

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ВАГИЗОВ Ф.Г. САДЫКОВ Э.К.

ПРОЦЕССЫ БЕСФОНОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И
ПОГЛОЩЕНИЯ ГАММА ФОТОНОВ ЯДРАМИ В
ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

(теория и практика мессбауэровской спектроскопии)
Учебно-методическое пособие.

Казань 2011

Печатается по решению Редакционно-издательского совета Института физики
УДК 539.1 539.2 538.913

Вагизов Ф. Г. Садыков Э. К. Процессы бесфононного излучения и поглощения гамма фотонов ядрами в твердых телах (теория и практика мессбауэровской спектроскопии). Учебно-методическое пособие для студентов третьего и четвертого курса, магистрантов и аспирантов Института физики. Казань 2011, электронная версия.

В классическом и квантово-механическом изложении дано определение фактора Лэмба-Мёссбауэра — параметра, выражающего суть *эффекта Мёссбауэра* и являющегося характеристикой вещества, исследуемого методом ядерного гамма резонанса. Описаны методики экспериментального определения этого параметра. Представлены схема лабораторной установки и алгоритм действий по определению фактора Лэмба-Мёссбауэра для нержавеющей стали методом площадей. Приводится библиография и контрольные вопросы.

Рецензент:

Манапов Р. А., к.-ф.м.н., доцент кафедры технической физики КГТУ имени
Туполева А. Н.

Часть первая

Фактор Лэмба-Мёссбауэра в гамма резонансной спектроскопии

Одним из важных и информативных параметров в мёссбауэровской (гамма-резонансной) спектроскопии является вероятность безотдачного излучения (поглощения) фотонов ядрами твердых тел (фактор Лэмба-Мёссбауэра). В пособии вводится определение фактора Лэмба-Мёссбауэра в классическом и квантово-механическом изложении, дается описание зависимости этого параметра от характера решеточных колебаний, приводится перечень параметров гамма-резонансных спектров (площадь, ширина, амплитуда линии поглощения), величина которых определяется значением фактора Лэмба-Мёссбауэра. Описываются некоторые абсолютные и относительные методики определения вероятности безотдачных переходов на основе экспериментальных данных, приводится их сравнительный анализ. Целью пособия является ознакомление с физической природой фактора Лэмба-Мёссбауэра и приобретение навыков извлечения информации из мёссбауэровских экспериментов. Данное пособие предназначено для методического обеспечения лабораторного практикума по гамма-резонансной спектроскопии, содержит ссылки на оригинальные работы по затронутым вопросам. Задачей лабораторной работы является экспериментальное определение фактора Лэмба-Мёссбауэра для ядер ^{57}Fe в нержавеющей стали и пленках металлического железа. Приведены контрольные вопросы и задачи для закрепления изучаемого материала. Вторая часть пособия содержит вопросы повышенной сложности. Этот материал может быть использован студентами старших курсов и магистратуры при выполнении квалификационных работ, а также аспирантами.

1. Введение

Вероятность безотдачного излучения (поглощения) фотонов ядрами в твердых телах, или *фактор Лэмба-Мёссбауэра*, тесно связана с динамикой кристаллической решетки и является одним из важных и информативных параметров мёссбауэровской спектроскопии. Вероятность безотдачных переходов определяется значением среднеквадратичного смещения мёссбауэровского ядра в направлении излучения (поглощения) гамма фотона. Она чрезвычайно чувствительна к различным изменениям состояния твердого тела под действием температуры, давления, фазовых переходов и других процессов, приводящих к изменениям фононного спектра кристалла.

Подобного рода информация может быть получена по данным упругого рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения. Поскольку эти методы основаны на дифракции излучения, они чувствительны к степени кристалличности исследуемых объектов и их информативные возможности существенно уменьшаются при исследовании аморфных тел и нанокристаллических веществ. Для определения среднеквадратичных смещений резонансных атомов эффект Мёссбауэра представляет определенные преимущества, поскольку его результаты мало зависят от структурного порядка, и метод может быть использован с равным успехом, как для кристаллических веществ, так и аморфных соединений, а в отдельных случаях, даже для жидкостей.

2. Фактор Лэмба-Мёссбауэра

Спектр излучения ядер в твердых телах содержит гамма фотоны двух типов: фотоны, энергия E_γ которых практически равна энергии ядерного перехода E_0 и фотоны другой (как правило, меньшей) энергии (см. рис. 1а). Фотонам первого типа в спектре соответствует узкая (с естественной шириной Γ) линия - линия Мёссбауэра. Такие фотоны появляются в результате *безотдачных процессов*; при их излучении ядро не получает энергию отдачи, как это имеет место для свободных ядер. Энергии фотонов второго типа отличаются от энергии E_0 на величину переданной колебаниям (или полученной от них) энергии в процессе ядерного перехода и занимают в спектре намного более широкий контур шириной D . Фактор Лэмба-Мёссбауэра, f_{LM} ,

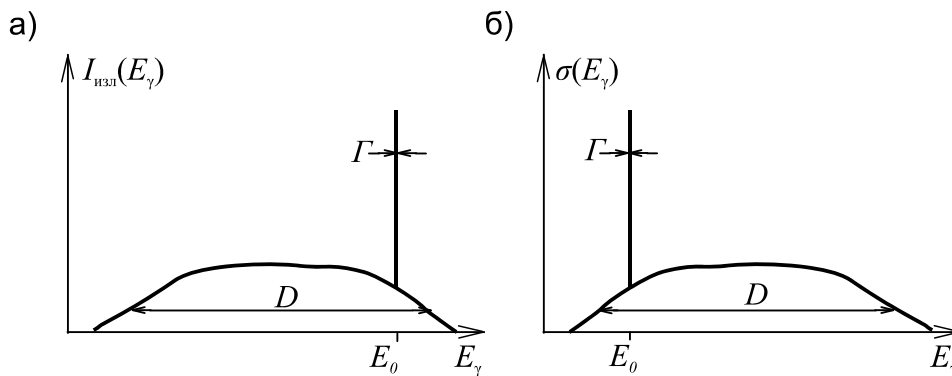


Рис.1. **а)** Спектр гамма-излучения ядер, находящихся в кристалле; энергия E_0 соответствует линии Мёссбауэра с шириной линии на половине высоты, равной Γ . Сплошной спектр шириной D описывает ядерные переходы с участием решеточных колебаний. **б)** Спектр поглощения гамма излучения. Здесь предполагается, что энергии ядерного перехода в источнике и поглотителе равны; т.е. $E_0^s = E_0^a = E_0$.

определяет долю гамма фотонов первого типа из общего числа фотонов в спектре. Эту величину следует определить как вероятность излучения фотона, когда колебательное (фононное) состояние кристалла не меняется. Безотдачный процесс называют также *бесфононным*. Здесь важно подчеркнуть, что такая вероятность отлична от нуля только для связанных (в кристалле) ядер – в этом заключена суть *эффекта Мёссбауэра*. Таким образом, фактор Лэмба-Мёссбауэра (ЛМ) является основным параметром, определяющим эффект Мёссбауэра как физическое явление. Для того, чтобы понять его роль (значимость) в мёссбауэровской спектроскопии проведем анализ простейшей схемы мёссбауэровского эксперимента.

Далее нам придется рассматривать также процессы поглощения гамма фотонов ядрами. Если ядра находятся в кристалле (они связаны), спектр поглощения их опять можно представить в виде двух составляющих (см. рис. 1б) - линии естественной ширины и более широкой полосы с шириной D . Вероятность поглощения в пределах естественной ширины снова определяется фактором ЛМ. При дальнейшем анализе мы ориентируемся на значения параметров, типичные для мёссбауэровского изотопа ^{57}Fe : здесь выполняются следующие неравенства $\Gamma \ll D \ll E_\gamma \approx E_0$; $\Gamma \sim 10^{-8} \text{ eV}$, $D \sim 10^{-2} \text{ eV}$, $E_\gamma \approx E_0 \sim 10^4 \text{ eV}$.

Итак, с одной стороны мы имеем возбужденные ядра в кристалле (*источник*), а с другой – такие же ядра в основном состоянии в другом кристалле (*поглотитель*). Число фотонов, излученных ядрами источника и достигших широкополосного детектора гамма фотонов на некотором расстоянии от источника за единицу времени (*скорость счета на детекторе*) I представим в виде суммы двух слагаемых:

$$I = (1 - f_s)I + f_s I = (1 - f_s)I + \frac{f_s I \Gamma}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma}{(E_\gamma - E_s^0)^2 + \Gamma^2 / 4}. \quad (1)$$

Здесь $f_s \equiv f_{LM}$ - фактор ЛМ для источника, второе слагаемое $f_s I$ определяет число фотонов, заключенных в пределах линии Мёссбауэра, распределение энергии E_γ этих фотонов вблизи E_0 описывается нормированной функцией Лоренца $f_{Lor}(E_\gamma) = \Gamma \left((E_\gamma - E_s^0)^2 + \Gamma^2 / 4 \right)^{-1} / 2\pi$ и $\int f_{Lor}(E_\gamma) dE_\gamma = 1$ (смысл представления второго слагаемого (1) в виде интеграла станет понятен ниже).

Если теперь между источником и детектором поместить поглотитель толщиной d , содержащий резонансные ядра, скорость счета на детекторе уменьшится. Уменьшение счета вызвано поглощением фотонов, излученных источником, электронами всех атомов и резонансными ядрами поглотителя, с коэффициентами линейного поглощения $\mu_{эл}$ и $\mu_{яд}(E_\gamma)$, соответственно. Первый коэффициент не зависит от энергии фотона, а второй имеет вид: $\mu_{яд}(E_\gamma) = \sigma(E_\gamma) n f_a$, где $\sigma(E_\gamma) = (\sigma_0 \Gamma^2 / 4) / \left[(E_\gamma - E_a^0)^2 + \Gamma^2 / 4 \right]$ - сечение резонансного поглощения (формула Брейта-Вигнера) для ядер в поглотителе, n - число резонансных ядер в единице объема поглотителя, f_a - фактор ЛМ для поглотителя. Скорость счета на детекторе с учетом поглотителя с толщиной d равна:

$$I(d) = (1 - f_s) I e^{-\mu_{эл} d} + \frac{f_s I \Gamma e^{-\mu_{эл} d}}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma e^{-\mu_{яд}(E_\gamma) d}}{(E_\gamma - E_s^0)^2 + \Gamma^2 / 4}. \quad (2)$$

Теперь понятно, почему второе слагаемое в (1) и (2) мы представили в виде интеграла по энергии E_γ ; различные гармоники (различные E_γ) в пределах линии Мёссбауэра, проходя через поглотитель, будут ослаблены за счет резонансного поглощения ядер в различной степени. Заметим также, что значение интеграла во втором слагаемом (2) сильно зависит от того, как соотносятся E_s^0 и E_a^0 (энергии ядерного перехода для источника и поглотителя). Рассмотрим сначала случай, когда источник и поглотитель покоятся, и допустим $E_s^0 = E_a^0$. В этом случае интеграл в (2) имеет минимальное значение. Действительно, для $E_\gamma = E_a^0$ коэффициент ослабления $\mu_{яд}(E_\gamma)$ максимален и такому ослаблению подвергается гармоника с максимальным весом; для $E_\gamma = E_a^0 = E_s^0$ знаменатель под интегралом достигает минимума. Именно при

