



Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Спецкурсы

**«Физика ядерного гамма-резонанса
в твердом теле»
«Ядерный гамма-резонанс, как метод
исследования твердых тел»**

Русаков Вячеслав Серафимович

Москва - 2024

МАТЕРИАЛЫ К ГЛАВЕ IV. СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ПАРАМЕТРЫ МЕССБАУЭРОВСКОГО СПЕКТРА

Часть 3. Сверхтонкое магнитное дипольное взаимодействие

§8. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

8.1. Магнитный момент ядра

8.2. Гамильтониан магнитного взаимодействия и сверхтонкая структура ядерных уровней

8.3. Интенсивности ядерных переходов

§9. Вклады в эффективное магнитное поле на ядре

9.1. Микроскопические вклады

9.2. Макроскопические вклады

§10. Комбинированное сверхтонкое взаимодействие

§8. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

8.1. Магнитный момент ядра

Представим ядро в виде системы замкнутых электрических токов, создаваемых нуклонами, движущимися в ядре по круговым орбитам радиуса r со скоростью v (импульсом p).

В системе CGS магнитный дипольный момент кругового тока:

$$\boldsymbol{\mu} \equiv \frac{SI}{c} \mathbf{n},$$

где S – площадь поверхности, ограниченной круговым током, I – сила тока, \mathbf{n} – нормаль к поверхности кругового тока.

Орбитальный магнитный момент частицы зарядом q и массой m на круговой орбите:

$$\boldsymbol{\mu}_l \equiv \frac{SI}{c} \mathbf{n} = \frac{\pi r^2 q}{c 2\pi r/v} \mathbf{n} = \frac{q}{2c} [\mathbf{r}\mathbf{v}] = \frac{q}{2mc} [\mathbf{r}\mathbf{p}].$$

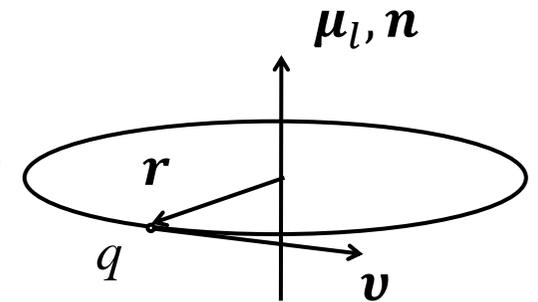
Орбитальный магнитный момент нуклона в ядре:

$$\boldsymbol{\mu}_l = g_l \frac{e}{2m_p c} [\mathbf{r}\mathbf{p}] = g_l \frac{e\hbar}{2m_p c} \cdot \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r}\mathbf{p}] = \underline{g_l \mu_n \frac{1}{\hbar} \mathbf{l}}.$$

Здесь $g_l \equiv \frac{\mu_l/\mu_n}{l/\hbar}$ – **g -фактор** для орбитального движения нуклонов (протонов и нейтронов) в ядре (фактор связи магнитного и механического моментов), причем $g_l^p = 1$ и $g_l^n = 0$,

$$\mu_n \equiv \frac{e\hbar}{2m_p c} \text{ – ядерный магнетон,}$$

$$\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] \text{ – орбитальный момент нуклона.}$$



8.1. Магнитный момент ядра

Введем в рассмотрение в соответствии с определением **оператор момента импульса**:

$$\hat{\mathbf{l}} \equiv \frac{1}{\hbar} [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}].$$

Тогда **оператор орбитального магнитного момента нуклона** будет равен:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = g_l \mu_n \hat{\mathbf{l}}.$$

Кроме орбитального момента нуклоны обладают и собственными моментами количества движения – спинами $\hat{\mathbf{S}}$ со спиновыми квантовыми числами $s_p = s_n = 1/2$.

Следовательно, они обладают и **спиновым магнитным моментом** $\boldsymbol{\mu}_s$, оператор которого равен:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = g_s \mu_n \hat{\mathbf{S}}.$$

При этом **g -факторы** нуклонов разные и отличаются от единицы:

$$g_s^p = 5.585,$$

$$g_s^n = 3.826.$$

Таким образом, оператор магнитного момента ядра $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ будет равен:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_n (g_s^p \sum_{i(p)} \hat{\mathbf{s}}_i^p + g_l^p \sum_{i(p)} \hat{\mathbf{l}}_i^p + g_s^n \sum_{i(n)} \hat{\mathbf{s}}_i^n + g_l^n \sum_{i(n)} \hat{\mathbf{l}}_i^n).$$

8.1. Магнитный момент ядра

Вследствие различия орбитального и спинового g -факторов нуклонов направление вектора магнитного момента ядра

$$\hat{\mu} = \mu_n (g_s^p \sum_{i(p)} \hat{s}_i^p + g_l^p \sum_{i(p)} \hat{l}_i^p + g_s^n \sum_{i(n)} \hat{s}_i^n + g_l^n \sum_{i(n)} \hat{l}_i^n)$$

не совпадает с направлением вектора полного момента количества движения (спина) ядра J , которому соответствует оператор

$$\hat{J} = \sum_{i(p)} \hat{s}_i^p + \sum_{i(p)} \hat{l}_i^p + \sum_{i(n)} \hat{s}_i^n + \sum_{i(n)} \hat{l}_i^n.$$

Поскольку J , J_z и μ_J , μ_z – интегралы движения, можно представить себе, что магнитный момент ядра μ с большой частотой, определяемой внутриядерными взаимодействиями, прецессирует вокруг спина J .

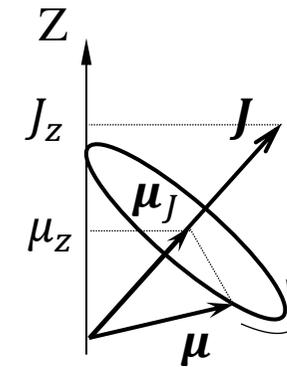
В эксперименте мы имеем дело с **составляющей μ_J магнитного момента μ вдоль спина ядра J** , для которой оператор равен:

$$\hat{\mu}_J = g\mu_n \hat{J},$$

где g – g -фактор ядра в данном его состоянии.

Введем в рассмотрение оператор проекции магнитного момента μ_J на ось квантования Z :

$$\hat{\mu}_z = g\mu_n \hat{J}_z.$$



Векторная модель ядра

8.1. Магнитный момент ядра

В квантовой механике величина μ магнитного момента ядра μ определяется как наблюдаемая величина проекции магнитного момента ядра на ось квантования в состоянии Ψ_{J,m_J} с максимальным магнитным квантовым числом проекции момента $m_J = J$, которая задается диагональным матричным элементом оператора проекции магнитного момента:

$$\underline{\mu} \equiv \langle \Psi_{J,J} | \hat{\mu}_z | \Psi_{J,J} \rangle = \langle \Psi_{J,J} | g\mu_n \hat{J}_z | \Psi_{J,J} \rangle = g\mu_n \langle \Psi_{J,J} | \hat{J}_z | \Psi_{J,J} \rangle = \underline{g\mu_n J}.$$

Вследствие инвариантности ядерных сил относительно обращения времени или относительно зеркального отражения пространства **все статические электрические моменты нечетного порядка и магнитные моменты четного порядка обращаются в нуль.**

Ядерные магнитные характеристики изотопов ^{57}Fe , ^{119}Sn и ^{151}Eu в основном (ground) и возбужденном (excite) состояниях.

Изотоп	Состояние	J	g	μ, μ_n
^{57}Fe	excite	3/2	-0.10353(3)	-0.15532(4)
	ground	1/2	+0.18121(2)	+0.090604(9)
^{119}Sn	excite	3/2	+0.422(12)	+0.633(18)
	ground	1/2	-2.0922(6)	-1.0461(3)
^{151}Eu	excite	7/2	+0.7403(6)	+2.591(2)
	ground	5/2	+1.3887(3)	+3.4717(6)

Вследствие квантовой природы спина атом или ядро со спином J не может иметь мультипольных (порядка 2^n ; $n = 0, 1, 2, \dots$) электрических и магнитных моментов более высокого порядка, чем $n = 2J$.

8.2. Гамильтониан магнитного взаимодействия и сверхтонкая структура ядерных уровней

В классической электродинамике энергия взаимодействия магнитного момента μ с внешним постоянным магнитным полем H равна:

$$E_m = -\mu \cdot H.$$

Следовательно, гамильтониан сверхтонкого магнитного взаимодействия ядра с внешним полем H_n можно записать как

$$\hat{H}_m = -\hat{\mu}_J \cdot \hat{H}_n = -g\mu_n \hat{J} \cdot \hat{H}_n.$$

При выборе оси квантования Z вдоль направления внешнего поля H_n ($Z \uparrow H_n$):

$$\hat{H}_m = -g\mu_n \hat{J}_z \hat{H}_n$$

и собственные значения гамильтониана \hat{H}_m , определяющие дополнительную энергию ядра во внешнем магнитном поле в состоянии Ψ_{J,m_J} , равны:

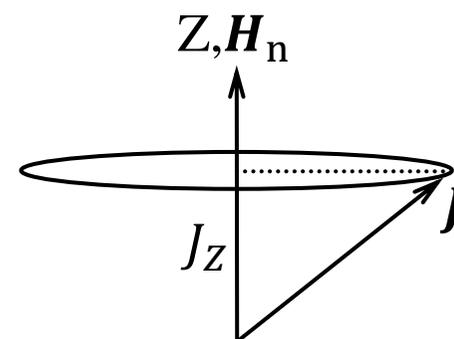
$$E_m = \langle \Psi_{J,m_J} | \hat{H}_m | \Psi_{J,m_J} \rangle = -g\mu_n m_J H_n$$

Магнитное дипольное взаимодействие полностью снимает вырождение ядерного энергетического уровня по магнитному квантовому числу (проекции спина) m_J .

Уровень расщепляется на $2J + 1$ эквидистантных подуровня, разделенных интервалом:

$$\Delta E_m = -g\mu_n H_n,$$

где: $g\mu_n H_n$ — константа сверхтонкого магнитного дипольного взаимодействия для данного уровня.



8.2. Гамильтониан магнитного взаимодействия и сверхтонкая структура ядерных уровней

Правила отбора – следствие закона сохранения проекции момента импульса для системы ядро + γ -квант:

$$\Delta t_J \equiv t_J^{\text{ex}} - t_J^{\text{gr}} = M = 0, \pm 1, \dots, \pm L,$$

M – магнитное квантовое число и L – угловой момент излучения (для излучения M1 $L = 1$).

Для уровней с $J_{\text{gr}} = 1/2$ и $J_{\text{ex}} = 3/2$ возможны из восьми только шесть переходов (см. рис.).

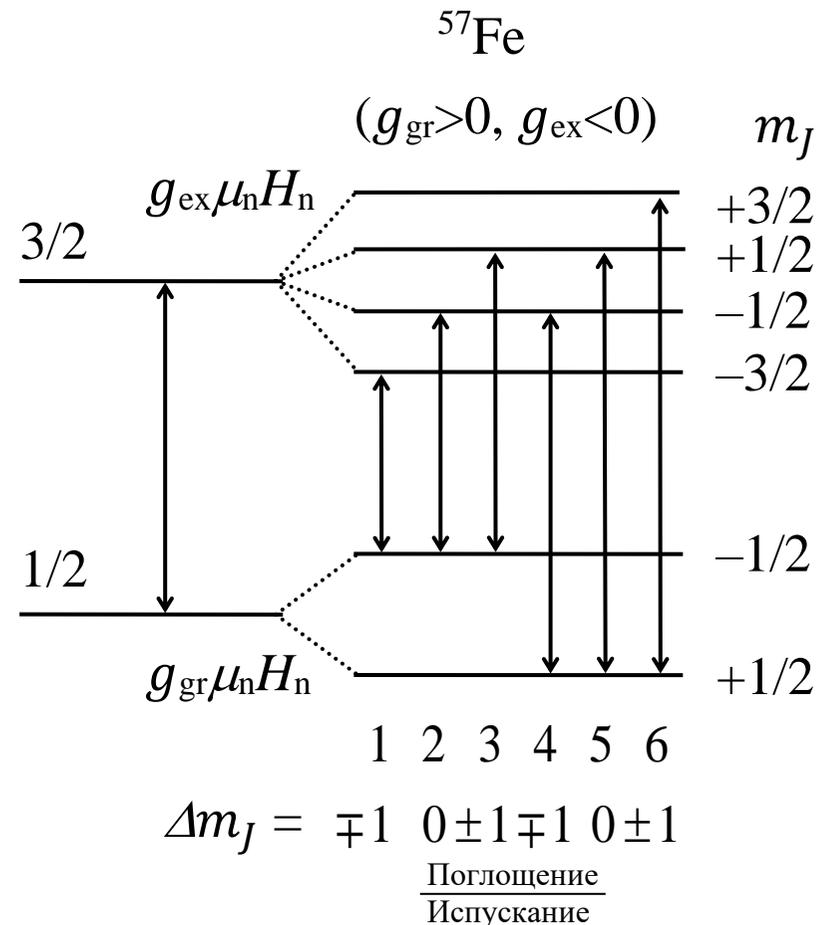
По отношению к оси квантования (направлению магнитного поля \mathbf{H}_n) излучение, соответствующее различным переходам, поляризовано в плоскости, перпендикулярной волновому вектору \mathbf{k}_γ , по-разному:

