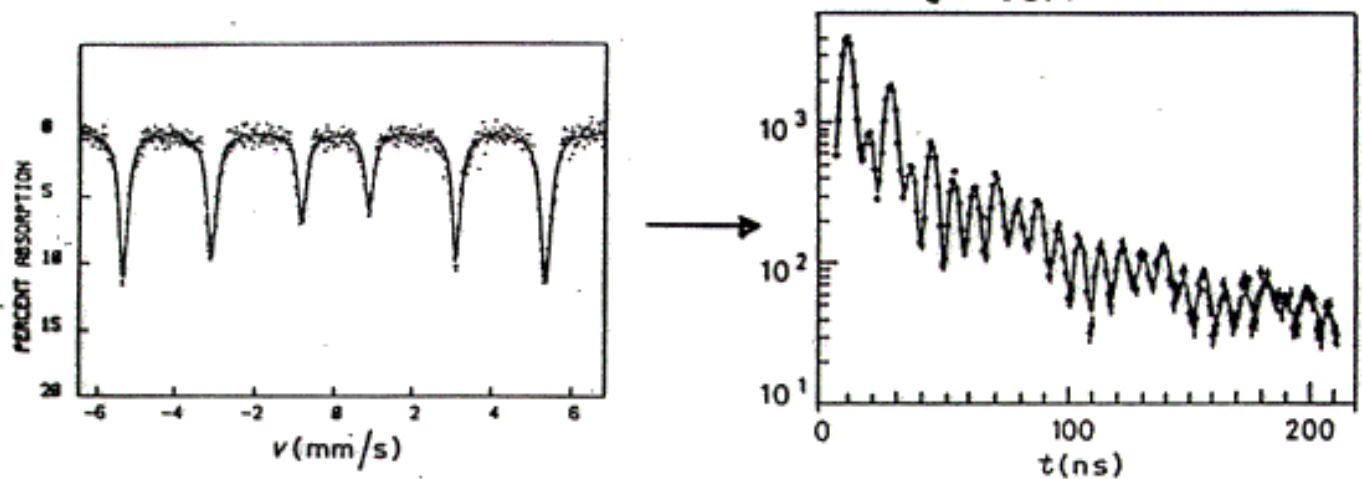
Interferencia a hiperfinom átmenetek között:

kvantum-beat szerkezet

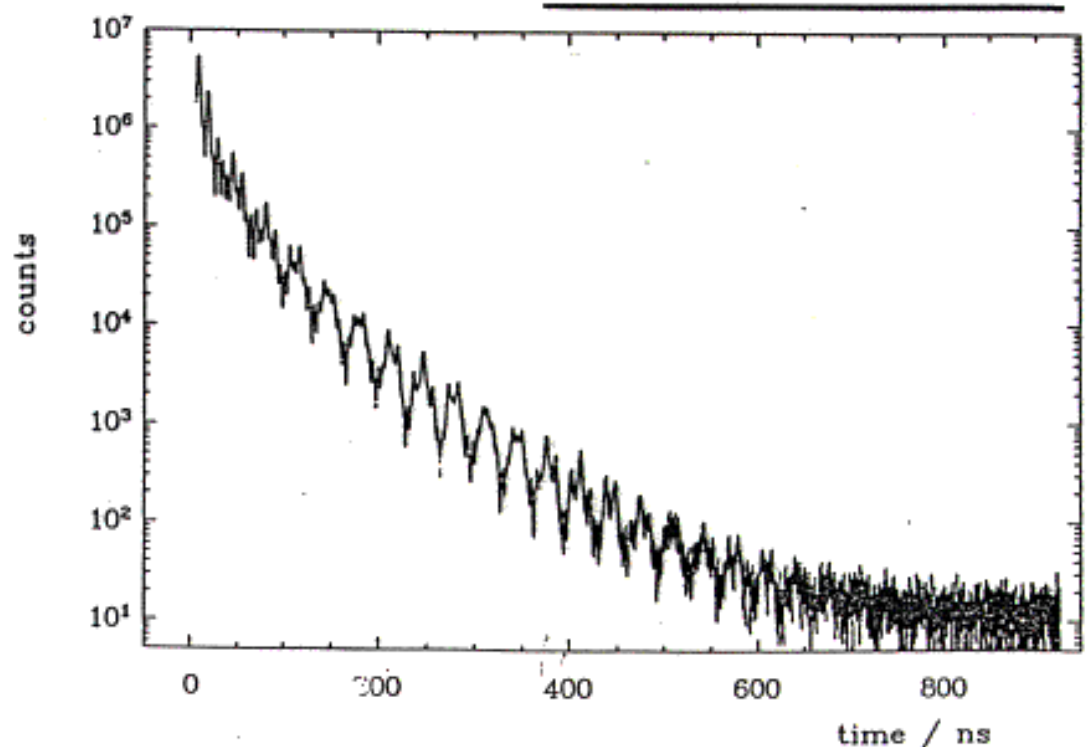
Célszerű a gerjesztő nyalábot $\sim 1 \text{ neV}$ -ra mono-
kromatizálni