таких условиях имеет место максимальный спад суммарной скорости счета фотонов в пределах ширины линии Мёссбауэра. Теперь допустим, что источник движется по отношению к поглотителю со скоростью v . Это означает, что энергия фотонов от источника возрастает в силу эффекта Доплера на величину $\Delta E_\gamma = \frac{v}{c} E_s^0$. Скорость счета на детекторе в этом случае можно записать с минимальным изменением (2):

$$I_v(d) = (1 - f_s) I e^{-\mu_{\text{за}} d} + \frac{f_s I \Gamma e^{-\mu_{\text{за}} d}}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma e^{-\mu_{\text{за}}(E_\gamma) d}}{(E_\gamma - E_s^v)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (3)$$

где $E_s^v = E_s^0 (1 + v/c)$. Анализ показывает, что значение интеграла в (3) минимально при *резонансной скорости* движения источника, $v_r = c(E_a^0 - E_s^0)/E_s^0$, и возрастает с отклонением скорости от этого значения, $|v - v_r|$ (теперь в наших суждениях, в общем случае, предполагается $E_s^0 \neq E_a^0$). Особый интерес представляет значение $I_v(d)$ при $|v| \rightarrow \infty$ (в действительности речь идет о скоростях, для которых доплеровский сдвиг многократно превышает ширину линии в поглотителе, $\Delta E_\gamma = E_s^0 v/c \gg \Gamma$). В этом случае в (3) остается только эффект электронного поглощения.

$$I_\infty(d) \approx I(1 - f_s) e^{-\mu_{\text{за}} d} + I f_s e^{-\mu_{\text{за}} d} = I e^{-\mu_{\text{за}} d}.$$

Определяемая выражением (3) *резонансная* зависимость $I_v(d)$ от v для *тонкого поглотителя* (см. ниже) представлена на рис. 2а. Вместо этого можно использовать нормированный спектр $I_v(d)/I_\infty(d)$. Более удобная характеристика резонансного поглощения гамма фотонов ядрами поглотителя дается нормированной разностью (*величина эффекта*):

$$\varepsilon(v) = \frac{I_\infty(d) - I_v(d)}{I_\infty(d)},$$

которую называют мессбауэровским спектром поглощения:

$$\varepsilon(v) = \frac{I e^{-\mu_{\text{за}} d} \left(1 - (1 - f_s) - f_s \frac{\Gamma}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma e^{-\mu_{\text{за}}(E_\gamma) d}}{(E_\gamma - E_s^v)^2 + \Gamma^2/4} \right)}{I e^{-\mu_{\text{за}} d}} = f_s \left(1 - \frac{\Gamma}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma e^{-\mu_{\text{за}}(E_\gamma) d}}{(E_\gamma - E_s^v)^2 + \Gamma^2/4} \right). \quad (4)$$

Чтобы понять смысл полученного выражения, упростим (4); для малых толщин d экспоненту под интегралом в (4) можно разложить в ряд. Первые два слагаемые дают:

$$\begin{aligned} \varepsilon(v) &= f_s \left(1 - 1 + \frac{\Gamma}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma \sigma_0 dn f_a \Gamma^2/4}{\left[(E_\gamma - E_s^v)^2 + \Gamma^2/4 \right] \left[(E_\gamma - E_a^0)^2 + \Gamma^2/4 \right]} \right) = \\ &= \sigma_0 f_s f_a dn \frac{1}{2} \frac{\Gamma^2}{(E_s^0 (1 + v/c) - E_a^0)^2 + \Gamma^2} = \sigma_0 f_s f_a dn \frac{1}{2} \frac{(\Gamma c/E_s^0)^2}{(v - v_r)^2 + (\Gamma c/E_s^0)^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь использовано то, что свертка двух лоренцианов приводит снова к лоренцевой функции. Последний результат представляет собой резонансную зависимость скорости счета на детекторе от относительной скорости источник-поглотитель (см. рис. 2б).

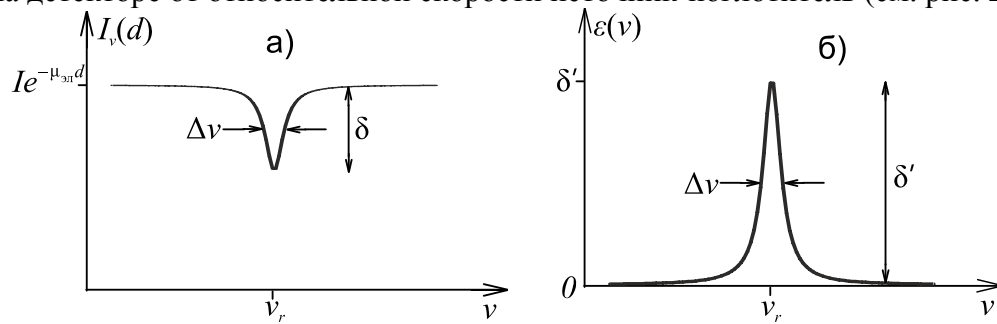


Рис. 2. Поведение скорости счета на детекторе $I_v(d)$ (а) и величины эффекта $\varepsilon(v)$ (б) от относительной скорости источник-поглотитель v для тонкого поглотителя; $v_r = c(E_a^0 - E_s^0)/E_s^0$, $\Delta v = 2c\Gamma/E_s^0$, $\delta \approx I\sigma_0 f_s f_a dn/2$, $\delta' = \sigma_0 f_s f_a dn/2$.

Безразмерную величину $t_a = \sigma_0 f_a dn$ называют *эффективной толщиной* поглотителя. Если $t_a < 1$ поглотитель называют тонким, и только в этом случае мы можем воспользоваться разложением экспоненты в ряд под интегралом в (4), что было использовано при получении формулы (5). Если $t_a > 1$ (толстый поглотитель) выражение (5) некорректно и следует вернуться к выражению (4) для описания экспериментального спектра. В этом случае форма резонанса будет заметно отличаться от лоренцевой формы (5). В выражениях (4) и (5), таким образом, заложен алгоритм мёссбауэровского эксперимента. Эти выражения являются также основой для математической обработки экспериментальных мёссбауэровских спектров. Как видно, гамма-резонансные спектры зависят от ядерных параметров $\mu_{яд}$ и параметров (f_a), определяемых характером движения ядра, как целого. Для наблюдения эффекта Мёссбауэра необходимо, чтобы факторы ЛМ для источника и поглотителя, f_s и f_a , были отличны от нуля и имели по возможности большие значения.

Выражение (4) легко обобщить с учетом возможных изменений входящих в него параметров. У реальных источников и поглотителей практически всегда $E_s^0 \neq E_a^0$, вследствие разного электростатического взаимодействия между ядром и электронным окружением ядер источника и поглотителя (изомерный сдвиг), коэффициент $\mu_{яд}(E_\gamma)$ может содержать несколько различных энергий резонансного поглощения (*сверхтонкая структура поглотителя*). В некоторых случаях приходится для описания экспериментальных спектров вводить также $\Gamma_s \neq \Gamma_a$, различие параметров, определяющих естественные ширины линий Мёссбауэра для источника и поглотителя. Выражение (4) может подвергнуться изменению также в том случае, если детектор фотонов в диапазоне его чувствительности подвержен влиянию другого (фонового) излучения, не связанного с рассматриваемым (мёссбауэровским) ядерным переходом. В этом (часто реализующемся) случае скорость счета на детекторе $I'_v(d)$ оказывается больше скорости счета $I_v(d)$, учитывающего только радиационные процессы на мёссбауэровском переходе, на величину фона $I_{фон}(d)$. С учетом сказанного выражение (4) переписывается как:

$$\varepsilon_v = \frac{I_\infty(d) - I_v(d)}{I_\infty(d)} = \frac{I'_\infty(d) - I'_v(d)}{I'_\infty - I'_{\text{фон}}(d)}, \quad I_v(d) = I'_v(d) - I'_{\text{фон}}(d). \quad (6)$$

Подводя итог сказанному выше, отметим, что выражение (4) может быть использовано для того, чтобы на основе сопоставления теории и эксперимента получить значения входящих в него неизвестных параметров. Нас в этой работе будут интересовать величины f_s и f_a .

3. Вычисление фактора Лэмба-Мёссбауэра в классическом приближении

Строгое теоретическое обоснование эффекта Мёссбауэра достигается в представлениях квантовой теории. Однако основной результат, неравенство нулю фактора ЛМ для ядер в кристаллической решетке, можно получить и в рамках классической физики (см. Ф.Л. Шапиро [1]).

Пусть возбужденное ядро в кристалле испускает фотон с частотой ω_0 . Тогда векторный потенциал излучения на расстоянии x от ядра определяется выражением

$$A(t) = A(0)e^{-\gamma t} e^{i(\omega_0 t - kx)}, \quad (7)$$

где $\gamma = \Gamma/2$ – коэффициент затухания, определяемый шириной возбужденного уровня ядра Γ . Частотный спектр такого излучения определяется функцией Лоренца

$$I(\omega) = \frac{\Gamma / 2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma / 2)^2}. \quad (8)$$

Следует отметить, выражения (7) и (8) записаны для гипотетического случая; подвижность ядра, закрепленного в кристалле, полностью подавлена. Величина ω_0 определена соотношением $\hbar\omega_0 = E_0$, где E_0 – энергия ядерного перехода. Теперь примем во внимание возможные колебания ядра вблизи положения равновесия со скоростью $v(t)$ (в направлении наблюдения). Тогда, благодаря доплеровской модуляции частоты излучения, фазовое слагаемое в показателе экспоненты в (7) переписется как:

$$\omega_0 t \rightarrow \phi(t) = \int_0^t \omega_0 (1 + v(t')/c) dt' = \omega_0 t + kx(t), \quad (9)$$

где $x(t)$ – смещение ядра из положения равновесия в направлении распространения гамма-излучения. Смещение может быть выражено как

$$x(t) = x_0 \sin \Omega t,$$

где Ω ($\Omega \ll \omega_0$) представляет частоту тепловых колебаний резонансных ядер (например, колебания в модели Эйнштейна), x_0 – амплитуда колебаний.