$\Delta t_J = M = +1$ – циркулярно право-поляризованное излучение (π) ($\perp \mathbf{k}_\gamma$);

$\Delta t_J = M = -1$ – циркулярно лево-поляризованное излучение (π) ($\perp \mathbf{k}_\gamma$);

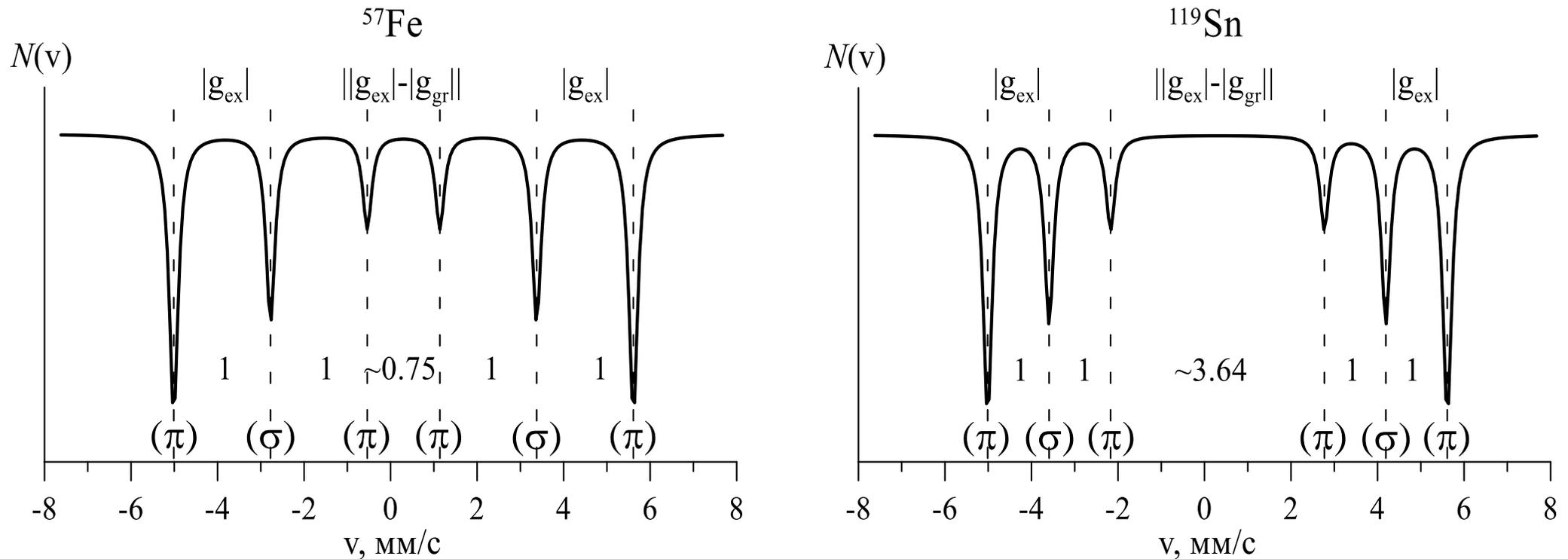
$\Delta t_J = M = 0$ – линейно поляризованное излучение (σ) ($\perp \mathbf{k}_\gamma$ и в плоскости оси квантования Z и \mathbf{k}_γ).

Магнитное расщепление ядерных уровней и межуровневые переходы для ядер ^{57}Fe .



8.2. Гамильтониан магнитного взаимодействия и сверхтонкая структура ядерных уровней

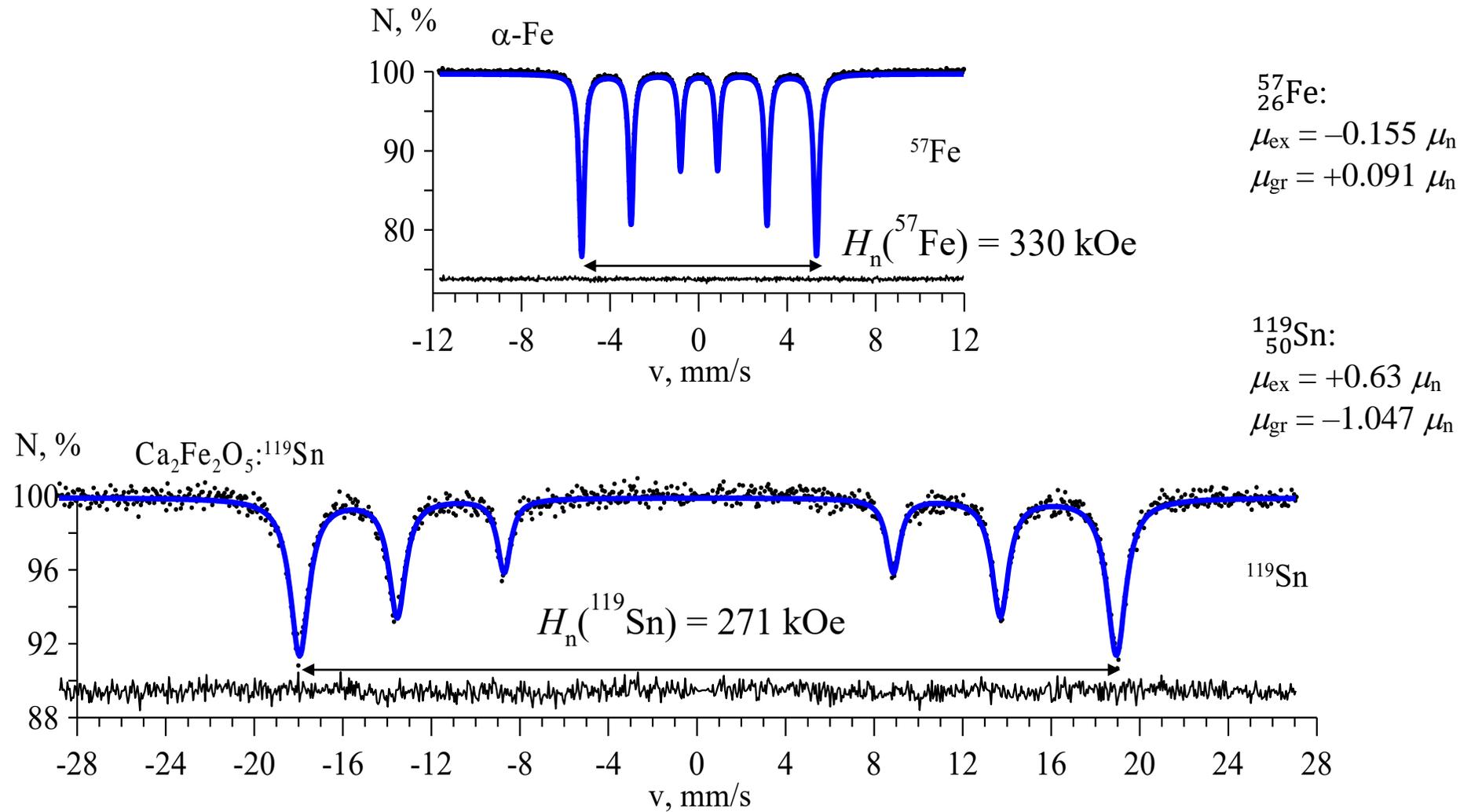
В случае сверхтонкого магнитного дипольного взаимодействия для уровней со спинами $J_{gr} = 1/2$ и $J_{ex} = 3/2$ мессбауэровский спектр представляет собой **зеэмановский секстет** с парно равными интенсивностями компонент.



Мессбауэровские спектры ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn при наличии магнитного дипольного взаимодействия.

§8. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

Примеры реальных экспериментальных спектров



§8. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

8.3. Интенсивности ядерных переходов

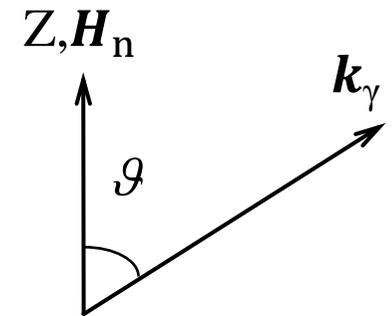
Относительные интенсивности переходов $I_{\text{ex} \rightarrow \text{gr}}$ между соответствующими подуровнями основного и возбужденного состояний (и относительные интенсивности компонент магнитной сверхтонкой структуры мессбауэровского спектра) определяются квадратом модуля соответствующих матричных элементов оператора $\hat{H}(\mathbf{A})$ взаимодействия ядра с полем излучения:

$$I_{\text{ex} \rightarrow \text{gr}} \propto \left| \left\langle \Psi_{J^{\text{ex}}, m_J^{\text{ex}}} \left| \hat{H}(\mathbf{A}) \right| \Psi_{J^{\text{gr}}, m_J^{\text{gr}}} \right\rangle \right|^2.$$

Эти интенсивности по-разному зависят от угла ϑ между волновым вектором γ -кванта \mathbf{k}_γ и осью квантования Z , направленного вдоль поля \mathbf{H}_n .

При магнитном дипольном излучении (и поглощении) M1 с уровня $J = 3/2$ на уровень $J = 1/2$ в отсутствие электрического квадрупольного взаимодействия или в случае аксиально-симметричного неоднородного электрического поля ($\eta = 0$) имеем:

$$\begin{aligned} I_{\pm 3/2 \rightarrow \pm 1/2}(\vartheta) : I_{\pm 1/2 \rightarrow \pm 1/2}(\vartheta) : I_{\pm 1/2 \rightarrow \mp 1/2}(\vartheta) &= \\ &= \underline{I_{1,6}(\vartheta) : I_{2,5}(\vartheta) : I_{3,4}(\vartheta)} = \\ &= \underline{3(1 + \cos^2 \vartheta) : 4(1 - \cos^2 \vartheta) : (1 + \cos^2 \vartheta)}. \end{aligned}$$

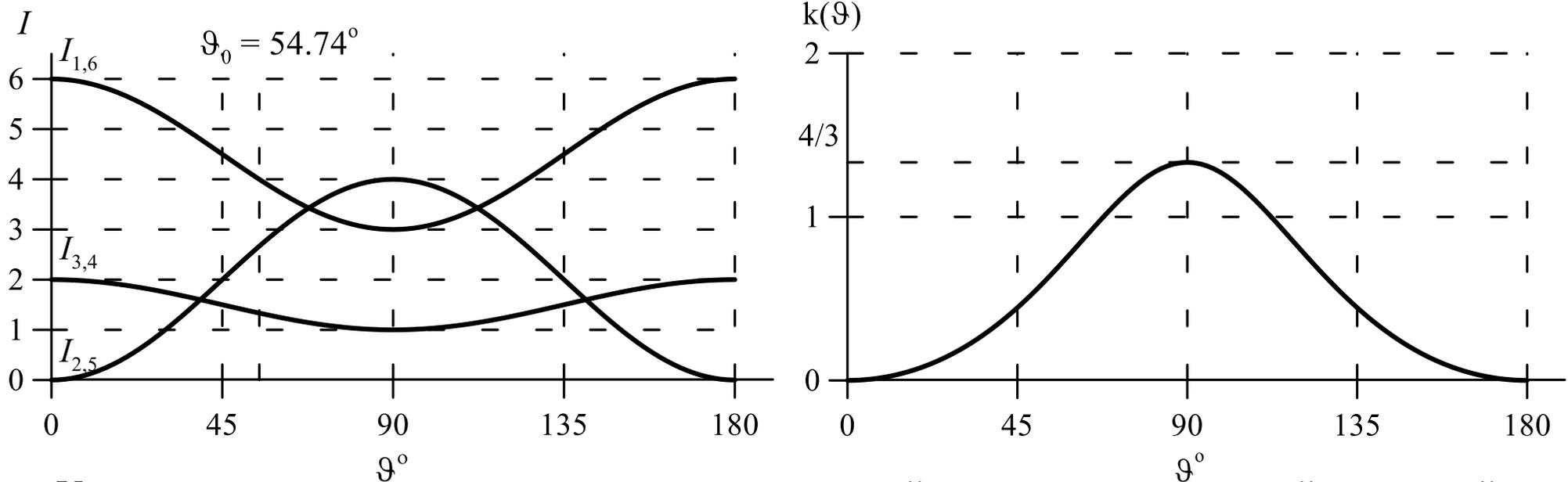


§8. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

8.3. Интенсивности ядерных переходов

Соотношение интенсивностей компонент сверхтонкой структуры дают информацию о направлении сверхтонкого магнитного (эффективного) поля \mathbf{H}_n .

Отношение интенсивностей $k(\vartheta) \equiv I_{2,5}/I_{1,6} = 4/3(1 - \cos^2 \vartheta)/(1 + \cos^2 \vartheta)$ – удобный параметр для определения ориентации сверхтонкого поля \mathbf{H}_n относительно направления волнового вектора γ -кванта k_γ : $\bar{\vartheta} = \arccos(\sqrt{(4 - 3k)/(4 + 3k)})$



Угловые зависимости относительных интенсивностей компонент сверхтонкой магнитной структуры мессбауэровского спектра (случай ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn).

§8. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

8.3. Интенсивности ядерных переходов

Вид мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe , соответствующих различным значениям угла ϑ между волновым вектором γ -кванта k_γ и эффективным магнитным полем H_n .