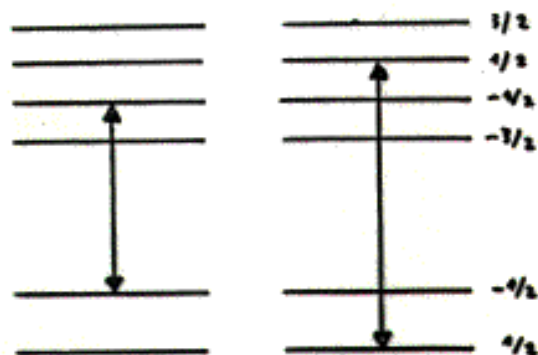


time dependence of response $\left\{ \begin{array}{l} \text{coh.} \\ \text{incoh.} \end{array} \right.$ of sample

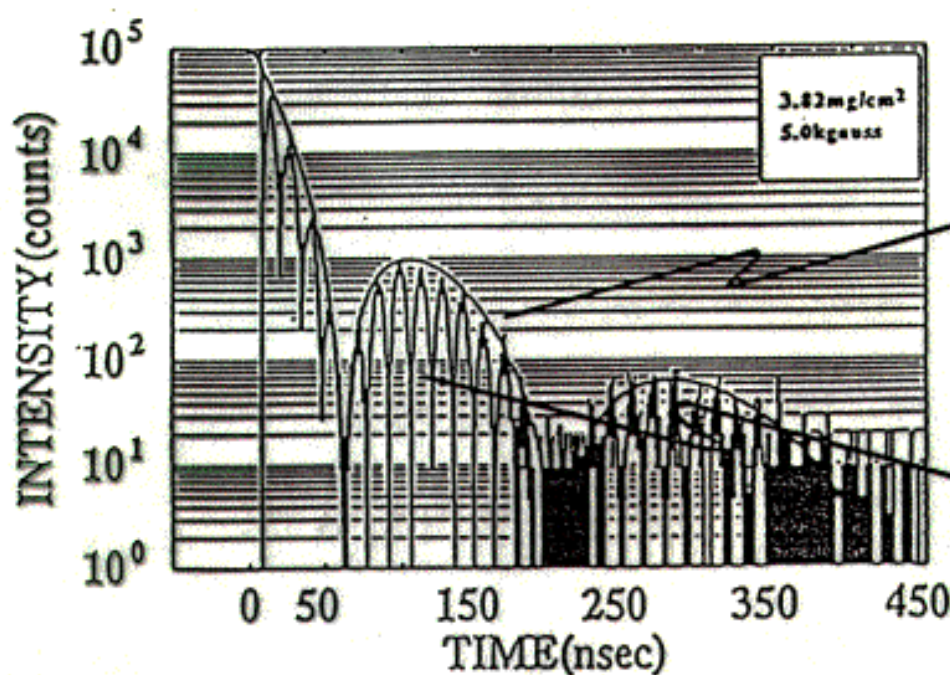
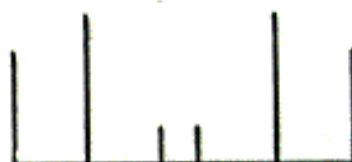


