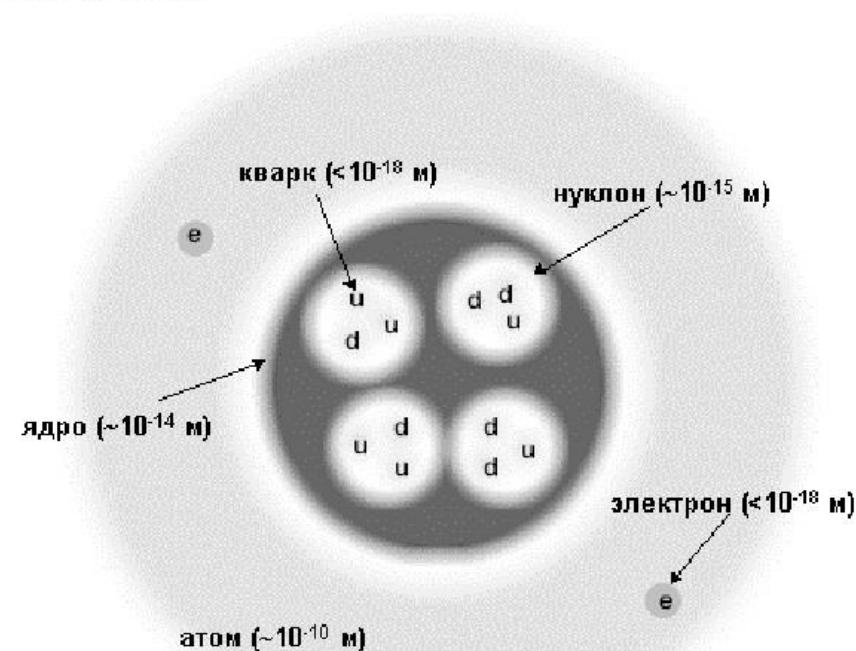
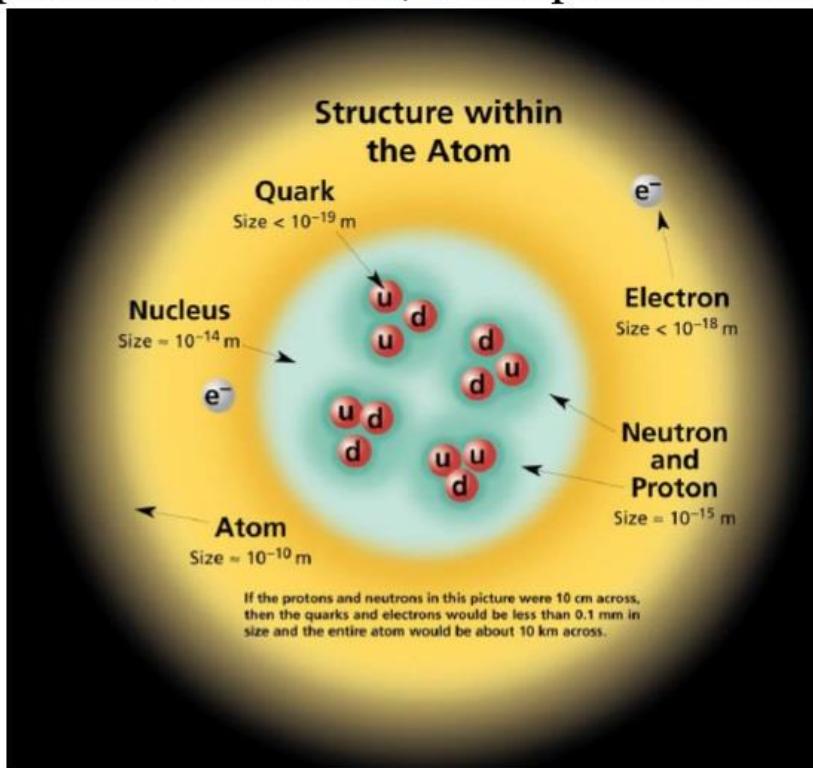


Материалы к первой лекции

Атомное ядро и ядерный энергетический переход. Характеристики ядра

Атомное ядро – связанная система протонов и нейтронов; положительно заряженная центральная часть атома, в которой 99.9 % массы атома.



Кварки – не наблюдающиеся в свободном состоянии фундаментальные фермионы (спин $s = 1/2$). С электрическим зарядом (q), кратным $e/3$: **верхний** (up) – u ($q = +2/3e$), **нижний** (down) – d ($q = -1/3e$). Кварки – точечные частицы вплоть до масштаба $\sim 0,5 \cdot 10^{-19}$ м. Кварки участвуют во всех видах взаимодействия.

Характеристики ядра. Система обозначений ядер и нуклидов

Характеристики атомных ядер:

- **зарядовое число:** число протонов – Z (eZ – заряд ядра, определяет порядковый номер и химические свойства элемента, $e \cong 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл);
- **изотопическое число:** число нейтронов – N ;
- **массовое число:** число нуклонов – $A = Z + N$.

Нуклид – вид атомов, определяемый массовым числом (A), атомным номером (Z) и энергетическим состоянием (основным или одним из метастабильных состояний) ядер и имеющий время жизни, достаточное для наблюдения.

Классификация ядер (нуклидов):

- **изотопы:** одинаковое Z , но разное $N(A)$;
- **изотоны:** одинаковое N , но разное $Z(A)$;
- **изобары:** одинаковое A , но разное $Z(N)$;
- **изомеры:** одинаковые $N, Z(A)$, но разное энергетическое состояние (E).

Изомеры – долгоживущие возбужденные состояния атомных ядер.

Обозначение ядра (нуклида) – ${}^A_Z X_N$.

Для изомеров – буква из последовательностей: m, n, p, q, \dots или $m1, m2, m3, \dots$

Примеры различных обозначений: ${}^{56}_{26}\text{Fe}$, ${}^{57}_{26}\text{Fe}$, ${}^{57}_{27}\text{Co}$, ${}^{119}_{50}\text{Sn}$, ${}^{119m}_{50}\text{Sn}$, ${}^{151}_{63}\text{Eu}$, ${}^{151}_{64}\text{Gd}$, ${}^{151}_{62}\text{Sm}$.

Характеристики ядра. Характеристики нуклонов.

Нуклон	Линейный размер, м	Масса покоя, кг	Заряд, е	Спин, \hbar	Магнитный момент, μ_n
Протон	$\sim 1.4 \cdot 10^{-15}$	$1.67 \cdot 10^{-27}$	+1	1/2	+2.792
Нейтрон	$\sim 1.5 \cdot 10^{-15}$	$1.68 \cdot 10^{-27}$	<2·10 ⁻²²	1/2	-1.913

$\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – приведённая постоянная Планка (постоянная Дирака),

$$\mu_n = \frac{e\hbar}{2m_p} \cong 5.05 \cdot 10^{-27} \text{ Дж/Тл} – \text{ядерный магнетон.}$$

Распределение массы и заряда в ядре, радиус ядра

Эксперименты по рассеянию α -частиц (опыты Э. Резерфорда, 1908–1911) и электронов высокой энергии (Р. Хоффштатер, 1955–58) на сферических ядрах.

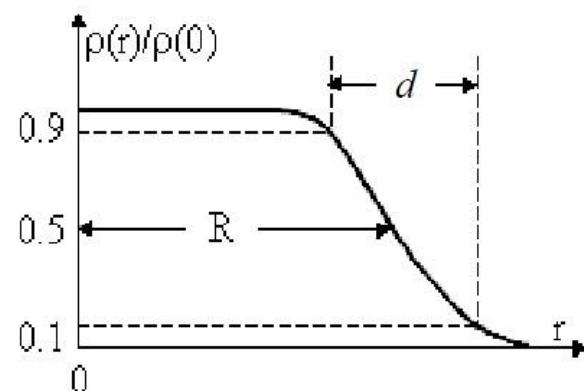
Плотности распределения ядерной материи и электрического заряда практически совпадают и приближенно описываются распределением Ферми:

$$\rho(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{\frac{r-R}{d}}},$$

ρ_0 – плотность ядерной материи в центре ядра,

R – **радиус ядра** – расстояние, на котором $\rho(R) = \rho_0 / 2$,

d – **параметр диффузности** ($d \cong 0.5 \cdot 10^{-15} = 0.5$ фм).



Характеристики ядра. Моменты нуклонов и спин атомного ядра.

Спин – собственный момент импульса (количества движения) частиц, имеющий квантовую природу и не связанный с перемещением частицы как целого.

Спином называют также собственный момент импульса атомного **ядра** или **атома**; в этом случае спин определяется как векторная сумма (вычисленная по правилам сложения моментов в квантовой механике) спинов элементарных частиц, образующих систему, и орбитальных моментов этих частиц, обусловленных их движением внутри системы.

Спин измеряется в постоянных Дирака \hbar и равен $\hbar s$, где s – целое (в том числе нулевое) или полуцелое положительное число – так называемое **спиновое квантовое число**, которое обычно называют просто спином.

Поскольку нуклоны обладают **спином** $s = \hbar/2$, то и ядра должны иметь механические моменты.

Кроме того, нуклоны участвуют в ядре в орбитальном движении, которое также характеризуется определённым моментом количества движения каждого нуклона.

Орбитальные моменты l принимают только целочисленные значения \hbar .

Полный момент количества движения нуклона j в ядре складывается из его спина s и орбитального момента l относительно центра ядра:

$$j = s + l.$$

Характеристики ядра. Моменты нуклонов и спин атомного ядра.

Атомное ядро в каждом состоянии характеризуется **полным моментом количества движения J** , который в системе покоя ядра называется **спином ядра**. Спин J ядра наряду с его массой M является механической характеристикой ядра как системы нуклонов.

Спин ядра J складывается из **спиновых $s_1 \div s_A$ и орбитальных $l_1 \div l_A$ моментов отдельных нуклонов:**

$$J = \sum_{i=1}^A s_i + \sum_{i=1}^A l_i .$$

Несмотря на то, что число нуклонов в ядре может быть очень велико, спины ядер обычно невелики и составляют не более нескольких \hbar , что объясняется особенностью взаимодействия одноимённых нуклонов.

Для спинов атомных ядер экспериментально установлены закономерности:

- если A – чётное, то спин ядра J имеет целочисленное значение –
 $J = n$, где $n = 0, 1, 2, 3, \dots;$
- если A – нечётное, то спин ядра имеет полуцелое значение –
 $J = n + 1/2;$
- чётно-чётные ядра в основном состоянии имеют значение спина – $J = 0$.
(взаимная компенсация моментов нуклонов в основном состоянии ядра).

Характеристики ядерного энергетического перехода.

$$J, \pi\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r}) = \pi\Psi(\mathbf{r}), \pi = \pm 1 \rightarrow J^\pi.$$

$$\mu = g\mu_n J \quad (J \geq 1/2), Q \quad (J \geq 1). \\ E_0.$$

А. Эйнштейн, 1916 г.:

$w = \text{const}(t)$ – вероятность спонтанного перехода в единицу времени.

$P(t) = P(0)e^{-wt}$ – вероятность нахождения ядра в возбужденном состоянии в момент времени t . При $P(t=0) = 1$: $P(t) = e^{-wt}$.

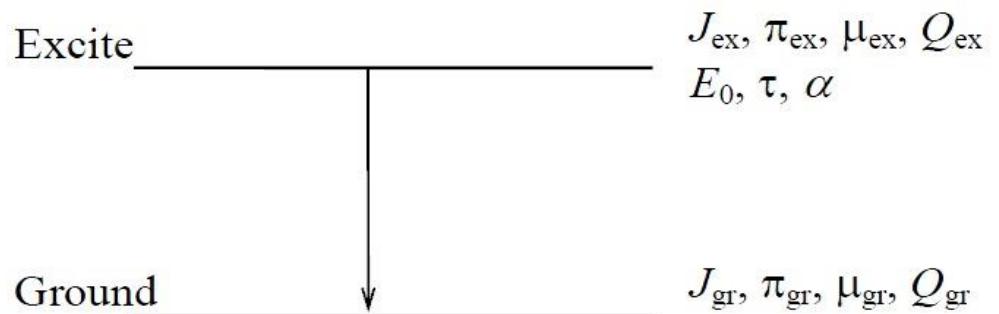
Вероятность того, что в момент времени t ядро находится в возбужденном состоянии, и в следующий интервал времени dt перейдет в основное состояние:

$$P(t) \cdot w dt = we^{-wt} dt,$$

(Среднее) время жизни ядра в возбужденном состоянии τ :

$$\tau \equiv \bar{t} = \int_0^{\infty} t we^{-wt} dt = \frac{1}{w}.$$

Время полураспада $t_{1/2}$: $t_{1/2} = \tau \cdot \ln 2$.



Принцип неопределённости Гейзенберга.