При значениях $\vartheta = 0^\circ, 45^\circ$ и 90° :

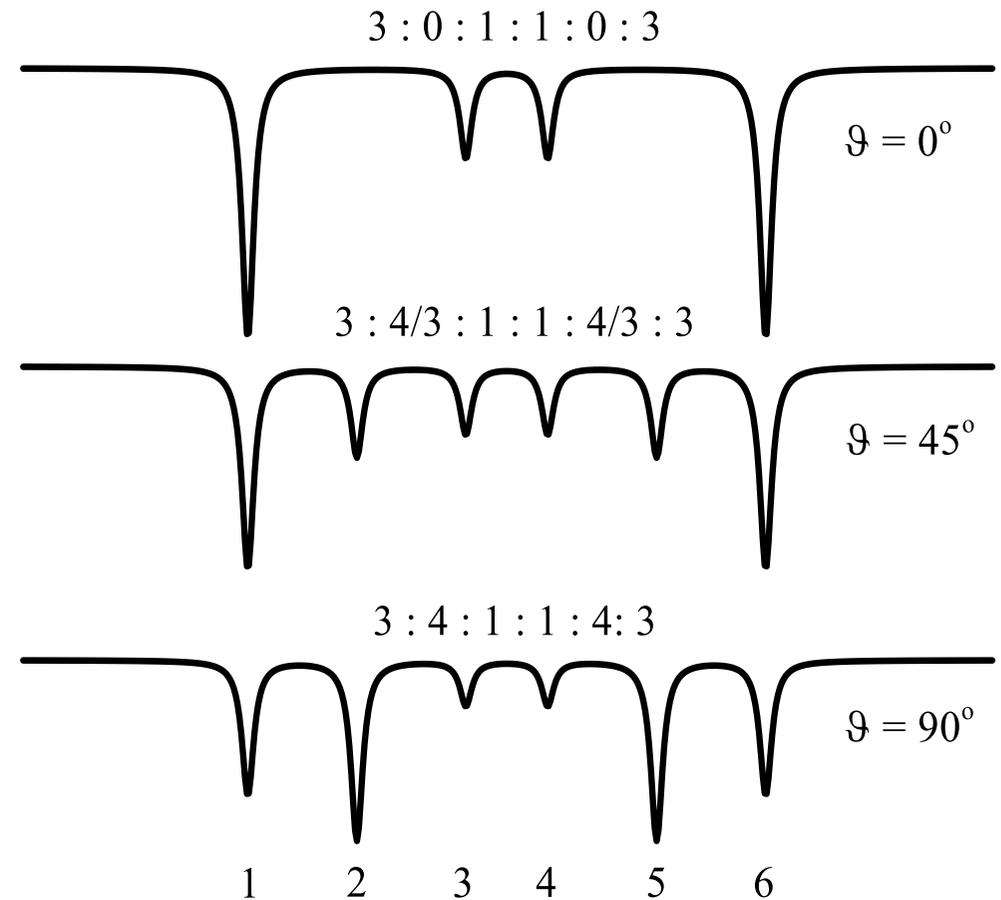
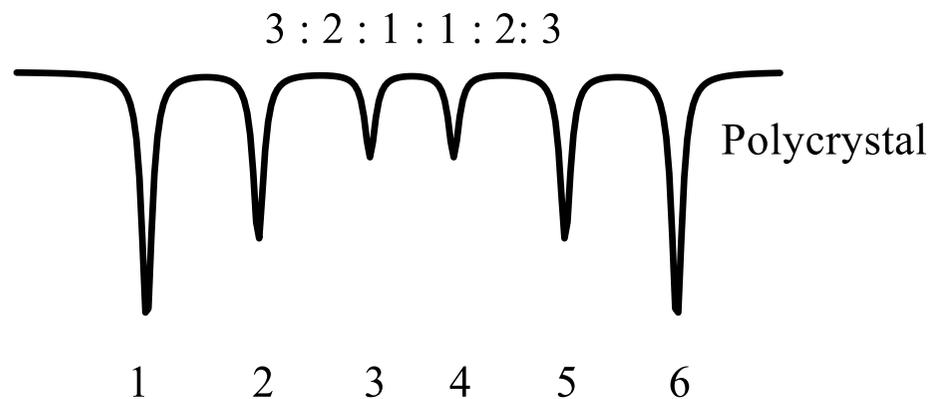
$$I_{1,6}(0^\circ) : I_{2,5}(0^\circ) : I_{3,4}(0^\circ) = 3 : 0 : 1,$$

$$I_{1,6}(45^\circ) : I_{2,5}(45^\circ) : I_{3,4}(45^\circ) = 3 : 4/3 : 1,$$

$$I_{1,6}(90^\circ) : I_{2,5}(90^\circ) : I_{3,4}(90^\circ) = 3 : 4 : 1.$$

В случае поликристалла в отсутствие эффекта Гольданского-Карягина:

$$\underline{I_1 : I_2 : I_3 : I_4 : I_5 : I_6 = 3 : 2 : 1 : 1 : 2 : 3.}$$



§9. Эффективное магнитное поле на ядре

9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

$$H_n = H_{\text{микро}} + H_{\text{макро}} = \underbrace{H_{\text{Fermi}} + H_L + H_S + H_{\text{ce}}}_{\text{микроскопические вклады от электр. оболочки и электронов проводимости}} + \underbrace{H_{\text{dip}} + \overbrace{H_{\text{Lor}} + H_{\text{dem}} + H_0}^{\text{локальное поле}}}_{\text{макроскопические вклады}}$$

В соответствии с механизмами сверхтонких магнитных взаимодействий всего четыре основных микроскопических вклада:

- H_{Fermi} – поле, обусловленное контактным взаимодействием Ферми с локализованными на ядре s -электронами (с учетом релятивистских эффектов и вклад от p -электронов) собственного атома; для ядер ^{57}Fe он является основным вкладом;
- H_L – поле, создаваемое суммарным орбитальным моментом L электронов, принадлежащих мессбауэровскому атому;
- H_S – поле, создаваемое результирующим спином S электронов электронной оболочки атома, которому принадлежит мессбауэровское ядро;
- H_{ce} – поле, обусловленное контактным взаимодействием Ферми ядра с электронами проводимости.

9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Фермиевский вклад H_{Fermi}

Контактное взаимодействие Ферми описывается сверхтонким полем Ферми:

$$\begin{aligned} \underline{H_{\text{Fermi}}} &= -\frac{8\pi}{3} \mu_B \sum_n (|\psi_{ns}^{\uparrow}(0)|^2 - |\psi_{ns}^{\downarrow}(0)|^2) \mathbf{i} = \\ &= -\frac{8\pi}{3} \mu_B \sum_n (\rho_{ns}^{\uparrow}(0) - \rho_{ns}^{\downarrow}(0)) \mathbf{i} = \underline{-\frac{8\pi}{3} \mu_B \sum_n \Delta\rho_{ns}^{\uparrow\downarrow}(0) \mathbf{i}}, \end{aligned}$$

$\rho_{ns}^{\uparrow}(0)$ и $\rho_{ns}^{\downarrow}(0)$ – плотности s-электронов атома на ns -оболочке со спином "вверх" и "вниз" соответственно;

$\sum_n \Delta\rho_{ns}^{\uparrow\downarrow}(0) = \sum_n (\rho_{ns}^{\uparrow}(0) - \rho_{ns}^{\downarrow}(0))$ – **спиновая плотность в области расположения ядра.**

Спаренные s-электроны с противоположно направленными спинами взаимно компенсируют друг друга $\Delta\rho_{ns}^{\uparrow\downarrow}(0) = 0$ и дают нулевой вклад в сверхтонкое поле.

Однако происходит **поляризация** внутренних s-электронов ионного остова, **вызванная результирующим спином d-электронов.**

Вследствие обменного взаимодействия d-электронов (электронов в незаполненной оболочке с не скомпенсированным спином S) с s-электронами происходит деформация электронных облаков в первую очередь внутренних по отношению к d-электронам s-электронов.

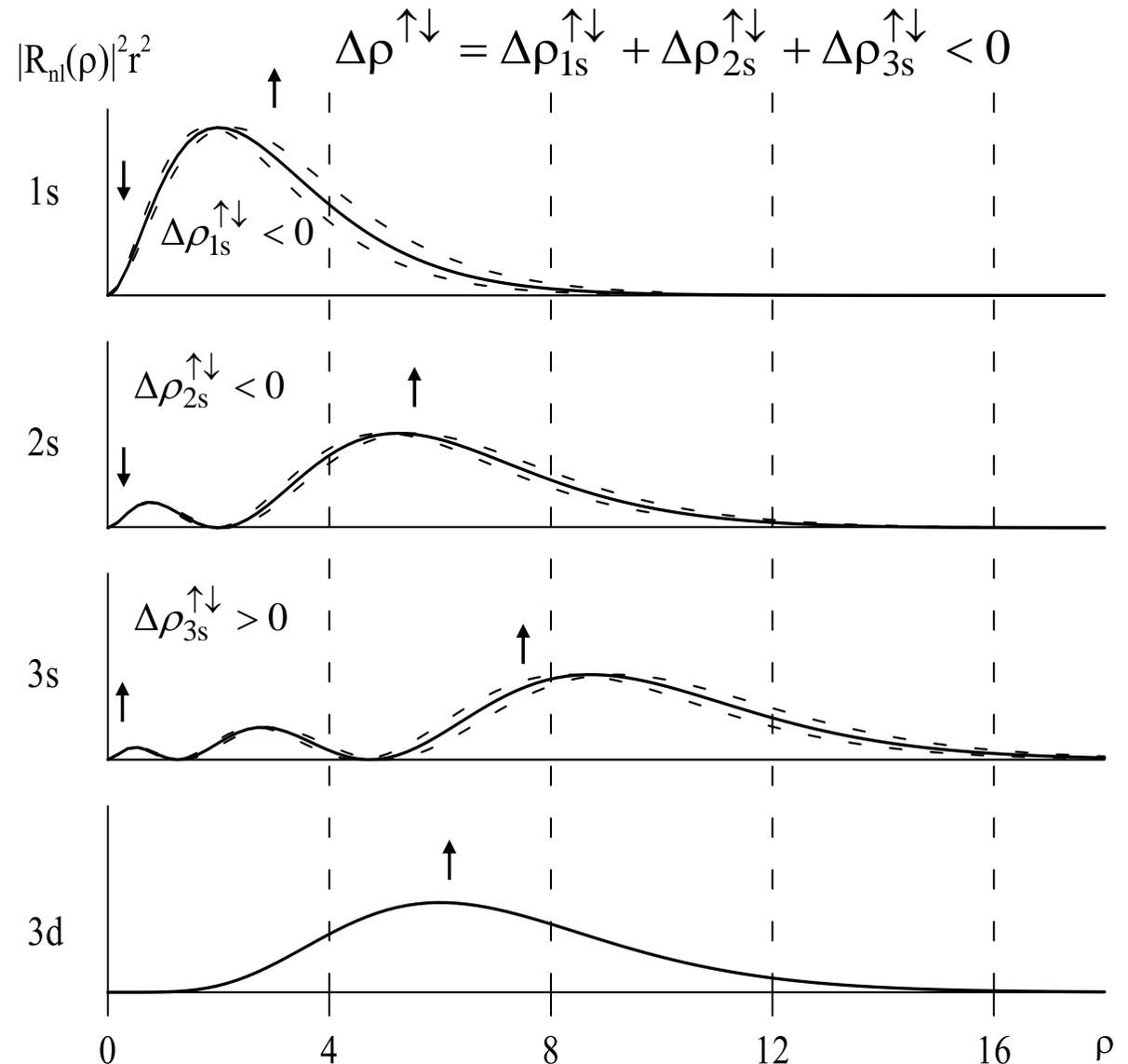
9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Фермиевский вклад H_{Fermi}

При параллельных спинах электронов между ними возникает **эф-фективное притяжение**, а при антипараллельных – отталкивание.

Полное изменение спиновой плотности всегда отрицательное! (направление суммарного спина s-электронов в области расположения ядра противоположно спину d-оболочки)

Изменение спиновой плотности s-электронов из-за обменного взаимодействия s-электронов с d-электронами атомов железа.



9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Фермиевский вклад H_{Fermi}

Направление вклада H_{Fermi} по отношению к μ_d .

Направление H_{Fermi} всегда сонаправлено спину 3d-оболочки S и противоположно направлено собственному магнитному моменту атома μ_d , определяемому этим спином.

Результирующее поле Ферми H_{Fermi} , как показывают расчеты, равно разности больших величин и весьма чувствительно к ионному окружению. Поэтому ошибка в расчетах может быть большой.

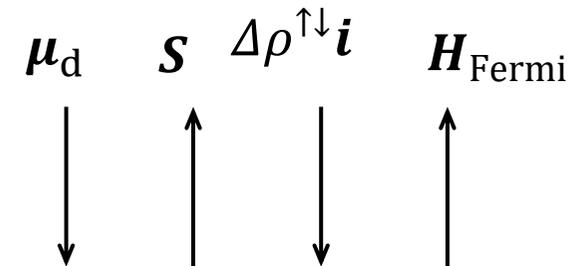
Оценка вклада: $H_{\text{Fermi}} \cong p \cdot 100$ кЭ.

В соответствии с теоретическими расчетами вклад H_{Fermi} пропорционален величине магнитного момента 3d-оболочки атома железа:

$H_{\text{Fermi}} = -k\mu_{\text{Fe}}$ с коэффициентом $k \cong 126$ кЭ/ μ_B .

