

穆斯堡尔效应

王艺霖*

物理学院 学号:2200011456

摘要: 穆斯堡尔效应是指在固体中的核发射或吸收 γ 射线时有一定的概率不发生核反冲. 本实验利用 Geant4 进行了穆斯堡尔效应模拟实验, 使用 ^{57}Co 发射源, 在 $\alpha\text{-Fe}$ 和硝普酸钠分别作吸收体的情况下对其穆斯堡尔谱进行了测量, 利用所测谱线对多道分析器的道增益、零速度所对应道址进行了测量, 并计算了 $\alpha\text{-Fe}$ 基态和第一激发态的朗道 g 因子和核磁矩大小, 以及硝普酸钠的同质异能移位和四级裂矩. 此外, 还利用了 ICRP145 模型对于 ^{57}Co 对人体的辐射剂量进行了模拟, 计算了达到人体剂量当量 $H = 25\text{mSv}$ 所用的时间.

关键词: 穆斯堡尔效应, 穆斯堡尔谱, Geant4, ICRP145

I. 引言

1957 年, 穆斯堡尔发现在固体中的核发射或吸收 γ 射线时可以有一定的概率不发生核反冲, 这一现象被称为穆斯堡尔效应. 穆斯堡尔因为发现和解释了这一现象获得 1961 年的诺贝尔物理学奖. 穆斯堡尔谱线非常尖锐, 从源发出的 γ 射线相对于吸收体的能量移动 $\delta E = \frac{v}{c} E_0$ 可以确定到极高的精度, 因此穆斯堡尔效应经常被用来测量核能级的超精细结构、确定核磁矩的大小、核激发态的寿命、固体内电场与磁场的大小以及研究固体的晶格振动等. 目前穆斯堡尔效应已经成为化学、磁学、固体物理、生物学、冶金学等领域的重要研究手段之一.

本实验的目的是观察穆斯堡尔效应以增进对穆斯堡尔效应原理的理解. 本实验采用 Geant4 程序进行穆斯堡尔模拟实验, 实验内容包括测量 ^{57}Co 源、 $\alpha\text{-Fe}$ 和硝普酸钠作吸收体的穆斯堡尔谱, 计算 $\alpha\text{-Fe}$ 基态和第一激发态的朗道 g 因子和核磁矩大小以及硝普

* e-mail: wylin@stu.pku.edu.cn; mobile number: 15837187296

酸钠的同质异能移位和四极裂矩。此外，还利用了 ICRP145 模型对于 ^{57}Co 对人体的辐射当量进行了模拟。

II. 实验

1. 实验环境

模拟实验所使用的系统是 Debian，所使用的程序是 Geant4，笔者使用的是实验室的 #8 号计算机，穆斯堡尔实验工作的目录是 /media/sf_share/mossbSim/V6/run20240313，点源吸收剂量模拟工作的目录是 /media/sf_share/Dose/ICRP145_HumanPhantomsAir/run20240313。

穆斯堡尔实验每一个样例的文件夹中初始都有三个文件：`createRun.sh`、`checkMossb.C` 和 `clearAllResult.sh`。其中 `createRun.sh` 是开始运行模拟程序的命令，可以对模拟的事件数、探测器厚度和源与样品之间的距离进行修改。`checkMossb.C` 是用于画图 ROOT 程序。

2. 实验方法

穆斯堡尔实验部分一共需要运行五个样例，具体参数如表 1 所示。

表 1 5 个穆斯堡尔实验的具体参数

样例	源	样品	源与样品距离/mm	探测器厚度/mm
1	^{57}Co	$\alpha - \text{Fe}$	100	0.13
2	^{57}Co	$\alpha - \text{Fe}$	100	13
3	^{57}Co	$\alpha - \text{Fe}$	100	0.1
4	^{57}Co	$\alpha - \text{Fe}$	5	0.1
5	^{57}Co	硝普酸钠	100	0.13

