

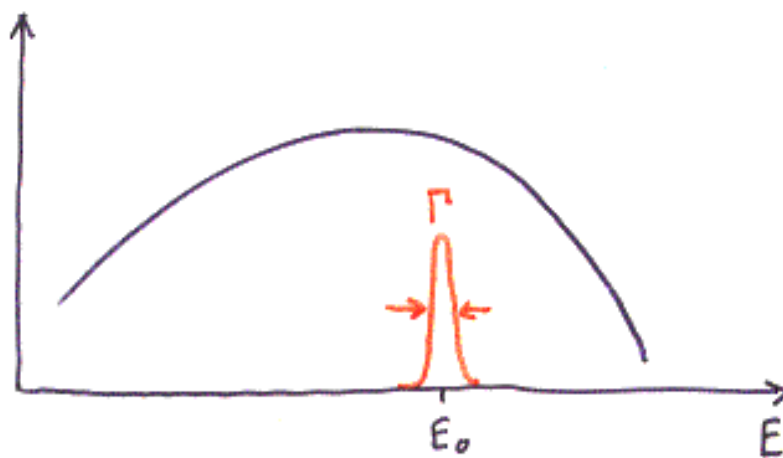
A szinkrotronsugárzás tulajdonságai

- intenzív folytonos spektrum az infravörös - röntgen tartományban
- kis nyalábdivergencia (a gyűrű síkjára merőlegesen $0.1 - 1 \text{ mrad}$)
- nagy fényerő - sűrűség (brilliance)
- lineárisan polarizált sugárzás a gyűrű síkjában; elliptikus polarizáció alatta és felette
- pulzált sugárzás:
 - impulzushossz $\sim 10^{-10} \text{ s}$
 - periódusidő $\sim 10^{-6} \text{ s}$ (single bunch mode)
 $\sim 10^{-8} - 10^{-7} \text{ s}$ (multibunch mode)

Teljes sugárzási teljesítmény: $P \sim E^4$

Pl: DORIS III. 4.5 GeV 100 mA : $P \approx 0.5 \text{ MW}$

A magrezonancia - szórás kiszűrésének kísérleti problémái



$$\frac{\Gamma}{E_0} \approx 10^{-12}$$

Hogyan lehet a nukleárisan szórt fotonokat elválasztani a

- direkt nyalábtól és az
- elektronokon szórt fotonoktól?
- monokromatizálás egykristály-monokromátorokkal
- időbeli szétválasztás:
 - direkt nyaláb
 - elektronikus szórás
 - nukleáris szórás késleltetett ($\tau \approx 10^{-7} \text{ s}$)
- elektronikusan tiltott reflexiók használata:
 - AF szuperszerkezet
 - izotóp-szuperszerkezet

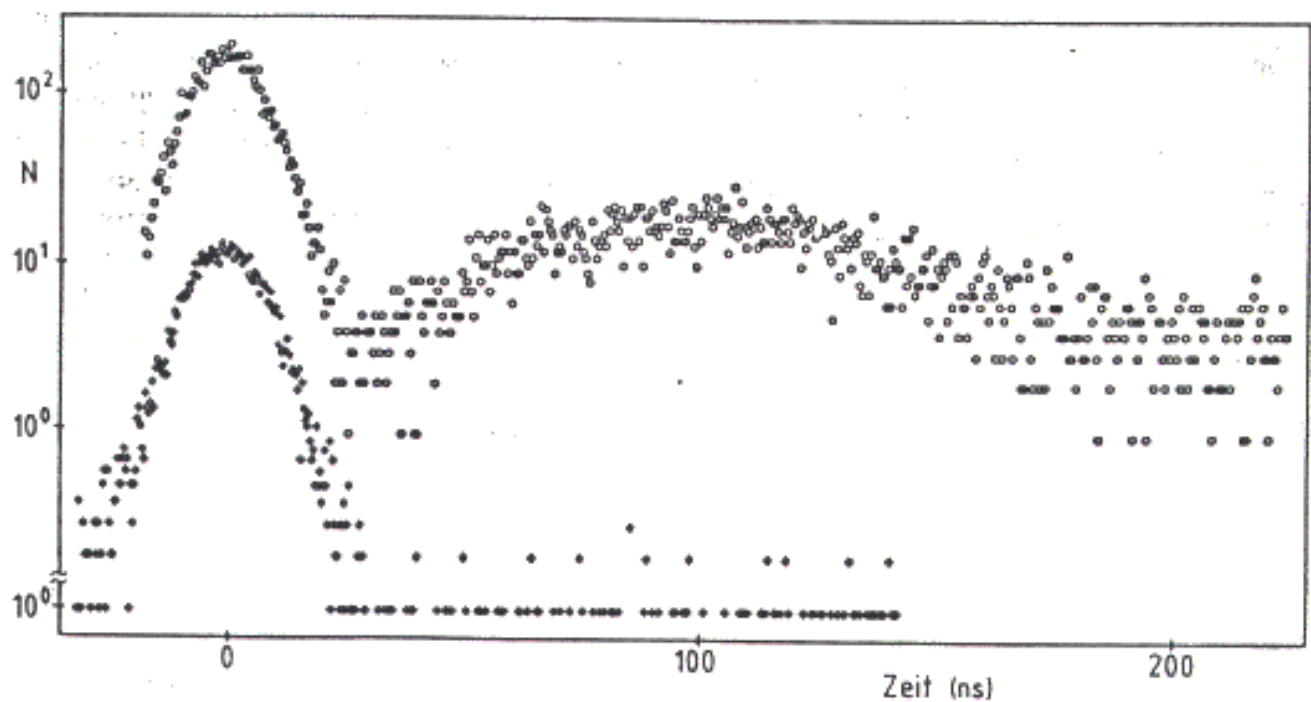


Abb. 1: Zeitlich verzögerter Zerfall des nuklearen-Exzitons. Die verzögerten Ereignisse erreichen ein Maximum bei ca. 100 ns. Darin dokumentiert sich der kollektive Charakter des Zerfalls. Für zwei aufeinanderfolgende Streuungen an einzelnen Kernen erwartet man das Maximum bei 280 ns. Zum Vergleich ist eine Messung außerhalb der Resonanz mit angegeben (untere Kurve).