Вerner Karl Гейзенберг (*Werner Karl Heisenberg*; 1901 – 1976)

Немецкий физик-теоретик, один из создателей квантовой механики, лауреат Нобелевской премии по физике (1932),



Принцип неопределённости Гейзенберга (1927 г.) для неопределённостей значений энергии ΔE и времени Δt :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar.$$

Трактовка: за ограниченное время Δt энергия замкнутой квантовой системы, находящейся в нестационарном состоянии, может быть определена с точностью, не большей ΔE

Естественная ширина уровня Γ_τ для квантовых систем (ядер, атомов, молекул) в возбужденных состояниях – минимальная неопределенность энергии нестационарного состояния – $\Gamma_\tau = \min(\Delta E \geq \hbar / \Delta t)$:

$$\Gamma_\tau = \hbar / \tau = \hbar w.$$

Оценка Γ_τ в случае ядер ^{57}Fe ($E_0 = 14.4 \cdot \text{кэВ}$, $\tau = 1.4 \cdot 10^{-7} \text{ с}$, $1 \text{ эВ} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$):

$$\Gamma_\tau = \frac{\hbar}{\tau} \cong \frac{1.055 \cdot 10^{-34}}{1.4 \cdot 10^{-7} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}} \cong 5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}, \quad \frac{E_0}{\Gamma_\tau} \cong \frac{14.4 \cdot 10^3}{5 \cdot 10^{-9}} \cong 3 \cdot 10^{12} \text{ !!!} \quad \text{Для } {}^{107}_{47}\text{Ag} : \sim 10^{22}.$$

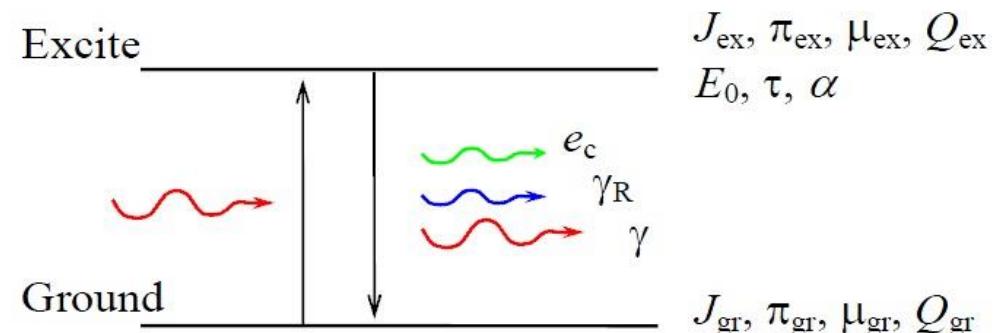
Характеристики ядерного энергетического перехода.

$$J, \pi \Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r}) = \pi \Psi(\mathbf{r}), \pi = \pm 1 \rightarrow J^\pi.$$

$$\mu = g\mu_n J \quad (J \geq 1/2), Q \quad (J \geq 1).$$

$$E_0, \tau, w - \text{const}(t), \tau = 1/w, t_{1/2} = \tau \cdot \ln(2).$$

$$\Gamma_\tau = \hbar/\tau = \hbar w.$$



Коэффициент внутренней конверсии α :

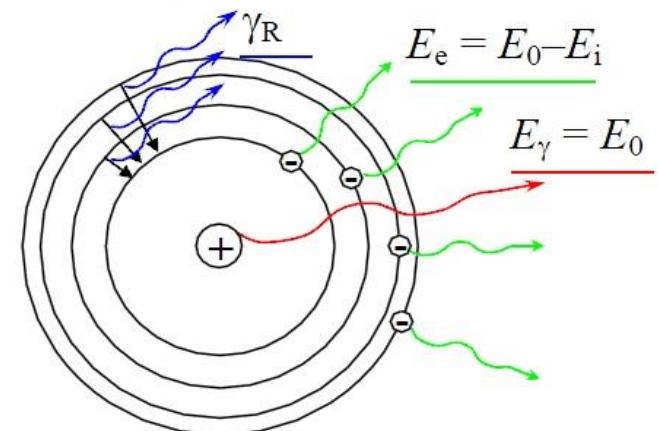
$w = w_\gamma + w_e$, (энергия передается s-электронам внутренних электронных слоев атома)

$$\alpha \equiv \frac{w_e}{w_\gamma}, \alpha = \alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \dots,$$

(K-, L-, M-, ... электронные слои атома; $n = 1, 2, 3, \dots$)

$$\frac{w_\gamma}{w} = \frac{w_\gamma}{w_\gamma + w_e} = \frac{1}{1 + \alpha}$$

$$\alpha(^{57}\text{Fe}) = 8.2, \alpha(^{119}\text{Sn}) = 5.2.$$



Мультипольность излучения и правило отбора.

Поле электромагнитного излучения с длиной волны $\lambda \gg R$ – линейные размеры излучающей системы, может быть представлено в виде суперпозиции **электрических (EL)** и **магнитных (ML) мультипольных излучений** – излучений колеблющихся электрических и магнитных мультиполей – диполей, квадрупольей, октуполей и т.д.

Каждое мультипольное излучение характеризуется определенным **моментом количества движения (угловым моментом)** L (дипольное излучение – $L = 1$, квадрупольное – $L = 2$, октупольное – $L = 3, \dots$) и определенной **четностью** $\pi_\gamma (= \pm 1)$.

Направление электромагнитного поля (E или B) при $\pi_\gamma = -1$ меняет, а при $\pi_\gamma = +1$ не меняет свое направление на противоположное при отражении в центре излучения ($r \rightarrow -r$). Четность для мультипольного излучения:

$$\begin{aligned}\pi_\gamma(\text{EL}) &= (-1)^L, \\ \pi_\gamma(\text{ML}) &= (-1)^{L+1}.\end{aligned}$$

Для определения мультипольности излучения (**типа Е или М** и его **порядка мультипольности L**) в соответствии с законами сохранения момента количества движения и четности волновой функции для системы «ядро + γ -квант» получаем **правила отбора**:

$$\begin{aligned}|J_{\text{ex}} - J_{\text{gr}}| &\leq L \leq J_{\text{ex}} + J_{\text{gr}}, \\ \pi_\gamma(\text{EL}) &= (-1)^L = \pi_{\text{ex}} \pi_{\text{gr}}, \\ \pi_\gamma(\text{ML}) &= (-1)^{L+1} = \pi_{\text{ex}} \pi_{\text{gr}}.\end{aligned}$$

Мультипольность излучения и правило отбора.

Вероятность перехода w_γ возрастает с увеличением энергии (с уменьшением λ) γ -кванта и очень резко уменьшается с увеличением углового момента L :

$$w_\gamma(EL) \sim (R/\lambda)^{2L},$$

$$w_\gamma(ML) \sim (R/\lambda)^{2L+2}.$$

При этом при том же порядке мультипольности L : $w_\gamma(ML)/w_\gamma(EL) \sim (R/\lambda)^2 \ll 1$.

Для чистого электрического или магнитного излучений γ -квант обычно имеет наименьший угловой момент L , разрешенный правилами отбора: $L = |J_{\text{ex}} - J_{\text{gr}}|$.

В случае смешанного магнитного и электрического излучения γ -квант имеет наименьший порядок мультипольности L для М- и следующий за ним $L + 1$ для Е-излучения.

Мультипольность излучения γ -квантов
для мессбауэровских переходов ядер ^{57}Fe , ^{119}Sn и ^{151}Eu

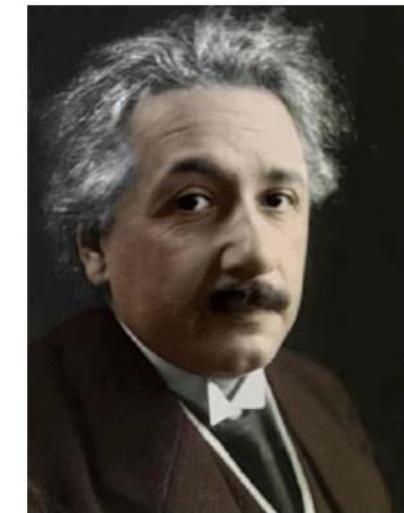
Ядро	J_{gr}	J_{ex}	L	π_{gr}	π_{ex}	π_γ	Мультипольность излучения
^{57}Fe	1/2	3/2	$1 \leq L \leq 2$	-1	-1	+1	M1 (E2)
^{119}Sn	1/2	3/2	$1 \leq L \leq 2$	+1	+1	+1	M1 (E2)
^{151}Eu	5/2	7/2	$1 \leq L \leq 6$	+1	+1	+1	M1 (E2)

Форма линий испускания и поглощения. Типы радиационных переходов.

Альберт Эйнштейн (*Albert Einstein, 1879 – 1955*)

один из основателей современной теоретической физики,
лауреат Нобелевской премии по физике 1921 года.

В 1916 г. Альберт Эйнштейн в работе "К квантовой теории излучения" сформулировал основные постулаты теории.

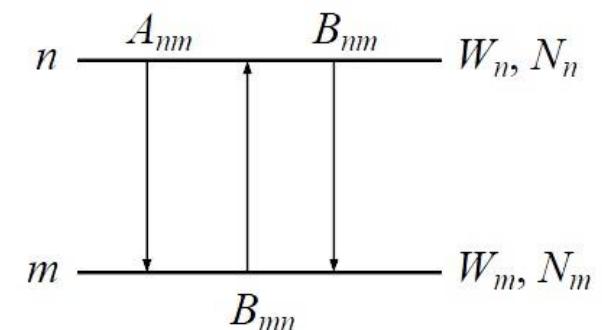


Три типа радиационных переходов:

1. Спонтанное испускание – самопроизвольный переход ядра из возбужденного состояния n в основное состояние m с испусканием γ -кванта (мгновенно, $w = \text{const}(t)$).

2. Поглощение – поглощение γ -кванта индуцирующего излучения и переход из состояния m в состояние n .

3. Вынужденное испускание – переход ядра из энергетически более высокого состояния n в состояние m с меньшей энергией под действием внешнего резонансного γ -кванта (индуцирующего излучения) с испусканием точно такого же кванта.



Радиационные переходы в двухуровневой квантовой системе

Контур спектральной линии.

В соответствии с экспоненциальным по времени характером распада возбужденного состояния **неподвижного** ядра, спектральная плотность мощности $p_{nm}^{\text{си}}(\omega)$ и спектральная плотность коэффициента Эйнштейна для спонтанного излучения $a_{nm}(\omega)$ описываются дисперсионной формулой Брейта-Вигнера (функцией Лоренца) с естественной шириной спектральной линии ($E = \hbar\omega$, $\Gamma_\tau = \hbar w \equiv \hbar\Delta\omega$):

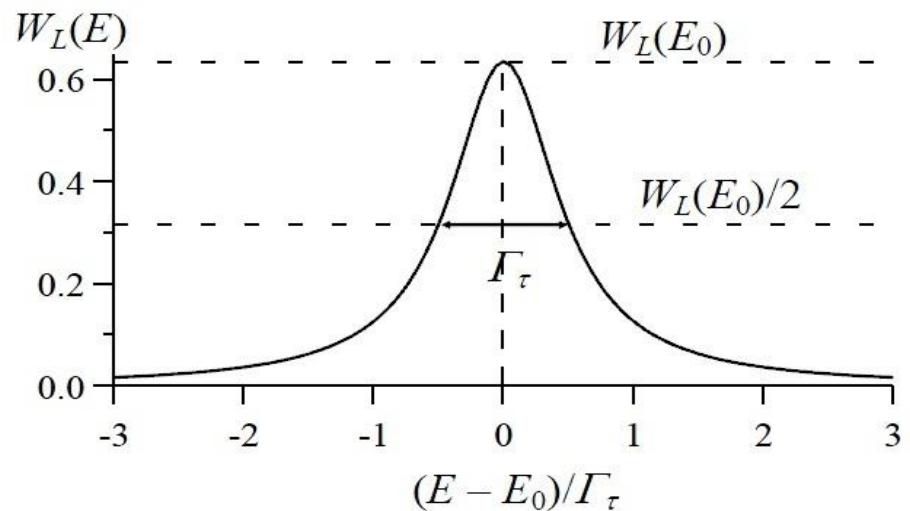
$$a_{nm}(\omega) = A_{nm} \frac{2}{\pi\Delta\omega} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\Delta\omega/2}\right)^2}.$$

То же для энергетической **линия излучения (поглощения), т.е. плотности вероятности испускания (поглощения):**

$$W_L(E) = \frac{2}{\pi\Gamma_\tau} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_\tau/2}\right)^2}, \quad \int_0^\infty W_L(E)dE = 1.$$

^{57}Fe : $E_0 \cong 14,4$ кэВ, $\tau = 1,4 \cdot 10^{-7}$ с,

$\Gamma \cong 5 \cdot 10^{-9}$ эВ; $E_0/\Gamma \cong 3 \cdot 10^{12}$ – !!! Для $^{107}_{47}\text{Ag}$: $\sim 10^{22}$.