Во многих случаях для ядер ^{57}Fe фермиевский вклад является основным и обеспечивает практически пропорциональную зависимость величины сверхтонкого поля H_n на ядре от магнитного момента d-оболочки μ_{Fe} : $H_n = -k\mu_{\text{Fe}}$.

В то же время, для кристаллических и аморфных сплавов редкая земля – железо обычно используется коэффициент пропорциональности $k \cong 145$ кЭ/ μ_B .



9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Орбитальный вклад H_L

В соответствии с классической теорией электромагнетизма электрон с зарядом $q_i = -e$ и массой m_e , движущийся со скоростью \mathbf{v}_i в точке с радиус-вектором \mathbf{r}_i относительно ядра, создает на ядре поле (в системе CGS):

$$\mathbf{H}_{l_i} = \frac{q_i}{c} \cdot \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i]}{r_i^3} = -\frac{e}{m_e c} \cdot \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i]}{r_i^3}.$$

Соответствующий ему оператор:

$$\hat{\mathbf{H}}_{l_i} = -\frac{e\hbar}{m_e c} \cdot \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3} = -2\mu_B \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3}.$$

Здесь $\hat{\mathbf{l}}_i$ – оператор орбитального момента электрона, $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e c} \cong 9.27 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл – магнетон Бора.

Наблюдаемое поле от орбитального движения i -го электрона в квантово-механической записи в случае центрально-симметричного поля электронного остова атома на орбитали $n_i l_i m_i$ равно матричному элементу:

$$\mathbf{H}_{l_i} = -2\mu_B \langle \Psi_{n_i l_i m_i} | \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3} | \Psi_{n_i l_i m_i} \rangle = -2\mu_B \langle R_{n_i l_i} | r_i^{-3} | R_{n_i l_i} \rangle \langle Y_{l_i m_i} | \hat{\mathbf{l}}_i | Y_{l_i m_i} \rangle = -2\mu_B \langle r_i^{-3} \rangle_{n_i l_i} \left\langle \hat{\mathbf{l}}_i \right\rangle_{l_i m_i}.$$

9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Орбитальный вклад H_L

Наблюдаемое поле от орбитального движения всех электронов с одной оболочки nl :

$$\underline{H_L} = \sum_i H_{l_i} = -2\mu_B \sum_i \langle r_i^{-3} \rangle_{n_i l_i} \langle \hat{l}_i \rangle_{l_i m_i} = -2\mu_B \langle r_i^{-3} \rangle_{nl} \sum_i \langle \hat{l}_i \rangle_{l m_i} = \underline{-2\mu_B \langle r_i^{-3} \rangle_{nl} \langle L \rangle},$$

где $\langle L \rangle = \sum_i \langle \hat{l}_i \rangle_{l m_i}$ – среднее значение полного орбитального момента электронной оболочки атома.

Как видим, орбитальный момент электронов L дает вклад в сверхтонкое поле только в том случае, если сумма средних значений моментов \hat{l}_i отлична от нуля.

В результате расщепления энергетических уровней иона железа в электрическом кристаллическом поле (см. далее рис.) среднее значение каждой компоненты орбитального момента электрона в каждом орбитальном состоянии равно нулю и, следовательно, орбитальный вклад равен нулю.

В этом случае говорят, что орбитальный момент "заморожен".

Описание электронной конфигурации атома

Водородоподобный атом

Полярные диаграммы атомных орбиталей: от начала координат в направлении, задаваемом углами ϑ и φ , выбирается точка на расстоянии, пропорциональном модулю угловой части волновой функции $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|$ (или их линейной комбинации).

Вещественные линейные комбинации угловых частей $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ волновых функций (s-, p- и d-орбитали; см. рисунок):

$$s = Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}};$$

$$p_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1-1}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\sqrt{3}\sin\vartheta\cos\varphi;$$

$$p_y = -\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1-1}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\sqrt{3}\sin\vartheta\sin\varphi;$$

$$p_z = Y_{10} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\sqrt{3}\cos\vartheta;$$

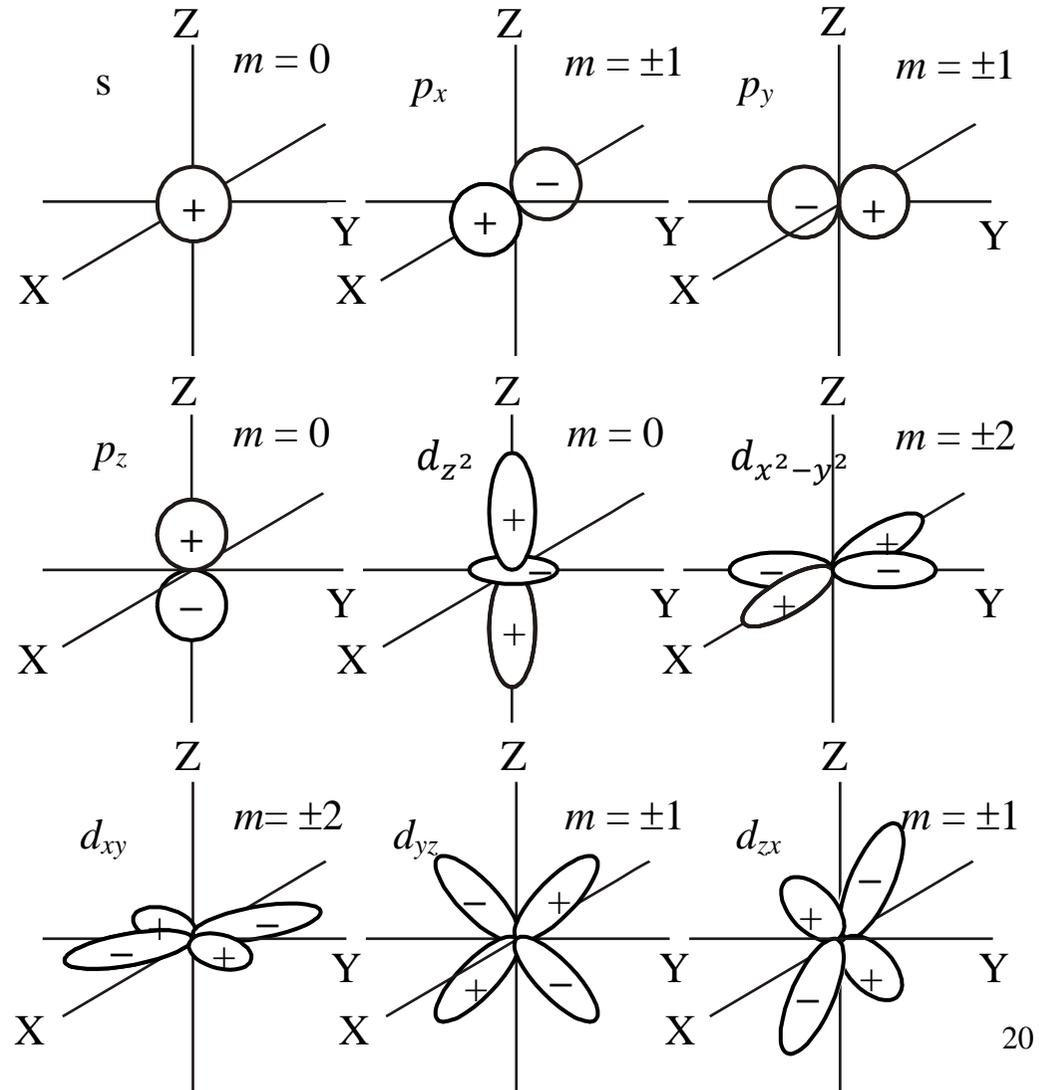
$$d_{z^2} = Y_{20} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{5}}{2}(3\cos^2\vartheta - 1);$$

$$d_{x^2-y^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{2}\sin^2\vartheta\cos 2\varphi;$$

$$d_{xy} = -\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{22} - Y_{2-2}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{2}\sin^2\vartheta\sin 2\varphi;$$

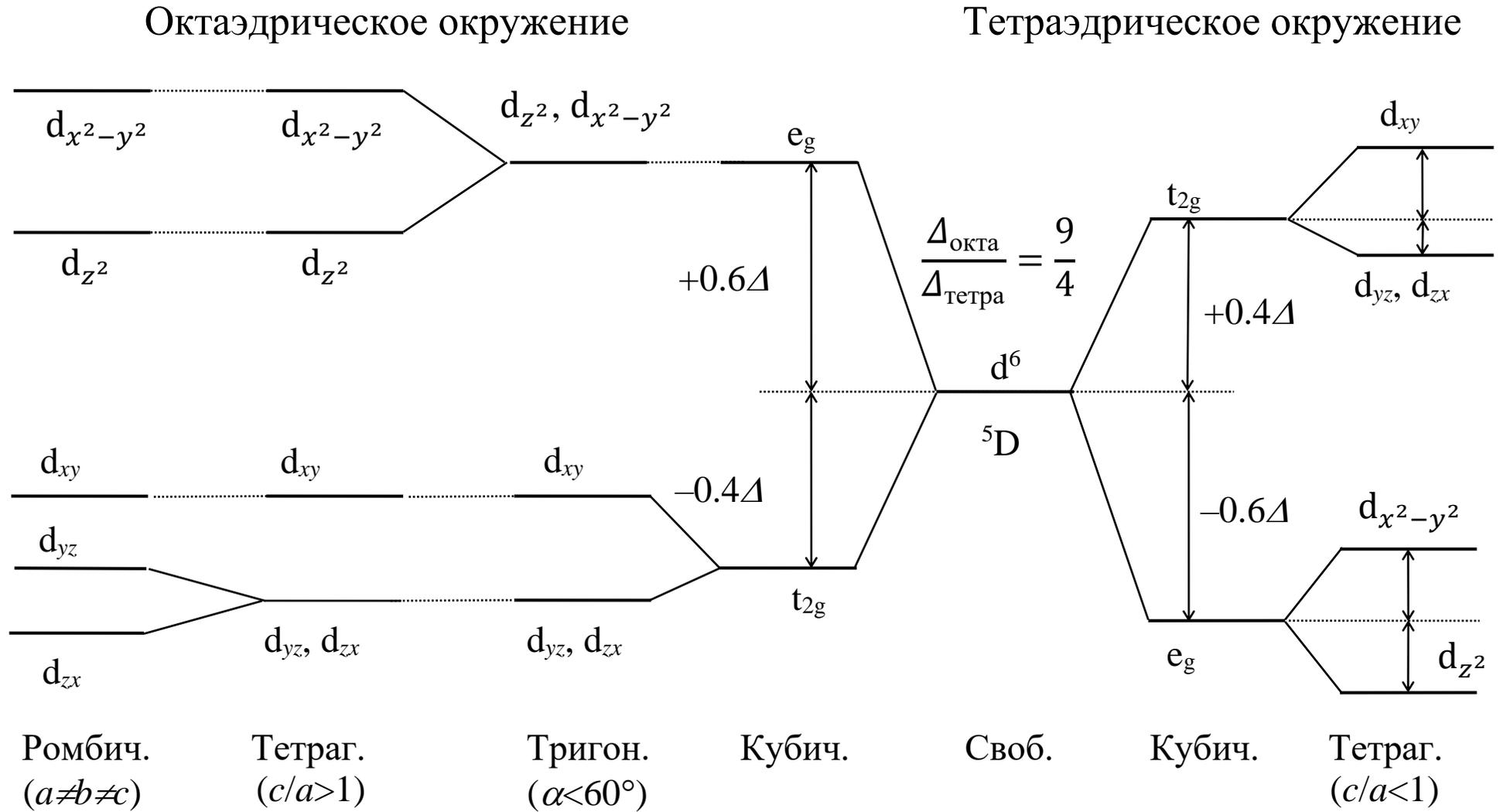
$$d_{yz} = -\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{21} - Y_{2-1}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{2}\sin 2\vartheta\sin\varphi;$$

$$d_{zx} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{21} + Y_{2-1}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{2}\sin 2\vartheta\cos\varphi.$$



Источники неоднородного электрического поля

Валентные электроны



Расщепление уровня одного d-электрона в кристаллических полях различной симметрии.

9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Орбитальный вклад H_L

Однако, в результате спин-орбитального взаимодействия наблюдается некоторое изменение орбитального движения электронов, что приводит к "размораживанию" небольшой части орбитального момента, имеющей порядок отношения постоянной спин-орбитальной связи λ ($\hat{H}_{LS} = \lambda \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$) к параметру расщепления Δ в кристаллическом поле – λ/Δ .

Изменение движения электронов, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием, можно представить себе как электрический ток, наводимый спином в электронной оболочке иона. Такой "наведенный орбитальный момент" вносит определенный вклад в эффективное поле в области расположения ядра

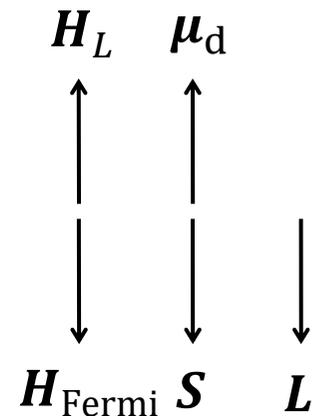
Направление вклада по отношению к H_{Fermi} .

При сонаправленности спина \mathbf{S} и орбитального момента \mathbf{L} (согласно **правилам Хунда** для оболочек, заполненных более чем на половину) орбитальный вклад противоположно направлен основному вкладу Ферми и наоборот.