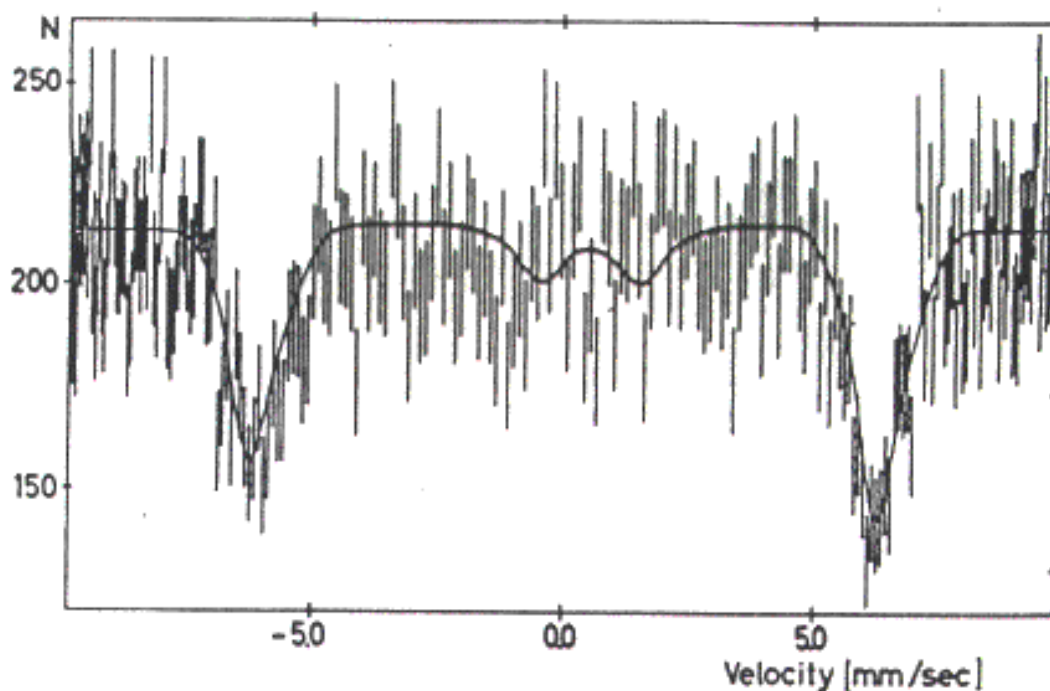
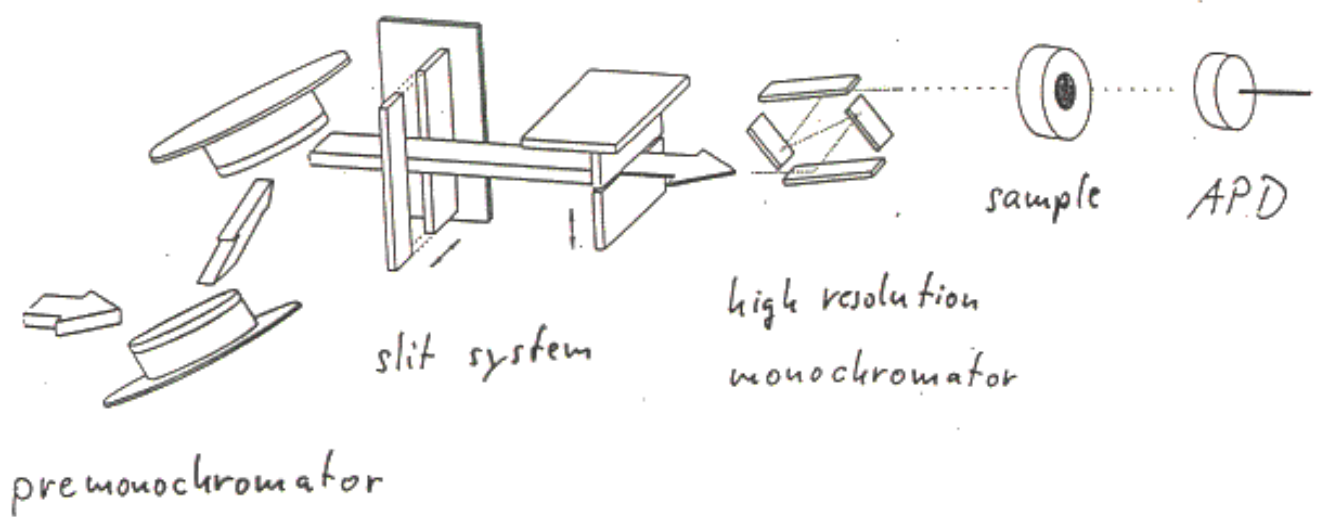


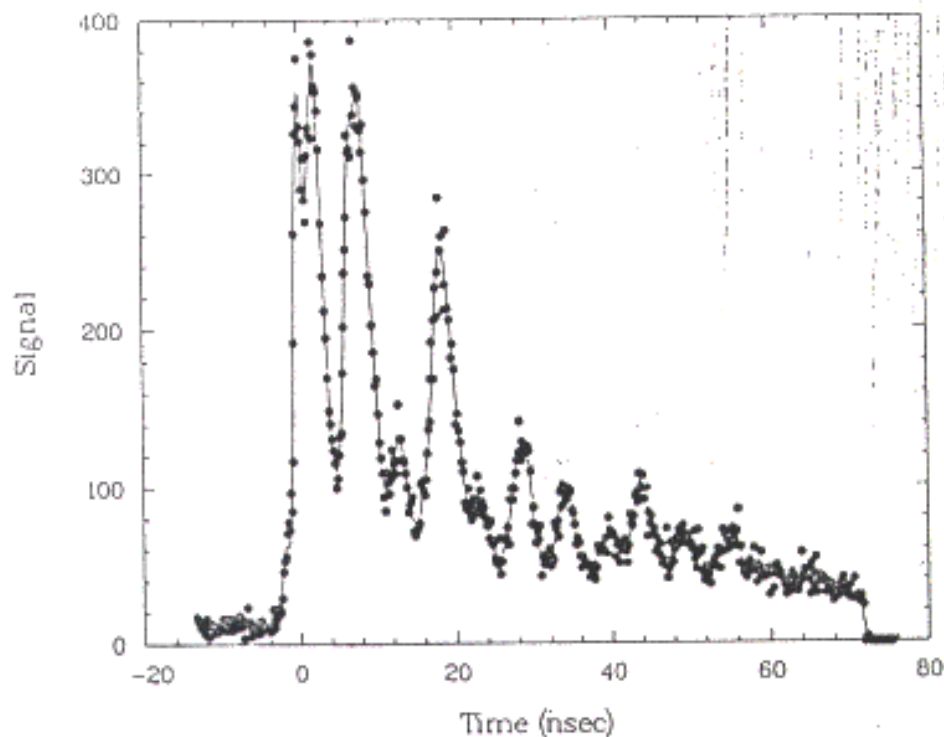
Fig. 4 Mössbauer spectrum of the monochromatized beam analyzed with a stainless-steel absorber. The solid line is the predicted result. Only the normalization constant and the effect are adjusted.

YIG (lithium-vas-gränat) (200)

Gerdau et al, 1985

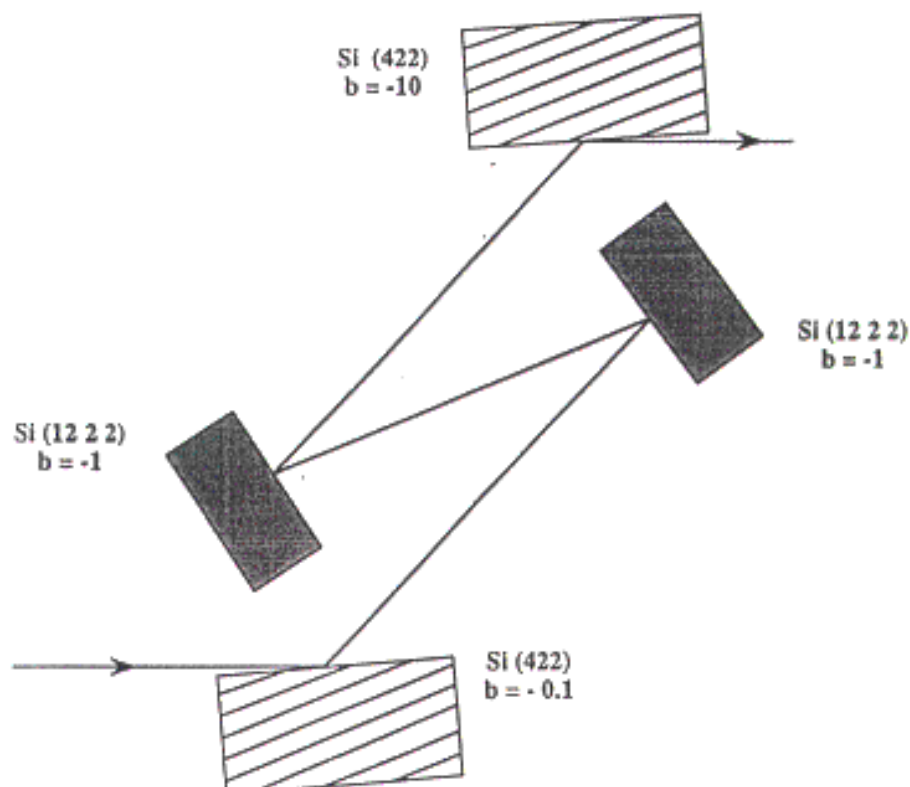


APD = Avalanche Photo Diode



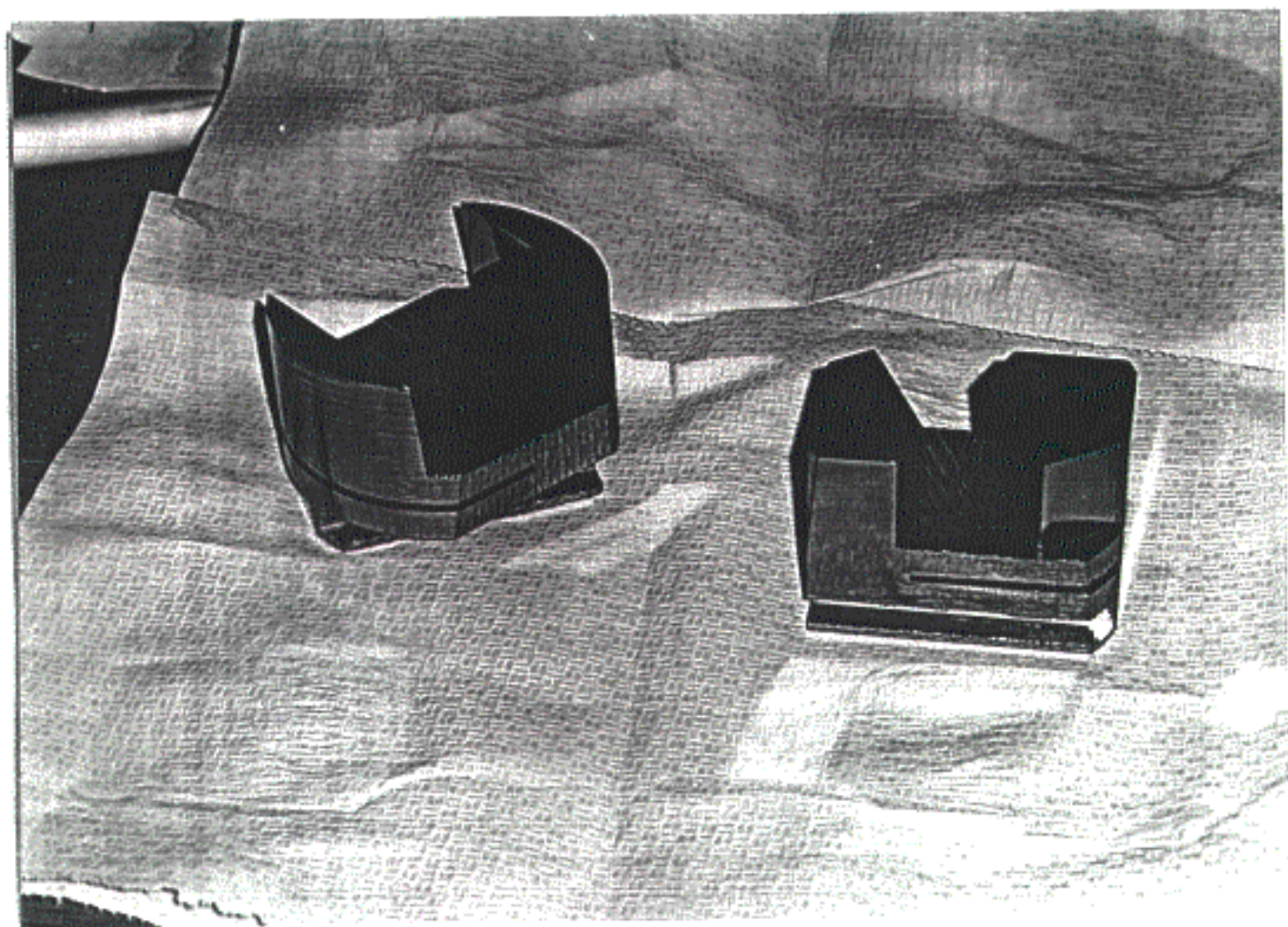
Faigel et al.
1988

FIG. 1. The observed time evolution of the "pure-nuclear" (777) reflection from ^{57}Fe -enriched hematite. The continuous curve is derived from the data by Fourier smoothing.

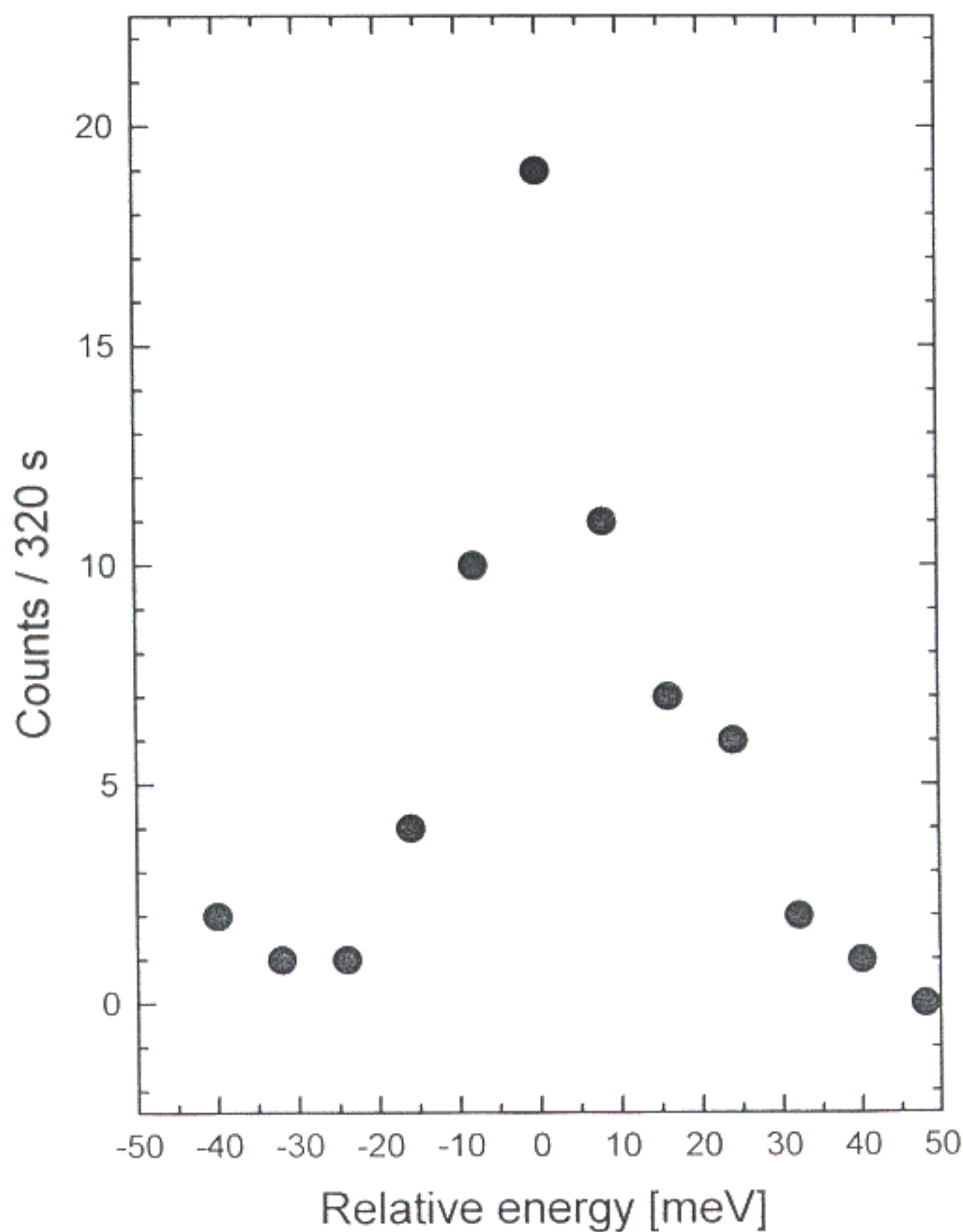


Four crystal arrangement for high-energy resolution and high "throughput"

Design for 14.4 keV with two Si (422) crystals (entrance and exit) which are asymmetric-cut crystals in order to gain the angular acceptance. The inner crystals, two Si (12 2 2) with a Bragg angle of 77.5° , are in a dispersive setting with the Si (422) to get a good energy resolution.



Europium resonance



Másodrendű Doppler-effektus

Magasabb hőmérséklet \Rightarrow gyorsabb hőmozgás

Mozgó órák lassabban járnak.

$$\omega = \omega_0 \underbrace{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}_{\text{relativisztikus idődilatació}} + \underbrace{k v}_{\text{klasszikus Doppler-effektus}} =$$

$$= \omega_0 + k v - \frac{\omega_0}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots$$

Időátlag:

$$\bar{\omega} = \omega_0 \left(1 - \frac{\bar{v}^2}{2c^2} \right)$$

Energiaeltolódás:

$$\delta E_D = \hbar (\bar{\omega} - \omega_0) = - \frac{\bar{v}^2}{2c^2} \hbar \omega_0 = - \frac{\overbrace{\hbar \omega_0}^{E_\gamma}}{Mc^2} \frac{M \bar{v}^2}{2}$$

Moláris belső energia: $U = 2 N_A \frac{M \bar{v}^2}{2}$

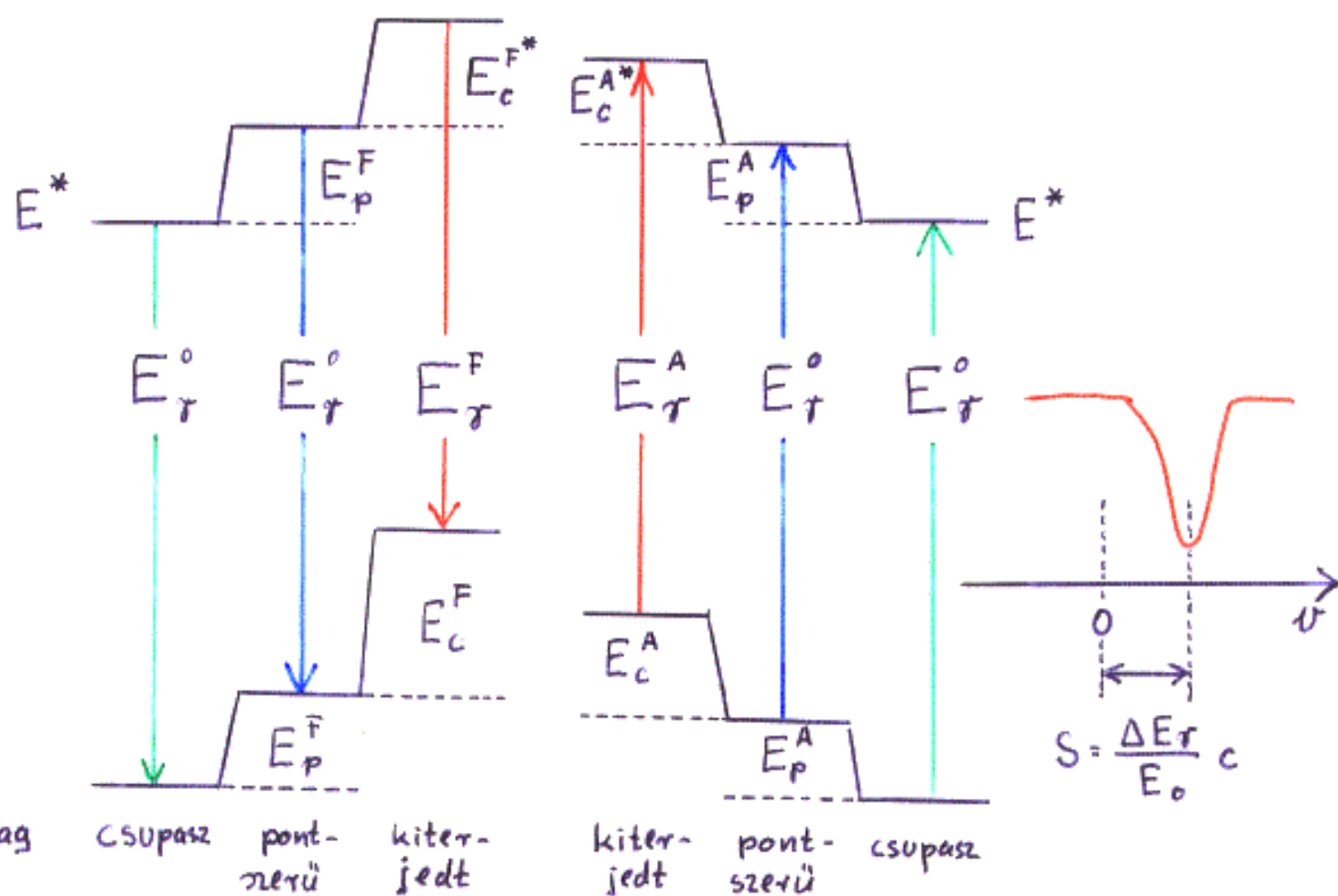
$$\delta E_D = - \frac{U_\gamma}{2 N_A M c^2} E_\gamma$$

$$\frac{d(\delta E_D)}{dT} = - \frac{E_\gamma}{2 N_A M c^2} \frac{dU}{dT} = - \frac{E_\gamma}{2 N_A M c^2} C_{\text{mol}}$$

$$- \frac{d(\delta E_D)}{dT} \frac{1}{E_\gamma} = \frac{1}{2 N_A M c^2} C_{\text{mol}}$$

\downarrow \downarrow
egy adott izotópra (és átmenetre) állandók

Izomér eltolódás



forrás

abszorbeens

$$\Delta E_r = E_r^A - E_r^F = (E_c^{A*} - E_c^A) - (E_c^{F*} - E_c^F) =$$

$$= \left[\underbrace{(E_c^{A*} + E_p^A)}_{E_0^{A*}} - \underbrace{(E_c^A + E_p^A)}_{E_0^A} \right] - \left[\underbrace{(E_c^{F*} + E_p^F)}_{E_0^{F*}} - \underbrace{(E_c^F + E_p^F)}_{E_0^F} \right] =$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \left[g_n^{A*}(\underline{r}_n) g_e^{A*}(\underline{r}_e) - g_n^A(\underline{r}_n) g_e^A(\underline{r}_e) - \right. \\ \left. - g_n^{F*}(\underline{r}_n) g_e^{F*}(\underline{r}_e) + g_n^F(\underline{r}_n) g_e^F(\underline{r}_e) \right] \frac{1}{r_s} d^3 r_n d^3 r_e$$

Polarizációs effektusok

- I. $g_e^{A*}(\underline{r}_e) \neq g_e^A(\underline{r}_e)$; $g_e^{F*}(\underline{r}_e) \neq g_e^F(\underline{r}_e)$
- II. $g_n^A(\underline{r}_n) \neq g_n^F(\underline{r}_n)$; $g_n^{A*}(\underline{r}_n) \neq g_n^{F*}(\underline{r}_n)$

kis effektusok ($\lesssim 1\%$)

Polarizációs effektusok nélkül:

$$g_e^{A*}(\underline{r}_e) = g_e^A(\underline{r}_e); \quad g_e^{F*}(\underline{r}_e) = g_e^F(\underline{r}_e)$$

$$g_n^A(\underline{r}_n) = g_n^F(\underline{r}_n) = g_n(\underline{r}_n); \quad g_n^{A*}(\underline{r}_n) = g_n^{F*}(\underline{r}_n) = g_n^*(\underline{r}_n)$$

$$\Delta E_{\text{st}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \left[g_n^*(\underline{r}_n) g_e^A(\underline{r}_e) - g_n(\underline{r}_n) g_e^A(\underline{r}_e) - \right. \\ \left. - g_n^*(\underline{r}_n) g_e^F(\underline{r}_e) + g_n(\underline{r}_n) g_e^F(\underline{r}_e) \right] \frac{1}{r_{>}} d^3r_n d^3r_e =$$

$$\Delta g_e(\underline{r}_e) = g_e^A(\underline{r}_e) - g_e^F(\underline{r}_e)$$

$$\Delta g_n(\underline{r}_n) = g_n^*(\underline{r}_n) - g_n(\underline{r}_n)$$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \iint \frac{\Delta g_e(\underline{r}_e) \Delta g_n(\underline{r}_n)}{r_{>}} d^3r_n d^3r_e =$$

$$\Delta g_e'(\underline{r}_e) = g_e^{A'}(\underline{r}_e) - g_e^{F'}(\underline{r}_e) \quad (\text{gömbi átlagolás})$$

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

Nem-relativisztikus esetben ($Z \ll 1/d$):

$$\Delta g_e'(r_e) = \Delta g_e(r_e) = \Delta g_e(0) = \Delta |\psi(0)|^2 e$$

$$\int_0^{r_n} \left(\frac{1}{r_n} - \frac{1}{r_e} \right) r_e^2 dr_e = -\frac{1}{6} r_n^2$$

$$\boxed{\Delta E_T = \frac{e}{6\epsilon_0} \Delta |\psi(0)|^2 \underbrace{\int \Delta g_n(r_n) r_n^2 d^3 r_n}_{\Delta \langle r_n^2 \rangle} =}$$

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

Feltételek: • nincsenek polarizációs hatások

• jogos a nem-relativisztikus közelítés

Relativisztikusan: • nemcsak az s-, hanem a $p_{1/2}$ -elektronok is előfordulnak a mag belsejében

• $|\psi_s(r_e)|^2$ a magon belül változik.

Pl.: R sugarú, homogén töltéeloszlású mag esetén:

$$g_e(r_e) = g_e(0) \left[1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 + \frac{\alpha^2 Z^2}{10} \left(1 + \frac{9\alpha^2 Z^2}{8} \right) \left(\frac{r}{R} \right)^4 + \dots \right]$$

Az izomér eltolódás korrekciós tényezője: $S'(Z)$:

$$\Delta E_T = \frac{Z e^2}{6\epsilon_0} S'(Z) \Delta |\psi(0)|^2 \Delta \langle r_n^2 \rangle$$

↑
nem-relativisztikus hullámfüggvény

(a magasabb nyomatékok elhagyásával)

Magasabb nyomatékokkal:

$$\Delta E_f = \frac{e}{6\epsilon_0} \Delta g_e^{\text{rel}}(0) \left[\Delta \langle r_n^2 \rangle + \beta_2(Z) \Delta \langle r_n^4 \rangle + \beta_4(Z) \Delta \langle r_n^6 \rangle + \dots \right]$$

Izomér eltolódás és kémiai vegyérték

Egy adott izotóp esetén:

$$\Delta E_f \sim \Delta |\psi(0)|^2$$

↑
fő járulék: s-elektronok

1. példa: ^{119}Sn $\Delta \langle r_n^2 \rangle > 0$

A vegyérték-elektronok az s-elektronok.

semleges Sn: ... (4d)¹⁰ (5s)² (5p)²

ionos Sn²⁺: ... (4d)¹⁰ (5s)²

ionos Sn⁴⁺: ... (4d)¹⁰

$$S(\text{mm/s}) = -0.38 + \underbrace{3.10 n_s - 0.20 n_s^2}_{\substack{\uparrow \\ \text{az s-elektronok közvetlen járuléka}}} - 0.17 n_s n_p$$

↑
a p-elektronok leárnyékoló hatása

2. példa: ^{57}Fe $\Delta \langle r_n^2 \rangle < 0$

Az s-elektronok **nem** vegyérték-elektronok.

semleges Fe: ... (3d)⁷ (4s)²

ionos Fe²⁺: ... (3d)⁶

ionos Fe³⁺: ... (3d)⁵

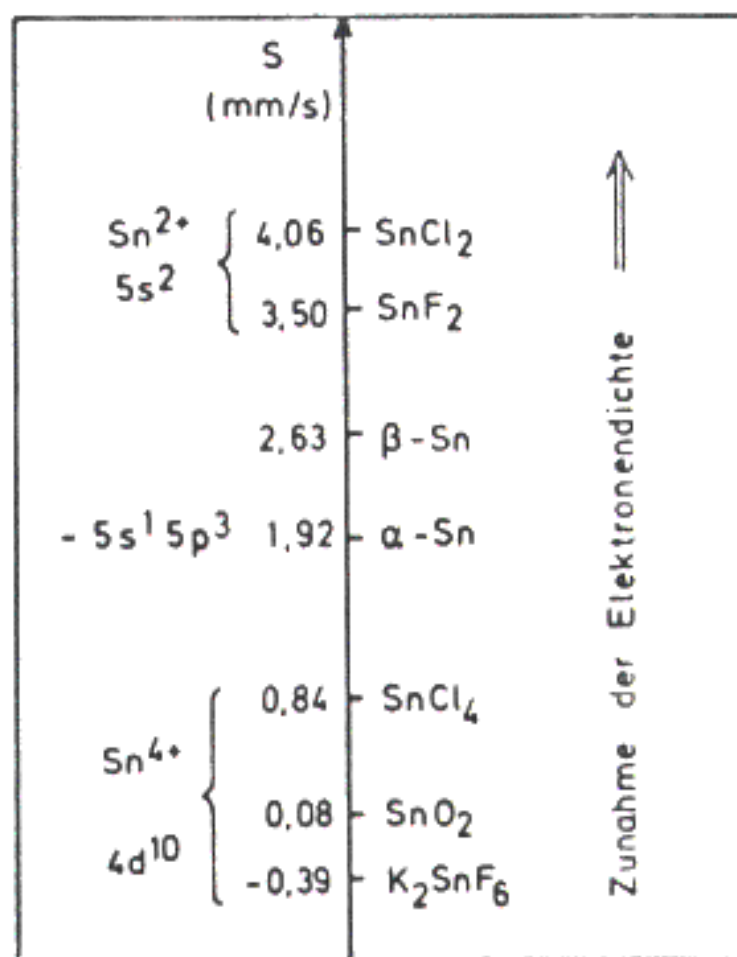


Abb. 4.16:

Isomerieverschiebungen für $\alpha\text{-Sn}$, $\beta\text{-Sn}$ und einigen Zinnverbindungen. Links ist der Ionisationszustand und die Elektronenkonfiguration angegeben. Quelle: BaSnO₃. Nach (FLI 78)

A belső s-elektronokat a 3d-elektronok
leárrnyékolják.

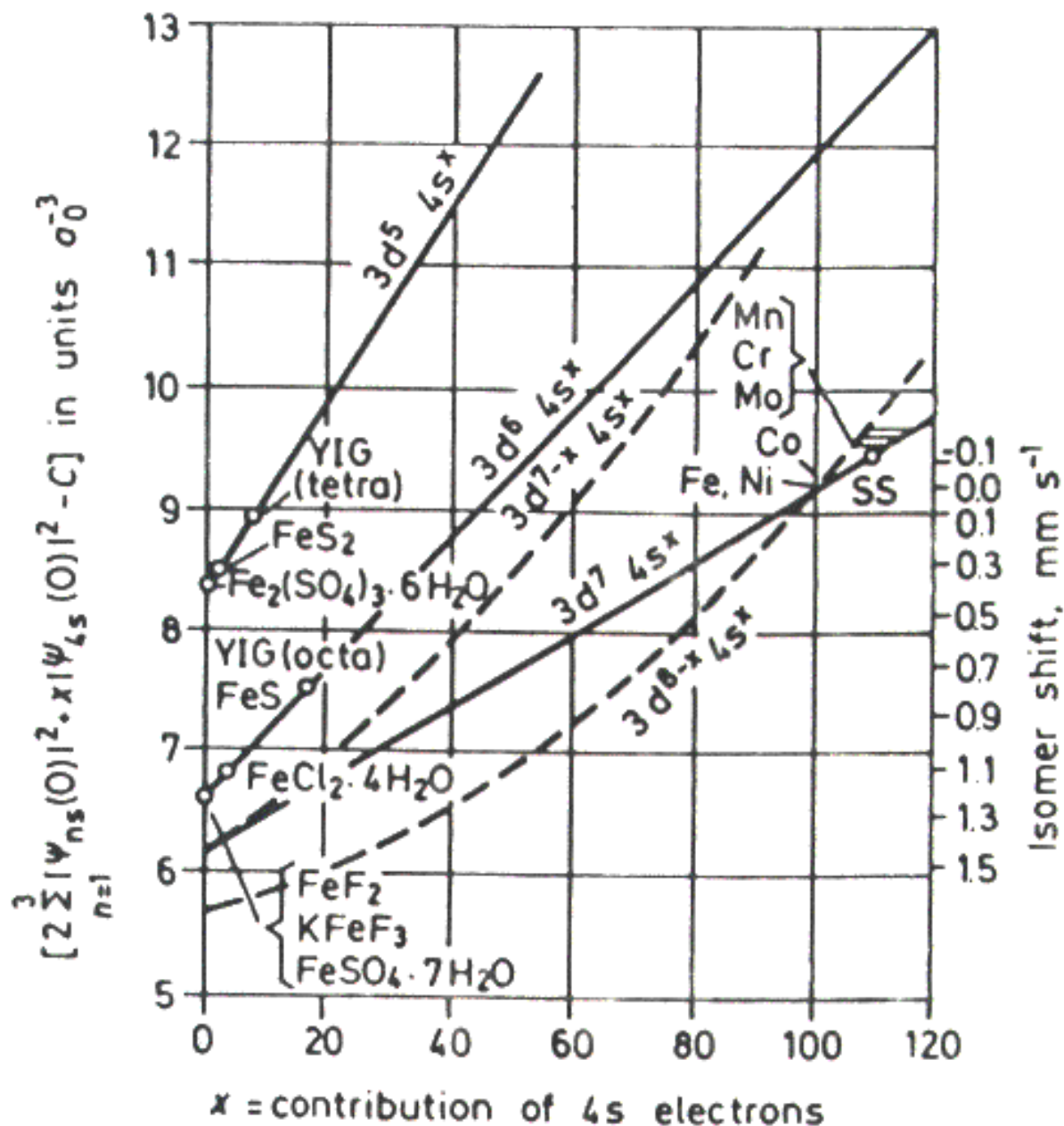
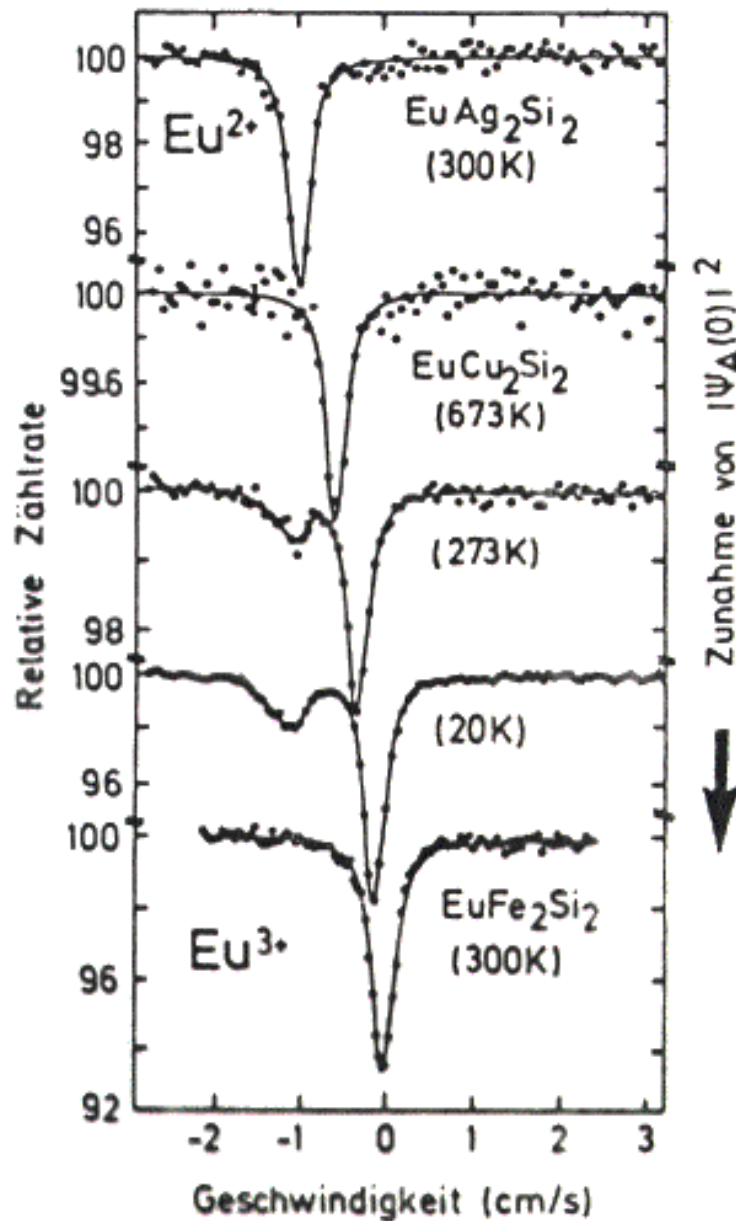


Fig. 1.6. Calibration curves of ^{57}Fe isomer shifts [17]

Die inneren s-Elektronen werden durch
die 3d-Elektronen abgeschirmt.

3. Beispiel: $(4f)^6 \leftrightarrow (4f)^7$ Valenzfluktuation am ^{151}Eu



$(4f)^6 \leftrightarrow (4f)^7$ vegyérték-fluktuáció a ^{151}Eu -n.

Abb. 4.17:

Isomerieverschiebung von ^{151}Eu in EuCu_2Si_2 gegenüber Eu_2O_3 . Zum Vergleich ist im oberen Teil die Isomerieverschiebung von Eu^{2+} in EuAg_2Si_2 und im unteren Teil Eu^{3+} in EuFe_2Si_2 dargestellt (BAU 73)

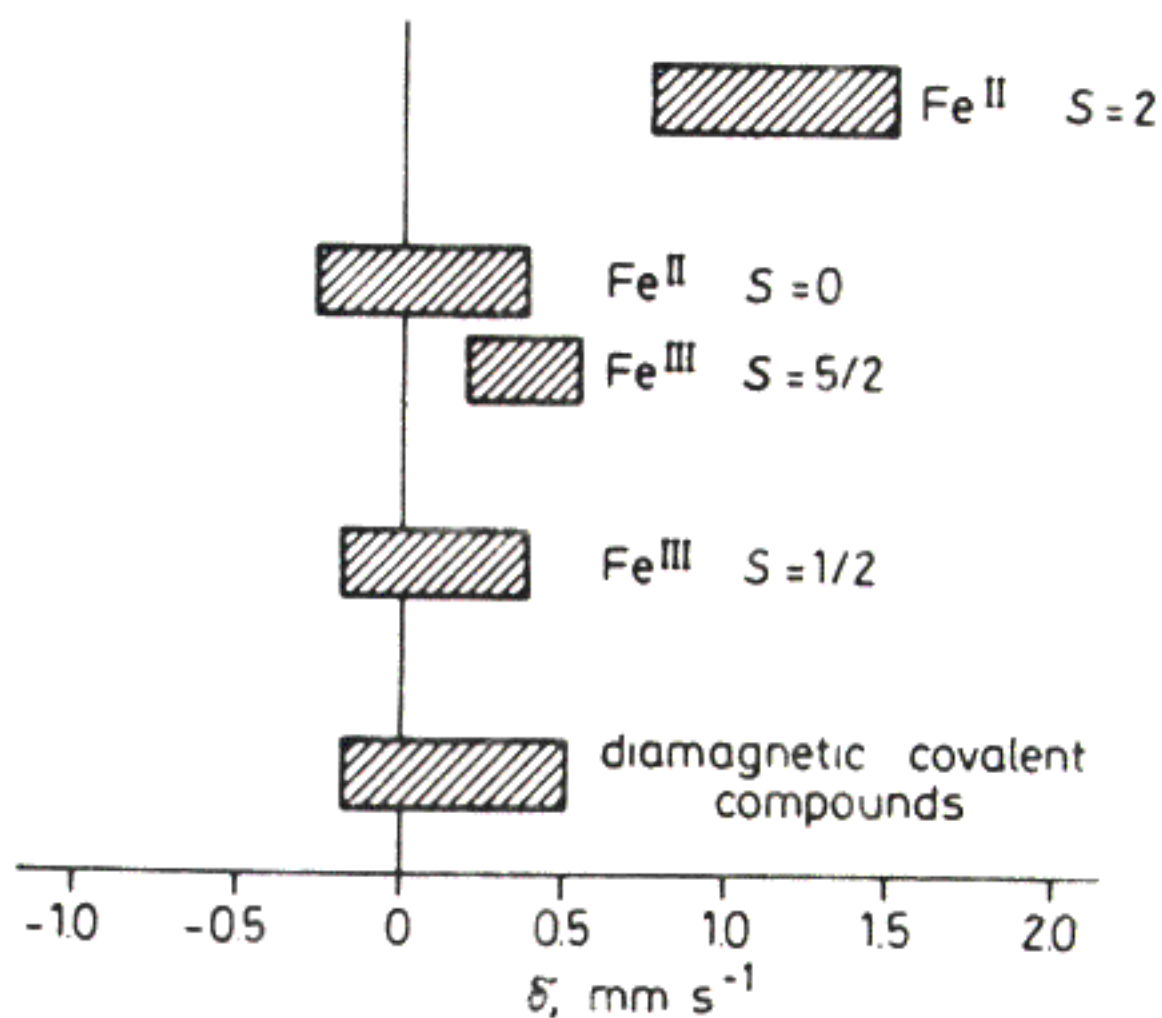


Fig. 1.5. Typical isomer shifts of iron compounds

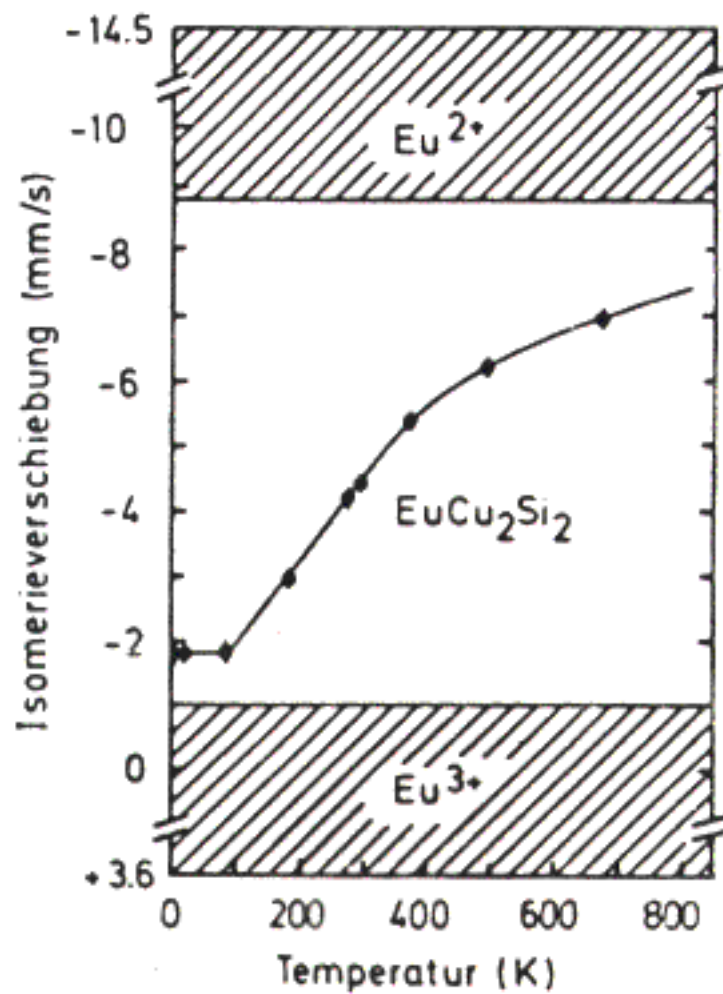


Abb. 4.18:
 Isomerieverschiebung von ^{151}Eu in EuCu_2Si_2 gegenüber Eu_2O_3 als Funktion der Temperatur. Zum Vergleich ist der experimentell gefundene Bereich von Isomerieverschiebungen in Eu^{2+} und Eu^{3+} Verbindungen angegeben (BAU 73)

Kvadrupólus - felhasadás

$$e \rightarrow \pi [A_{\pi\pi}^0]_{\pi\pi}$$

$$\hat{H}_Q = \frac{1}{5\epsilon_0} \sum_{m=2}^2 (-1)^m \hat{T}_{2m} U_{2,-m} = \frac{e}{4} \sum_{m=2}^2 (-1)^m \hat{Q}_{2m} V_{2,-m}$$

$$\langle I M' | \hat{Q}_{2m} | I M'' \rangle = (-1)^{I-M'} \begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M' & m & M'' \end{pmatrix} \langle I || Q_2 || I \rangle$$

$$Q := \langle \text{II} | \hat{Q}_{20} | \text{II} \rangle = \begin{pmatrix} \text{I} & 2 & \text{I} \\ -\text{I} & 0 & \text{I} \end{pmatrix} \langle \text{II} | Q_2 | \text{II} \rangle$$

$$\langle I M' | \hat{Q}_{2m} | I M'' \rangle = (-1)^{I-M'} \frac{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M' & m & M'' \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} Q$$

A 3j-simbólumoktól is meg lehet szabadulni, ha ekvivalens operátorokat vezetünk be:

$$\hat{p}_{20} := \frac{1}{2} (3I_z^2 - I^2)$$

$$\hat{p}_{2\pm 1} := \mp \sqrt{\frac{3}{8}} (\hat{I}_2 \hat{I}_{\pm} + \hat{I}_{\pm} \hat{I}_2)$$

$$\hat{p}_{2\pm 2} := \sqrt{\frac{3}{8}} \hat{I}_{\pm}^2$$

\hat{p}_{2m} másodrendű
szférikus tenzor-operátor

$$\langle IM' | \hat{p}_{2m} | IM' \rangle = (-1)^{I-M'} \begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M' & m & M' \end{pmatrix} \langle I || p_2 || I \rangle$$

$$p := \langle II | \hat{p}_{20} | II \rangle = \begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix} \langle II | p_2 | II \rangle$$

$$\langle I M' | \hat{p}_{2m} | I M'' \rangle = (-1)^{I-M'} \frac{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -M' & m & M'' \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix}} \quad p \downarrow$$

$$\frac{1}{2} (3I^2 - I(I+1))$$