Форма энергетической линии излучения (поглощения)

Сечение резонансного поглощения.

Сечение резонансного поглощения (рассеяния) $\sigma(\omega)$ – это вероятность поглощения (рассеяния) в единицу времени одним покоящимся ядром γ -кванта с частотой ω (энергией $E = \hbar\omega$), при единичной плотности потока этих γ -квантов:

$$\sigma(\omega) = \frac{b_{nm}(\omega)u(\omega)}{n_\gamma(\omega)}.$$

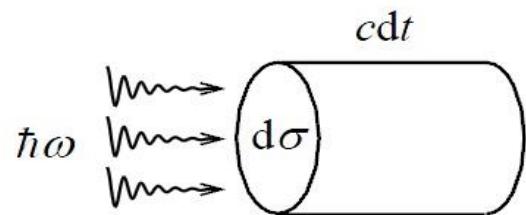
где $b_{nm}(\omega)u(\omega)$ – спектральная плотность вероятности поглощения γ -кванта ядром в единицу времени при индуцирующем излучении со спектральной объемной плотностью $u(\omega)$, $n_\gamma(\omega)$ – спектральная плотность плотности потока γ -квантов с энергией $\hbar\omega$ в индуцирующем излучении.

$$b_{nm}(\omega) = \frac{g_n}{g_m} b_{nm}(\omega) = \frac{g_n}{g_m} \cdot \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} a_{nm}(\omega);$$

$$u(\omega) = \frac{n_\gamma d\sigma dt \hbar\omega}{d\sigma cd t} = \frac{n_\gamma \hbar\omega}{c};$$

$$\sigma(\omega) = \frac{g_n}{g_m} \cdot \frac{\pi^2 c^2}{\omega^2} a_{nm}(\omega),$$

$$\omega \rightarrow E, \lambda; g_{m,n} = 2J_{m,n} + 1; A_{nm} = w_{nm}^\gamma = \frac{\Gamma_\gamma}{\hbar}; \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma_\tau} = \frac{1}{1+\alpha}.$$



Рассматриваемый элемент
поверхности и объема

Сечение резонансного поглощения.

$$\sigma(E) = \frac{2I_{\text{ex}} + 1}{2I_{\text{gr}} + 1} \cdot \frac{\lambda^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{1 + \alpha} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_{nm}}{\Gamma_\tau / 2}\right)^2} = \sigma_0 \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_{nm}}{\Gamma_\tau / 2}\right)^2},$$

где σ_0 – **максимальное сечение резонансного поглощения**.

Относительная вероятность спонтанного испускания γ -кванта: $\frac{w^\gamma}{w} = \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma_\tau} = \frac{1}{1 + \alpha}$.

Максимальное сечение резонансного рассеяния:

$$\sigma_0^{\text{sc}} = \sigma_0 \frac{1}{1 + \alpha} = \frac{2I_{\text{ex}} + 1}{2I_{\text{gr}} + 1} \cdot \frac{\lambda^2}{2\pi} \cdot \left(\frac{1}{1 + \alpha}\right)^2.$$

Если падающее излучение имеет спектральное распределение $W(E)$ ($\int_0^\infty W(E)dE = 1$), то

наблюдаемые эффекты поглощения (рассеяния) будут определяться **эффективным сечением**:

$$\sigma_{\text{eff}} = \int_0^\infty \sigma(E)W(E)dE.$$

Сечение резонансного поглощения.

При постоянной интенсивности падающего излучения до энергии $E_m > \sim(E_0 + 3\Gamma_\tau)$:

$$W(E) = \begin{cases} 1/E_m & \text{при } E \leq E_m \\ 0 & \text{при } E > E_m \end{cases}, \text{ эффективное сечение поглощения равно:}$$

$$\sigma_{\text{eff}} = \int_0^{\infty} \sigma(E) W(E) dE = \frac{1}{E_m} \int_0^{E_m} \sigma_0 \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_\tau / 2}\right)^2} dE \cong \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\Gamma_\tau}{E_m} \sigma_0.$$

Использовать сплошной спектр излучения (например, рентгеновской трубки) не представляется возможным, так как в этом случае эффективное сечение будет очень малым: при $\Gamma \cong 5 \cdot 10^{-9}$ эВ и $E_m \cong 14.4$ кэВ: $\Gamma/E_m \cong 3 \cdot 10^{-13}$. Интенсивности тормозного излучения не хватит. Однако можно использовать спектр синхротронного излучения.

В опытах по эффекту Мессбауэра: если линия испускания и линия поглощения имеют лоренцевскую форму с естественной шириной и энергии центров линий совпадают, то:

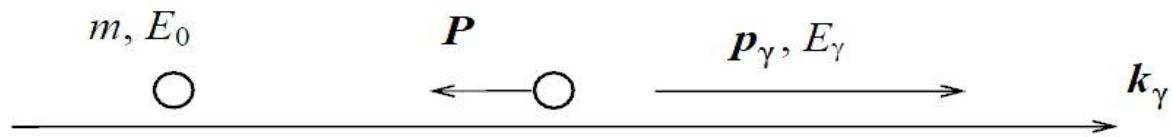
$$\sigma_{\text{eff}} = \int_0^{\infty} \sigma(E) W(E) dE = \int_0^{\infty} \sigma_0 \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_\tau / 2}\right)^2} \cdot \frac{2}{\pi \Gamma_\tau} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_\tau / 2}\right)^2} dE = \frac{\sigma_0}{2}.$$

Максимальное сечение резонансного поглощения для мессбауэровских переходов достигает значения $\sim 10^6$ б ($1 \text{ б} = 10^{-28} \text{ м}^2$). Для ядра ^{57}Fe – $\sigma_0 \cong 2.56 \cdot 10^6$ б.

Потеря энергии на отдачу и доплеровское уширение линии.

Свободное покоящееся ядро.

Потеря энергии на отдачу



Законы сохранения импульса и энергии:

$$0 = -P + p_\gamma, \quad E_0 = \frac{P^2}{2m} + E_\gamma.$$

$$P = p_\gamma = \frac{E_\gamma}{c}.$$

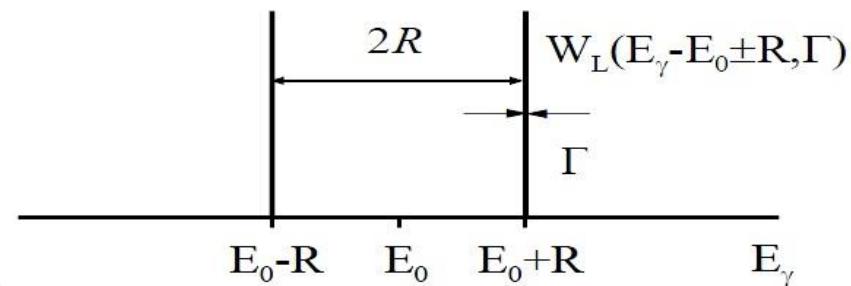
Энергия отдачи R :

$$R \equiv E_0 - E_\gamma = \frac{P^2}{2m} = \frac{p_\gamma^2}{2m} = \frac{E_\gamma^2}{2mc^2} = \frac{(E_0 - R)^2}{2mc^2} \cong \frac{E_0^2}{2mc^2}.$$

$$E_\gamma = E_0 - R, \quad R \cong \frac{E_0^2}{2mc^2}; \quad R \gg \Gamma_\tau.$$

$$\text{Fe-57: } E_0 = 14,4 \text{ кэВ}, \quad \Gamma_\tau \cong 5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}, \quad R \cong 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}, \quad R / \Gamma_\tau \sim 4 \cdot 10^5.$$

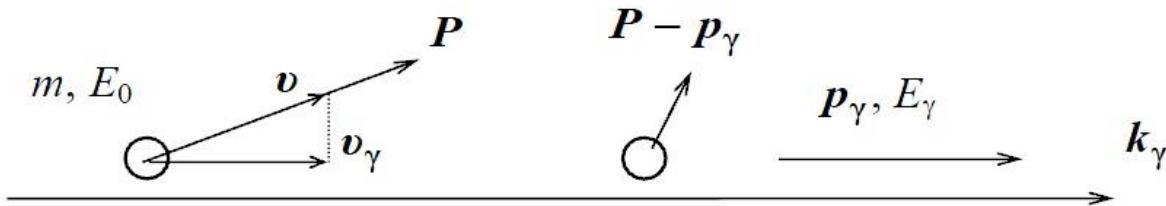
Линия испускания Линия поглощения



Потеря энергии на отдачу и доплеровское уширение линии.

Ядро, участвующие в тепловом движении.

Доплеровское уширение линии



Законы сохранения импульса и энергии: $E_0 + \frac{\mathbf{P}^2}{2m} = \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{p}_\gamma)^2}{2m} + E_\gamma.$

$$E_\gamma = E_0 + \frac{\mathbf{P}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{P} - \mathbf{p}_\gamma)^2}{2m} = E_0 + \frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{p}_\gamma}{m} - \frac{\mathbf{p}_\gamma^2}{2m} = E_0 + \frac{\mathbf{P} \cdot \mathbf{p}_\gamma}{m} - R = E_0 - R + v_\gamma \frac{E_\gamma}{c} \cong E_0 - R + v_\gamma \frac{E_0}{c}.$$

Распред. Максвелла: $f(v_\gamma) = const \cdot e^{-\frac{mv_\gamma^2}{2k_B T}}$. Однозначность связи: $f(v_\gamma)dv_\gamma = f(E_\gamma)dE_\gamma$.

$$f(E_\gamma) = \frac{c}{E_0} f(v_\gamma) = const \cdot e^{-\left((E_\gamma - E_0 + R) / \sqrt{\frac{2k_B T}{m} \left(\frac{E_0}{c} \right)^2} \right)^2} = const \cdot e^{-\left(\frac{E_\gamma - E_0 + R}{D} \right)^2}.$$

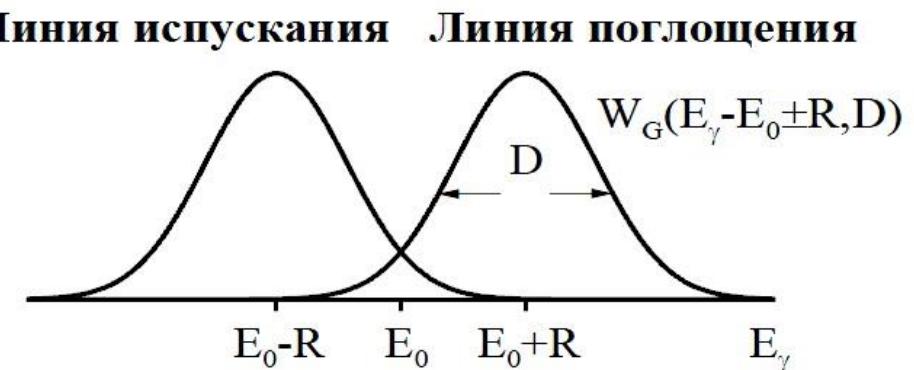
Потеря энергии на отдачу и доплеровское уширение линии.

Ядро, участвующие в тепловом движении.

$$W_G(E_\gamma) = \text{const} \cdot e^{-\left(\frac{E_\gamma - E_0 + R}{D}\right)^2},$$

$$D = 2\sqrt{k_B T R}.$$

$$D \gg \Gamma_\tau.$$



57Fe: $E_0 = 14,4 \text{ кэВ}$, $\Gamma_\tau \cong 5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}$, $R \cong 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$;

при $T = 4 \text{ К}$ – $D \cong 1,6 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$, $D/\Gamma_\tau \sim 3 \cdot 10^6$;

при $T = 300 \text{ К}$ – $D \cong 1,4 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$, $D/\Gamma_\tau \sim 3 \cdot 10^5$.

Мун, 1951 г. – γ -резонанс за счет движения источника относительно поглотителя ($\sim 100 \text{ м/с}$).

