квадрупольное взаимодействие

КВАДРУПОЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ - взаимодействие системы с внеш. полем (или создающими его источниками), обусловленное наличием у системы *квадрупольного момента*. К. в. вызывается неоднородностью внеш. поля, к-рая обычно предполагается малой на размере системы l (т. е. поле мало изменяется в пределах системы). Так, энергия системы электрич. зарядов, напр, молекулы или атомного ядра, в электрич. поле E(r)=-Cj_0(r), описываемом плавной гармонич. ф-цией j_0(r) (Dj_0=0) равна

$$U_0 = \left[q\varphi_0 + \boldsymbol{p}^e \nabla\varphi_0 + Q^e_{ik}\nabla_i\nabla_k\varphi_0 + \cdots\right]|_{r=0} \qquad (1)$$

(здесь и далее по повторяющимся индексам i и k производится суммирование). В (1) учтены только первые три электрич. мультипольных момента - полный заряд q, дипольный момент p^e и квадрупольный момент Q^e_{ik} (i, A=1, 2, 3), вычисленные относительно к--л. внутр. точки системы r=0. К. в. отвечает последнее слагаемое в ф-ле (1). Оно описывает изменение энергии системы под действием неоднородности поля E(r), к-рую т. о. неявно характеризует. Это обстоятельство используется, в частности, в спектроскопии ядерного квадрупольного резонанса, позволяющей получать информацию об электронной структуре молекулы путём измерения квадрупольного расщепления энергетич. уровней её резонансных ядер в неоднородном поле окружающих электронов. Если внеш. поле создано нек-рой удалённой системой зарядов, расположенной в области с размером l_0 в окрестности точки R(Rдl, l_0)*и обладающей, в свою очередь, мультиполышми моментами* q_0, $\boldsymbol{p}^e_0$, Q^e_{0jm} *,..., то его потенциал (в Гаусса системе единиц) равен*

$$\varphi_0(\boldsymbol{r}) = \frac{q_0}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|} + \frac{\boldsymbol{p}^e_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|^3} + \frac{3Q^e_{0jm}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})_j(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})_m}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}|^5} + \cdots . \qquad (2)$$

Подстановка (2) в (1) приводит к след. асимптотич. разложению энергии К. в. $U_Q = -Q^e_{ik}\nabla_i E_k$ *одной системы зарядов в эл--статич. поле другой:*

$$U_Q = -3q_0 n_i n_k Q^e_{ik}/R^3 + \left(15p^e_{0j}n_j n_i n_k - 6p^e_{0i}n_k\right)Q^e_{ik}/R^4 - \\ -15\left(\frac{7}{}\,Q^e_{0jm}n_j n_m n_i n_k - 4Q^e_{0ij}n_k n_j + \frac{2}{5}\,Q^e_{0ik}\right)\times \\ \times Q^e_{ik}/R^5 + \ldots, \qquad (3)$$

где $n = \boldsymbol{R}/R$. *Здесь первый член описывает энергию взаимодействия квадруполя с зарядом* q_0, *второй - с диполем* $\boldsymbol{p}^e_0$, *третий - с квадруполем* Q^e_{0jm}. *К. в. с зарядом реализуется, напр., при кулоновском возбуждении несферич. ядер на вращат. уровень энергии в процессе рассеяния заряж. частиц ядрами. Собственно квадруполь-квадрупольное взаимодействие с энергией* $U_{QQ_0} \sim \mathrm{const}/R^5$ *наиб. важно для незаряж. систем с нулевыми дипольными моментами. Такая ситуация имеет место, в частности, при взаимодействии между состоящими из одинаковых атомов двухатомными молекулами в основном*

состоянии или между атомами с ненулевыми орбитальным (L№0) и полным (I№0, $^1/_2$)угл. моментами. Однако при усреднении по всевозможным ориентациям моментов молекул или атомов, напр., в газе, соответствующая сила притяжения (либо отталкивания) $<-\partial U_{QQ_0}/\partial R>$ обращается в нуль. Последнее справедливо также по отношению к любым силам, обусловленным собственными дипольными или высшими мультипольными моментами частиц. Поэтому, согласно квантовомеханич. расчётам, усреднённые силы между молекулами (или атомами) в газе на больших расстояниях обычно определяются не эл--статич., а высокочастотной эл--магн. энергией наведённого диполь-дипольного взаимодействия $U\sim -1/R^6$, возникающего вследствие деформации одной молекулой электронного облака другой (см. Межмолекулярное взаимодействие). Лит.: Гречишкин В. С., Ядерные квадрупольные взаимодействия в твердых телах, М., 1973; Бор О., Моттельсон Б., Структура атомного ядра, пер. с англ., т. 2, М., 1977; Гроот С. Р. де Сатторп Л. Г., Электродинамика, пер. с англ., М., 1982; Каплан И. Г., Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий, М., 1982. В. В. Кочаровский, Вл. В. Кочаровский.

[<<](#) Предметный указатель [>>](#)

© femto.com.ua
webmaster@femto.com.ua