Quantum Beats





$$^{57}\text{Fe} : \Delta m = 0$$

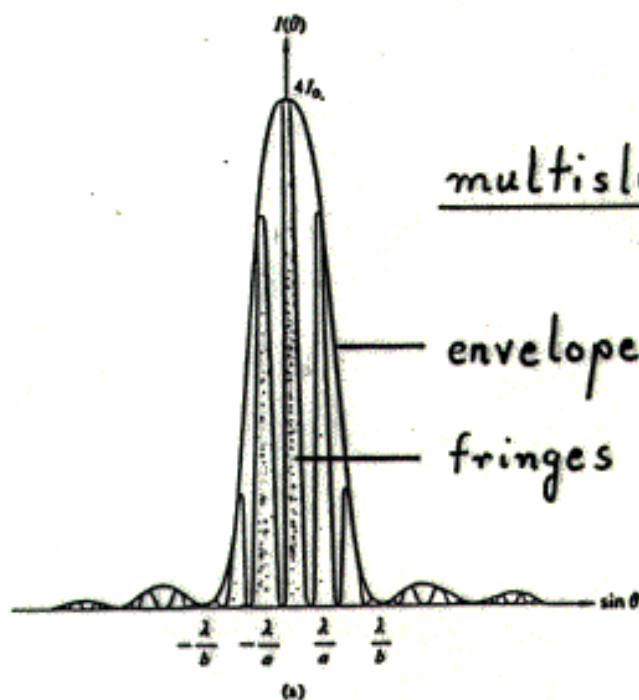


Dynamical Envelope

$$\rightarrow d_{\text{eff}} \sim f_a$$

Quantum Beats

Kikutu... 93



multislit interference:

envelope (1 slit)

fringes (n slits)