С учетом фазовой модуляции векторный потенциал (7) приобретает вид

$$A(t) = A(0)e^{-i\omega_0 t - \Gamma t/2} e^{-ikx_0 \sin \Omega t}. \quad (10)$$

Если представить последний множитель в виде суммы функций Бесселя

$$e^{-ikx_0 \sin \Omega t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(kx_0) e^{-in\Omega t}, \quad (11)$$

то выражение (10) может быть представлено в виде

$$A(t) = A(0) \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(kx_0) e^{-\Gamma t/2} e^{-i\omega_0 t - in\Omega t} . \quad (12)$$

Следовательно, частотный спектр излучения возбужденного ядра в этом случае будет

$$I(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |J_n(kx_0)|^2 \frac{(\Gamma/2\pi)}{(\omega - \omega_0 - n\Omega)^2 + (\Gamma/2)^2} . \quad (13)$$

Видно, что излучение состоит из спектральной линии на несмещенной частоте ω_0 и ряда линий-спутников с частотами $\omega_0 \pm \Omega, \omega_0 \pm 2\Omega, \dots, \omega_0 \pm n\Omega, \dots$ (см. рис.3). Каждая спектральная линия имеет лоренцеву форму с шириной Γ и амплитудой, определяемой квадратом соответствующей функции Бесселя, $J_n(kx_0)$. По определению, данному выше, фактор Лэмба-Мёссбауэра есть отношение доли гамма фотонов с энергиями $E_\gamma \simeq \hbar\omega_0 = E_0$ в пределах естественной ширины Γ к числу фотонов со всевозможными энергиями. Аналитически это есть отношение площади под несмещенной линией к полной площади под спектром (13); суммирование в (13) - по всем целым числам n в пределах $-\infty < n < \infty$.

$$f_{LM} = |J_0(kx_0)|^2 / \sum_n |J_n(kx_0)|^2 = |J_0(kx_0)|^2, \quad \sum_n |J_n(kx_0)|^2 = 1. \quad (14)$$

Для гамма переходов с низкой энергией ($E_\gamma \sim 10^4 \text{ eV}$) $kx_0 \ll 1$, что означает $x_0/\lambda \ll 1$; в этом случае, используя разложение функции Бесселя по малому параметру, получим из (14):

$$\ln f_{LM} \approx 2 \ln(1 - \frac{k^2 x_0^2}{4}) \approx -\frac{k^2 x_0^2}{2}, \quad \text{или } f_{LM} = e^{-k^2 \langle x^2 \rangle}, \quad (15)$$

где $\langle x^2 \rangle = x_0^2/2$ - среднеквадратичное смещение ядра при его гармоническом колебании (в направлении излучения гамма фотона). Согласно более реалистичной

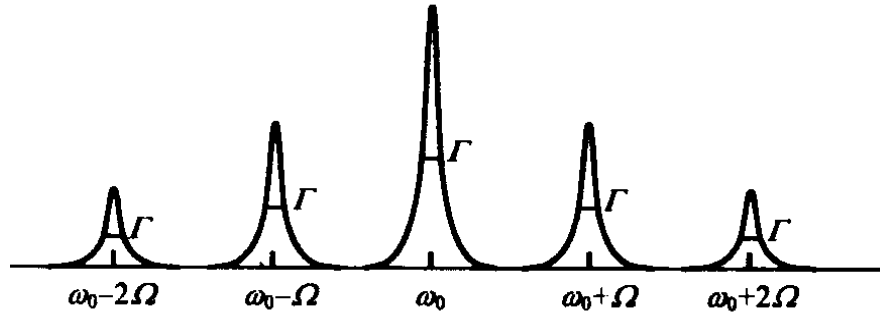


Рис. 3. Распределение интенсивности линий гамма излучения при гармоническом колебании ядра с частотой Ω .

модели решеточных колебаний ядро подвержено влиянию $3N$ (N - число элементарных ячеек в кристалле) типов колебаний с различными частотами. Теперь интенсивность несмещенной линии в спектре излучения выражается как

$$f_{LM} = \prod_{m=1}^{3N} |J_0(kx_{m0})|^2; \quad \ln f_{LM} \approx 2 \sum_m \ln(1 - k^2 x_{m0}^2/4) \approx -k^2 \sum_m x_{m0}^2/2 = -k^2 \langle x^2 \rangle,$$

здесь суммирование проводится по квадратам проекций амплитуд всех типов колебаний x_{m0} на направление распространения фотона. В правой части последнего равенства введено средне квадратичное смещение ядра $\langle x^2 \rangle = \sum_m x_{m0}^2 / 2$. Итак:

$$f_{LM} = \exp(-k^2 \langle x^2 \rangle), \quad (16)$$

т. е. и в этом случае мы приходим к тому, что интенсивность несмещенной линии связана с среднеквадратичным смещением ядра $\langle x^2 \rangle = \sum_m x_{m0}^2 / 2$ в направлении распространения фотона.

Результаты (15) и (16), полученные для классической модели колебаний излучающего ядра, сохраняют свой вид и при более строгом описании колебаний решетки, на основе квантово-механических представлений (см. Часть 2). Такие расчеты были проведены Р. Мёссбауэром сразу же после экспериментального обнаружения им в 1958 году явления безотдачного излучения и поглощения гамма фотонов ядрами в твердых телах [2]. При этом он пользовался результатами У. Лэмба [3], который еще 1939 году теоретически показал существование бесфононной линии в спектре резонансного захвата нейтронов ядрами твердых тел. Из ранних работ по квантовым расчетам фактора ЛМ отметим также работы У. Вишера [4] и Г. Липкина [5]. Здесь следует отметить и то, что безотдачные процессы взаимодействия излучения с кристаллом были известны задолго до Лэмба и Мёссбауэра. Речь идет об упругом (без потери энергии) рассеянии рентгеновских лучей на атомах кристаллической решетки. Именно в результате интерференции упругих амплитуд рассеяния на атомах решетки реализуются условия наблюдения дифракционных максимумов. Эксперименты по наблюдению дифракционных максимумов составляют основу рентгеноструктурного анализа кристаллов – мощного метода исследования структуры и динамики твердых тел. Интенсивность дифракционных максимумов в рентгеноструктурном анализе определяется *фактором Дебая-Валлера*, который имеет много общего с обсуждаемой здесь характеристикой эффекта Мёссбауэра – фактором Лэмба-Мёссбауэра (см. Часть 2).

Эффект Мёссбауэра имеет место также для атомов, внедренных в аморфные среды, если энергия связи атома с окружением достаточно велика. К. Сингви и А. Съеландер [6] провели вычисления спектра излучения ядра, находящегося в аморфной среде, на основе метода Л. Ван Хова [7], описывая движение атомов в представлениях пространственно-временной корреляционной функции. Ими было показано существование вероятности упругих процессов излучения и поглощения фотонов ядрами и в этом случае. В отличие от кристаллов, в таких средах имеет место диффузия атомов. Следствием этого является диффузионное уширение линии Мёссбауэра. В заключение поучительно вспомнить теоретическую работу Дикке [8] (1952 год), в которой он анализировал спектр излучения атома, заключенного между двумя стенками. Таким образом он моделировал влияние столкновений в плотном газе на спектр излучения атомов. В рамках своей модели Дикке обнаружил в спектре излучения атома несмещенную линию естественной ширины (это - аналог мёссбауэровской линии!). Общей особенностью всех известных моделей, приводящих к появлению несмещенной линии в спектре излучения, является финитный характер движения излучателя.

4. Методы измерения фактора Лэмба-Мёссбауэра

В этом разделе обсуждается вопрос о том, какие методики имеются для экспериментального определения фактора ЛМ. Наши суждения основаны на методе поглощения, описанном в разд. 2, и на выражении для мёссбауэровского спектра (4):

$$\varepsilon(\nu) = f_s \left(1 - \frac{\Gamma}{2\pi} \int \frac{dE_\gamma \exp(-\mu_{\text{яд}}(E_\gamma)d)}{(E_\gamma - E_s^v)^2 + \Gamma^2/4} \right), \mu_{\text{яд}}(E_\gamma) = \sigma(E_\gamma) n f_a = \frac{\sigma_0 n f \Gamma^2/4}{(E_\gamma - E_a^0)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (17)$$

Данное выражение для $\varepsilon(\nu)$ сводится к лоренциану (см. (5) разд.2) в случае малых эффективных толщин. В этом случае имеется вполне определенная зависимость максимальной интенсивности линии $\varepsilon(\nu_r)$ ($\nu_r = c(E_a^0 - E_s^0)/E_s^0$), ее ширины и площади под ней от эффективной толщины $t_a = f_a n \sigma_0 d$. Например, в этом приближении площадь и интенсивность прямо пропорциональны t_a , а ширина линии от t_a не зависит. С ростом t_a однако, такие простые закономерности не имеют место. Функция $\varepsilon(\nu)$ искажается от лоренцевой формы и зависимость каждой из перечисленных характеристик спектра от t_a может быть представлена номограммой. Определив t_a из этих номограмм, можно далее получить численное значение фактора ЛМ с учетом соотношения $t_a = f_a n \sigma_0 d$. Проанализируем в качестве примера методики определения фактора ЛМ, основанные на измерении интенсивности линии и площади под спектром. Предварительно получим выражения для этих величин (интенсивности и площади) на основе (17).

Для интенсивности при разных ширинах линий источника и поглотителя, Γ_s и Γ_a , имеем выражение (вывод в Прил. А1):

$$\frac{\varepsilon(\nu_r)}{f_s} = 1 - e^{-t_a/2} I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) - 2e^{-t_a/2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^n I_n\left(\frac{t_a}{2}\right), \quad (18)$$

которое, как мы видим, зависит от эффективной толщины поглотителя и соотношения ширин линий источника и поглотителя $\xi = \Gamma_s/\Gamma_a$. Через I_0 и I_1 обозначены модифицированные функции Бесселя нулевого и первого порядка. В случае равных ширин линии источника и поглотителя, то есть $\Gamma_s = \Gamma_a$, $\xi = 1$, эта формула сводится к весьма простой форме

$$\varepsilon(\nu_r) = f_s \left[1 - e^{-t_a/2} I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) \right]. \quad (19)$$

Зависимость (18) представлена на рис 4 для различных значений ξ .

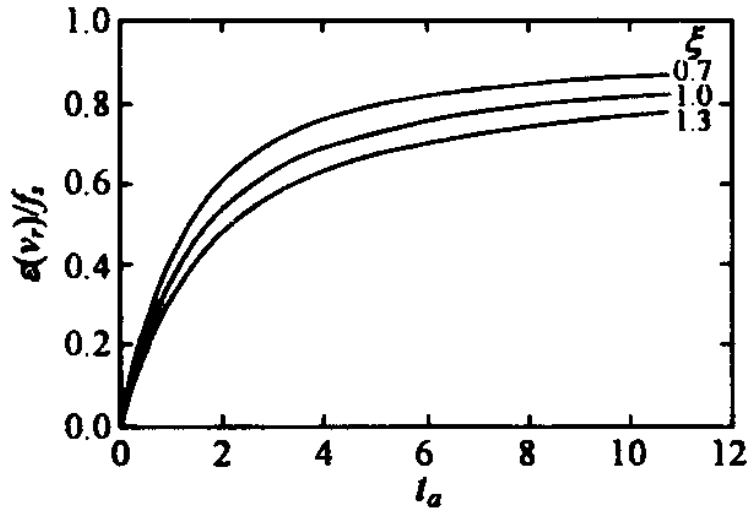


Рис. 4. Зависимость $\frac{\varepsilon(v_r)}{f_s}$ от эффективной толщины t_a для отношения ширины линий испускания и поглощения $\xi = 0.7, 1.0, 1.3$.