每个样例单独放置在一个文件夹中。进入文件夹后，首先修改 `createRun.sh` 中的参数使之满足实验要求，接着运行程序。在运行过程中应当定期监测程序运行结果，在 ROOT 环境中输入 “.L checkMossb.C” 载入文件，然后输入 “checkMossb()” 就可以查看穆斯堡尔实验的结果，括号中是一个可选参数，若为 1 则对结果中的峰进行拟合，若

为 0 则不进行拟合，默认值为 1。当程序可以清晰拟合出穆斯堡尔各峰的时候，模拟完成的统计量就已经满足需要，可以使用 `killall mossbSim` 结束所有正在运行的进程。

点源吸收剂量模拟直接在工作目录中使用 “`./ICRP145phantoms -m ionCo55.mac -o Co55.out`” 即可，结果将被保存到 `Co55.out` 文件中。

III. 结果与讨论

A. 观察穆斯堡尔谱

按照表 1 中的五组参数进行穆斯堡尔模拟实验，可以分别得到其穆斯堡尔谱。

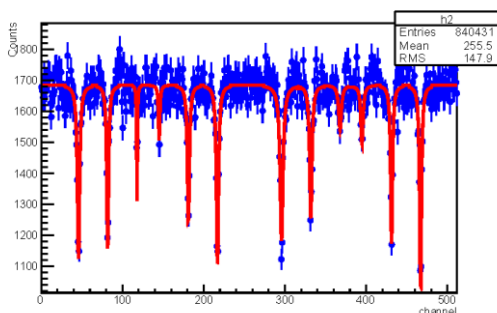


图 1 α -Fe 100mm 0.13mm

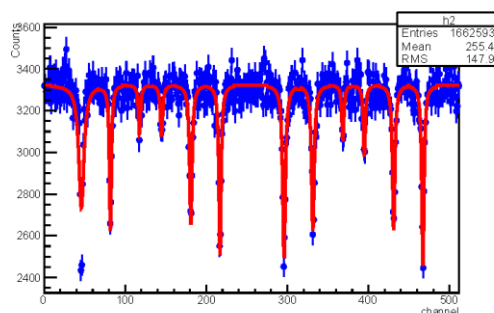


图 2 α -Fe 100mm 13mm

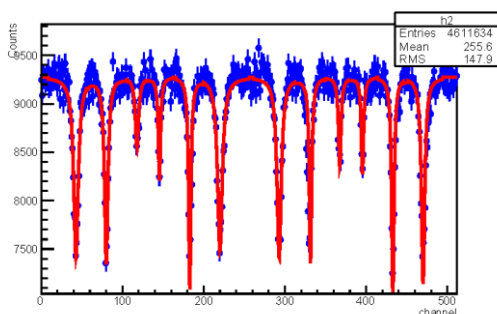


图 3 α -Fe 5mm 0.10mm

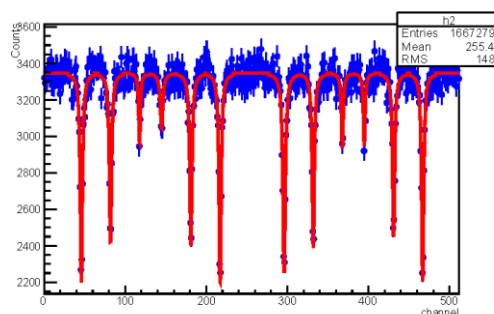


图 4 α -Fe 100mm 0.10mm

图 1 到图 4 是四组 α -Fe 作吸收体的穆斯堡尔谱，图中的 12 条谱线分为两组，分别是源运动的速度增大和减小时产生的 6 条谱线，而 6 条谱线是由 ^{57}Fe 的核塞曼分裂产生的。

从 `checkMossb.C` 程序运行的结果中可以得到每条谱线的强度、位置和线宽，使用 `python` 提取这些数据并利用其中的线宽数据画图，可以得到图 5，图中的横坐标是 12