Оценка вклада H_L :

$$H_L = -2\mu_B \langle r^{-3} \rangle_{nl} \langle \mathbf{L} \rangle \cong -2 \cdot 9.3 \cdot 10^{-21} \cdot a_0^{-3} \langle \mathbf{L} \rangle = -126 \text{ кЭ} \cdot \langle \mathbf{L} \rangle;$$

$$H_L \cong \underline{p \cdot 10 \text{ кЭ}}.$$



9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Спиновый вклад H_S

Для одного i -го электрона со спином s_i магнитный момент равен

$$\boldsymbol{\mu}_{s_i} = g_s \mu_B \mathbf{s}_i = -2\mu_B \mathbf{s}_i \quad (g_s = -2 - g\text{-фактор спина электрона}).$$

Этот момент создает в области расположения ядра магнитное поле:

$$\mathbf{H}_{s_i} = \frac{3\mathbf{r}_i(\boldsymbol{\mu}_{s_i} \mathbf{r}_i) - \boldsymbol{\mu}_{s_i} r_i^2}{r_i^5} = -2\mu_B \frac{3\mathbf{r}_i(s_i \mathbf{r}_i) - s_i r_i^2}{r_i^5}.$$

Для совокупности электронов:

$$\mathbf{H}_S = \sum_i \mathbf{H}_{s_i} = -2\mu_B \sum_i \frac{3\mathbf{r}_i(s_i \mathbf{r}_i) - s_i r_i^2}{r_i^5}, \quad H_{S,\alpha} = -2\mu_B \sum_i \sum_{\beta} \frac{3x_{i\alpha} x_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_i^2}{r_i^5} s_{i\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z).$$

В квантовомеханической записи в случае центрально-симметричного поля электронного остова атома наблюдаемое магнитное поле будет равно матричному элементу:

$$\mathbf{H}_S = -2\mu_B \sum_i \left\langle R_{n_i l_i} Y_{l_i m_i} \left| \frac{3\mathbf{r}_i(\hat{s}_i \mathbf{r}_i) - \hat{s}_i r_i^2}{r_i^5} \right| R_{n_i l_i} Y_{l_i m_i} \right\rangle.$$

Если валентные электроны находятся **в одной оболочке**, при этом ось α – **ось спинов электронов, которые коллинеарны**, то:

$$\underline{\mathbf{H}_S} = -2\mu_B \langle r^{-3} \rangle_{nl} \langle F_{\alpha}(\vartheta, \varphi) \rangle_{lm} \mathbf{S}.$$

Здесь среднее берется по всем орбиталям с ненулевым спином.

$$F_x(\vartheta, \varphi) = 3 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi - 1, \quad F_y(\vartheta, \varphi) = 3 \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi - 1, \quad F_z(\vartheta, \varphi) = 3 \cos^2 \vartheta - 1.$$

Источники неоднородного электрического поля

Валентные электроны

Характеристики тензора градиента электрического поля, создаваемого одним электроном, находящимся на орбитали nlm .

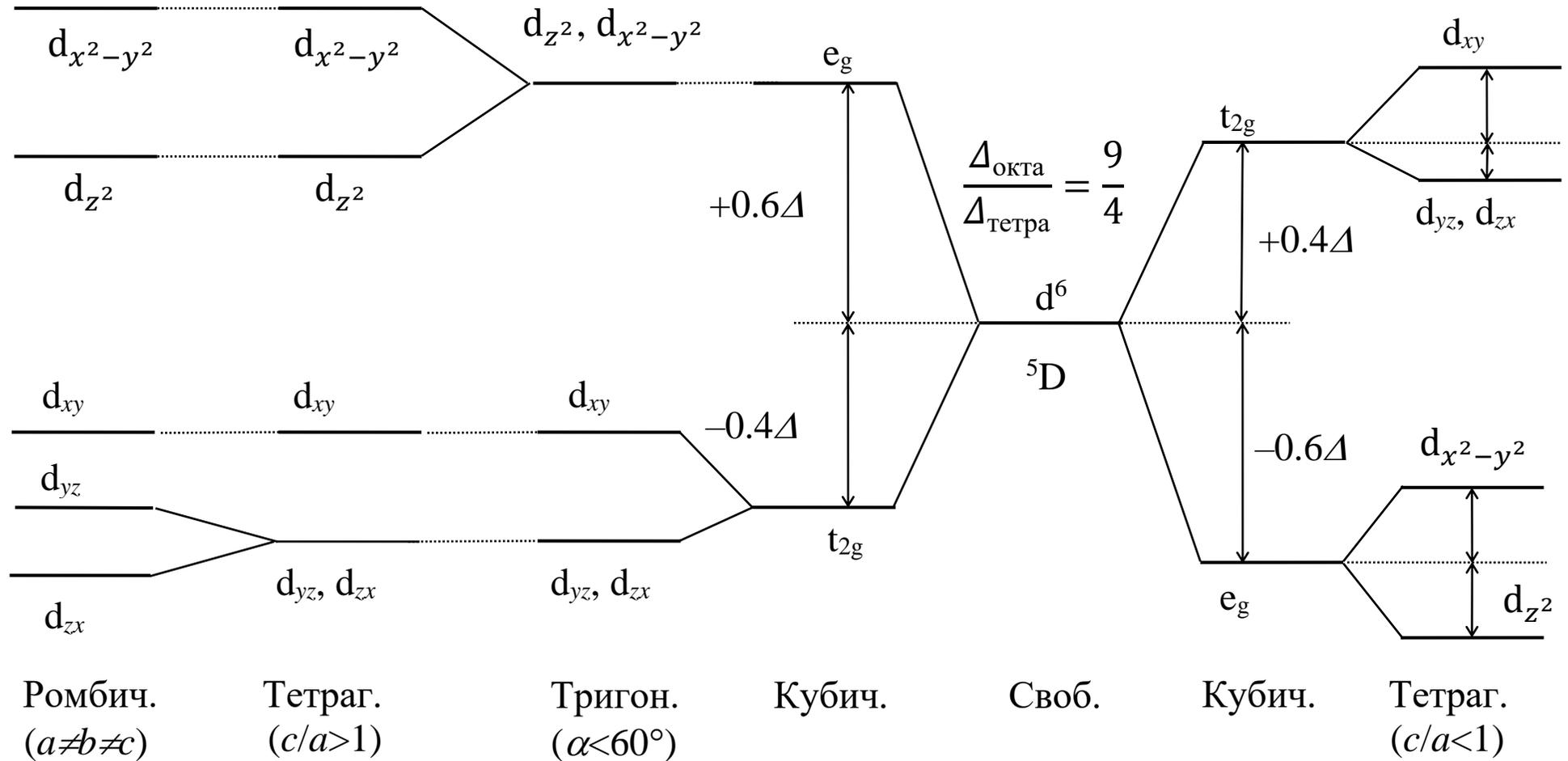
Орбиталь	l	m		$\langle F_x \rangle_{lm}$	$\langle F_y \rangle_{lm}$	$\langle F_z \rangle_{lm}$	Гл. ось	η
s	0	0	$\langle r^{-3} \rangle_{ns}$	0	0	0	—	—
p_x	1	± 1	$\langle r^{-3} \rangle_{np}$	+4/5	-2/5	-2/5	X	0
p_y	1	± 1		-2/5	+4/5	-2/5	Y	0
p_z	1	0		-2/5	-2/5	+4/5	Z	0
d_{z^2}	2	0	$\langle r^{-3} \rangle_{nd}$	-2/7	-2/7	+4/7	Z	0
$d_{x^2-y^2}$	2	± 2		+2/7	+2/7	-4/7	Z	0
d_{xy}	2	± 2		+2/7	+2/7	-4/7	Z	0
d_{yz}	2	± 1		-4/7	+2/7	+2/7	X	0
d_{zx}	2	± 1		+2/7	-4/7	+2/7	Y	0

Источники неоднородного электрического поля

Валентные электроны

Октаэдрическое окружение

Тетраэдрическое окружение



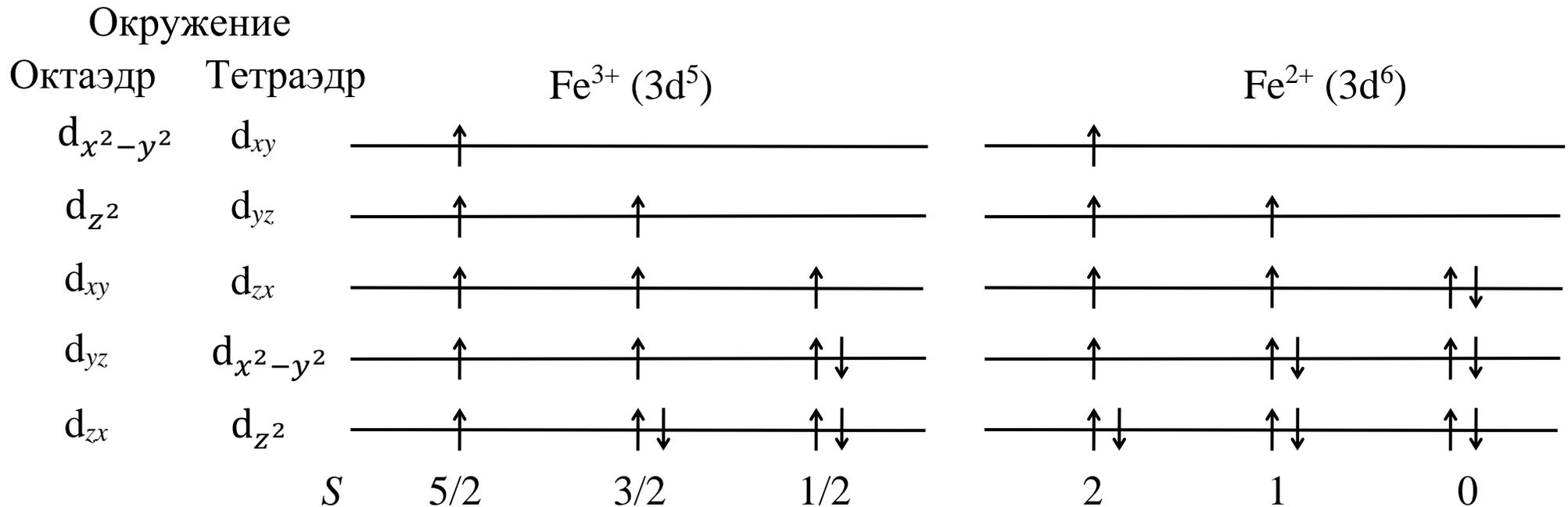
Расщепление уровня одного d-электрона в кристаллических полях различной симметрии.

§7. Источники неоднородного электрического поля

7.2. Валентные электроны

Если энергия кристаллического поля меньше энергии корреляционного взаимодействия, то электроны данной оболочки заполняют орбитали так, чтобы спин этой оболочки был максимальным, т.е. реализуется **высокоспиновое состояние**.

Если энергия кристаллического поля больше энергии корреляционного взаимодействия, то электроны данной оболочки заполняют орбитали так, чтобы спин данной оболочки был минимальным, т.е. реализуется **низкоспиновое состояние**.



Заполнение одноэлектронных полностью расщепленных энергетических уровней ионов Fe³⁺ и Fe²⁺ в октаэдрическом и тетраэдрическом полях лигандов с учетом различных спиновых состояний.

9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Спиновый вклад H_S

Если проанализировать сомножитель $\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm}$ и схему расщепления уровней электрона в кристаллическом поле, то легко прийти к следующим умозаключениям, которые справедливы в отсутствие спин-орбитального взаимодействия.

1. В кубическом кристаллическом поле вклад H_S равен нулю

$$\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm} = 0.$$

2. Для катиона Fe^{3+} в высокоспиновом состоянии вклад H_S равен нулю

$$\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm} = 0.$$

2. Для катиона Fe^{2+} в низкоспиновом состоянии вклад H_S равен нулю

$$\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm} = 0.$$

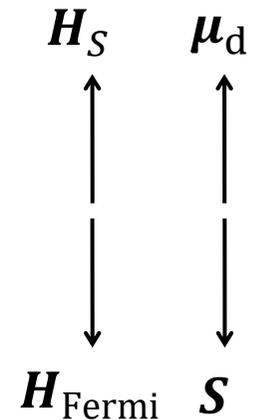
4. Направление поля H_S по отношению к H_{Fermi} зависит от знака $\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm}$.

В случае, когда $\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm} > 0$, спиновый вклад противоположно направлен спину S , а значит и основному вкладу Ферми.

Оценка вклада H_S :

$$H_S = -2\mu_B \langle r^{-3} \rangle_{nl} \langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm} S \cong -126 \text{ кЭ} \cdot \langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \rangle_{lm} S;$$

$$H_S \cong p \cdot 10 \text{ кЭ}.$$



9.1. Микроскопические вклады $H_{\text{микро}}$

Вклад электронов проводимости H_{ce}

Поскольку электроны проводимости имеют конечную плотность в области расположения ядра, то по аналогии с контактным взаимодействием Ферми вклад от электронов проводимости будет равен

$$\underline{H_{\text{ce}}} = -\frac{8\pi}{3} \mu_B (|\psi_{\text{ce}}^{\uparrow}(0)|^2 - |\psi_{\text{ce}}^{\downarrow}(0)|^2) \mathbf{i},$$

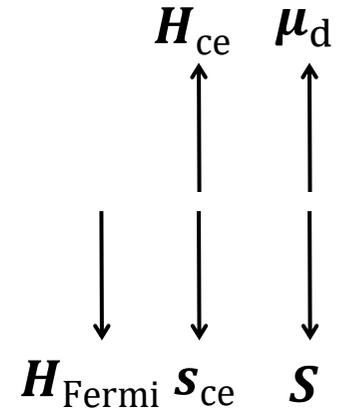
где $|\psi_{\text{ce}}^{\uparrow}(0)|^2$ и $|\psi_{\text{ce}}^{\downarrow}(0)|^2$ – плотности в области расположения ядра электронов проводимости со спином "вверх" и "вниз" соответственно.

Направление вклада по отношению к H_{Fermi} .

Если вследствие обменного взаимодействия спин электронов проводимости направлен также, как и спин мессбауэровского иона, то вклад от электронов проводимости будет иметь противоположное направление направлению основного, фермиевского, вклада.

В общем случае направление спина электронов проводимости определяется не только спином мессбауэровского иона, но и направлениями спинов окружающих его ионов. Степень и направление поляризации спина электрона проводимости в существенной мере зависит от расстояния его до поляризующего иона.

$$\underline{H_{\text{ce}}} \sim p \cdot 1 \text{ кЭ.}$$



§9. Вклады в эффективное магнитное поле на ядре

9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

$$H_n = H_{\text{микро}} + H_{\text{макро}} = \underbrace{H_{\text{Fermi}} + H_L + H_S + H_{\text{се}}}_{\text{микроскопические вклады от электр. оболочки и электронов проводимости}} + \underbrace{H_{\text{dip}} + \overbrace{H_{\text{Lor}} + H_{\text{dem}} + H_0}^{\text{локальное поле}}}_{\text{макроскопические вклады}}$$

Три макроскопические вклада, обусловленные магнитными моментами ионов, окружающих мессбауэровский атом, и внешним магнитным полем:

H_{dip} – поле, обусловленное диполь-дипольным взаимодействием ядра с локализованными магнитными моментами окружающих атомов (расположенных внутри макроскопической сферы);

H_{Lor} – поле Лоренца – поле, создаваемое непрерывной безграничной намагниченной средой внутри макроскопической полой сферы (токами намагничивания на поверхности полости);

H_{dem} – размагничивающее поле, обусловленное пространственной ограниченностью образца (создаваемое токами намагничивания на внешней поверхности образца);

H_0 – внешнее магнитное поле.

§9. Вклады в эффективное магнитное поле на ядре

9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

Три макроскопических вклада $H_{\text{макро}}$ в поле на ядре мессбауэровского атома обусловлены магнитным полем, создаваемым магнитными моментами μ окружающих атомов.

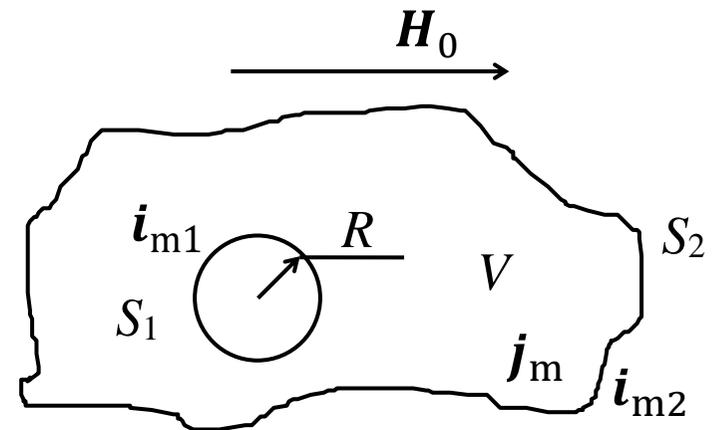
В исследуемом образце конечных размеров и заданной формы проведем макроскопическую сферу радиуса R ($L \gg R \gg a$) с центром в точке наблюдения – в области расположения мессбауэровского ядра (атома) (см. рис.). При этом:

a – межатомное расстояние,

L – характерный линейный размер неоднородности намагниченности образца $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ (например, размер домена),

S_1 и S_2 – внутренняя и внешняя поверхности части образца V без вещества внутри сферы радиуса R ,

\mathbf{j}_m и \mathbf{i}_{m1} , \mathbf{i}_{m2} – плотности объемного и поверхностных токов намагничивания.



В соответствии с принципом суперпозиции:

$$H_{\text{макро}} = H_{\text{dip}} + H_{S_1} + H_{S_2} + H_V + H_0 \equiv H_{\text{dip}} + H_{\text{Lor}} + H_{\text{dem}} + H_V + H_0.$$

Если считать, что среда однородно намагничена, то $\text{rot}\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_m = 0$ и $H_V = 0$:

$$H_{\text{макро}} = H_{\text{dip}} + H_{\text{Lor}} + H_{\text{dem}} + H_0.$$

9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

Диполь-дипольный вклад H_{dip}

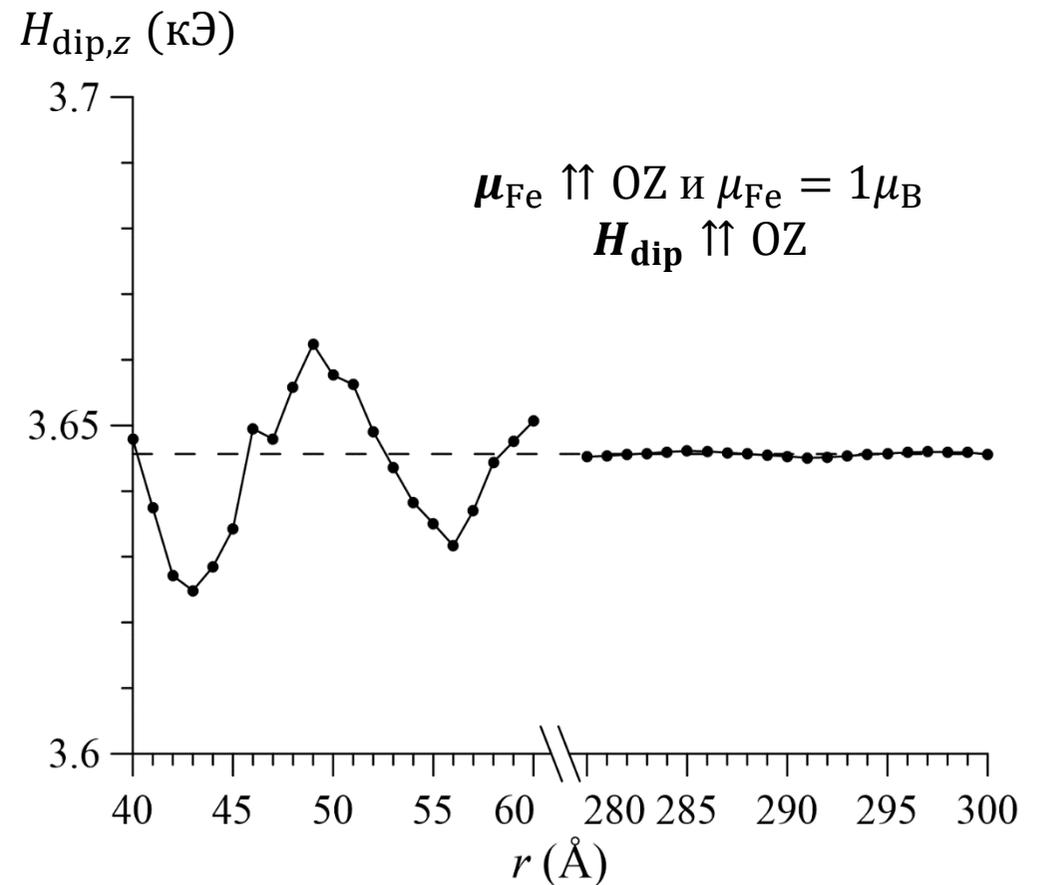
Дипольный вклад H_{dem} от локализованных магнитных моментов μ_k окружающих атомов, находящихся внутри сферы достаточно большого радиуса ($R \gg a$), вычисляется с помощью суммирования вкладов от каждого из локализованных моментов:

$$H_{\text{dip}} = \sum_{k(r^k < R)} \frac{3r^k (\mu^k r^k) - \mu^k (r^k)^2}{(r^k)^5}.$$

$$H_{\text{dip},i} = \sum_{k(r^k < R)} \sum_j \mu_j^k \frac{3x_i^k x_j^k - \delta_{ij} (r^k)^2}{(r^k)^5}.$$

При этом радиус сферы R выбирается таким, что при дальнейшем его увеличении диполь-дипольный вклад H_{dip} остается постоянным с достаточной степенью точности.

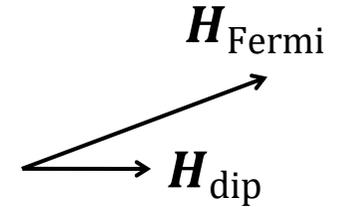
Для примера на рисунке приведен результат расчета дипольного вклада H_{dip} в сверхтонкое магнитное поле на ядрах ^{57}Fe в мультиферроике AgFeO_2 в зависимости от максимального радиуса координационных сфер.



9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

Диполь-дипольный вклад H_{dip}

Направление дипольного вклада H_{dip} по отношению к H_{Fermi} в общем случае произвольное. Оно зависит от точечной симметрии позиции, занимаемой мессбауэровским атомом, и ориентации локализованных магнитных моментов окружающих его атомов (характера магнитного упорядочения).



Оценка величины дипольного вклада H_{dip} (из эксперимента и результата расчета):

$H_{\text{dip}} \cong 0 \div 20$ кЭ.

9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

Поле Лоренца H_{Lor}

Поле Лоренца H_{Lor} – поле внутри макроскопической полой сферы, создаваемое безграничной непрерывной однородно намагниченной средой (поверхностными токами намагничивания i_{m1} , текущими по поверхности S_1 сферы Лоренца):

$$\underline{H_{\text{Lor}}} = \frac{4\pi}{3} \mathbf{M} = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{\mu}{\nu},$$

где:

\mathbf{M} – намагниченность, магнитный момент единицы объема среды;

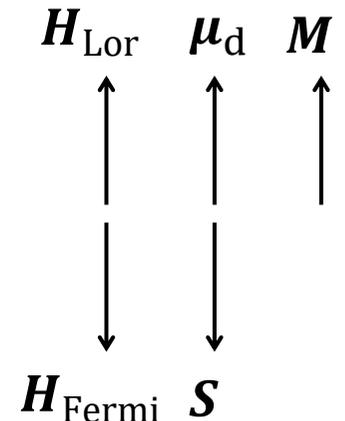
μ и ν – магнитный момент и объем формульной единицы вещества (или элементарной ячейки кристаллического тела).

Направление вклада H_{Lor} всегда ориентировано вдоль направления намагниченности \mathbf{M} . По отношению к вкладу H_{Fermi} – по-разному.

В случае коллинеарной магнитной структуры – вдоль или противоположно H_{Fermi} .

Оценка величины вклада:

$$\underline{H_{\text{Lor}}} = 1 \div 10 \text{кЭ}.$$



9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

Размагничивающее поле H_{dem}

Размагничивающее поле H_{dem} , учитывающее форму образца (поле, создаваемое поверхностными токами намагничивания i_{m2} , текущими по поверхности S_2 образца):

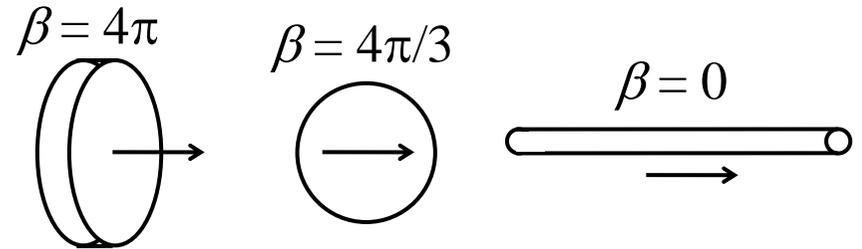
$$\underline{H_{\text{dem}}} = -\beta M = -\beta \frac{\mu}{v},$$

где β – **размагничивающий фактор**, который в общем случае является тензором.

Этот вклад зависит от ориентации доменов в образце. Если частицы многодоменные, то $H_{\text{dem}} \cong 0$, если однодоменные, то вклад определяется формой частицы.

Наиболее характерные примеры значений размагничивающего фактора β (в системе CGS):

1. Плоский тонкий образец с направлением намагниченности вдоль нормали к поверхности – $\beta = 4\pi$.



2. Сферические магнитные частицы – $\beta = 4\pi/3$.

3. Длинные тонкие иглы с направлением намагниченности вдоль игл или многодоменный образец в отсутствие внешнего поля – $\beta = 0$.

Заметим, что в случае сферических однодоменных магнитных частиц:

$$H_{\text{Lor}} + H_{\text{dem}} = 0 \text{ и } H_{\text{макро}} = H_{\text{dip}}.$$

9.2. Макроскопические вклады $H_{\text{макро}}$

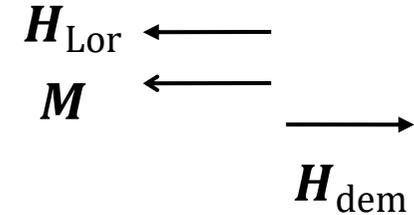
Размагничивающее поле H_{dem}

Направление вклада H_{dem} .

По отношению к H_{Fermi} ориентировано по-разному, но всегда противоположно направлению поля Лоренца H_{Lor} .

Оценка величины вклада H_{dem} :

$$H_{\text{dem}} \cong 0 \div 10 \text{ кЭ.}$$

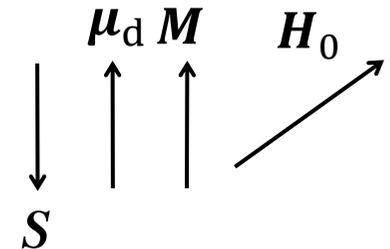


Внешнее поле H_0

Внешнее поле H_0 .

Направление вклада H_0 по отношению к H_{Fermi} ориентировано по-разному, в зависимости от взаимной ориентации собственного момента мессбауэровского атома μ_d и внешнего поля H_0 .

Оценка величины вклада H_0 : $H_0 = 0 \div 70 \text{ кЭ.}$



§10. Комбинированное сверхтонкое взаимодействие

Гамильтониан комбинированного (одновременно магнитного дипольного и электрического квадрупольного) сверхтонкого взаимодействия ядра в собственных осях $X'Y'Z'$ тензора ГЭП равен (в общем случае направление поля \mathbf{H}_n и соответственно ось квантования спина ядра Z не совпадают ни с одной из главных осей $X'Y'Z'$ тензора ГЭП):

$$\hat{H}_{\text{comb}} = \hat{H}_m + \hat{H}_Q = -g\mu_n \hat{J}_z H_n + \frac{eQ}{2J(2J-1)} \left(\varphi_{x'x'} \hat{J}_{x'}^2 + \varphi_{y'y'} \hat{J}_{y'}^2 + \varphi_{z'z'} \hat{J}_{z'}^2 \right).$$

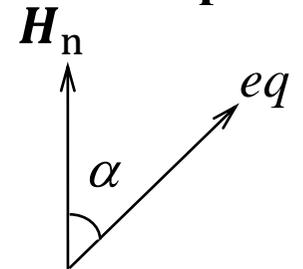
В случае аксиально-симметричного тензора ГЭП ($\varphi_{x'x'} = \varphi_{y'y'} = -\frac{1}{2}\varphi_{z'z'} \equiv -\frac{1}{2}eq$):

$$\hat{H}_{\text{comb}} = \hat{H}_m + \hat{H}_Q = -g\mu_n \hat{J}_z H_n + \frac{e^2 q Q}{4J(2J-1)} \left(3\hat{J}_{z'}^2 - \hat{J}^2 \right).$$

Если при этом энергия дипольного магнитного сверхтонкого взаимодействия существенно больше энергии квадрупольного электрического сверхтонкого взаимодействия — $|g\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$, то **собственные значения гамильтониана комбинированного сверхтонкого взаимодействия E_{comb} в первом приближении будут равны:**

$$E_{\text{comb}} = E_m + E_Q = -g\mu_n m_J H_n + \frac{e^2 q Q}{4J(2J-1)} \left(3m_J^2 - J(J+1) \right) \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2},$$

где α — угол между сверхтонким полем \mathbf{H}_n и главной осью тензора ГЭП.



§10. Сверхтонкое комбинированное взаимодействие

Для спина ядра $J = 3/2$ (случай ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn в возбужденном состоянии):

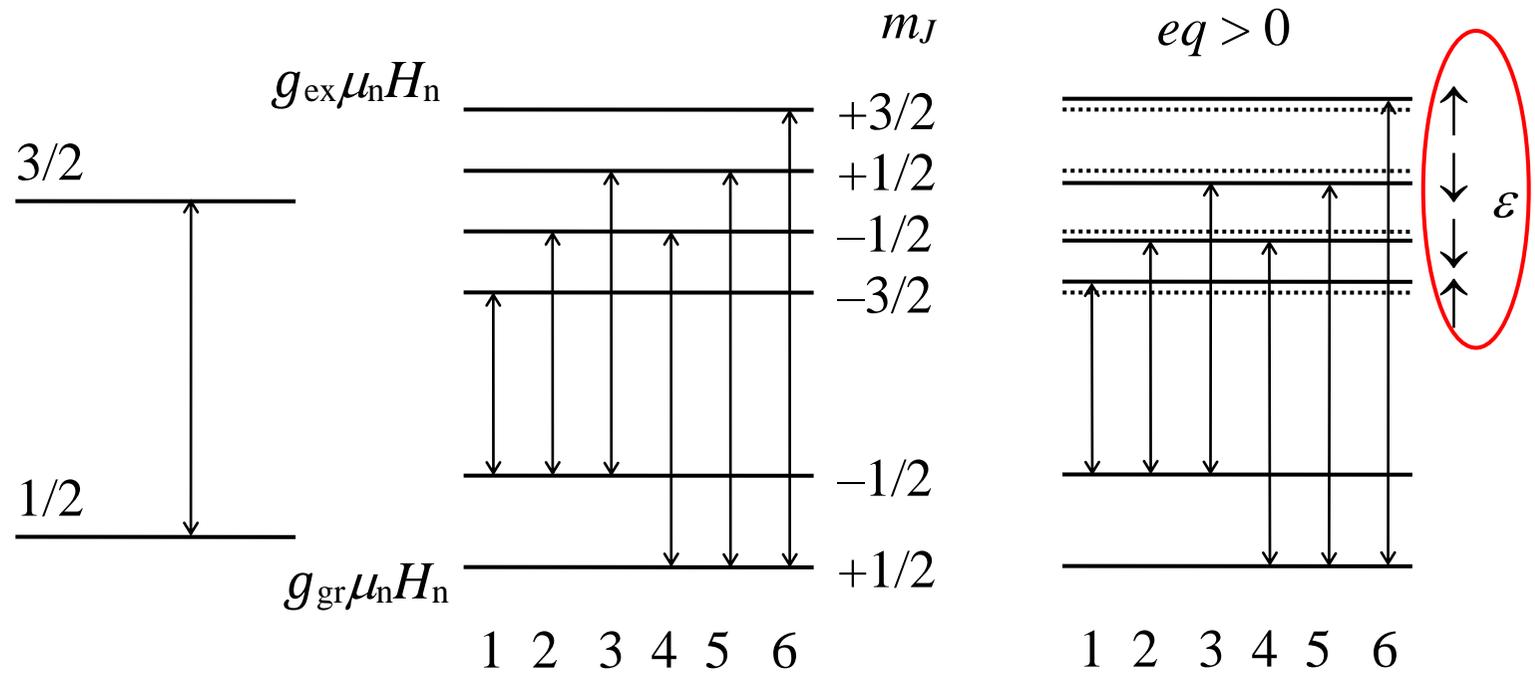
$$E_{\text{comb}} = E_m + E_Q = -g_{\text{ex}}\mu_n m_J H_n + \frac{e^2 q Q}{4} \left(m_J^2 - \frac{5}{4} \right) \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2}.$$

Наряду с магнитным расщеплением возникает **квадрупольное смещение** ε энергетических уровней и соответствующее им смещение компонент мессбауэровского спектра:

$$\varepsilon = \frac{e^2 q Q}{4} \cdot \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2} \cong \varepsilon_{\text{para}} \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2}.$$

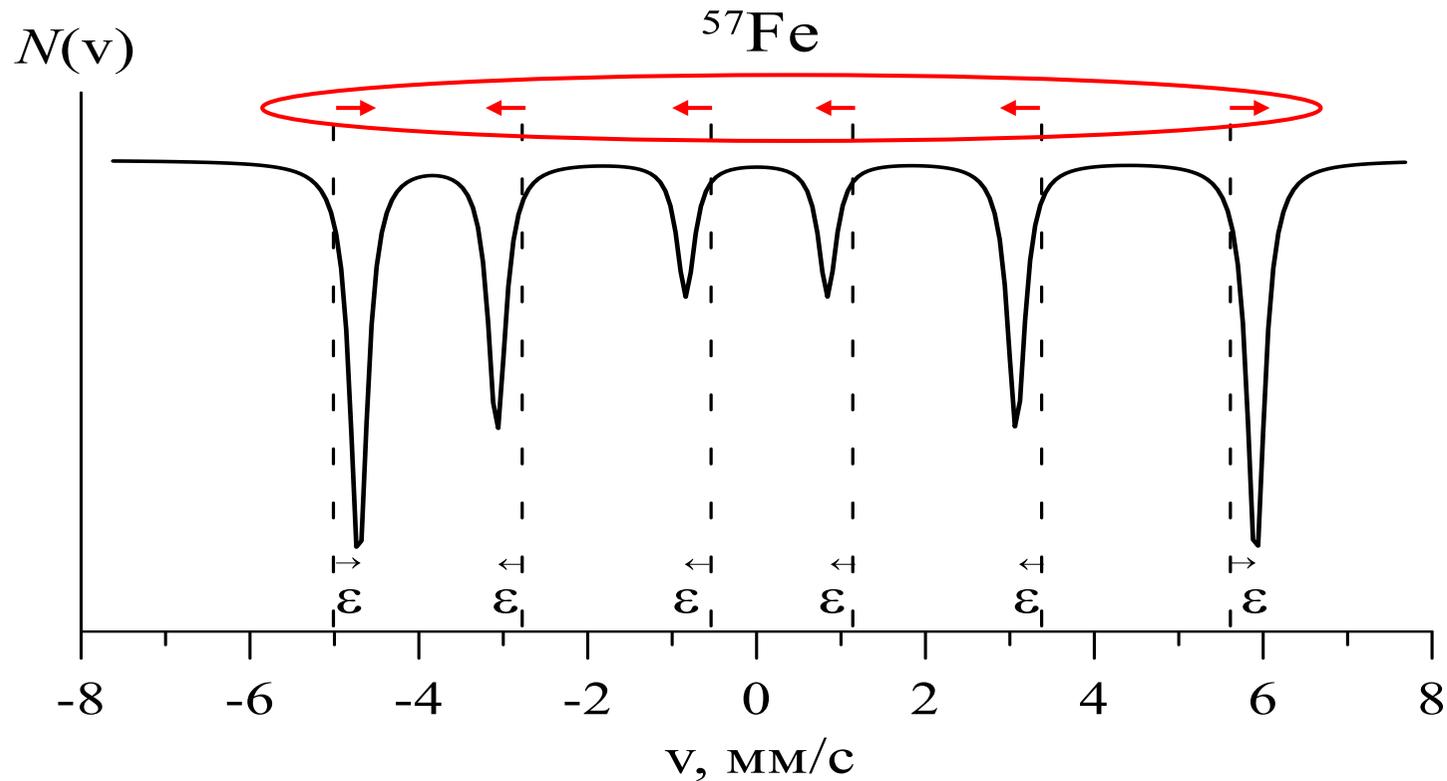
^{57}Fe
($g_{\text{ex}} < 0, g_{\text{gr}} > 0, Q_{\text{gr}} = 0, Q_{\text{ex}} > 0$)

Схема ядерных уровней при комбинированном СТВ в случае $|g\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$



§10. Сверхтонкое комбинированное взаимодействие

Мессбауэровский спектр для уровней со спинами $J^{\text{gr}} = 1/2$ и $J^{\text{ex}} = 3/2$ представляет собой зеемановский секстет, у которого компоненты смещаются на одну и ту же величину **квадрупольного смещения** $|\varepsilon|$. При этом внешняя пара компонент смещается в одну, а две внутренние пары компонент – в противоположную сторону оси доплеровских скоростей.



Мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe при комбинированном СТВ в случае $|g\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$ (в первом приближении и при $\varepsilon > 0$).

§10. Сверхтонкое комбинированное взаимодействие

Во втором порядке малости в разложении энергии комбинированного сверхтонкого взаимодействия ядра по энергии квадрупольного взаимодействия ($|g\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$) взаимное положение компонент парциальных спектров на шкале доплеровских скоростей будут определяться следующими соотношениями:

$$v_{1,6} = \delta + \varepsilon \mp a_+ \mp \mu_n \frac{|g_{gr}| + 3|g_{ex}|}{2} H_n,$$

$$v_{2,5} = \delta - \varepsilon \pm a_- \mp \mu_n \frac{|g_{gr}| + |g_{ex}|}{2} H_n,$$

$$v_{3,4} = \delta - \varepsilon \mp a_- \mp \mu_n \frac{|g_{gr}| - |g_{ex}|}{2} H_n.$$

Здесь:

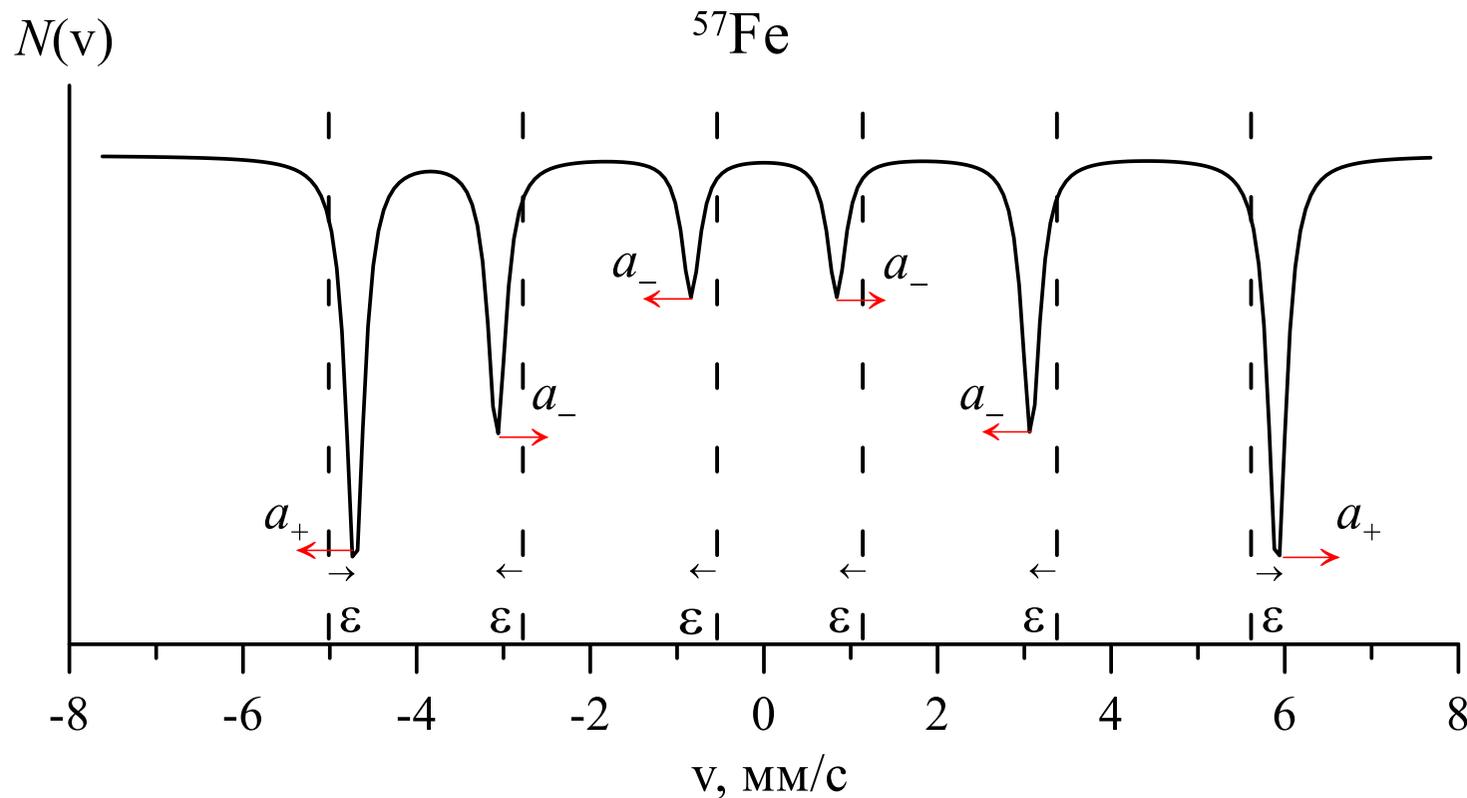
$$\mu_n \equiv \frac{e\hbar}{2m_p c} - \text{ядерный магнетон};$$

g_{gr} и g_{ex} – g -факторы для основного и возбуждённого состояний ядра;

$$a_{\pm} = \frac{3}{4} \cdot \frac{e^2 q Q}{4} \cdot \frac{e^2 q Q}{|g_{ex}| \mu_n H_n} \left[\cos^2 \alpha \pm \frac{\sin^2 \alpha}{8} \right] \sin^2 \alpha - \text{дополнительные смещения линий.}$$

§10. Сверхтонкое комбинированное взаимодействие

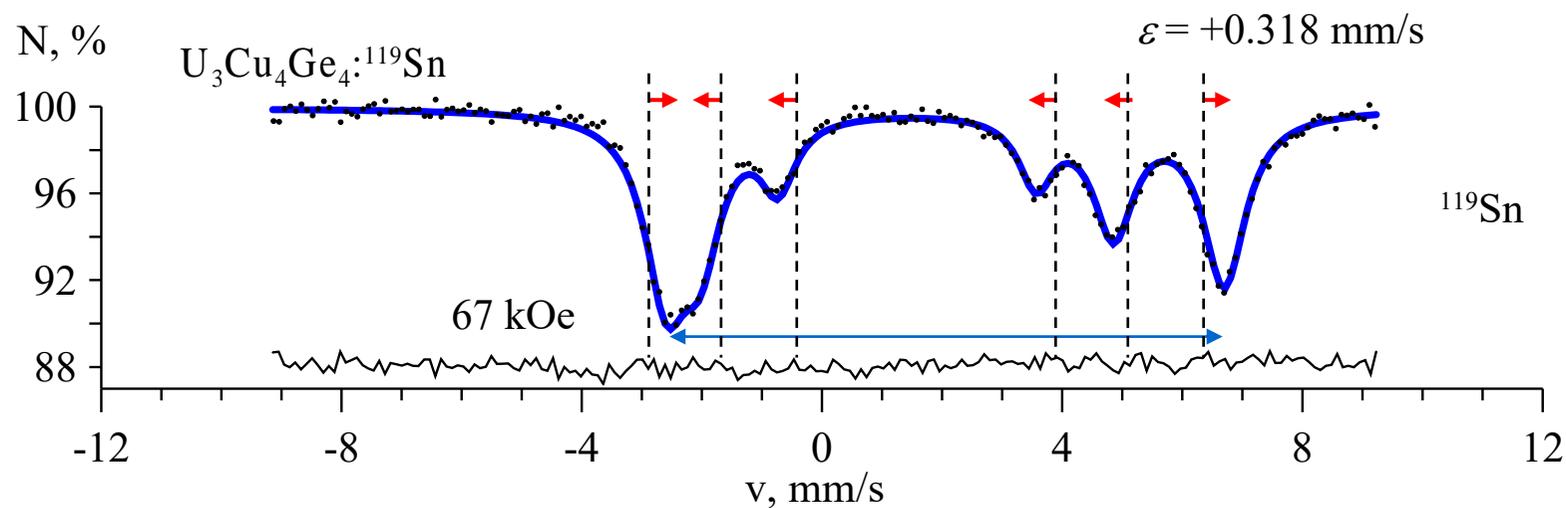
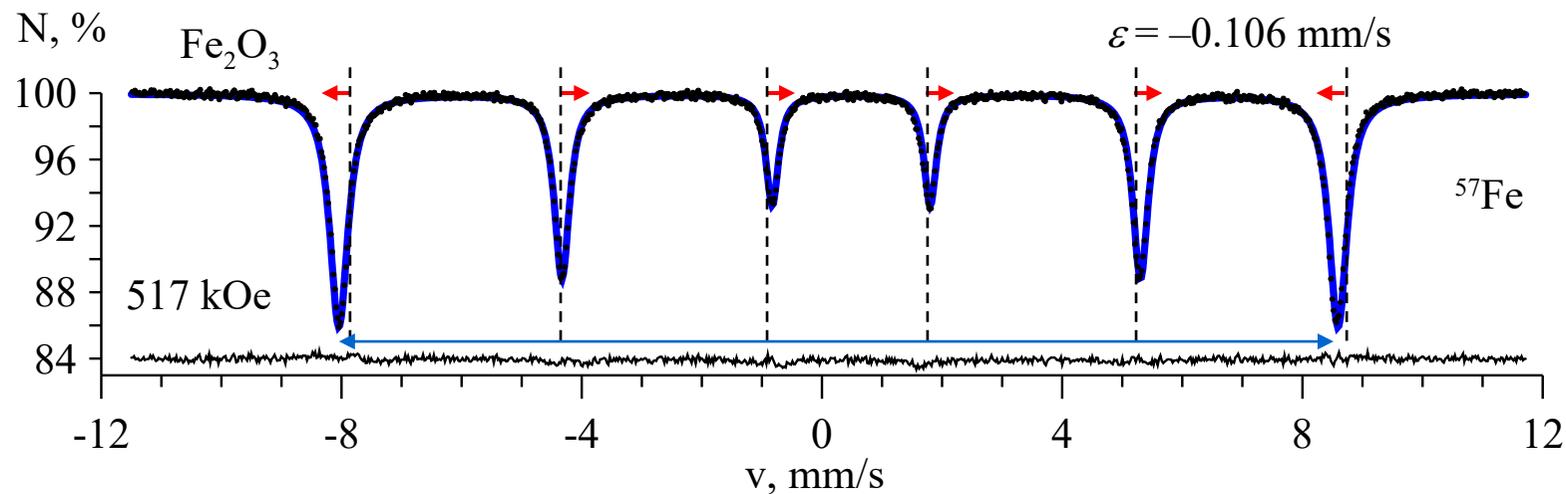
В этом случае компоненты спектра испытывают **дополнительные смещения**: внешние компоненты в разные стороны на величину a_+ , а средние и внутренние компоненты навстречу друг другу на величину a_- .



Мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe при комбинированном СТВ
в случае $|g\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$ (во втором приближении).

§10. Сверхтонкое комбинированное взаимодействие

Пример реальных экспериментальных спектров



§10. Сверхтонкое комбинированное взаимодействие

Спектр в виде октета Гамильтона (связанных друг с другом восьми резонансных линий) возникает при наличии магнитного поля в области расположения мессбауэровского ядра, когда энергия электрического квадрупольного сверхтонкого взаимодействия (СТВ) с неоднородным электрическим полем сравнима с энергией магнитного СТВ.

Положения и интенсивности всех восьми резонансных линий являются результатом решения стационарного уравнения Шредингера для гамильтониана комбинированного сверхтонкого взаимодействия в случае поликристаллических образцов и наиболее часто встречающихся в эксперименте переходов между уровнями со спинами 3/2 и 1/2

Модель комбинированного СТВ (октеты Гамильтона):

$$N_H(v; I, \gamma, \delta, e^2 q Q, H_n, \theta, \varphi, \eta, \Gamma, \alpha) =$$

$$= I \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^4 N_{PV} \left(v, \frac{I_{ij}}{\sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^4 I_{ij}}, v_{ij}, \Gamma, \alpha \right);$$

$$I_{ij}(\{P_i\}, \{P_j\}, \gamma) = \left| \sqrt{\frac{1}{3}} P_{i,2} P_{j,2}^* + P_{i,1} P_{j,1}^* \right|^2 (2 - \sin^2 \gamma) + 2 \left| \sqrt{\frac{2}{3}} P_{i,2} P_{j,1}^* + \sqrt{\frac{2}{3}} P_{i,3} P_{j,2}^* \right|^2 \sin^2 \gamma +$$

$$+ \left| \sqrt{\frac{1}{3}} P_{i,3} P_{j,1}^* + P_{i,4} P_{j,2}^* \right|^2 (2 - \sin^2 \gamma);$$

$$v_{ij} = E_j - E_i.$$

Здесь $E_i, P_i; E_j, P_j$ – собственные значения и собственные векторы гамильтонианов комбинированного СТВ для возбужденного $\mathcal{H}_{3/2}$ и основного $\mathcal{H}_{1/2}$ уровней со спинами 3/2 и 1/2 соответственно:

$$\mathcal{H}_{1/2} = \begin{pmatrix} -\frac{\beta}{2} \cos \theta & -\frac{\beta}{2} \sin \theta e^{-i\varphi} \\ -\frac{\beta}{2} \sin \theta e^{+i\varphi} & +\frac{\beta}{2} \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{H}_{3/2} = \begin{pmatrix} 3A - \frac{3}{2} \alpha \cos \theta & -\frac{\sqrt{3}}{2} \alpha \sin \theta e^{-i\varphi} & \sqrt{3}A\eta & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \alpha \sin \theta e^{+i\varphi} & -3A - \frac{\alpha}{2} \cos \theta & -\alpha \sin \theta e^{-i\varphi} & \sqrt{3}A\eta \\ \sqrt{3}A\eta & -\alpha \sin \theta e^{+i\varphi} & -3A + \frac{\alpha}{2} \cos \theta & -\frac{\sqrt{3}}{2} \alpha \sin \theta e^{-i\varphi} \\ 0 & \sqrt{3}A\eta & -\frac{\sqrt{3}}{2} \alpha \sin \theta e^{+i\varphi} & 3A + \frac{3}{2} \alpha \cos \theta \end{pmatrix},$$

где: $A = \frac{e^2 q Q}{12}$, $\alpha = g_{3/2} \mu_N H_n$, $\beta = g_{1/2} \mu_N H_n$.

СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ПАРАМЕТРЫ СПЕКТРА

Чувствительность параметров мессбауэровского спектра

Сверхтонкие параметры спектра:

- сдвиг мессбауэровского спектра – $\delta = \delta_I + \delta_T$,
- квадрупольное смещение компонент сверхтонкой структуры – ε ,
- эффективное магнитное поле в области расположения ядра – H_n .

Для ядер ^{57}Fe :

Сверхтонкие параметры	δ_I	ε	H_n
Число координационных сфер	1÷2	1÷10	1÷5
Расстояние	2÷4 Å	2÷10 Å	2÷10 Å
$\Delta(\delta_I, \varepsilon, H_n)$ при атом А \Leftrightarrow атом В	~0.03 мм/с	~0÷0.3 мм/с	~10÷30 кЭ

$$\Delta\delta(\Delta r) = (1 \div 5) \frac{\Delta r}{r} \text{ мм/с.}$$

Интенсивности (площади) спектра и его компонент S – ~0.1÷1 %.

Ширины компонент спектра Γ – ~0.01 мм/с.

Нанометровый диапазон – !