Площадь под одиночной спектральной линией определяется выражением (вывод в Прил. А2):

$$A(t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} f_s [1 - T(v)] dv = f_s \Gamma_a \pi \frac{t_a}{2} \exp\left(-\frac{t_a}{2}\right) \left[I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) + I_1\left(\frac{t_a}{2}\right) \right]. \quad (20)$$

Здесь введен $T(v)$ – интеграл пропускания,

$$T(v) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_s}{2\pi} \frac{1}{(E - E_0 - \frac{v}{c} E_0) + \Gamma_s^2/4} \cdot e^{-\frac{\sigma(E)t_a}{\sigma_0}} dE. \quad (21)$$

Как видно из выражения (20), $A(t_a)$ зависит от эффективной толщины поглотителя и график этой зависимости приведен на рис.5. По мере увеличения толщины поглотителя площадь $A(t_a)$, как и амплитуда линии поглощения $\varepsilon(v_r)$ (рис.4), растет на начальном участке ($t_a < 1$) линейно, но уже в области $t_a > 2$ начинает наблюдаться отклонение от линейного роста и насыщение. Сравнение графиков на рис. 4 и рис. 5 показывает, что насыщение $\varepsilon(v_r)$ наступает на много раньше по сравнению с насыщением площади спектра $A(t_a)$. Следует отметить, что вследствие этой особенности измерение фактора Лэмба-Мёссбауэра в большинстве случаев проводят методом, основанным на измерении площади спектра, поскольку этот параметр, $A(t_a)$, остается достаточно чувствительным к изменению толщины поглотителя вплоть до $t_a \approx 15 - 20$. В области малой толщины, амплитуда мёссбауэровской линии $\varepsilon(v_r)$ также чувствительна к изменению толщины поглотителя, но следует заметить, что значение $\varepsilon(v_r)$ зависит как от ширины линии поглощения Γ_a , так и ширины линии источника Γ_s (см. более общее выражение для $\varepsilon(v_r)$, (18)). Поэтому для получения надежных результатов по определению фактора Лэмба-Мёссбауэра необходимо измерить с хорошей точностью и ширину линии источника. Такой необходимости нет при использовании метода площадей, поскольку площадь под мёссбауэровской линией зависит только от ширины линии поглощения Γ_a .

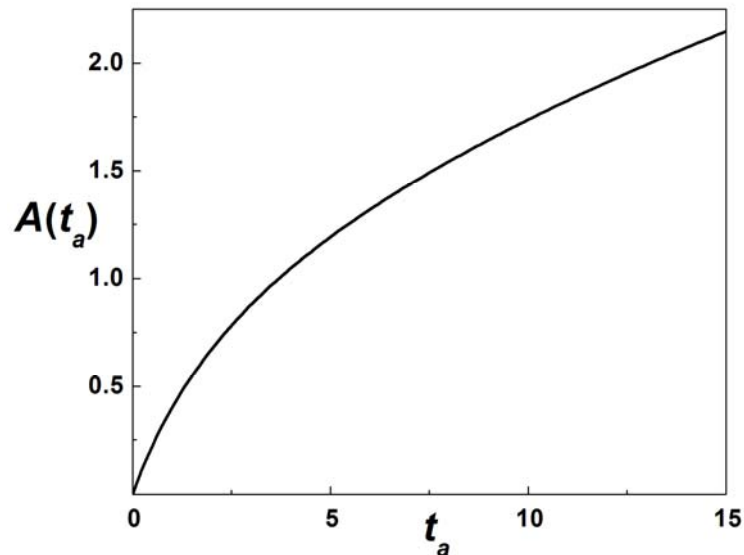


Рис. 5. Зависимость площади мёссбауэровского спектра от эффективной толщины поглотителя; значение f_s в уравнении (20) взято равным 1.

Методы измерения вероятности эффекта Мёссбауэра можно разбить на две группы. Отнесем в первую группу методы, которые можно условно назвать абсолютными методами. Ко второй группе отнесем методы, основанные на относительных измерениях. Рассмотрим теперь методику определения t_a , основанную на измерении площади под спектром и использующую технику относительных измерений.

Допустим, у нас имеется два образца из одного и того же материала с эффективными толщинами t_x и $2t_x$, и мы хотим определить значение фактора ЛМ для этого материала. Определим сначала теоретически отношение площадей под спектрами, вычисленных для толщин $2t_a$ и t_a , пользуясь выражением (20). Отношение этих двух величин определяется функцией:

$$R(t_a) = \frac{A(2t_a)}{A(t_a)} = \frac{2 \exp(-\frac{t_a}{2}) [I_0(t_a) + I_1(t_a)]}{\left[I_0(\frac{t_a}{2}) + I_1(\frac{t_a}{2}) \right]}. \quad (22)$$

Теперь мы видим, что (22), в отличие от (20), не зависит от f_s . Функция $R(t_a)$ в хорошем приближении может быть аппроксимирована простым выражением:

$$R(t_a) \approx 1.4242 + 0.1105 \exp(-t_a/4) + 0.4645 \exp(-t_a). \quad (23)$$

На рис. 6 приведены графики функции $R(t_a)$ в точной (22) и приближенной форме (23). В заданном интервале изменения t_a они почти идентичны, отклонение приближенной формулы (23) от точной составляет не более 0.06 процентов.

Экспериментальная часть работы сводится к получению мёссбауэровского спектра сначала одного образца с толщиной t_x , а затем двух (наложенных друг на друга) образцов той же толщины. Путем математической обработки спектров определим экспериментальные величины для площадей двух спектров, $A_{\text{экс}}(t_x)$ и $A_{\text{экс}}(2t_x)$. По отношению площадей измеренных спектров $R_{\text{экс}}(t_x) = A_{\text{экс}}(2t_x)/A_{\text{экс}}(t_x)$ можно легко определить по графику (рис. 6) эффективную толщину поглотителя t_x , а,

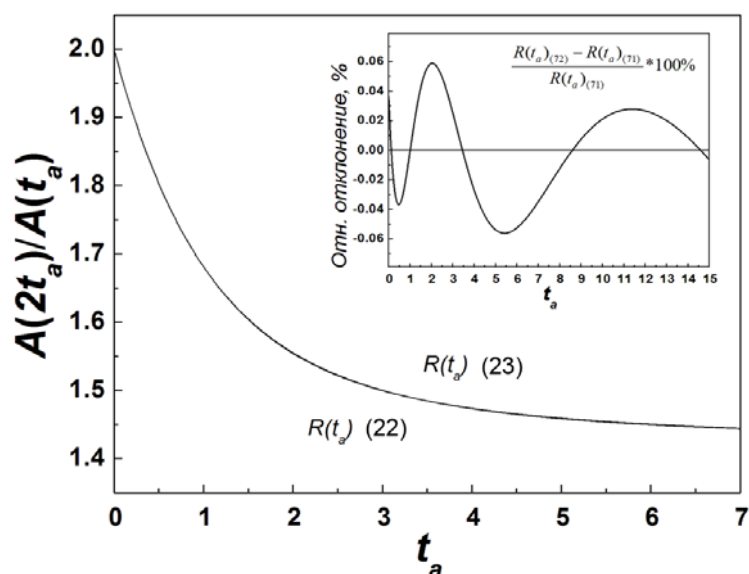


Рис. 6. Зависимость отношения площадей спектров $R(t_a) = A(2t_a)/A(t_a)$ от эффективной толщины t_a ; верхняя кривая выражена в форме (23), нижняя – в форме (22).

следовательно, и искомый фактор Лэмба-Мёссбауэра для ядер, в использованном в качестве поглотителя материале, $f_x \equiv f_a$. Для нахождения эффективной толщины по измеренному значению $R_{\text{экс}}$ можно также воспользоваться выражением:

$$t_a = -0.02483 - 0.02578 \cdot R_{\text{экс}} - 1.184 \cdot \log[1.9 \cdot R_{\text{экс}} - 2.7815]. \quad (24)^*$$

При использовании этой формулы ошибка определения t_a в диапазоне $t_a < 5$ составляет не более 0.2%. Ниже зависимость t_a от $R_{\text{экс}}$ приведена также в табличной форме (табл. 1) для образцов с эффективной толщиной $t_a < 5$, а на рис. 7 – ее график.

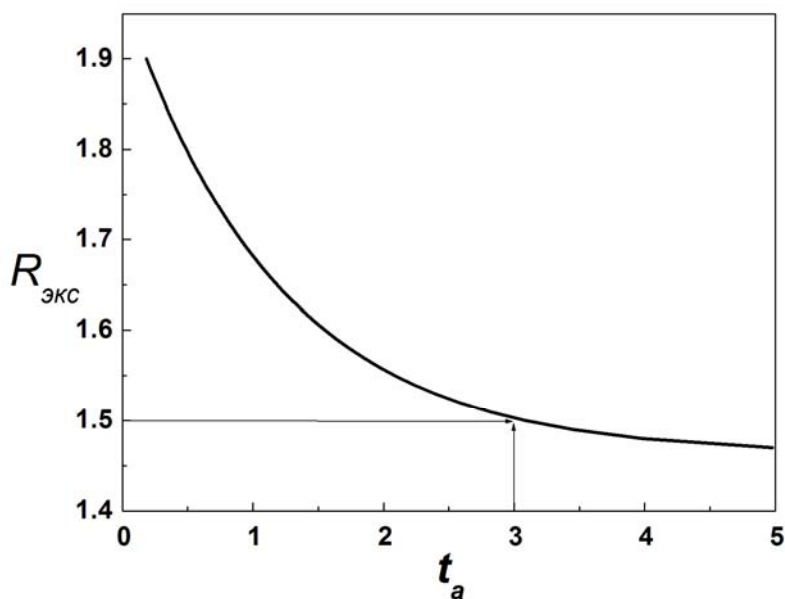


Рис. 7. График функции (24)* в интервале изменений $t_a < 5$.

*Вагизов Ф.Г. – не опубликованные результаты.

Таблица 1. Значения эффективной толщины t_x , определяемые по измеренной величине отношения площадей спектров $R_{\text{экс}}$ согласно формуле (24).