reciprocal scales

MS

$$\Gamma_0 = 5 \text{ neV}$$

$$\Delta_{hf} = 100 \Gamma_0$$

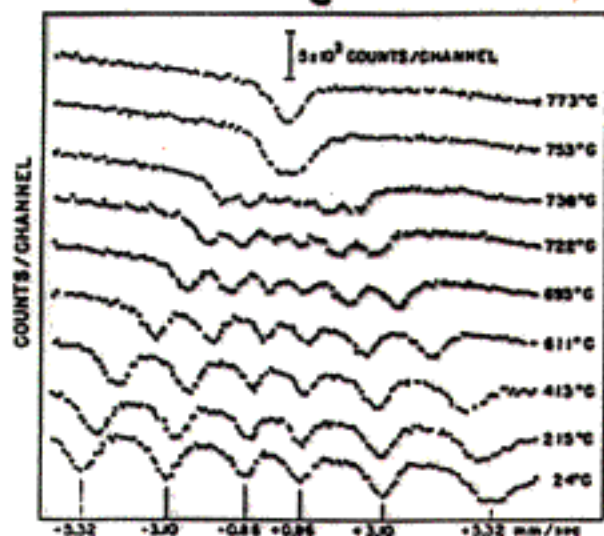
-pMS

$$\tau_0 = 141 \text{ ns}$$

$$T_{QB} = 8 \text{ ns}$$

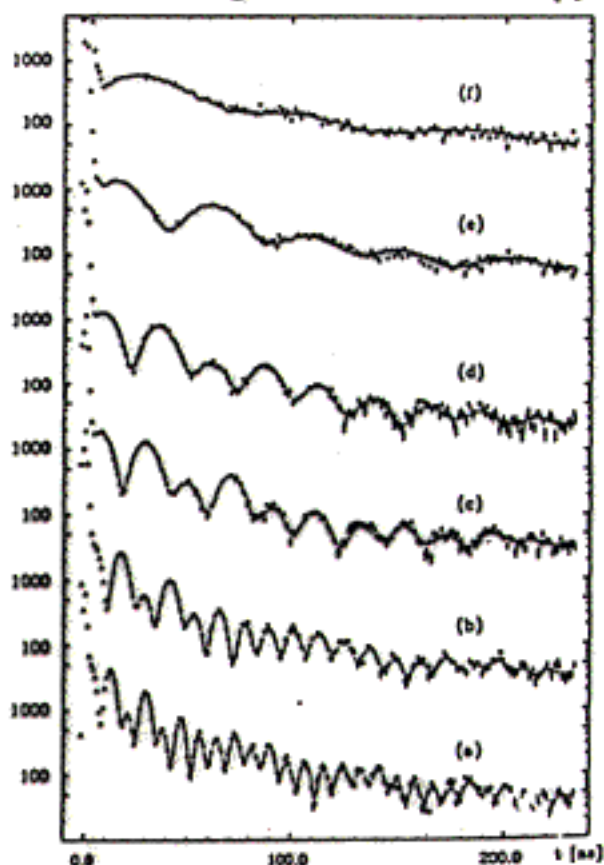
both scales accessible!

$^{57}\text{Fe} \rightarrow T_c$



Nagle... 60

$^{57}\text{FeBO}_3(333) \rightarrow T_N$

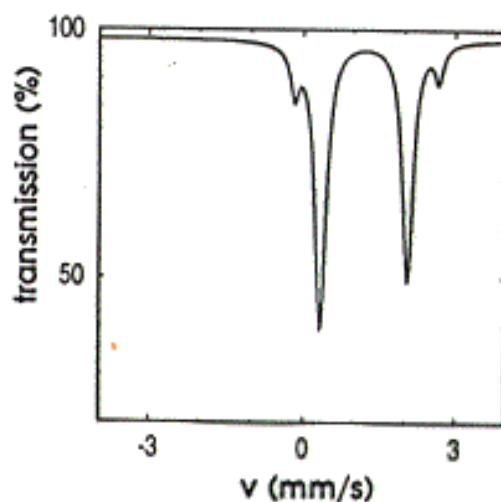
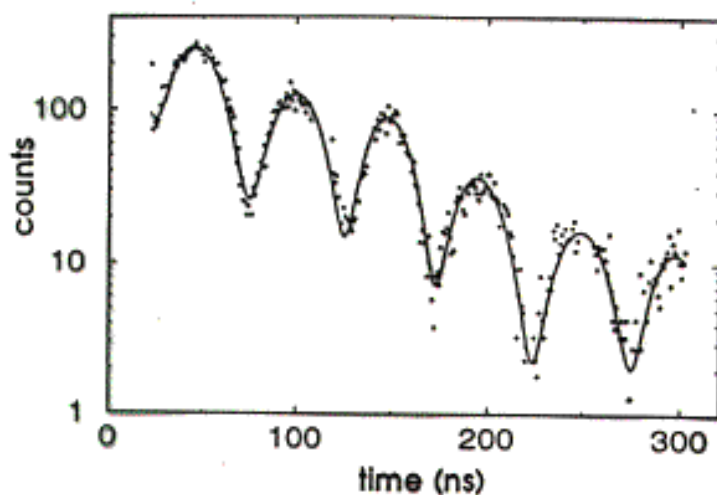


Rüter... 90

Chumakov... 90

Mohr's salt, $^{57}\text{Fe} (\text{NH}_4)_2 (\text{SO}_4)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$