Малфорс, 1952 г. – $T \uparrow \Rightarrow D \uparrow$ – перекрытие линий испускания и поглощения

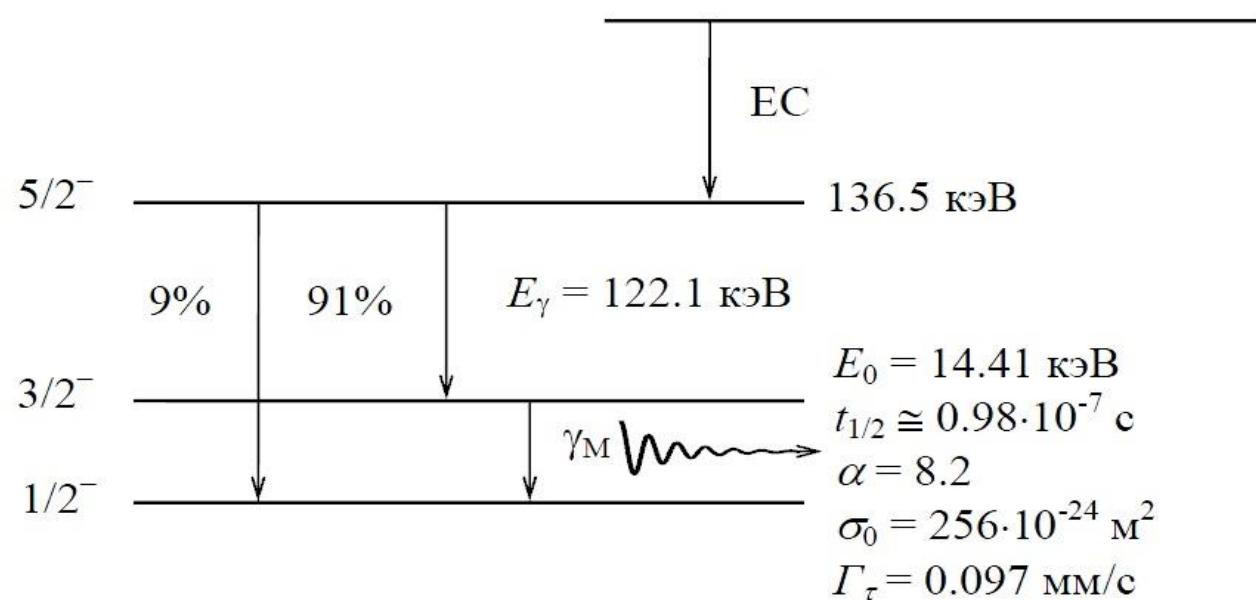
(^{198}Hg , $E_0 = 411 \text{ кэВ}$).

Схема ядерных превращений для мессбауэровского изотопа ^{57}Fe (мессбауэрский источник – ядра ^{57}Co)

массовое число $\rightarrow^{57}\text{Fe}$ (2.14%)
атомный номер $\rightarrow^{26}\text{Fe}$

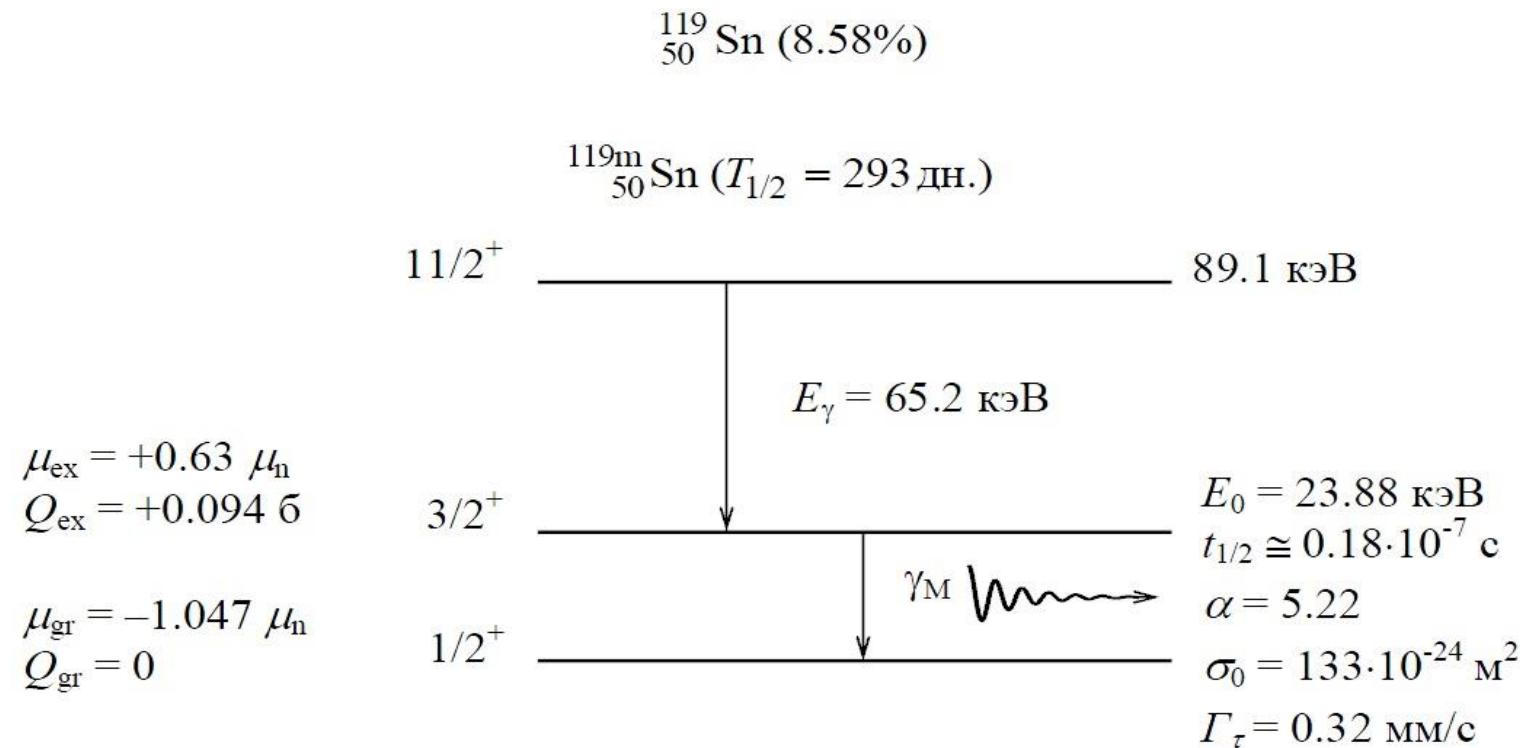
^{57}Co ($T_{1/2} = 270$ дн.)

$$\begin{aligned}\mu_{\text{ex}} &= -0.155 \mu_{\text{n}} \\ Q_{\text{ex}} &= +0.14 \text{ б} \\ \mu_{\text{gr}} &= +0.091 \mu_{\text{n}} \\ Q_{\text{gr}} &= 0\end{aligned}$$



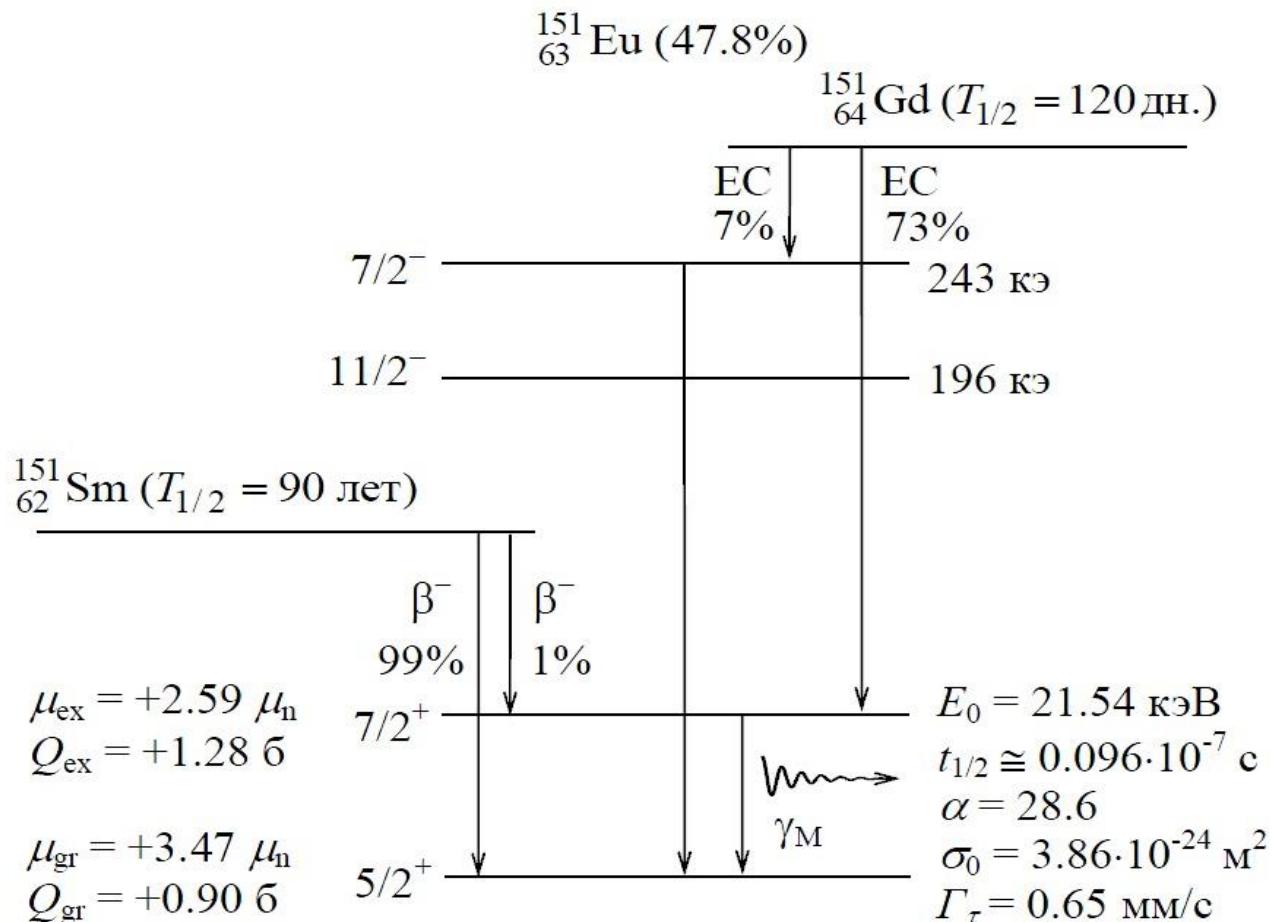
Ядерные превращения.

**Схема ядерных превращений для мессбауэровского изотопа ^{119}Sn
(мессбауэровский источник – ядра $^{119\text{m}}_{50}\text{Sn}$)**



Ядерные превращения.

**Схема ядерных превращений для мессбауэровского изотопа ^{151}Eu
(мессбауэровские источники – ядра ^{151}Sm и ^{151}Gd)**



Основные характеристики мессбауэрвоских изотопов.

Период полураспада материинского ядра – $T_{1/2}$

(от 1.7 мин для $^{57}\text{Mn} \xrightarrow{\beta^-} {}^{57}\text{Fe}$ до $1.6 \cdot 10^7$ лет для $^{129}\text{I} \xrightarrow{\beta^-} {}^{129}\text{Xe}$); чем больше его значение, тем дольше можно использовать данный мессбауэровский источник, однако при том же числе материинских ядер будет меньше активность источника.

Процентное содержание мессбауэровского изотопа – c

(от 0.012% для ^{40}Kr до 100% для ^{197}Au); чем больше его значение, тем большее величина наблюдаемого эффекта Мессбауэра.

Энергия мессбауэровского перехода – E_0

(от 6.25 кэВ для ^{181}Ta до 155 кэВ для ^{188}Os); чем меньше ее значение, тем большее вероятность и величина эффекта Мессбауэра.

Период полураспада возбужденного состояния мессбауэровского изотопа – $t_{1/2}$

(от 10^{-11} с для ^{187}Re до 44 с для ^{107}Ag); чем больше его значение, тем уже резонансная линия и выше разрешение в мессбауэровском спектре.

Максимальное сечение резонансного поглощения – σ_0

(от $0.71 \cdot 10^{-24}$ м² для ^{234}U до $256 \cdot 10^{-24}$ м² для ^{57}Fe); чем больше его значение, тем большее величина наблюдаемого эффекта Мессбауэра.

Коэффициент конверсии – α

(от 0.12 для ^{61}Ni до 660 для ^{238}U); чем больше его значение, тем менее интенсивен источник "мессбауэровских" γ -квантов и тем эффективнее регистрировать эффект Мессбауэра с помощью электронов конверсии.

Основные характеристики мессбауэрвоских изотопов.

Основные характеристики наиболее часто используемых в эксперименте мессбауэровских изотопов

Оценка физических величин

Оценка энергии отдачи R в случае свободного и покоящегося ядра ^{57}Fe массы $m = 57$ а.е.м. (1 а.е.м. = $1.66 \cdot 10^{-27}$ кг) и энергии мессбауэровского перехода $E_0 = 14.4$ кэВ (1 эВ = $1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж, $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с):

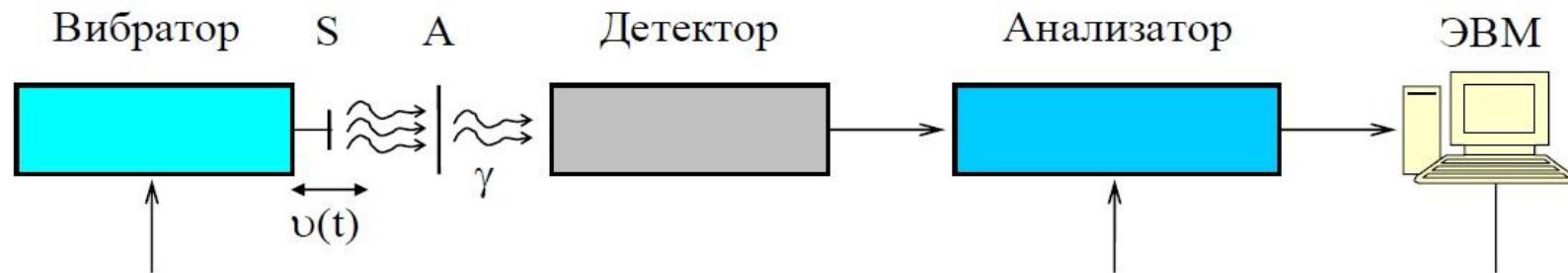
$$R = \frac{E_0^2}{2mc^2} \cong \frac{(14.4 \cdot 10^3)^2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19}}{2 \cdot 57 \cdot 1.66 \cdot 10^{-27} \cdot (3 \cdot 10^8)^2} \cong 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}. \quad \frac{R}{\Gamma_\tau} \cong \frac{2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}}{5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}} = 4 \cdot 10^5.$$

Оценка интегральной ширины D в случае ядер ^{57}Fe ($\Gamma_\tau \cong 5 \cdot 10^{-9}$ эВ, $R \cong 2 \cdot 10^{-3}$ эВ), если учесть $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К, то:

$$\text{для } T = 300 \text{ К} - D = 2\sqrt{k_B T R} = 2\sqrt{\frac{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 300 \cdot 2 \cdot 10^{-3}}{1.6 \cdot 10^{-19}}} \cong 1.4 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}, \quad D \sim R, \quad \frac{D}{\Gamma_\tau} \sim 3 \cdot 10^6;$$

$$\text{для } T = 4 \text{ К} - D = 2\sqrt{k_B T R} = 2\sqrt{\frac{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 4 \cdot 2 \cdot 10^{-3}}{1.6 \cdot 10^{-19}}} \cong 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}, \quad D \sim R, \quad \frac{D}{\Gamma_\tau} \sim 3 \cdot 10^5.$$

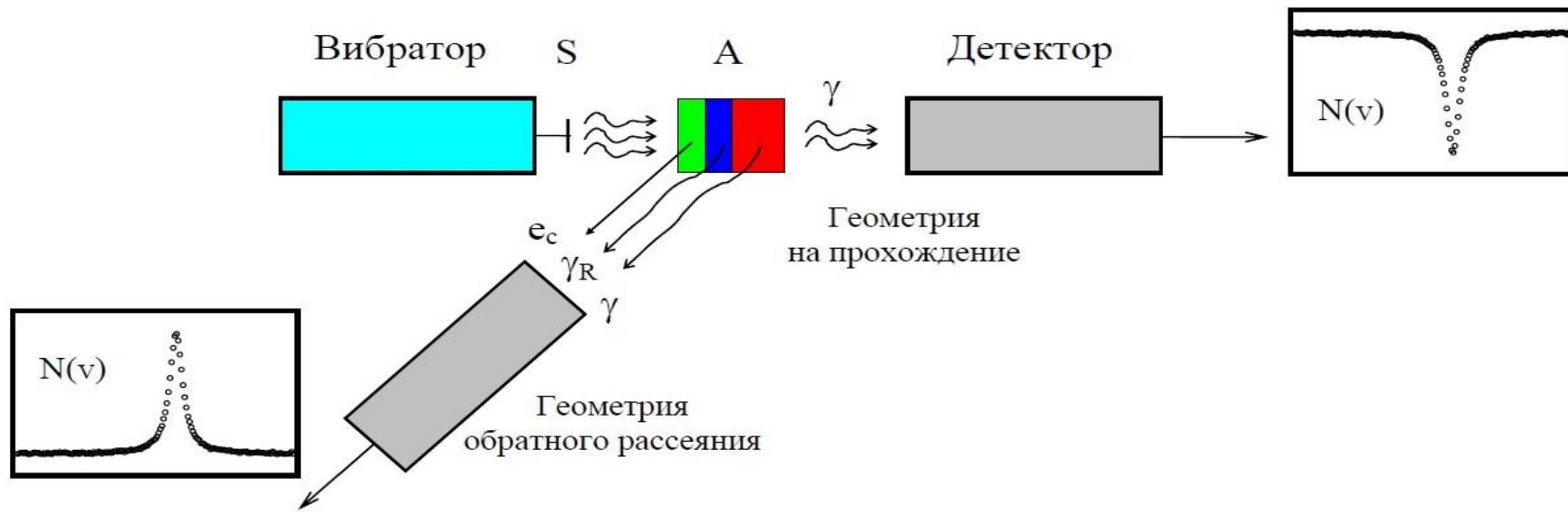
Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр.



Основные блоки мессбауэровского спектрометра:

- **вибратор** – задание доплеровской скорости движения источника относительно поглотителя;
- **детектор** – детектирование резонансных актов и формирование электрических импульсов;
- **анализатор** – дискриминация, сортировка и накопление электрических импульсов;
- **ЭВМ** – сбор информации и управление электронными блоками спектрометра.

Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр.



Объект регистрации (d – глубина проникновения или выхода из образца):

- **электроны конверсии e_c** ($d < \sim 0,3$ мкм),
- **рентгеновское вторичное излучение γ_R** ($d \sim 20$ мкм),
- **γ -кванты γ** ($d \sim 100$ мкм).

Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр.

Режимы работы спектрометра:

- **амплитудный анализ** – регистрация интенсивности счета электрических импульсов в зависимости от их амплитуды (энергии γ -квантов);
- **регистрация (скоростного, энергетического) спектра** – регистрация интенсивности счета электрических импульсов в зависимости от доплеровской скорости движения источника относительно поглотителя $v(t)$ (энергии γ -квантов).

Законы периодического ($T \sim 0.1$ с) изменения $v(t)$ (рис.):

- а – постоянных ускорений пи-лообразной формы;
- б – постоянных ускорений треугольной формы;
- в – постоянных скоростей;
- г – постоянных скоростей с фиксацией счета в "нулевом" канале;
- д – трапециидальный закон;
- е – гармонический закон.

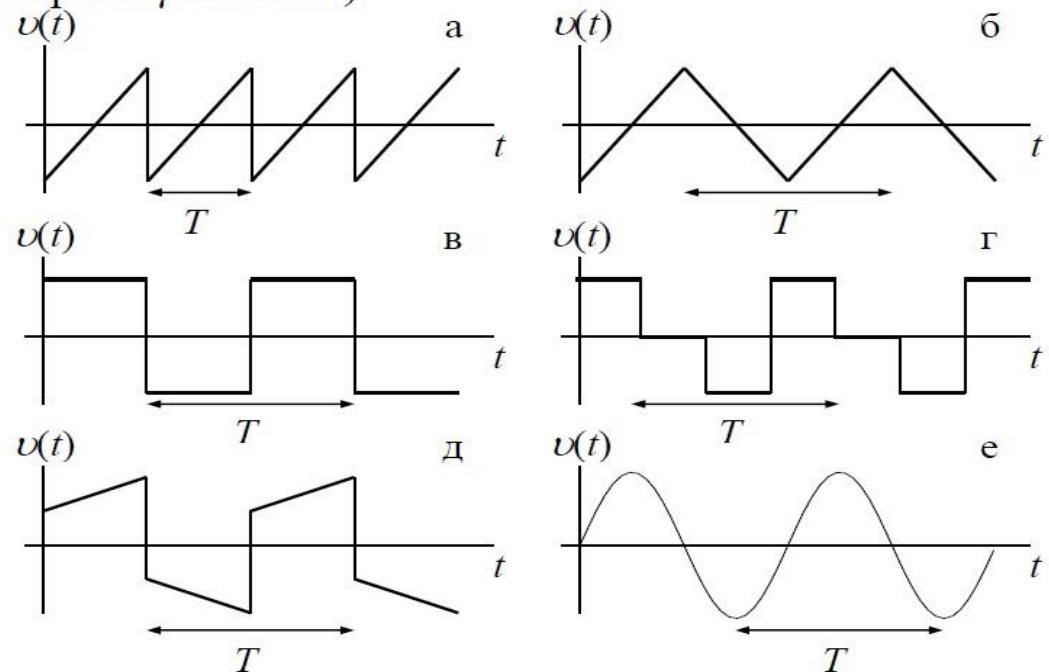


Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр.

Что регистрируется (d – глубина проникновения или выхода из образца излучения – область образца, формирующего мессбауэровский спектр):

- γ -кванты ($d \sim 100$ мкм),
- электроны конверсии ($d < \sim 0.3$ мкм),
- рентгеновское вторичное излучение ($d \sim 20$ мкм).

Чем регистрируется:

- сцинтиляционный детектор (например NaJ(Tl)),
- газовый пропорциональный счетчик,
- полупроводниковый детектор,
- резонансный детектор (регистрируется вторичное излучение резонансного поглотителя-конвертера, находящегося внутри неподвижного относительно источника детектора, при этом движется исследуемый образец).

Геометрия эксперимента:

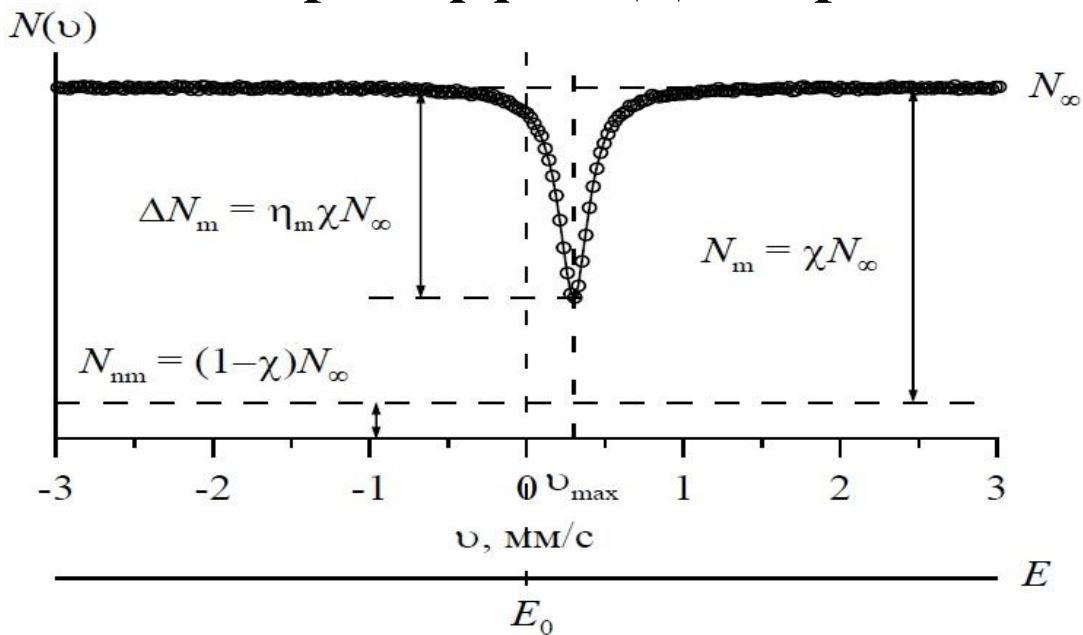
- пропускания (поглощения, прохождения),
 - рассеяния (в том числе обратного).
-

Мессбауэровский спектр

Мессбауэровский спектр и эффект Доплера

Продольный эффект Доплера
при $v \ll c$:

$$E_\gamma \cong E_0 + E_0 \frac{v}{c}.$$



Оценка скорости движения источника относительно поглотителя Δv_Γ , при которой энергия γ -кванта изменится на естественную ширину уровня (резонансной линии) Γ_ν для ядер ^{57}Fe $\Gamma_\tau \cong 5 \cdot 10^{-9}$ эВ, $E_0 \cong 14.41$ кэВ и:

$$\Delta v_\Gamma \cong c \frac{\Gamma_\tau}{E_0} \cong 3 \cdot 10^8 \frac{5 \cdot 10^{-9}}{14.41 \cdot 10^3} \cong 10^{-4} \text{ м/с} = 0.1 \text{ мм/с.}$$

Огибающая мессбауэровского спектра

При наличии нескольких неэквивалентных позиций мессбауэровского ядра с вероятностью эффекта f_a , поверхностью плотностью n_a и сечением резонансного поглощения $\sigma_a(E)$ можно получить:

$$\langle N(\nu) \rangle \equiv N(\nu) = N_\infty - N_\infty \chi \int_0^\infty \left(1 - e^{-\sum f_a n_a \sigma_a(E)} \right) W_s(E, \nu) dE,$$

$$\sigma_a(E) = \sigma_0 \alpha_a(E) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\tau}{\Gamma_a} \sum_{k=1}^{p_a} \frac{\beta_k^a}{1 + \left(\frac{E - E_0 - E_0 v_k^a / c}{\Gamma_a / 2} \right)^2}.$$

где Γ_a – ширина линии поглощения; p_a – число компонент для парциального спектра, $W_s(E, \nu)$ – линия излучения источника – $\int_0^\infty W_s(E, \nu) dE = 1$.

Для каждой неэквивалентной позиции параметры f_a , n_a , $\alpha_a(\{p_a, \beta_k^a, v_k^a, \Gamma_a\})$ – свои.

Величина эффекта, интенсивность спектра и эффективная толщина образца

Введем в рассмотрение **эффективную толщину образца** – $t_a \equiv f_a n_a \sigma_0$.

Относительная величина эффекта $\eta(\nu)$ с учетом формулы для огибающей спектра:

$$\eta(\nu) \equiv \frac{\Delta N(\nu)}{N_m} = \frac{N_\infty - N(\nu)}{\chi N_\infty} = f_s \int_0^\infty \left(1 - e^{-\sum t_a \alpha_a(E)}\right) W_s(E, \nu) dE.$$

Величина эффекта определяется только свойствами источника и исследуемого образца
и не зависит от параметров настройки конкретного спектрометра.

Площадь (интенсивность) спектра: $S \equiv \int_{-\infty}^\infty \eta(\nu) d\nu = f_s \frac{c}{E_0} \int_0^\infty \left(1 - e^{-\sum t_a \alpha_a(E)}\right) dE.$

Для "**тонкого образца**" ($t_a \equiv f_a n_a \sigma_0 \ll 1$) справедлив **принцип суперпозиции** – мессбауэровский спектр можно представить в виде суперпозиции отдельных парциальных спектров (подрешеток) или резонансных линий:

$$N(\nu) = N_\infty - N_\infty \chi f_s \sum_0^\infty t_a \int \alpha_a(E) W_s(E, \nu) dE,$$

$$\eta(\nu) = f_s \sum_0^\infty t_a \int \alpha_a(E) W_s(E, \nu) dE = \sum \eta_a(\nu), \quad \eta_a \sim n_a, f_a,$$

$$S = \frac{c}{E_0} \cdot \frac{\pi \Gamma_\tau}{2} f_s \sum f_a n_a \sigma_0 = \sum S_a, \quad S_a \sim n_a, f_a.$$

Форма линии излучения, поглощения и резонансной линии

Лоренцевская форма $W_L(E, \Gamma_\tau)$ линий излучения и поглощения с естественной шириной Γ_τ обусловлена самим явлением спонтанного испускания γ -квантов:

$$W_L(E, \Gamma_\tau) = \frac{2}{\pi \Gamma_\tau} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_\tau/2}\right)^2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} W_L(x, \Gamma_\tau) dx = 1.$$

Основные причины изменения формы и уширения излучения, поглощения и резонансной линий:

- 1) локальная неоднородность ядер в матрице источника,
- 2) при большой начальной активности источника – эффект самопоглощения.
- 3) локальная неоднородность окружения ядер в образце,
- 4) эффект насыщения,
- 5) геометрический эффект,
- 6) качество работы вибратора спектрометра (нелинейность по скорости, паразитные вибрации и т.д.),
- 7) в ряде случаев и способ регистрации γ -квантов (например, при резонансном детектировании).

Самопоглощение в источнике

Интенсивность мессбауэровских резонансных γ -квантов с энергией E на поверхности однородного по толщине источника:

$$N(E, t) = S_s x_0 \frac{m(t)}{T} \cdot \frac{\chi}{1 + \alpha} f_s W_s(E) \frac{1 - e^{-\alpha_s(E)t_s(t) - \mu x_0}}{\alpha_s(E)t_s(t) + \mu x_0}.$$

S_s – площадь активной поверхности источника,

x_0 – максимальная глубина внедрения материнских ядер,

$m(t) = m(0)e^{-t/T}$ – объемная плотность материнских ядер;

T – среднее время жизни материнского ядра ($T_{1/2} = \ln 2 \cdot T$),

χ – доля мессбауэровских γ -квантов,

$W_s(E, v)$ – линия испускания неподвижных мессбауэровских ядер,

$t_s(t) = \sigma_0 f_s n_s(t)$ – эффективная толщина излучающего слоя,

$n_s(t) = n(t)x_0$ – поверхностная плотность мессбауэровских ядер в источнике,

$n(t) = m(0) - m(t) = m(0)(1 - e^{-t/T})$ – объемная плотность дочерних резонансных ядер,

μ – линейный коэффициент нерезонансного поглощения

Линия испускания источника может существенно изменить свою форму и эффективную ширину, особенно при большой начальной интенсивности и со временем, когда число $n(t)$ дочерних резонансных (мессбауэровских) ядер велико.

Самопоглощение в источнике

Если нерезонансное поглощение преобладает над резонансным – $\mu x_0 \gg t_s(t)$, то искажение формы линии излучения не происходит:

$$N(E, x_0, t) = S_s \frac{m(t)}{T} \cdot \frac{\chi}{1 + \alpha} f_s W_s(E) \frac{1 - e^{-\mu x_0}}{\mu}.$$

При обычных интенсивностях источника (<100 мКи) $\mu x_0 > t_s$.

Если резонансное поглощение преобладает над нерезонансным – $t_s \gg \mu x_0$ (в случае большой активности источников, предназначенных для исследования резонансного рассеяния γ -квантов), тогда с учетом $W_s(E) = \frac{2}{\pi \Gamma_s} \alpha_s(E)$:

$$N(E, x_0, t) = \frac{2S_s m(t)}{\pi \Gamma_\tau T} \cdot \frac{\chi}{1 + \alpha} f_s \frac{x_0}{t_s(t)} \left(1 - e^{-\alpha_s(E)t_s(t)}\right),$$

$$\sigma_s(E) = \sigma_0 \frac{\Gamma_\tau}{\Gamma_0} \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{E - E_0}{\Gamma_0 / 2}\right)^2} = \sigma_0 \alpha_s(E).$$

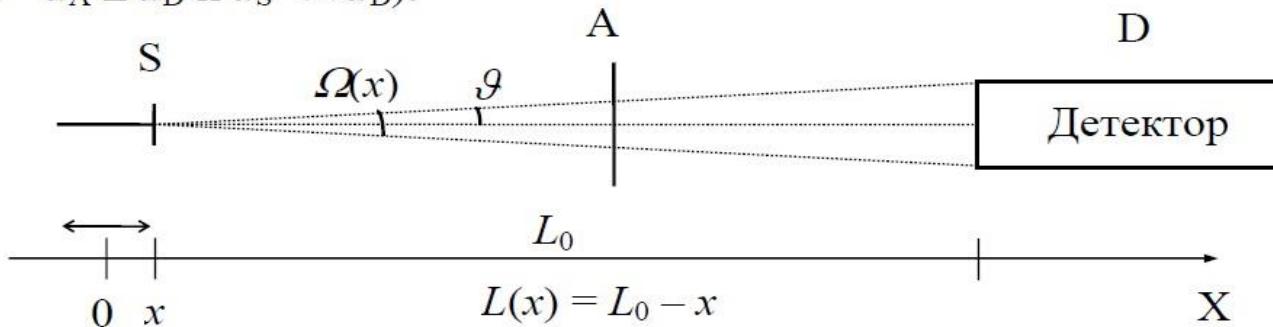
Происходит искажение формы линии источника, при этом ширина линии будет возрастать со временем:

$$\Gamma_s \cong \Gamma_0 + \Gamma_\tau \cdot 0.25t_s(t).$$

Геометрический эффект

Геометрический эффект – влияние геометрии мессбауэровского эксперимента на форму и параметры мессбауэровского спектра.

Влияние изменения угловой апертуры регистрируемого пучка (коллимации пучка детектором – $d_A \geq d_D$ и $d_S \ll d_D$).



Пусть $d_D \ll L_0$ и $x \ll L_0$, тогда угловая апертура регистрируемого потока γ -квантов:

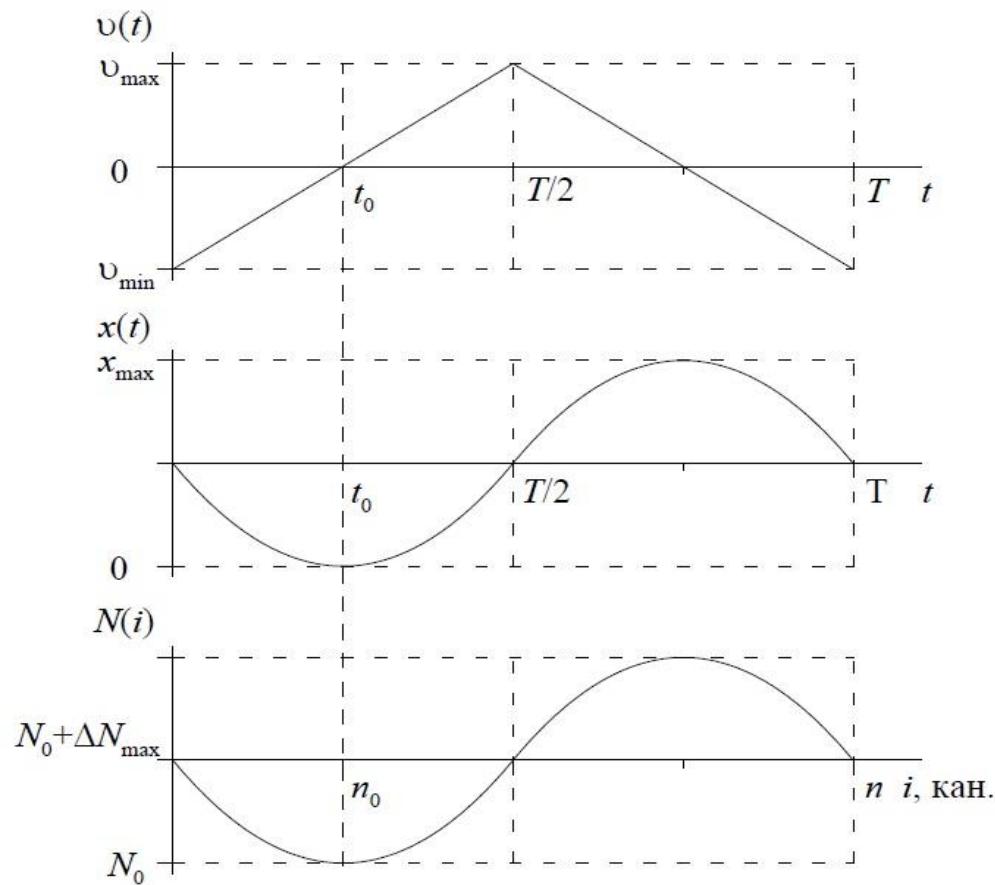
$$\Omega(x) \cong \frac{\pi d_D^2}{4L^2(x)} = \frac{\pi d_D^2}{4(L_0 - x)^2} = \frac{\pi d_D^2}{4L_0^2} \cdot \frac{1}{(1 - x/L_0)^2} \cong \frac{\pi d_D^2}{4L_0^2} \left(1 + \frac{2x}{L_0}\right) = \Omega_0 \left(1 + \frac{2x}{L_0}\right).$$

Интенсивность счета γ -квантов пропорциональна угловой апертуре – $N(x) \sim \Omega(x)$:

$$N(x) = N_0 \left(1 + \frac{2x}{L_0}\right).$$

Геометрический эффект

При движении источника с постоянным a и треугольной формой временной зависимости скорости движения источника относительно поглотителя v при $t \leq T/2$:



$$a = 2 \frac{v_{\max} - v_{\min}}{T} = 2 \frac{\Delta v}{T};$$

$$v = \frac{2\Delta v}{T}(t - t_0);$$

$$x(t) = \frac{\Delta v}{T}(t - t_0)^2.$$

$$\begin{aligned} N(t) &= N_0 \left(1 + \frac{2\Delta v}{T} \cdot \frac{(t - t_0)^2}{L_0} \right) = \\ &= N(v) = N_0 \left(1 + \frac{T}{2\Delta v L_0} v^2 \right) = \\ &= N_0 \left(1 + \alpha v^2 \right) = \\ &= N_0 \left(1 + \beta (i - n_0)^2 \right). \end{aligned}$$

Геометрический эффект

В результате геометрического эффекта экспериментальный мессбауэровский спектр будет модулирован параболической функцией от доплеровской скорости v и номера канала i в спектре.

Даже при достаточно большом расстоянии от источника до детектора $L_0 = 20$ см в случае статистики в спектре $\sim 10^6$ и более необходимо учитывать геометрический эффект.

При использовании треугольной формы временной зависимости скорости $v(t)$ движения источника относительно поглотителя одновременно регистрируются два зеркально отраженных мессбауэровских спектра с одинаковым по величине и противоположным знаком геометрическим эффектом. В случае инверсного сложения этих спектров относительно номера канала, соответствующего максимальной скорости движения источника геометрический эффект для результирующего спектра практически пропадает.

Влияние угла вылета γ -кванта

Из-за не равного нулю угла вылета из источника γ -кванта ϑ будет наблюдаться смещение резонансных линий в область больших по абсолютной величине значений доплеровской скорости v и асимметрия линий с их одновременным уширением.

Качество спектра и оптимизация эксперимента

Спектр высокого качества – спектр, содержащий достаточно детальную информацию о совокупности параметров спектра.

Наиболее важные факторы, определяющие качество спектра:

- число точек в спектре,
- исследуемый диапазон скоростей $\Delta\nu$,
- набранное число импульсов при расстройке резонанса N_∞ (статистика в спектре),
- геометрия опыта и др.

Качество спектра $Q(\nu)$ – это отношение видимой величины эффекта $\Delta N(\nu)$ к максимальному стандартному отклонению статистических ошибок $S_{N_\infty} = \sqrt{N_\infty}$:

$$Q(\nu) \equiv \frac{\Delta N(\nu)}{S_{N_\infty}} \equiv \frac{N_\infty - N(\nu)}{\sqrt{N_\infty}}.$$

Качество спектра $Q(\nu)$ существенно зависит от статистики в спектре и непосредственно связано со временем регистрации спектра t :

$$Q(\nu) = \frac{N_\infty - N(\nu)}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_\infty - N(\nu)}{\chi \cdot N_\infty} \chi \sqrt{N_\infty} = \eta(\nu) \chi \sqrt{N_\infty} \sim \sqrt{t}.$$

Качество спектра – понятие относительное и зависит от величины эффекта в той области спектра, которая для исследователя наиболее интересна.

Качество спектра и оптимизация эксперимента

Поскольку по мере увеличения толщины образца увеличивается величина эффекта $\eta(v)$, а доля χ г-квантов мессбауэровского перехода уменьшается из-за различных значений линейных коэффициентов нерезонансного поглощения – $\mu_m \gg \mu_{nm}$, то для повышения качества спектра $Q(v)$ необходимо подбирать оптимальную толщину образца.

Выбор оптимальной толщины образца.

Удобный параметр для выбора оптимальной толщины образца (без учета т.н. "эффекта насыщения") может служить **максимальное качество спектра** – качество спектра при до-плеровской скорости v_{max} , при которой величина эффекта максимальна:

$$K_{\text{обр}} \equiv Q(v_{max}) = \frac{\Delta N(v_{max})}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_\infty - N(v_{max})}{\sqrt{N_\infty}}.$$

Выбор оптимального режима работы спектрометра.

Так как величина эффекта $\eta(v)$ зависит только от используемого источника и исследуемого образца, то отношение качества спектра $Q(v)$ к величине эффекта $\eta(v)$ –

$$K_{\text{апп}} \equiv \frac{Q(v)}{\eta(v)} = \frac{N_\infty - N(v_{max})}{\sqrt{N_\infty}} \cdot \frac{\chi N_\infty}{N_\infty - N(v_{max})} = \frac{\chi N_\infty}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_m}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_\infty - N_{nm}}{\sqrt{N_\infty}}$$

может служить удобным параметром, характеризующим оптимальность настройки аппаратуры (выбора детектора, окна дискриминатора, коэффициента усиления, напряжения на фотоэлектронном умножителе и т.д.).

Оценка физических величин

Оценка доли ρ испущенных после резонансного поглощения γ -квантов, которая регистрируется детектором с диаметром окна d_D :

$$\rho = \frac{\Omega}{4\pi} = \frac{\pi d_D^2}{4\pi \cdot 4l^2} = \frac{d_D^2}{16l^2} = \left(\frac{d_D}{4l} \right)^2,$$

где Ω – угловая апертура регистрации детектором вторичного излучения γ -квантов, l – расстояние от поглотителя до детектора. Для $d_D \cong 2$ см и $l \cong 10$ см доля зарегистрированных γ -квантов равна $\rho \cong 2.5 \cdot 10^{-3}$.

Оценка статистики (интенсивности счета в отсутствие резонанса) N_∞ , необходимой для обнаружения вклада от вторичного излучения γ -квантов $N_{\text{sec}}^{\text{det}}$ ($\chi = 0.7$, $\eta_{\max} = 0.1$, $\alpha = 8.2$, $\rho \cong 2.5 \cdot 10^{-3}$):

$$N_{\text{sec}}^{\text{det}} \geq S_{N_{\max}}, \quad S_{N_{\max}} = \sqrt{N_{\max}} = \sqrt{N_\infty(1 - \eta_{\max}\chi)}, \quad N_{\text{sec}} = \Delta N_{\max} \frac{1}{1 + \alpha} = \frac{\eta_{\max}\chi}{1 + \alpha} N_\infty,$$

$$N_{\text{sec}}^{\text{det}} = N_{\text{sec}}\rho = \frac{\eta_{\max}\chi}{1 + \alpha} N_\infty\rho, \quad \frac{\eta_{\max}\chi N_\infty}{1 + \alpha} \rho \geq \sqrt{N_\infty(1 - \eta_{\max}\chi)},$$

$$N_\infty \geq (1 - \eta_{\max}\chi) \left(\frac{1 + \alpha}{\eta_{\max}\chi\rho} \right)^2 \cong 0.93 \cdot \left(\frac{1 + 8.2}{0.1 \cdot 0.7 \cdot 2.5 \cdot 10^{-3}} \right)^2 \cong 2.6 \cdot 10^9 \text{ имп.}$$

Колебательный спектр ядра в твёрдом теле

При классическом описании произвольное собственное (свободное) колебание линейной динамической системы (с постоянными не зависящими от состояния системы параметрами) представляет собой суперпозицию нормальных колебаний (мод). **Нормальные колебания** – это собственные гармонические колебания. Координаты атомов (ядер) относительно их равновесного положения можно представить в виде:

$$u_i(t) = \sum_{j=1}^s \eta_{ij} \xi_j(t) = \sum_{j=1}^s \eta_{ij} a_j \cos(\omega_j t + \varphi_j) = \sum_{j=1}^s A_{ij} \cos(\omega_j t + \varphi_j); i, j = 1, 2, \dots, s.$$

$s = 3N$ – **число степеней свободы**, N – число атомов (ядер) в системе;

$\{\xi_j(t) = a_j \cos(\omega_j t + \varphi_j)\}$ – **нормальные координаты**, задающие состояние системы;

$\{a_j\}$ и $\{\varphi_j\}$ – амплитуды и начальные фазы, определяемые начальными условиями;

$\{\omega_j\}$ и $\{\eta_{ij}\}$ – **нормальные частоты и спектр колебаний** (распределение координат атомов по нормальным частотам) – определяются параметрами системы.

Нормальные колебания полностью независимы друг от друга. Энергия от одной моды во времени не переходит к другой. При этом отдельные части связанной системы обмениваются энергией. Система ведет себя как набор независимых гармонических осцилляторов с нормальными частотами. Полная энергия движения системы (усредненная за $t \gg T_j$):

$$E = \sum_{j=1}^s E_j.$$

Температурный сдвиг и колебательный контур

Учтем релятивистский эффект изменения массы ядра из-за уменьшения его энергии на E_0 при переходе из возбужденного состояния в основное:

$$mc^2 = E, \delta mc^2 = \delta E = -E_0, \quad \delta m = -\frac{E_0}{c^2}.$$

Изменение кинетической энергии ядра E_k при излучении γ -кванта без отдачи ядра ($P = \text{const}$) и релятивистском изменении массы (v – скорость тепловых колебаний атома):

$$\delta E_k = \delta \left(\frac{P^2}{2m} \right) = -\frac{P^2}{2m^2} \delta m = \frac{P^2}{2m^2} \cdot \frac{E_0}{c^2} = \frac{E_0}{2c^2} v^2,$$

Следовательно, изменение энергии γ -кванта при этом равно:

$$\delta E_\gamma = -\delta E_k = -\frac{E_0}{2c^2} v^2.$$

В среднем за время излучения ($\tau \gg \tau_T$):

$$\langle \delta E_\gamma \rangle = -\frac{E_0}{2c^2} \langle v^2 \rangle.$$

Следовательно, резонансная линия будет испытывать так называемый **температурный сдвиг** δ_T мессбауэровской линии вдоль шкалы доплеровских скоростей:

$$\delta_T = \frac{c}{E_0} \langle \delta E_\gamma \rangle = -\frac{1}{2c} \langle v^2 \rangle.$$

Динамика атомов в твёрдом теле

Произвольное твердое тело состоит из N атомов: $3N$ уравнений движения, решение – нормальные колебания с нормальными частотами $\{\omega_j\}$, $i = 1, 2, \dots, 3N$.

Регулярный (периодический) кристалл обладает трансляционной симметрией и состоит из n элементарных ячеек по r атомов в каждой: $l = 1, 2, \dots, n$, $t = 1, 2, \dots, r$, $N = nr$.

Колебания атомов представляются как участие в распространении упругих плоских волн $u_{tl}^j(t) = u_{tl}^j e^{i\omega t} = u_t^j e^{-iq \cdot l} e^{i\omega t}$ с различными нормальными частотами ω , волновыми векторами q ($q = 2\pi/\lambda$) и амплитудами u_t^j , которые одинаковы в различных элементарных ячейках, положение каждой из которых задается вектором l .

Определим, какие и сколько значений может принимать волновой вектор q .

В случае трансляционной симметрии физически эквивалентны волновой вектор q и вектор $q + 2\pi\mathbf{g}$, где $\mathbf{g} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$ – любой вектор обратной решетки с тройкой базисных векторов \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 :

$$\mathbf{b}_1 \equiv \frac{1}{v} [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3], \mathbf{b}_2 \equiv \frac{1}{v} [\mathbf{a}_3 \mathbf{a}_1], \mathbf{b}_3 \equiv \frac{1}{v} [\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2],$$

где \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 – параметры и $v \equiv (\mathbf{a}_1 [\mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3])$ – объем элементарной ячейки.

Все физически неэквивалентные волновые вектора q лежат внутри зоны Бриллюэна – ячейки Вигнера-Зейца, построенной на векторах обратной решетки $2\pi\mathbf{b}_1$, $2\pi\mathbf{b}_2$ и $2\pi\mathbf{b}_3$.

Акустические и оптические ветви колебания

2. Случай **оптических колебаний** – $\omega_\alpha(q \rightarrow 0) \neq 0$.

Оптические колебания соответствуют смещению атомов одного сорта относительно атомов другого сорта в элементарной ячейке, при этом центр масс всей элементарной ячейки остается неподвижным. Колебания происходят во всех элементарных ячейках одинаково.

Спектр этих колебаний начинается с некоторой граничной частоты ω_0 .

Число оптических ветвей колебаний равно числу степеней свободы атомов в элементарной ячейке $3r$ без числа степеней свободы элементарной ячейки как целой:

$$3r-3 = 3(r-1).$$

При малом волновом векторе $q = qj$ вдоль произвольного направления j для каждой из ветвей оптических колебаний при $q \rightarrow 0$ частота стремится к постоянной величине: $\omega_\alpha(q \rightarrow 0) = \omega_\alpha(0)$.

Фазовая скорость волны стремиться к бесконечности: $\frac{\omega_\alpha(q)}{q} \rightarrow \infty$.

Групповая скорость волны стремится к нулю: $\frac{\partial \omega_\alpha(q)}{\partial q} \rightarrow 0$.

Дебаевское приближение

В общем случае низкочастотные колебания анизотропного кристалла описываются тремя дебаевскими частотами Ω_D^j , а начальный (низкочастотный) участок спектра атомов данного сорта t зависит лишь от его массы m_t , но не от узла решетки, в которой находится, и может быть описан с помощью трех соответствующих ему дебаевских частот – $\Omega_{D,t}^j$.

Если ввести в рассмотрение **температуру Дебая** ϑ_D :

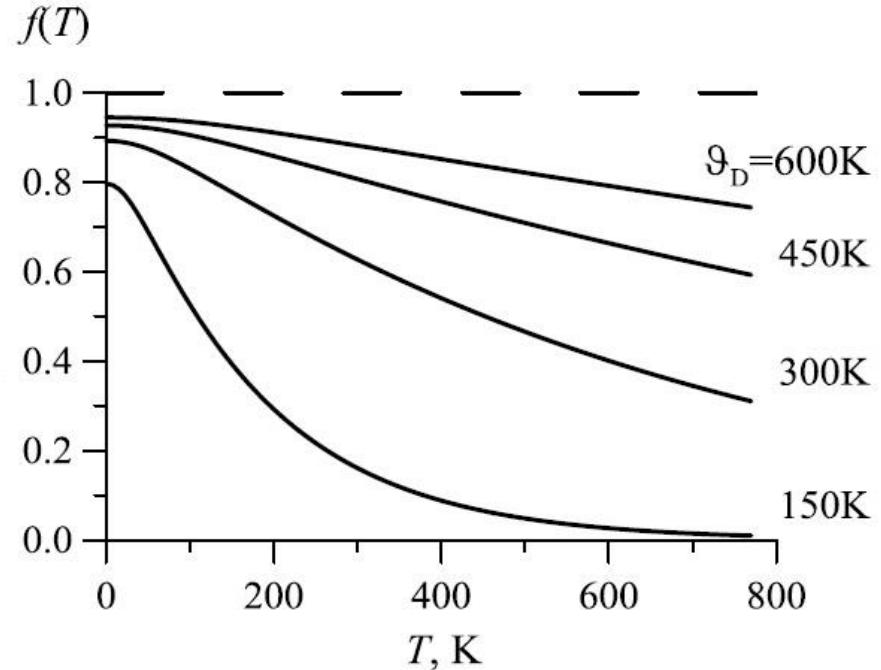
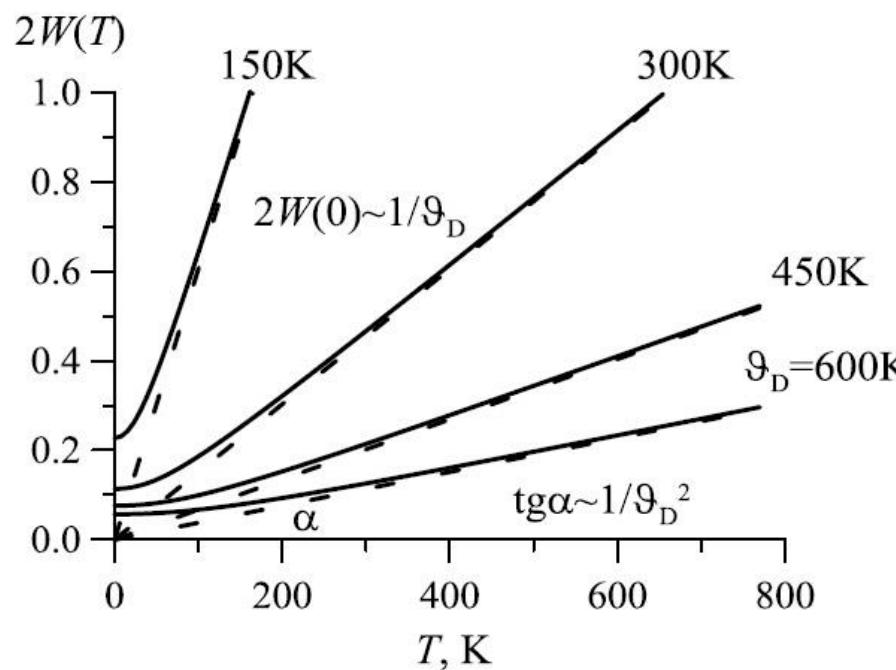
$$k_B \vartheta_D \equiv \hbar \Omega_D; \quad \vartheta_D = \frac{\hbar \Omega_D}{k_B},$$

то для температур Дебая, соответствующих различным колебательным спектрам, получим те же соотношения, что и для дебаевских частот.

В дебаевском приближении интересующие нас параметры мессбауэровского спектра равны:

$$2W = R \int_0^\infty \frac{1}{\hbar \omega} \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T}\right) g(\omega) d\omega = \frac{3R}{k_B \vartheta_D^3} \int_0^{\vartheta_D} x \cdot \operatorname{cth}\left(\frac{x}{2T}\right) dx,$$
$$\delta_T = -\frac{3}{4mc} \int_0^\infty \hbar \omega \cdot \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T}\right) g(\omega) d\omega = -\frac{9k_B}{4mc \vartheta_D^3} \int_0^{\vartheta_D} x^3 \cdot \operatorname{cth}\left(\frac{x}{2T}\right) dx.$$

Дебаевское приближение



Температурные зависимости показателя экспоненты $2W(T)$ и вероятности
эффекта $f(T)$ для ядер ^{57}Fe при различных температурах Дебая ϑ_D

$$2W(0) = \frac{3R}{2k_B} \cdot \frac{1}{\vartheta_D}, \quad \tan \alpha = \frac{6R}{k_B} \cdot \frac{1}{\vartheta_D^2}.$$

Вероятность эффекта и площадь мессбауэровской линии

$$N(\nu) = N_\infty - N_\infty \chi f_s \int_0^\infty \left(1 - e^{-\sum f_a n_a \sigma_0 \alpha_a(E)}\right) W_s(E, \nu) dE - \text{огибающая мессб. спектра};$$

$$\alpha_a(E) = \frac{\Gamma_\tau}{\Gamma_a} \sum_{k=1}^{p_a} \frac{\beta_k^a}{1 + \left(\frac{E - E_0 - E_0 v_k^a / c}{\Gamma_a / 2} \right)^2} - \text{нормированное сечение резонанс. поглощения.}$$

В случае "тонкого образца" ($t_a \equiv f_a n_a \sigma_0$):

$$N(\nu) = N_\infty - \chi N_\infty f_s \sum_0^\infty f_a n_a \sigma_0 \int_0^\infty \alpha_a(E) W_s(E, \nu) dE, \alpha_a(E) - ?.$$

От многих недостатков свободен способ определения вероятности эффекта, основанный на вычислении площади (интенсивности) мессбауэровского спектра S :

$$S \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \eta(\nu) d\nu = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{N_\infty - N(\nu)}{\chi N_\infty} d\nu = \frac{c}{E_0} f_s \int_0^\infty \left(1 - e^{-\sum f_a n_a \sigma_0 \alpha_a(E)}\right) dE.$$

В случае "тонкого образца" вообще можно не знать тонкую структуру спектра:

$$S = \sum S_a = \frac{c}{E_0} \cdot \frac{\pi \Gamma_\tau}{2} f_s \sum f_a n_a \sigma_0, S_a = \frac{c}{E_0} \cdot \frac{\pi \Gamma_\tau}{2} f_s f_a n_a \sigma_0 = const \cdot f_a n_a.$$

Вероятность эффекта и площадь мессбауэровской линии

В однопараметрическом приближении колебательного спектра атома определить эффективную дебаевскую (эйнштейновскую) температуру (а значит и вероятность эффекта Мессбауэра в поглотителе f_a при любой температуре) можно по профилю температурной зависимости площади $S_a(T)$ парциального мессбауэровского спектра (или сдвига $\delta_a(T)$ мессбауэровской линии).

При этом, однако, приходится предполагать, что колебательный спектр ядер и эффективная дебаевская температура не меняются в исследуемой области температур (не наблюдаются, например, "магнитные аномалии" или явление ангармонизма).

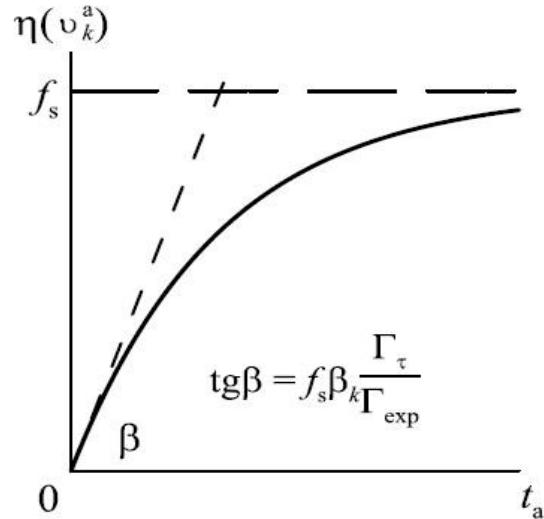
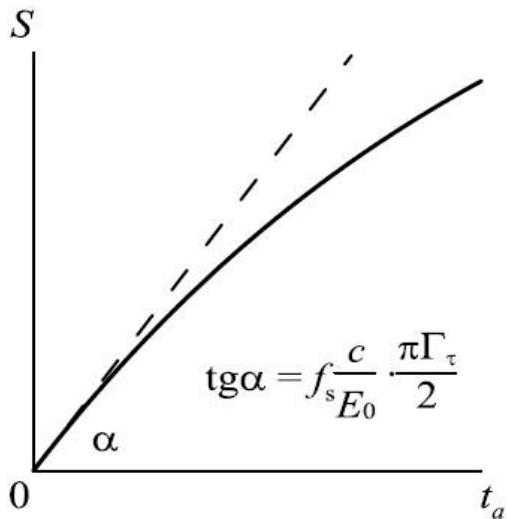
Наиболее просто определить вероятность эффекта Мессбауэра в источнике f_s , так как в формуле для площади мессбауэровского спектра она выступает в качестве множителя:

$$S = \text{const} \cdot f_s.$$

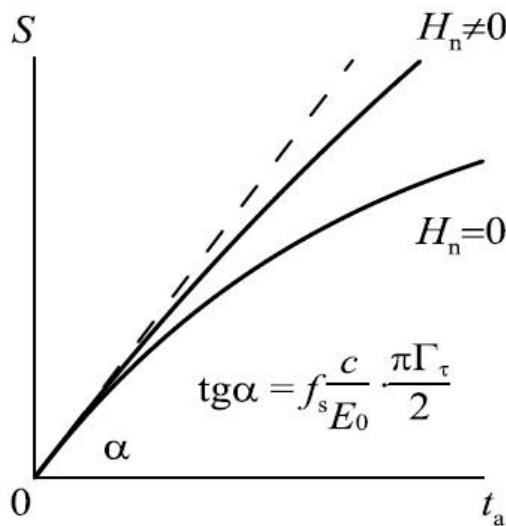
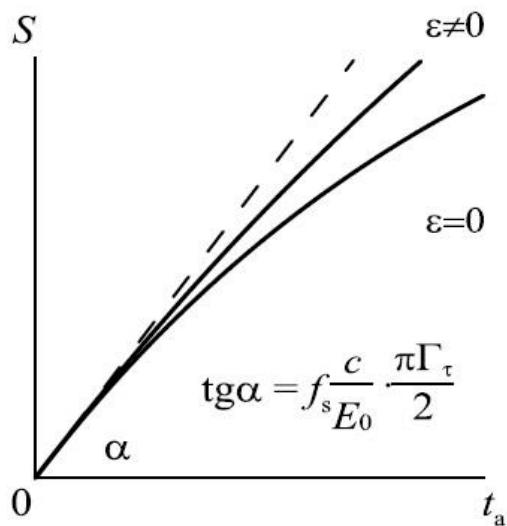
Константа, зависящая только от используемого поглотителя, может быть определена в опыте с эталонным источником, для которого известна вероятность f_s^{et} , при этом поглотитель может быть практически любым по толщине. В этом случае

$$f_s = f_s^{\text{et}} \frac{S}{S^{\text{et}}}.$$

Эффект насыщения



Зависимость площади спектра S и величины эффекта $\eta(v_k)$ от эффективной толщины образца t_a



Зависимости площади спектра S от эффективной толщины образца t_a при различной сверхтонкой структуре спектра

Использованные ресурсы при составлении материалов к лекции.

1. http://issuu.com/vsrusakov/docs/3_i/1?e=5282267/3794923
2. http://issuu.com/vsrusakov/docs/4_ii_20121008122024/1?e=5282267/3795464
3. http://issuu.com/vsrusakov/docs/8_20121008122021/1?e=0
2. Вертхейм Г. "Эффект Мессбауэра". – М.: Мир. 1966. – 172с.
2. Шпинель В.С. Резонанс гамма-лучей в кристаллах. – М.: Наука. 1969. – 407с.
3. Химические применения мессбауэровской спектроскопии. Под ред. В.И.Гольданского и Р.Гербера. – М.: Мир. 1970. – 502с.
4. Иркаев С.М., Кузьмин Р.Н., Опаленко А.А. Ядерный гамма-резонанс. – М: Изд-во Москва. Ун-та. 1970. Dickson and F.J. Berry. Cambridge University Press. 1986. – 274р.
9. Русаков В.С. Мессбауэровская спектроскопия локально не-однородных систем. – Алматы. ИЯФ НЯЦ РК. 2000. – 431с.
10. Русаков В.С. Основы мессбауэровской спектроскопии. – М.: Физический факультет МГУ, 2011. – 292с.