$R_{\text{экс}}$	t_x	$R_{\text{экс}}$	t_x	$R_{\text{экс}}$	t_x	$R_{\text{экс}}$	t_x
1.90	0.18	1.79	0.53	1.68	1.01	1.57	1.84
1.89	0.21	1.78	0.56	1.67	1.07	1.56	1.96
1.88	0.24	1.77	0.60	1.66	1.12	1.55	2.09
1.87	0.27	1.76	0.64	1.65	1.19	1.54	2.23
1.86	0.30	1.75	0.68	1.64	1.25	1.53	2.39
1.85	0.33	1.74	0.72	1.63	1.32	1.52	2.58
1.84	0.36	1.73	0.76	1.62	1.39	1.51	2.81
1.83	0.39	1.72	0.81	1.61	1.47	1.50	3.09
1.82	0.42	1.71	0.86	1.60	1.55	1.49	3.45
1.81	0.46	1.70	0.91	1.59	1.64	1.48	3.99
1.80	0.49	1.69	0.96	1.58	1.74	1.47	4.98

А.1 Зависимость интенсивности мёссбауэровской линии в резонансе от эффективной толщины поглотителя

Пусть Γ_s и Γ_a ширина мёссбауэровской линии источника и поглотителя, соответственно. В большинстве случаев они не равны друг другу, то есть $\xi = \Gamma_s/\Gamma_a \neq 1$. Поэтому кривая резонансного поглощения (17) может быть переписана с небольшими изменениями обозначений:

$$\varepsilon(S) = \frac{I(\infty) - I(\nu)}{I(\infty) - I_b} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_s \Gamma_s}{(E - E_0 + S)^2 + \Gamma_s^2/4} \left\{ 1 - e^{-\frac{t_a \Gamma_a^2/4}{(E - E_0)^2 + \Gamma_a^2/4}} \right\}, \quad (\text{A.1})$$

где $S = E_0(\nu/c)$, ν – доплеровская скорость источника, E_0 и E'_0 – положения линии излучения и поглощения, соответственно.

Введем два безразмерных параметра $\nu_r = c(E'_a - E'_s)/E_s^0$

$$x = \frac{2(E - E'_0)}{\Gamma_a}, \quad y = \frac{2(S + E'_0 - E_0)}{\Gamma_a}, \quad (\text{A.2})$$

и перепишем интеграл (A.1) как

$$\varepsilon(y) = \frac{f_s \xi}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-t_a/1+x^2}}{\xi^2 + (x+y)^2} dx = f_s - \frac{f_s \xi}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t_a/1+x^2}}{\xi^2 + (x+y)^2} dx. \quad (\text{A.3})$$

Замена $x = \tan \frac{\phi}{2}$ в интеграле (A.3) дает

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - \frac{\xi}{\pi} \frac{e^{-t_a/2}}{\xi^2 + y^2 + 1} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{-(t_a/2)\cos\phi} d\phi}{1 + \frac{\xi^2 + y^2 - 1}{\xi^2 + y^2 + 1} \cos\phi + \frac{2y}{\xi^2 + y^2 + 1} \sin\phi} \quad (\text{A.4})$$

Введем еще два параметра, ρ и θ , такие, что

$$\begin{aligned} \frac{\xi^2 + y^2 - 1}{\xi^2 + y^2 + 1} &= \rho \cos \theta & \frac{2y}{\xi^2 + y^2 + 1} &= \rho \sin \theta \\ \rho^2 &= 1 - \frac{4\xi^2}{(\xi^2 + y^2 + 1)^2} & \theta &= \arccos \left[\frac{\xi^2 + y^2 - 1}{\sqrt{(\xi^2 + y^2 + 1)^2 - 4\xi^2}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Здесь $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$. Использование этих параметров приводит к существенному упрощению интеграла (A.4)

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - \frac{e^{-t_a/2} \sqrt{1 - \rho^2}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{-(t_a/2)\cos\phi}}{1 + \rho \cos(\phi - \theta)} d\phi. \quad (\text{A.6})$$

В этом интеграле знаменатель дроби является периодической функцией ϕ с периодом 2π и может быть разложен в ряд Фурье

$$\frac{1}{1 + \rho \cos(\varphi - \theta)} = \sum_{-\infty}^{\infty} a_n(\rho, \theta) e^{in\varphi}, \quad (\text{A.7})$$

где

$$a_n(\rho, \theta) = \frac{e^{-in\theta}}{\sqrt{1-\rho^2}} \left(\frac{\sqrt{1-\rho^2}-1}{\rho} \right)^{|n|}. \quad (\text{A.8})$$

Вводя это разложение, мы получаем следующее выражения для интеграла (A.6)

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - \frac{e^{-t_a/2}}{2\pi} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} \left(\frac{\sqrt{1-\rho^2}-1}{\rho} \right)^{|n|} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i(t_a/2)\cos\varphi + in\varphi} d\varphi. \quad (\text{A.9})$$

Видно, что интеграл в последнем выражении есть модифицированная функция Бесселя, I_n , поэтому мы можем переписать (A.9) как

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - e^{-t_a/2} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-in\theta} \left(\frac{\sqrt{1-\rho^2}-1}{\rho} \right)^{|n|} I_n\left(-\frac{t_a}{2}\right). \quad (\text{A.10})$$

Так как для модифицированных функций Бесселя справедливы соотношения $I_n(x) = I_{-n}(x)$ и $I_n(-x) = (-1)^n I_n(x)$, мы можем рассортировать члены с $+n$ и $-n$ так, что в конечном выражении для (A.10) получим

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - e^{-t_a/2} \left\{ I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(-\frac{\sqrt{1-\rho^2}-1}{\rho} e^{i\theta} \right)^n + \left(-\frac{\sqrt{1-\rho^2}-1}{\rho} e^{-i\theta} \right)^n \right] I_n\left(\frac{t_a}{2}\right) \right\}. \quad (\text{A.11})$$

Теперь для упрощения мы можем воспользоваться такой заменой

$$-\frac{\sqrt{1-\rho^2}-1}{\rho} = e^{-\beta} \quad (\beta > 0), \quad (\text{A.12})$$

где условие $\beta > 0$ необходимо для сходимости бесконечной суммы. Тогда выражение (A.11) может быть записано в более компактной форме

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - e^{-t_a/2} I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) - 2e^{-t_a/2} \sum_{n=1}^{\infty} (e^{-n\beta} \cos n\theta) I_n\left(\frac{t_a}{2}\right). \quad (\text{A.13})$$

В точном резонансе, то есть когда $\nu_r = c(E_0 - E'_0)/E_0$, $y = 0$, $\theta = 0$ мы получаем следующее аналитическое выражение для интенсивности спектральной линии

$$\frac{\varepsilon(y)}{f_s} = 1 - e^{-t_a/2} I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) - 2e^{-t_a/2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\xi-1}{\xi+1} \right)^n I_n\left(\frac{t_a}{2}\right), \quad (\text{A.14})$$

которое, как мы видим, зависит только от эффективной толщины поглотителя и соотношения ширин линий источника и поглотителя $\xi = \Gamma_s/\Gamma_a$. В случае равных ширин линии источника и поглотителя, то есть $\Gamma_s = \Gamma_a$, $\xi = 1$, эта формула сводится к весьма простой форме

$$\varepsilon(\nu_r) = f_s \left[1 - e^{-t_a/2} I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) \right]. \quad (\text{A.15})$$

А.2 Зависимость площади линии поглощения от эффективной толщины поглотителя

Площадь мёссбауэровской линии можно определить интегрированием функции профиля мёссбауэровской линии $\varepsilon(S)$

$$A(t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(S) dS. \quad (\text{A.16})$$

Приведем вывод этой формулы следуя за Williams и Brooks, которые привели ее впервые в работе [9]. Для этого подставим в (A.16) выражение для профиля мёссбауэровской линии (A.3).

$$A(t_a) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_s \xi}{\pi} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-t_a/(1+x^2)}}{\xi^2 + (x+y)^2} dx \right\} dS = f_s \frac{\Gamma_a}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ 1 - e^{-\frac{t_a}{1+x^2}} \right\} dx. \quad (\text{A.17})$$

Используя простое интегральное представление

$$1 - e^{-\alpha t_a} = \alpha \int_0^{t_a} e^{-\alpha t} dt, \quad (\text{A.18})$$

и замену переменной $x = \tan \frac{\varphi}{2}$ мы можем переписать (A.17) в таком виде

$$A(t_a) = f_s \frac{\Gamma_a}{4} \int_0^{t_a} dt \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{\left[-\frac{t}{2(1+\cos\varphi)} \right]} = f_s \frac{\Gamma_a}{2} \int_0^{t_a} dt e^{\left(-\frac{t}{2} \right)} \int_0^{\pi} d\varphi e^{\left[-\frac{t}{2} \cos\varphi \right]}. \quad (\text{A.19})$$

Воспользуемся определением модифицированных функций Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента:

$$J_0(i\xi) = I_0(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{-\xi \cos\phi} d\phi, \quad (\text{A.20})$$

(ξ – реальная величина) и приведем с их помощью интеграл (A.19) к виду

$$A(t_a) = f_s \frac{\Gamma_a}{2} \pi \int_0^{t_a} e^{-t/2} I_0\left(\frac{t}{2}\right) dt. \quad (\text{A.21})$$

Можно показать, что

$$\int_0^{\eta} e^{-x} I_0(x) dx = \eta e^{-\eta} [I_0(\eta) + I_1(\eta)]. \quad (\text{A.22})$$

Тогда мы можем записать конечное выражение для $A(t_a)$

$$A(t_a) = f_s \Gamma_a \pi \frac{t_a}{2} e^{-\frac{t_a}{2}} \left[I_0\left(\frac{t_a}{2}\right) + I_1\left(\frac{t_a}{2}\right) \right]. \quad (\text{A.23})$$

Как видно, $A(t_a)$ не зависит от ширины линии источника Γ_s . В этом и заключается главное отличие зависимости площади под резонансной линией и интенсивности линии от эффективной толщины поглотителя.

Лабораторная работа

5. Экспериментальное определение фактора Лэмба-Мёссбауэра с помощью метода площадей и относительных измерений.

I. Использование метода площадей для набора идентичных поглотителей.

Цель работы: определение фактора Лэмба-Мёссбауэра нержавеющей стали методом площадей.

Экспериментальное оборудование: мёссбауэровский спектрометр, работающий в режиме многоканального счета с постоянным ускорением системы движения мёссбауэровского источника ^{57}Co ; сцинтилляционный детектор и амплитудный анализатор для выделения резонансных гамма квантов (14.4 КэВ); программное обеспечение и компьютер для управления мёссбауэровским спектрометром, настройки уровней дискриминации амплитудного анализатора, вывода экспериментального спектра и математической обработки полученных результатов.

Исследуемый образец: две фольги нержавеющей стали толщиной порядка 10 мк площадью 15*15 мм². Рекомендуется выбрать одинаковые по толщине образцы.

Порядок выполнения работы:

1. Включить мёссбауэровский спектрометр, тракт регистрации, компьютер.
2. Установить на рекомендуемых расстояниях детектор излучения, держатель образца и коллиматор мёссбауэровского движителя.
3. Закрепить на коллиматоре один образец.
4. После 20-30 минутного прогрева аппаратуры и восстановления стабильного режима работы движителя снять амплитудный спектр излучения, прошедшего через исследуемый образец.
5. Установить нижний и верхний порог дискриминации для регистрации резонансного излучения (14.4кэВ).
6. Установить число каналов счета равным 256, а диапазон изменения скорости спектрометра равным $\pm 2\text{мм/сек}$.
7. Запустить спектрометр и снять мёссбауэровский спектр со статистикой не менее 100 тысяч импульсов на канал.
8. Провести математическую обработку экспериментального спектра с помощью программы UNIVEM. Определить параметры спектра: амплитуды линии, изомерный сдвиг, ширину на полувысоте, площадь под линией поглощения $A(t_a)$.
9. Закрепить на коллиматоре вторую фольгу поверх первой.
10. Снять мёссбауэровский спектр этого составного поглотителя со статистикой не менее 100 тысяч импульсов на канал.
11. Провести программой UNIVEM математическую обработку экспериментального спектра. Определить параметры спектра: амплитуды линии, изомерный сдвиг, ширину на полувысоте, площадь под линией поглощения $A(2t_a)$.
12. Найти отношение $R_{\text{жс}} = A(2t_a) / A(t_a)$. Используя график Рис. 6 или Таб. 1, найти эффективную толщину t_a . Вычислить t_a с помощью формулы (23), сравнить полученные результаты.

13. Вычислить число ядер ^{57}Fe на единицу площади, n , используя измеренную толщину фольги, естественное содержание изотопа ^{57}Fe в образце (2.2 %) и плотность нержавеющей стали ($\rho = 8.03 \text{ г/см}^3$).
14. Вычислить фактор Лэмба-Мёссбауэра, $f = \frac{t_a}{dn\sigma_0}$, используя $\sigma_0 = 2.56 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$ – сечение резонансного поглощения.
15. Сравнить полученное значение с литературными данными.

6. Вопросы и задачи.

1. Векторный потенциал электромагнитного излучения на расстоянии x_0 от ядра определяется выражением $A(t) = A(0)e^{-\gamma t} e^{i(\omega_0 t - kx_0)}$, где γ – коэффициент затухания ($\gamma = \Gamma_0/2$), ω_0 – частота излучения, k – волновой вектор. Определить частотный спектр такого излучения (распределение Лоренца).
2. Упростить выражение (4) для малых значений эффективной толщины – получить выражение (5).
3. Вывести формулу для вероятности излучения без отдачи, пользуясь классическим описанием решеточных колебаний.
4. Какого рода информация заключена в факторе Лэмба-Мёссбауэра?
5. Почему эффект Мёссбауэра представляет определенные преимущества при исследовании среднеквадратичных смещений атомов в нанокристаллических и аморфных соединениях по сравнению с рентгеноструктурными измерениями?
6. Чем обусловлено насыщение поглощения при увеличении эффективной толщины поглотителя?
7. Почему метод площадей более удобен для определения фактора Лэмба-Мёссбауэра?
8. Во сколько раз смещение частоты гамма кванта с энергией 14.4 кэВ за счет отдачи при излучении больше естественной ширины резонансной линии ядер ^{57}Fe ?
9. Определить фактор Лэмба-Мёссбауэра ядер ^{57}Fe в алмазе при температуре 4.2 К, если температура Дебая кристалла равна $\theta_D = 2230 \text{ К}$?
10. Во сколько раз фактор Лэмба-Мёссбауэра ядер ^{57}Fe в алмазе больше фактора Лэмба-Мёссбауэра в металлическом железе при температуре 1000 К?

Литература к первой части

1. Ф.Л.Шапиро, Эффект Мёссбауэра и его приложения, УФН, 72 (1960) 685-696.
2. R.L. Mossbauer, Kernresonanzfluoreszenz von Gammastrahlung in Ir^{191} , Z. Phys. 151, 124-143 (1958); Naturwiss. 45, 538-539 (1958); Z. Naturforsch. 14a, 211 (1959).
3. W.E. Lamb, Capture of neutrons by atoms in a crystal, Phys. Rev. 55 (1939) 190-197.
4. W.M. Visscher, Study of lattice vibrations by resonance absorption of nuclear gamma rays, Ann. Phys. 9 (1960) 194-210.
5. H.J. Lipkin, Some simple features of the Mossbauer effect, Ann. Phys. 9 (1960) 332-339.
6. K.S. Singwi and A. Sjolander, Resonance absorption of nuclear gamma rays and the dynamics of atomic motion, Phys. Rev. 120 (1960) 1093-1102.
7. L. Van Hove, Correlations in space and time and Born approximation scattering in systems of interacting particles, Phys. Rev. 95 (1954) 249-262.
8. R.H. Dicke Phys. Rev. 89 (1954) 472-483.
9. Williams J.M. and Brooks J.S. The thickness dependence of Mossbauer absorption line areas in unpolarized and polarized absorbers // Nucl. Instr. and Meth. – 1975 – V.128. – P.363–372.

Часть вторая.

Квантово-механические расчеты фактора Лэмба-Мёссбауэра

7. Представление когерентных состояний осциллятора

В начале 60-х годов в квантовой теории осциллятора было разработано *представление когерентных состояний*, состояний максимально приближенных к классическим состояниям осциллятора [1]. Расчет вероятности безотрадного поглощения и испускания резонансных гамма фотонов (Bateman et al. [2]) на основе этого представления весьма поучителен с точки зрения процессов передачи импульса при распаде ядра в кристалле с излучением гамма фотона.

Начнем с простейшего случая. Гамильтониан гармонического осциллятора в квантовой теории выглядит как:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2. \quad (2.1)$$

Переход в представление чисел заполнения достигается введением операторов уничтожения \hat{a} и рождения \hat{a}^+ фононов:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right). \quad (2.2)$$

Легко выразить \hat{x} и \hat{p} через новые операторы:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a}). \quad (2.3)$$

Подставляя \hat{x} и \hat{p} в (2.1), получим гамильтониан в представлении чисел заполнения:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \quad (2.4)$$

где $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$ – оператор числа частиц (фононов). Собственные состояния $|n\rangle$ (в представлении чисел заполнения) удовлетворяют уравнениям:

$$\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \text{и} \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (2.6)$$

Здесь $|n\rangle$ – собственное состояние оператора \hat{N} с энергией $n\hbar\omega$ сверх энергии $\hbar\omega/2$ *основного состояния* $|0\rangle$. Любое состояние $|n\rangle$ может быть получено n -кратным воздействием оператора рождения на основное состояние $|0\rangle$:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle. \quad (2.7)$$

Состояния $|n\rangle$ образуют ортонормированный базис $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$.

Когерентные состояния осциллятора вводятся как собственные состояния оператора уничтожения, $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ (отсюда следует также $\langle\alpha|\hat{a}^+ = \langle\alpha|\alpha^*$). Легко показать, этому уравнению удовлетворяет линейная комбинация:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.8)$$

Поскольку \hat{a} не является эрмитовым оператором, то собственные значения α являются комплексными. Собственные состояния $|\alpha\rangle$ нормированы, т.е. $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, что можно показать на основе (2.8). Если выражение (2.7) подставить в (2.8), то когерентное состояние может быть выражено как результат действия на $|0\rangle$ оператором смещения $\hat{D}(\alpha) = \exp[\alpha\hat{a}^+ - \alpha^*\hat{a}]$:

$$|\alpha\rangle = \hat{D}|\alpha\rangle. \quad (2.9)$$

Важная особенность когерентных состояний в том, что неопределенности координаты и импульса для этих состояний одновременно имеют конечные значения,

$$\Delta x^2 = \langle\alpha|x^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|x|\alpha\rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad (2.10)$$

$$\Delta p^2 = \langle\alpha|p^2|\alpha\rangle - \langle\alpha|p|\alpha\rangle^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}, \quad (2.11)$$

приводя к минимальному значению их произведения $\Delta x\Delta p = \hbar/2$. В этом смысле эти состояния максимально приближены к состояниям классического осциллятора.

Состояния $|\alpha\rangle$ не ортогональны, однако они составляют полный (переполненный) набор состояний, удовлетворяющих условию:

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \hat{I}, \quad (2.12)$$

где \hat{I} – единичный оператор. Любой оператор может быть записан в представлении когерентных состояний. Оператор плотности $\hat{\rho}$, описывающий равновесное состояние осциллятора при температуре T , выглядит особенно просто:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\pi} \int p(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha, \quad p(\alpha) = \exp\left(-|\alpha|^2 / \langle n \rangle\right) / \langle n \rangle, \quad \langle n \rangle = \left(\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1\right)^{-1}, \quad (2.13)$$

k_B – постоянная Больцмана. Следовательно, используя $p(\alpha)$ в представлении когерентных состояний как весовую функцию, можно провести температурное усреднение любой физической величины.

Следует отметить, что использованный выше метод когерентных состояний позволяет получить температурную зависимость фактора Лэмба-Мёссбауэра очень естественным и простым образом, не прибегая к сложным вычислениям. Опуская вывод этой формулы, приведем лишь конечный результат

$$f(T) = \exp\left[-E_R \int \frac{g(\omega)}{\hbar\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) d\omega\right], \quad (2.14)$$

где k_B – постоянная Больцмана, $g(\omega)$ – плотность состояний. Для модели Эйнштейна и $T \rightarrow 0$ мы получаем $f \rightarrow e^{-E_R/\hbar\omega_E}$. Для других случаев необходимо знание $g(\omega)$. В приближении Дебая плотность состояний определяется выражением

$$g(\omega) = \frac{3\omega^2}{\omega_D^3} \quad (\omega < \omega_D), \quad (2.15)$$

что приводит к следующей температурной зависимости фактора Лэмба-Мёссбауэра

$$f(T) = \exp \left\{ -\frac{3E_R}{2k_B\theta_D} \left[1 + 4 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{xdx}{(e^x - 1)} \right] \right\}, \quad (2.16)$$

где $x = \hbar\omega/k_B T$ и $\theta_D = \hbar\omega_D/k_B$ – температура Дебая.

Представление когерентных состояний позволяет проследить процесс передачи импульса ядру при излучении гамма фотона. Пусть в первоначальный момент до распада ядро находилось в основном состоянии гармонического осциллятора $|0\rangle$. Пользуясь свойством полноты собственных состояний оператора импульса $|k'\rangle$, представим $|0\rangle$ в базисе этих состояний:

$$|0\rangle = \sum |k'\rangle \langle k'|0\rangle. \quad (2.17)$$

Когда происходит переход ядра из возбужденного состояния в основное излучается фотон с волновым вектором $k = \frac{E_\gamma}{c\hbar}$ в направлении оси x . Каждое собственное состояние импульса в (2.17) при этом получает смещение $|k'\rangle \rightarrow |k' - k\rangle$, в соответствии с законом сохранения импульса, и конечное состояние атома может быть записано в виде

$$|fin\rangle = \sum_k |k' - k\rangle \langle k'|0\rangle. \quad (2.18)$$

С другой стороны сдвиг собственного значения для состояний с определенным значением волнового вектора производится при помощи оператора смещения $e^{-ik\hat{x}}$:

$$e^{-ik\hat{x}} |k'\rangle = |k' - k\rangle. \quad (2.19)$$

С учетом (2.17) и (2.19), (2.18) может быть переписано в виде

$$|fin\rangle = e^{-ik\hat{x}} |0\rangle. \quad (2.20)$$

Сопоставив это выражение с (2.9) заключаем, что состояние $|fin\rangle$ тождественно когерентному состоянию $|\alpha_f\rangle$ с $\alpha_f = -ik\sqrt{\hbar/2m\omega}$, т.е. при излучении фотона осциллятор переходит из основного состояния $|0\rangle$ в когерентное состояние $|\alpha_f\rangle$ с $\alpha_f = -ik\sqrt{\hbar/2m\omega}$.

Вопрос о том, какова вероятность перехода осциллятора из состояния $|0\rangle$ в состояние $|n\rangle$ (в представлении чисел заполнения) легко решается после представления (2.20) в виде (опять использовано свойство полноты множества состояний $|n\rangle$):

$$|\alpha_f\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha_f\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|e^{-ik\hat{x}}|0\rangle. \quad (2.21)$$

Вероятность того, что атом окажется в состоянии $|n\rangle$, определяется квадратом $\langle n|e^{-ik\hat{x}}|0\rangle$. В частности вероятность того, что состояние $|0\rangle$ осциллятора не изменится (это и есть фактор ЛМ) будет равна:

$$f_{LM} = \left| \langle 0 | e^{-ikx} | 0 \rangle \right|^2 = \left| \langle 0 | \alpha_f \rangle \right|^2. \quad (2.22)$$

Используя далее (2.8) получим

$$f_{LM} = \exp\left(-|\alpha_f|^2\right) = \exp\left(-k^2 \hbar/2m\omega\right) = \exp\left(-k^2 \langle x^2 \rangle\right). \quad (2.23)$$

Последнее выражение получено на основе того, что средняя кинетическая энергия осциллятора равна средней потенциальной энергии (см. (2.1)), которая, в свою очередь равна половине полной энергии $\hbar\omega/2$ (для состояния $|0\rangle$). Выражение (2.23) можно также представить

$$f_{LM} = \exp\left(-k^2 \hbar/2m\omega\right) = \exp\left(-E_R/\hbar\omega\right), \quad (2.24)$$

где E_R — энергия отдачи свободного ядра.

Результат (2.23) интересен следующим. Он показывает, что вероятность сохранения начального колебательного состояния ядра (фактор ЛМ) определяется его средне квадратичным смещением и в том случае, когда оно (ядро) находится в чистом квантовом состоянии $|0\rangle$ в представлении чисел заполнения. Таким образом, этот результат совпадает с результатом классического рассмотрения: когда ядро совершает выделенное гармоническое колебание или когда оно подвержено воздействию всех решеточных мод в кристалле.

Теперь обратимся к выражению $\langle x^2 \rangle = \hbar/2m\omega$, которое было использовано при получении (2.23). Оно показывает, что среднеквадратичное смещение даже для нулевых колебаний обратно пропорционально частоте осциллятора. Частота в свою очередь пропорциональна коэффициенту квазиупругости, или коэффициенту жесткости, или энергии связи атома с ближайшим окружением. Следовательно, чем больше энергия связи (другими словами, частота осциллятора) тем меньшее значение имеет $\langle x^2 \rangle$, что ведет, согласно (2.23), к большему значению фактора ЛМ. К тому же результату ведет и выражение (2.24); с ростом частоты осциллятора, при $\hbar\omega \gg E_R$ значение f может достигать значений, близких к единице.

Таким образом, относительно высокие значения f_{LM} получаются в том случае, когда мёссбауэровские ядра достаточно сильно локализованы благодаря сильной связи с окружением, что выражается в высоких значениях температуры Дебая θ_D . Один из ярких примеров – это фактор Лэмба-Мёссбауэра ядер ^{57}Fe в алмазе [3]. Кристалл алмаза имеет наиболее высокую температуру Дебая: $\theta_D = 2230$ К и фактор Лэмба-Мёссбауэра, равный $f_{LM}(295\text{K}) = 0.94 \pm 0.06$. Это значение, вероятно, является рекордным среди значений, измеренных до сих пор для изотопа ^{57}Fe при комнатной температуре [4].

8. Квантово-теоретическая модель колебаний решетки

В данном разделе фактор ЛМ будет вычислен в рамках квантовой теории колебаний решетки. Предполагается знакомство читателя с основами этого раздела физики твердого тела.

Переход ядра, находящегося в кристалле, из возбужденного состояния (В) в основное состояние (А) со спонтанным излучением гамма фотона сопровождается в общем случае изменениями и колебательного (фононного) состояния кристалла. Такому комбинированному переходу соответствует амплитуда:

$$A_{B \rightarrow A}^{\{n\} \rightarrow \{n'\}} = \langle 1_{\vec{k}_\gamma}, \{n'\} | A | \hat{H}_{\text{int}}(\vec{k}_\gamma) | B, \{n\}, 0_{\vec{k}_\gamma} \rangle, \quad (2.25)$$

где $\hat{H}_{\text{int}}(\vec{k}_\gamma) = (\hat{N} \cdot \hat{L} \cdot \hat{b}_{\vec{k}_\gamma}^+ + \text{э.с.})$ - оператор комбинированного перехода. Состояния электромагнитного поля гамма излучения заданы числами заполнения $0_{\vec{k}_\gamma}$ и $1_{\vec{k}_\gamma}$, $\hat{b}_{\vec{k}_\gamma}^+$ - оператор рождения гамма фотона с волновым вектором \vec{k}_γ . Оператор \hat{N} зависит только от координат нуклонов относительно центра масс ядра и описывает переход ядра из возбужденного состояния в основное, оператор $\hat{L} = \exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_{\vec{l}})$ описывает переходы между колебательными состояниями $\{n\} \rightarrow \{n'\}$ в кристалле. В гармоническом приближении функция состояния $\{n\}$ представляется произведением колебательных состояний всех осцилляторов решетки $|\{n\}\rangle = \prod_{\vec{q}j} |n_{\vec{q}j}\rangle$; используется также обозначение $|\{n\}\rangle \equiv |n_1, n_2, n_3, \dots, n_{3N}\rangle$, где n_m задает число фононов в осцилляторе m -ого типа (m пробегает все возможные значения $\vec{q}j$). Оператор смещения \vec{l} -ого узла решетки из положения равновесия $\hat{U}_{\vec{l}}$ представлен ниже в виде разложения по операторам рождения и уничтожения фононов $\hat{a}_{\vec{q}j}^+$ и $\hat{a}_{\vec{q}j}$. Именно эти фононные операторы ответственны за изменения состояний $\{n\}$ и $\{n'\}$.

$$\hat{U}_{\vec{l}} = \sum_{\vec{q}j} \left(\vec{\xi}_j U_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j} \exp(i\vec{q}\vec{l}) + \vec{\xi}_j U_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j}^+ \exp(-i\vec{q}\vec{l}) \right), \quad U_{\vec{q}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_j(\vec{q})}}. \quad (2.26)$$

Здесь проводится суммирование по типам решеточных колебаний (осцилляторов), которые идентифицируются волновым вектором \vec{q} и номером ветви (поляризации) колебаний j . Выражение (2.26) записано для кристаллических структур с одним атомом в элементарной ячейке, m - масса атома, $\vec{\xi}_j$ - единичный вектор поляризации, $\omega_j(\vec{q})$ - частота осциллятора $\vec{q}j$ -ого типа. Учитывая $\langle 1_{\vec{k}_\gamma} | \hat{b}_{\vec{k}_\gamma}^+ | 0_{\vec{k}_\gamma} \rangle = 1$, перепишем (2.26) в виде:

$$A_{B \rightarrow A}^{\{n\} \rightarrow \{n'\}} = \langle A | \hat{N} | B \rangle \langle \{n'\} | \exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_{\vec{l}}) | \{n\} \rangle. \quad (2.27)$$

При $\{n'\} \equiv \{n\}$ переход (2.27) называется *бесфононным*. Энергия фотона при этом равна энергии ядерного перехода. Следовательно, вероятность бесфононного перехода, фактор Лэмба-Мёссбауэра, выражается как квадрат диагонального по фононным

переменным матричного элемента $\langle \{n\} | \exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_i) | \{n\} \rangle$. Для вычисления такого матричного элемента используем выражения $| \{n\} \rangle = \prod_{\vec{q}j} | n_{\vec{q}j} \rangle$ и учитывая (2.26)

$$\exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_i) = \prod_{\vec{q}j} \exp(i\vec{k}_\gamma (\vec{U}_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j} \exp(i\vec{q}l) + \text{э.с.})), \quad \vec{U}_{\vec{q}j} = \vec{\xi}_j U_{\vec{q}j},$$

что позволяет записать

$$\langle \{n\} | \exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_i) | \{n\} \rangle = \prod_{\vec{q}j} \langle n_{\vec{q}j} | \left(1 + i\vec{k}_\gamma (\vec{U}_{\vec{q}j} +) - \frac{1}{2} (\vec{k}_\gamma (\vec{U}_{\vec{q}j} +))^2 + \dots \right) | n_{\vec{q}j} \rangle. \quad (2.28)$$

В последнем выражении использовано разложение множителей (экспонент) в ряд до слагаемых второго порядка по малому параметру ($U_{\vec{q}j}$) и в целях компактной записи введено обозначение:

$$(\vec{U}_{\vec{q}j} +) \equiv (\vec{\xi}_j U_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j} \exp(i\vec{q}l) + \text{э.с.}) = (\vec{\xi}_j U_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j} \exp(i\vec{q}l) + \vec{\xi}_j U_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j}^+ \exp(-i\vec{q}l)).$$

Диагональные по числам заполнения матричные элементы разрешены для первого и третьего слагаемых в разложениях экспонент в правой части выражения (6.6). Они равны:

$$\begin{aligned} \langle n_{\vec{q}j} | 1 | n_{\vec{q}j} \rangle &= 1, & \langle n_{\vec{q}j} | \left(-\frac{1}{2} (\vec{k}_\gamma (\vec{U}_{\vec{q}j} +))^2 + \dots \right) | n_{\vec{q}j} \rangle &= \\ &= -\frac{1}{2} (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 \langle n_{\vec{q}j} | (\hat{a}_{\vec{q}j} \hat{a}_{\vec{q}j}^+ + \hat{a}_{\vec{q}j}^+ \hat{a}_{\vec{q}j}) | n_{\vec{q}j} \rangle = -\frac{1}{2} (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 (2n_{\vec{q}j} + 1) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Таким образом, амплитуда бесфононного перехода (6.5) с учетом (6.6) определяется как:

$$\langle \{n\} | \exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_i) | \{n\} \rangle = \prod_{\vec{q}j} \left(1 - \frac{1}{2} (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 (2n_{\vec{q}j} + 1) \right), \quad (2.30)$$

а вероятность бесфононного гамма перехода равна квадрату этой величины. С учетом малости второго слагаемого в каждом множителе

$$\left| \langle \{n\} | \exp(i\vec{k}_\gamma \hat{U}_i) | \{n\} \rangle \right|^2 \approx \prod_{\vec{q}j} \left(1 - (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 (2n_{\vec{q}j} + 1) \right). \quad (2.31)$$