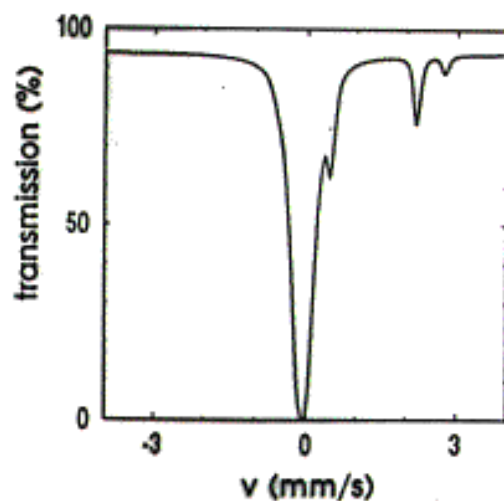
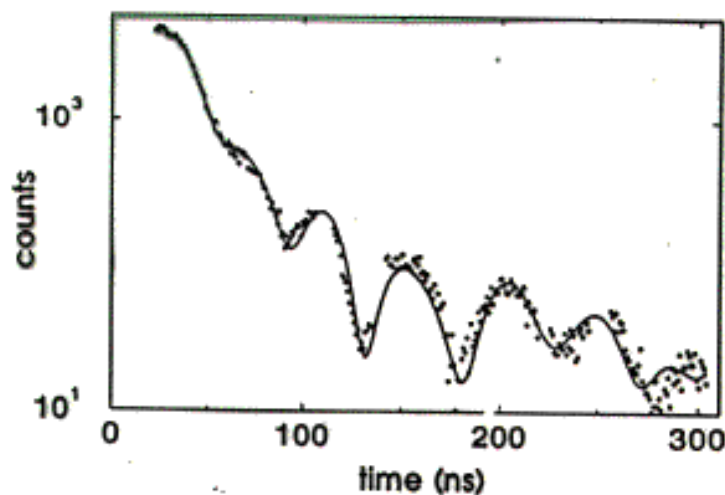
1.1



quadrupole splitting : 1.710(7) mm/s

data collection time : 1 hour

Mohr's salt + stainless steel



quadrupole splitting : 1.718(8) mm/s

isomer shift : 1.41(2) mm/s

data collection time : 2 hours

Advanced Photon Source

Téreloszlási (felbontásjavító) módszerek a Mössbauer-spektroszkópiában

Egyszerűsítő feltevések:

- transzmissziós geometria
- vékony abszorbens
- statikus hiperfinom kölcsönhatás
- ^{57}Fe (14.4 keV)

A mért spektrum (relatív abszorpció):

$$y(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\omega) l(\nu - \omega) d\omega$$

a hiperfinom energia
eloszlás függvénye

$$l(\nu) = \frac{\Gamma}{\pi} \frac{1}{\nu^2 + \Gamma^2}$$

Ez a fizikai információ!

Elsődleges feladat: $p(\nu)$ meghatározása $y(\nu)$ -ből.

$p(\nu)$ ismeretében – ha egyáltalán – az izomér eltolódás, az ETG és a hiperfinom mágneses tér (esetleg korrelált) eloszlása már megkapható.

A Fourier-technika

$y(v)$ konvolúció: $y(v) = p(v) * l(v)$

↑
a konvolúció műveleti jele

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

\mathcal{F} : a Fourier-transzformáció operátora

$Y(k) := \mathcal{F} y(v)$, stb.:

$$Y(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} y(v) e^{ikv} dv$$

$$y(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} Y(k) e^{-ikv} dk$$

$y(v)$ -t csak hibával (zajjal) terhelt formában tudjuk mérni:

$$y'(v) = y(v) + h(v) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(w) l(v-w) dw + h(v)$$

↑
fehér zaj

$$L(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-|k|\Gamma} \Rightarrow \frac{1}{L(k)} = \sqrt{2\pi} e^{|k|\Gamma}$$

kierősíti a zaj nagyfrekvenciás
($k \gg 1/\Gamma$) részét

Megoldás: az inverz Fourier-transzformáció előtt
egy $D(k)$ növekvő függvénnyel szorzunk: