Теорема Вигнера-Эккарта: тензорные операторы ранга *l* (в нашем случае 2) для состояния со спином I имеют с точностью до численного коэффициента такие же матричные элементы, как и неприводимый тензорный оператор ранга *l* , образованный из компонент спина $\vec{I}$.

$$\hat{Q}_0 = \alpha \hat{T}_2^{(0)} \qquad \hat{Q}_{\pm 1} = \alpha \hat{T}_2^{(\pm 1)} \qquad \hat{Q}_{\pm 2} = \alpha \hat{T}_2^{(\pm 2)}$$

$$\hat{T}_2^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{3}}(3\hat{I}_z^2 - I(I+1)) \qquad \hat{T}_2^{(\pm 1)} = \mp(\hat{I}_\pm \hat{I}_z + \hat{I}_z \hat{I}_\pm) \qquad \hat{T}_2^{(\pm 2)} = \hat{I}_\pm^2$$

$$\alpha = \frac{eQ}{2I(2I-1)}$$

Q - квадрупольный момент, порядка 10^{-28} м^2

Только у ядер со спином I>1/2

Взаимодействие с неоднородными электрическими полями.

$$U_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial E_i}{\partial x_k} + \frac{\partial E_k}{\partial x_i}\right)$$

градиенты электрических полей

5 независимых компонент:

$$\Delta E_0 = \sqrt{\frac{3}{2}} U_{zz} \qquad \Delta E_{\pm 1} = \mp\left(U_{xz} \pm iU_{yz}\right) \qquad \Delta E_{\pm 2} = \frac{1}{2}\left(U_{xx} - U_{yy} \pm 2iU_{xy}\right)$$

$$\hat{H}_Q = \sum_{q=-2}^{2} \alpha \Delta E_q \hat{T}_2^{(-q)} \Longrightarrow$$

сдвиг энергетических уровней
в зависимости от m

Главные оси тензора ГЭП X, Y, Z

$$\begin{vmatrix} U_{XX} & 0 & 0 \\ 0 & U_{YY} & 0 \\ 0 & 0 & U_{ZZ} \end{vmatrix}$$

из уравнения Лапласа $U_{ZZ} + U_{YY} + U_{XX} = 0$

$$|U_{ZZ}| \geq |U_{YY}| \geq |U_{XX}|$$

Обозначение $U_{ZZ} = eq$

$$\hat{H}_Q = \frac{e^2 qQ}{4I(2I-1)} \left[3\hat{I}_Z^2 - I(I+1) + \frac{1}{2}\eta(\hat{I}_+^2 + \hat{I}_-^2) \right]$$

Параметр асимметрии $\eta = \dfrac{U_{XX} - U_{YY}}{U_{ZZ}}$

Константа квадрупольного взаимодействия $$C_Q = \frac{e^2 qQ}{h}$$

Квадрупольная частота $$\omega_Q = \frac{3e^2 qQ}{2I(2I-1)\hbar}$$

Ядерный квадрупольный резонанс (ЯКР)

Аксиальная симметрия $\eta = 0$

$$\hat{H}_Q = \frac{e^2 qQ}{4I(2I-1)}\left[3\hat{I}_Z^2 - I(I+1)\right]$$

Состояние |I,m> 2I+1 вырожденное расщепляется

$$E_Q = \frac{e^2 qQ}{4I(2I-1)}\left[3m^2 - I(I+1)\right]$$

$I = 3/2$

$m = \pm\frac{3}{2}$ двукратное вырождение

$m = \pm\frac{1}{2}$

$I = 1$

$m = \pm 1$ дублет и синглет

$m = 0$

Произвольный полуцелый спин – *I*+1/2 дублетов
Спектр неэквидистантный

Произвольный целый спин – *I* дублетов и 1 синглет
Спектр неэквидистантный

Поглощение энергии внешнего генератора при возбуждении переходов между уровнями – ядерный квадрупольный резонанс.
Переходы с $\Delta m = \pm 1$ как и для ЯМР

Неаксиально симметричное кристаллическое поле: $\eta \neq 0$

для полуцелых спинов сохраняется двукратное вырождение – крамерсово вырождение (теорема Крамерса)

для целых спинов вырождение снимается

Ядерная спин система в присутствии магнитного постоянного поля и кристаллического поля.

Предельные случаи:

1. Взаимодействие с магнитным полем намного слабее взаимодействия с кристаллическим полем
2. Взаимодействие с кристаллическим полем намного слабее взаимодействия с магнитным полем

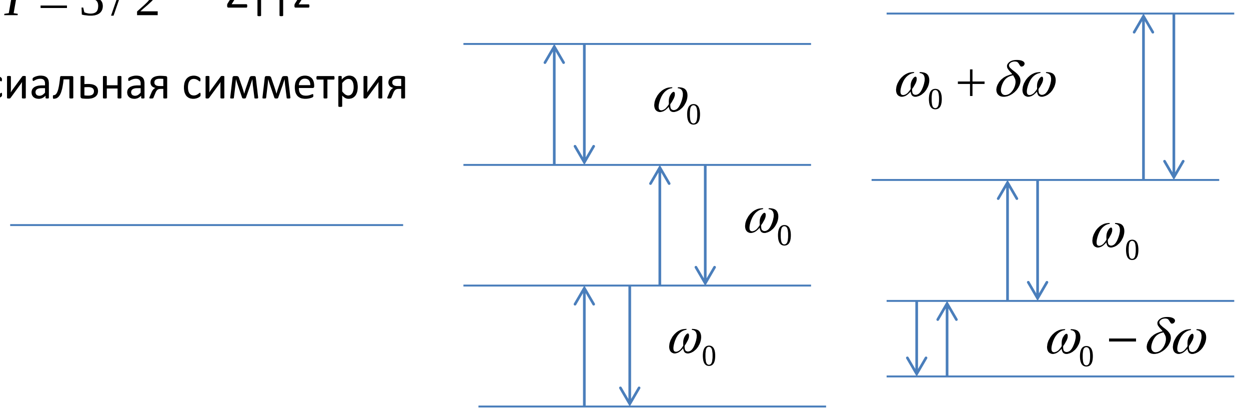
Случай 2. $\hat{H}_Q << \hat{H}_0$

Полный гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_Q$

$\hat{H}_Q$ Рассматривается как возмущение по отношению к зеемановскому взаимодействию.

$I = 3/2$ Z||z

аксиальная симметрия

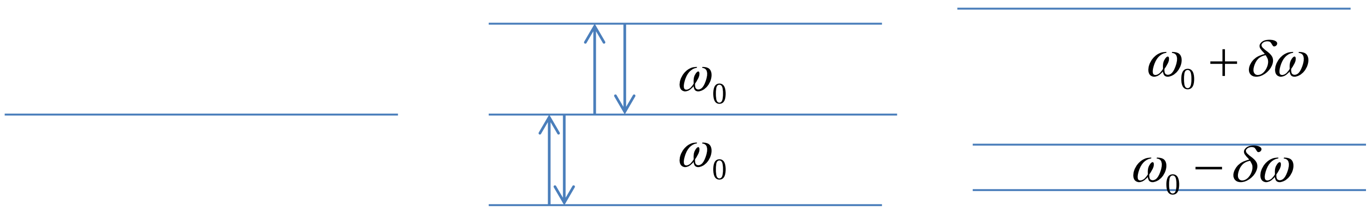


$\delta\omega = \omega_Q$

$B = 0$ $\hat{H}_0$ $\hat{H}_Q + \hat{H}_0$

$I = 1$ Z||z

аксиальная симметрия



$\delta\omega = \omega_Q / 2$

$B = 0$ $\hat{H}_0$ $\hat{H}_Q + \hat{H}_0$

Z не параллельна z

$$\hat{H}_Q = \frac{e^2 qQ}{8I(2I-1)}\left(3\cos^2\theta - 1\right)\left[3\hat{I}_Z^2 - I(I+1)\right]$$