Это выражение записано для случая, когда осцилляторы решетки находятся в состоянии с определенным числом фононов. Однако в действительности осцилляторы находятся в смешанном состоянии, соответствующем равновесному распределению их по фононным состояниям при температуре T . Усреднение (2.31) по такому распределению дает фактор ЛМ:

$$f_{LM} = \prod_{\vec{q}j} \left(1 - (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 (2\langle n_{\vec{q}j} \rangle + 1) \right) = \exp(-2W), \quad (2.32)$$

$$2W = \sum_{\vec{q}j} (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 (2\langle n_{\vec{q}j} \rangle + 1), \quad \langle n_{\vec{q}j} \rangle = \left(\exp(\hbar\omega_j(\vec{q})/kT) - 1 \right)^{-1}. \quad (2.33)$$

При записи (6.9) использован замечательный предел

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N (1 - \alpha_n/N) = \exp\left(-\sum_{n=1}^N \alpha_n/N\right).$$

Вычисление $2W$ проведем в рамках модели Дебая для решеточных колебаний, используя закон дисперсии в линейном приближении по волновому вектору. При этом, допустим равенство скоростей распространения продольных и поперечных волн,

следовательно частоты $\omega_j(\vec{q})$ не зависят от j . Тогда от j не зависят и величины $U_{\vec{q}j}$ и $\langle n_{\vec{q}j} \rangle$; $U_{\vec{q}j} \rightarrow U_{\vec{q}}$ и $\langle n_{\vec{q}j} \rangle \rightarrow \langle n_{\vec{q}} \rangle$ (см. (6.3) и (6.10)) и мы имеем:

$$2W = \sum_{\vec{q}j} (\vec{k}_\gamma \vec{U}_{\vec{q}j})^2 (2\langle n_{\vec{q}j} \rangle + 1) = k_\gamma^2 \sum_{\vec{q}} \left(\sum_j (\vec{k}_\gamma \vec{\xi}_j)^2 \right) U_{\vec{q}}^2 (2\langle n_{\vec{q}} \rangle + 1) = k_\gamma^2 \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}}^2 (2\langle n_{\vec{q}} \rangle + 1)$$

где введен единичный вектор в направлении распространения гамма фотона, заметим что

$$\left(\sum_j (\vec{k}_\gamma \vec{\xi}_j)^2 \right) = 1 \text{ для всех волновых векторов } \vec{q}, \text{ где } \vec{k}_\gamma^0 = \vec{k}_\gamma / k_\gamma.$$

Это выражение полезно представить

$$2W = k_\gamma^2 \sum_{\vec{q}} U_{k_\gamma}^2(\vec{q}) (2\langle n_{\vec{q}} \rangle + 1) = k_\gamma^2 \left\langle \left(\hat{U}_l \vec{k}_\gamma^0 \right)^2 \right\rangle, \text{ где последний множитель имеет смысл}$$

среднеквадратичного значения проекции смещения узла решетки на направление волнового вектора фотона (усреднение квантовомеханическое (круглые скобки) и статистическое, по осцилляторам в гармоническом приближении).

Заменим суммирование по \vec{q} интегрированием по пространству обратной решетки (внутри сферы Дебая), вводя функцию спектральной плотности $\rho_D(\omega)$:

$$\begin{aligned} 2W &= \frac{\hbar k_\gamma^2}{2mN} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^{-1} \rho_D(\omega) (2\langle n \rangle + 1), \quad \rho_D(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 v^3}. \\ 2W &= (\hbar k_\gamma^2 / 4\pi^2 m N v_{3g}^3) \int_0^{\omega_D} d\omega \omega \left(2 \{ \exp(\hbar\omega/kT) - 1 \}^{-1} + 1 \right) = \\ &= 3(\hbar k_\gamma^2 / 2\omega_D^3 m) (kT/\hbar)^2 \int_0^{T_D/T} dx x \left(2 \{ \exp(x) - 1 \}^{-1} + 1 \right) = \\ &= 3R/2kT_D \left[1 + 4(T/T_D)^2 \int_0^{T_D/T} dx x (\exp(x) - 1)^{-1} \right] \end{aligned} \quad (2.34)$$

Интеграл в (2.34) легко вычисляется для двух предельных случаев.

$$T \gg T_D, \quad 2W = \frac{3R}{2kT_D} \left(1 + 4 \frac{T}{T_D} \right), \quad (2.35)$$

$$T \ll T_D, \quad 2W = \frac{3R}{2kT_D}. \quad (2.36)$$

Для того чтобы вероятность эффекта f_{LM} имела измеримую величину нужно, чтобы $2W$ не очень сильно превосходила единицу (см. (2.32)). А это определяется, как видно из (2.35) и (2.36), соотношением между kT_D и $R = E_\gamma^2 / 2mc^2$ (температурой Дебая для решетки и энергией отдачи для свободного ядра). Отсюда следует, что энергии ядерных переходов E_0 , для которых имеет место эффект Мёссбауэра, ограничены сверху. E_0 должно быть не намного больше величины $(mc^2 k_B T_D)^{1/2}$ (m - масса ядра), что дает $E_0 \leq 100 \text{ KeV}$. В этом диапазоне энергий, как показывают оценки, отношение $R/E_0 \leq 10^{-6}$. Поэтому при определении энергии отдачи с большой точностью можно положить $E_\gamma \approx E_0$ и $R = E_\gamma^2 / 2mc^2 \approx E_0^2 / 2mc^2$. При энергиях гамма перехода $E_0 \sim E_\gamma > 100 \text{ KeV}$ энергия отдачи ядра может оказаться больше чем энергия связи ядра (атома) в решетке, и ядра в этом случае будут излучать скорее как свободные.

9. Связь фактора Лэмба-Мёссбауэра с фактором Дебая –Валлера

Фактор ЛМ имеет тесную аналогию с фактором Дебая-Валлера, известным в области рентгенодифракционного анализа кристаллов. Последняя величина определяет интенсивность дифракционных максимумов, которые наблюдаются при рассеянии рентгеновского излучения на атомах кристаллической решетки, если выполняются условия конструктивной интерференции амплитуд рассеяния на различных атомах (условия Лауэ, Брэгга). Но даже при выполнении этих условий интенсивность максимума зависит от температуры, от значения волновых векторов падающего и рассеянного фотонов и угла между ними. Фактор Дебая-Валлера и выражает эту зависимость. Причину зависимости от температуры легко понять: рассеяние рентгеновских фотонов на атомах может иметь бесфононный или фононный характер. Дифракционные максимумы формируются только как результат интерференции бесфононных амплитуд, доля которых, как и в случае поглощения гамма фотонов ядрами, уменьшается с ростом температуры. Здесь мы приведем лишь конечное выражение для фактора Дебая-Валлера:

$$f_{DW} = \exp(-2W), \quad 2W = K^2 \sum_{\vec{q}} U_{\vec{q}}^2 (\vec{q}) (2\langle n_{\vec{q}} \rangle + 1) = K^2 \left\langle \left(\hat{U}_i \vec{K}^0 \right)^2 \right\rangle. \quad (2.37)$$

Оно почти совпадает с выражением, полученным выше для фактора Лэмба-Мёссбауэра. В выражениях для f_{LM} , полученных выше, \vec{k}_y заменяется *вектором рассеяния* $\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$; здесь \vec{k} и \vec{k}' - векторы падающего на кристалл и рассеянного рентгеновских фотонов, \vec{K}^0 - единичный вектор в направлении вектора рассеяния. Таким образом, теперь значение f_{DW} определяется квадратом вектора рассеяния и среднеквадратичным смещением в направлении вектора рассеяния. При бесфононном рассеянии $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ и $K^2 = 4k^2 \sin^2(\theta/2)$, где θ - угол рассеяния (угол между \vec{k} и \vec{k}'). Это дает зависимость величины $2W$ от угла рассеяния: $2W \sim k^2 \sin^2(\theta/2)$.

В отличие от явления дифракции рентгеновских лучей на атомах в кристалле, в экспериментах У. Лэмба и Р. Мёссбауэра имеет место резонансный захват нейтронов или резонансное поглощение (излучение) гамма фотонов ядрами твердого тела. Для обозначения вероятности бесфононных процессов и Лэмб и Мёссбауэр в своих работах использовали название *фактор Дебая-Валлера*. Позже для описания этих резонансных процессов установился новый термин – фактор Лэмба-Мёссбауэра- чтобы отличать их от процессов нерезонансного рассеяния. Сопоставление рассматриваемых величин позволяет отметить схожесть и отличие двух физических процессов. Например, упругое рассеяние рентгеновских лучей представляет собой рассеяние без передачи энергии решетке, как и излучение гамма фотона ядром в кристалле. С другой стороны, вероятность мёссбауэровского рассеяния (бесфононного резонансного рассеяния гамма фотона на ядре) определяется произведением факторов Лэмба-Мёссбауэра (для поглощения и для излучения), вместо одного фактора Дебая-Валлера в случае нерезонансного рассеяния рентгеновского фотона.

Литература ко второй части

1. R.J. Glauber, Coherent and incoherent states of the radiation field, Phys. Rev. 131 (1963) 2766-2788; C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, Quantum Mechanics, vol.1. p.295 (John Wiley, New York, 1977).
2. D.S. Bateman, S.K. Bose, B. Dutta-Roy, and M. Bhattacharyya, The harmonic lattice, recoilless transitions, and the coherent state, Am. J. Phys. 60 (1992) 829-832.
3. J.A. Sawiski and B.D. Sawiska, Properties of Fe hot implanted into diamond crystals studied by Mossbauer emission spectroscopy between 4 and 300 K, Nucl. Instrum. Methods B 46 (1990) 38-45.
4. T. W. Sinor, J.D. Standifird, F. Davanloo, K.N. Taylor, C. Hong, J.J. Carroll, and C.B. Collins, Mossbauer effect measurements of the recoil free fraction for ^{57}Fe implanted in a nanophase diamond film, Appl. Phys. Lett., 64 (1994) 1221-1223.

Оглавление

<u>Часть первая.</u>	
<u>Фактор Лэмба-Мессбауэра в гамма резонансной спектроскопии.</u>	3
1. Введение.	3
2. Фактор Лэмба-Мессбауэра.	4
3. Вычисление фактора Лэмба-Мессбауэра в классическом приближении	8
4. Методы измерения фактора Лэмба-Мессбауэра	11
Приложения к разделу 4	16
5. Экспериментальное определение фактора Лэмба-Мессбауэра с помощью метода площадей и относительных измерений (Лабораторная работа)	19
6. Вопросы и задачи.	20
Литература к первой части	20
<u>Часть вторая</u>	
<u>Квантово-механические расчеты фактора Лэмба-Мессбауэра</u>	21
7. Представление когерентных состояний осциллятора	21
8. Квантово-теоретическая модель колебаний решетки	25
9. Связь фактора Лэмба-Мессбауэра с фактором Дебая –Валлера	28
Литература ко второй части	29