条谱线，纵坐标表示穆斯堡尔谱宽 Γ 的大小。比较图中的(0.13,100)和(13,100)两组数据，可以看出在源与样品距离相同时，探测器厚度越大，谱线的线宽越大，这是因为探测器的厚度越大，自吸收对于谱线的影响就显著，从而谱线越宽。比较图中的(0.1,100)和(0.1,5)两组数据，可以看出在探测器厚度相同时，源与样品的距离越小，谱线的线宽越大，这是因为当源与样品距离较小时，到达样品的 γ 射线的准直性就较差，从而引起谱线的增宽。

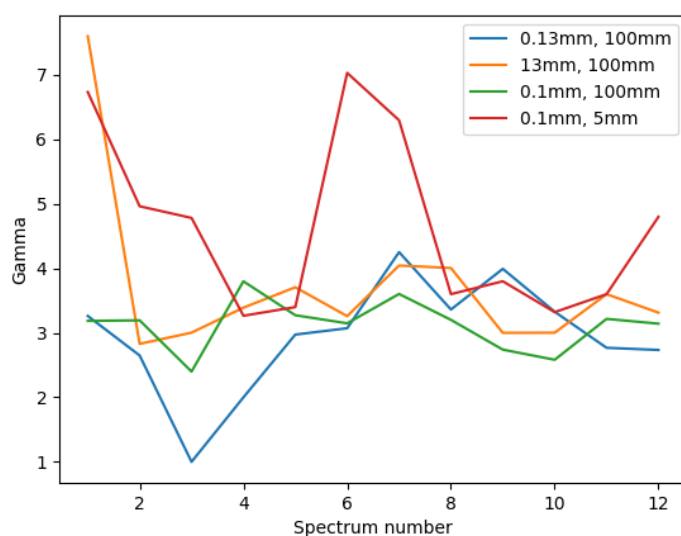


图 5 四组参数下的 α -Fe 穆斯堡尔谱线宽度 Γ

图 6 是硝普酸钠样品作吸收体时的穆斯堡尔谱，四条谱线依然分为两组，每组的两条谱线是由电四极矩分裂产生的。

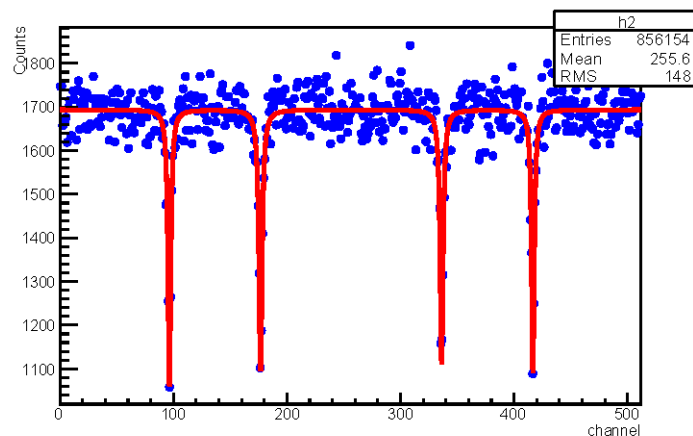


图 6 硝普酸钠 100mm 0.13mm

B. 数据处理

选取 (α -Fe, 0.13mm, 100mm) 和 (硝酸钠, 0.13mm, 100mm) 两组数据, 依然从 checkMossb.C 程序的运行结果中直接获取拟合数据, 谱线峰值道址如表 2 所示. 注意左侧峰道址随序号递减, 而右侧峰递增, 这是因为它们分别对应一个速度周期中的下降、上升区间, 这一点可以由之后对 α -Fe 谱的重心的计算判断得出.

表 2 穆斯堡尔谱峰值道址

(a) α -Fe						
序号	1	2	3	4	5	6
左侧峰道址 v_l	217.0	181.2	145.2	118.0	81.85	45.95
右侧峰道址 v_r	295.8	331.9	367.9	394.8	431.3	467.0

(b) 硝酸钠		
	1	2
左侧峰道址 v_l	176.8	96.43
右侧峰道址 v_r	336.2	416.6

1. 道增益 K

已知 α -Fe 的 $v_6 - v_1 = 10.656 \text{ mm/s}$, 所以可以得到模拟实验中多道分析器的道增益为

$$K = \frac{10.656}{|v_6 - v_1|_{\alpha\text{-Fe}}} \text{ mm/s} = 6.229 \times 10^{-2} \text{ mm/s}$$

其中 $|v_6 - v_1|$ 由左右两道址的平均值给出, 之后计算中的峰值道址之差均由两道址平均值给出, 不再赘述.

2. 零速度对应的道址

$$v_{lc} = \frac{v_{l1} + v_{l2} + v_{l5} + v_{l6}}{4} = 131.5$$

$$v_{rc} = \frac{v_{r1} + v_{r2} + v_{r5} + v_{r6}}{4} = 381.5$$

可以看出, 二者之差为 $v_{rc} - v_{lc} = 250.0 < 256$, 而 α -Fe 谱的重心位于 $v_{c0} = -0.185 \text{ mm/s}$ 的位置, 因此在一整个速度周期中, 速度的确是先下降后上升, 也就是左侧峰值对应速度下降沿, 而右侧则对应上升沿.

根据 α -Fe 谱的重心位置，我们可以计算出零速度对应的道址：

$$v_{l0} = v_{lc} + \frac{v_{c0}}{K} = 128.5$$

$$v_{r0} = v_{rc} - \frac{v_{c0}}{K} = 284.5$$

左右的零速度道址之差在实验精度范围内恰好等于 256，这就说明了放射源的速度周期和多道分析器的周期匹配；相反，如果已知二者周期匹配，那么这一结果就说明了同质异能移位的存在性，并可以利用它求出同质异能移位的大小。

3. ^{57}Fe 的基态和第一激发态的朗道 g 因子和核磁矩的大小

根据 ^{57}Fe 的核塞曼跃迁的六条容许跃迁，可以得到基态和激发态中相邻能级的间距

（已知对于 14.4keV 的谱线，1mm/s 对应的能量为 $\delta E = 4.80766 \times 10^{-8} \text{ eV} \cdot (\text{mm/s})^{-1}$ ）：

$$\Delta E_g = \frac{|v_4 - v_2| + |v_5 - v_3|}{2} \cdot K \cdot \delta E = 1.893 \times 10^{-7} \text{ eV}$$

$$\Delta E_e = \frac{|v_3 - v_2| + |v_5 - v_4|}{2} \cdot K \cdot \delta E = 1.081 \times 10^{-7} \text{ eV}$$

已知 α -Fe 的内磁场 $B = 33\text{T}$ ，根据 $g = \frac{\Delta E}{\mu_N B}$ 以及 $\mu_N = 3.152451 \times 10^{-8} \text{ eV/T}$ ，可以得到

$$g_g = 0.182 \quad \mu_g = g_g \mu_N = 5.74 \times 10^{-9} \text{ eV/T}$$

$$g_e = 0.104 \quad \mu_e = g_e \mu_N = 3.28 \times 10^{-9} \text{ eV/T}$$

4. 硝普酸钠的同质异能移位和四极裂矩

硝普酸钠的相对 α -Fe 的重心偏移为

$$\Delta v = \frac{|v_1 + v_2|}{2} - v_{c, \alpha\text{-Fe}} = 5.11$$

相对移位是 $K\Delta v = 0.318\text{mm/s}$ ，对应 $\Delta E = \frac{K\Delta v}{c} \cdot E_0 = 1.53 \times 10^{-8} \text{ eV}$ 。

硝普酸钠中 ^{57}Fe 的四极裂矩为

$$\Delta E = \frac{K |v_1 - v_2|}{c} \cdot E_0 = 2.41 \times 10^{-7} \text{ eV}$$

5. 谱峰宽度

根据 checkMossb.C 给出的拟合参数，对 (α -Fe, 0.13mm, 100mm) 的 12 个峰进行拟合得到的 Γ 的平均值是 2.95，对应 $2\Gamma = 5.90$ ，也就是 $\delta E = \frac{2\Gamma K}{c} E_0 = 1.77 \times 10^{-8} \text{ eV}$ ，比激发态寿命

对应的半高宽度 $9.8 \times 10^{-9} \text{eV}$ ^[1]，可以看到，实验测量的谱线宽度大于理论给出的值，这是因为源和吸收体存在一定厚度导致的自吸收。源和吸收体的厚度增大导致的谱线增宽从前述的 A 部分也可以看出。

6. 吸收剂量模拟

运行 ICRP145phantoms 模型，模拟了 $n = 10^6$ 个样例对人体的辐射，对人体辐射的总剂量是 $h = 4.1813 \times 10^{-16} \text{Sv}$ ，所以 1Ci 的 ^{57}Co 核素放在人体右侧 1m 处，达到人体剂量当量 $H = 25 \text{mSv}$ 所需的时间为：

$$t = \frac{H}{h} \cdot \frac{n}{1\text{Ci}} = 1.616 \times 10^9 \text{s} = 51.24 \text{d}$$

IV. 结论

本实验利用 Geant4 软件对穆斯堡尔实验进行了模拟，以 ^{57}Co 作为 γ 射线源，分别获得了 $\alpha\text{-Fe}$ 和硝普酸钠的穆斯堡尔谱。通过对比不同参数下的 $\alpha\text{-Fe}$ 的穆斯堡尔谱线宽度，得到了在源与样品距离一定时，探测器厚度越大，谱线的线宽越大；在探测器厚度一定时，源与样品的距离越小，谱线的线宽越大的结论。同时，利用测得的穆斯堡尔谱对 ^{57}Fe 核能级的超精细结构进行了研究，测定了 $\alpha\text{-Fe}$ 中 ^{57}Fe 基态和第一激发态的朗道 g 因子和核磁矩，以及硝普酸钠中 ^{57}Fe 的同质异能移位（相对 $\alpha\text{-Fe}$ ）和四极裂矩。此外，利用 ICRP145phantoms 模型对 1m 处的 1Ci ^{57}Co 对人体的辐射剂量进行了模拟，并计算了达到人体剂量当量的时间。

[1] 吴思诚，荀坤 2015 近代物理实验（北京：高等教育出版社）第81页.{专著}

实验报告思考题

1.在发射（吸收） γ 射线后，核的质量实际上会有所下降（上升），由于核反冲能远小于 γ 射线的能量，所以 $m'_N - m_N \approx \frac{E_0}{c^2}$ ，其中 m'_N 和 m_N 分别是核激发态和基态的质量。所以反冲能的变化为

$$\delta E_R \approx \frac{E_0^2}{2m_N c^2} - \frac{E_0^2}{2m'_N c^2} \approx \frac{E_0^3}{2m_N^2 c^4} \approx 6 \times 10^{-10} \text{ eV}$$

其中，发射的反冲能变为 $E_{R0} + \delta E_R$ ，吸收的反冲能变为 $E_{R0} - \delta E_R$ 。可以看到，反冲能的变化小于 ^{57}Fe 的激发态的寿命对应的自然线宽。同时，由于吸收和发射时反冲能对能谱的影响分别为 $E_0 - E_R$ 和 $E_0 + E_R$ ，所以考虑到核的质量变化之后能谱的中心位置变为 $E_0 - E_{R0} - \delta E_R$ 和 $E_0 + E_{R0} - \delta E_R$ ，可以看到核的质量变化并没有带来能级间距的变化，而只是使得能谱整体进行一个小的平移。由于源在电磁驱动器的作用下速度连续变化，也就是使得能谱在一定范围内连续扫描，所以核的质量变化引起的能谱平移并不影响对穆斯堡尔谱的观察。

2.核塞曼分裂显著大于或小于电四极裂矩时，能级图和穆斯堡尔谱

(1)核塞曼能级显著大于电四极裂矩时，能级图如图7所示，对应的穆斯堡尔谱如图8所示。

其中 y 曲线是四极裂矩为0时的穆斯堡尔谱， z 曲线是加入了远小于核塞曼分裂的电四极裂矩的穆斯堡尔谱。

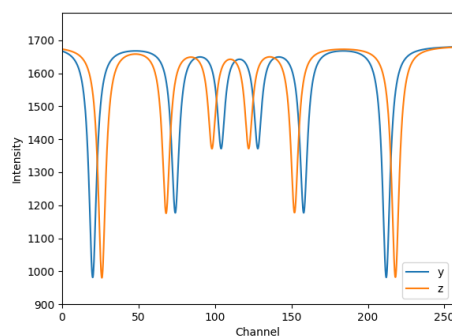
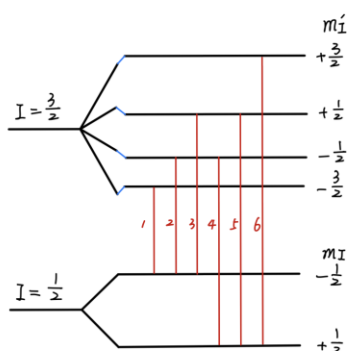


图7 核塞曼能级远大于电四极裂矩的能级图 图8 核塞曼能级远大于电四极裂矩的穆斯堡尔谱

(2)核塞曼能级显著小于电四极裂矩时，能级图如图9所示，对应的穆斯堡尔谱如图10所示. 其中 y 曲线是没有核塞曼分裂、只有电四极裂矩的穆斯堡尔谱， z 曲线是加入了远小于电四极裂矩的核塞曼分裂能级的穆斯堡尔谱.

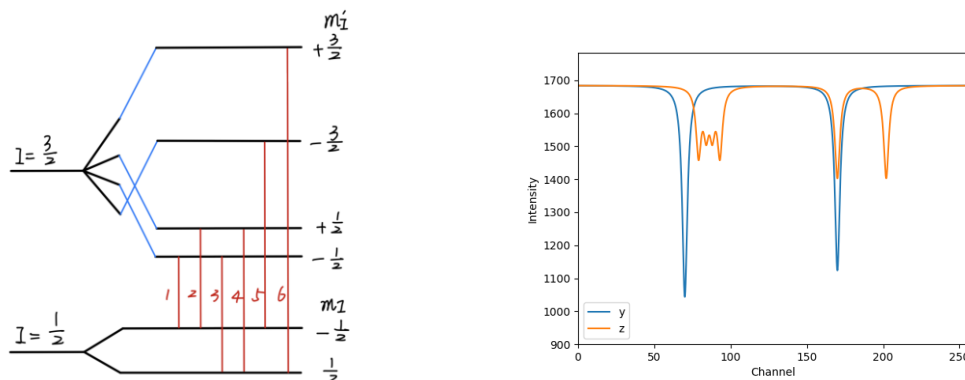


图9 核塞曼能级远小于电四极裂矩的能级图 图10 核塞曼能级远小于电四极裂矩的穆斯堡尔谱

3.当源或吸收体较厚的时候吸收谱会增宽，这是因为自吸收的效应更加显著. 当 γ 射线到达吸收体的时候，会被靠前的吸收体吸收，因此在吸收体中， γ 射线的强度是递减的，而不同位置的 γ 射线吸收对于谱线的贡献不同，所以这种非均匀性会导致谱线的增宽.

4.在计算 $\alpha - \text{Fe}$ 的重心位置的时候没有用到 v_3, v_4 ，这是因为由于第3,4个峰的幅度较小，所以在拟合之后其峰值位置的不确定度较大，从 $(\alpha - \text{Fe}, 0.13\text{mm}, 100\text{mm})$ 的拟合数据中也可以看出，第1,2,5,6个峰的峰值位置的不确定度都小于 10^{-1} 道，而第3,4个峰的峰值位置的不确定度则都超过了 10^{-1} . 因此，为了尽量减少结果的不确定度，同时简化数据处理流程，在计算 $\alpha - \text{Fe}$ 的重心位置的时候选择不使用 v_3, v_4 .