

Геометрия Cl_3 группы при 100 К

Атомы	a , Å		Атомы	ω , Å	
	до поправки	после поправки		до поправки	после поправки
$\text{Cl}-\text{Cl}1$	1.98	1.74	$\text{Cl}1-\text{Cl}-\text{Cl}2$	103	109
$\text{Cl}-\text{Cl}2$	1.66	1.76	$\text{Cl}1-\text{Cl}-\text{Cl}3$	103	109
$\text{Cl}-\text{Cl}3$	1.67	1.77	$\text{Cl}2-\text{Cl}-\text{Cl}3$	120	109

связей). Принимая во внимание получаемую из эксперимента анизотропию тепловых колебаний атомов (эллипсоиды тепловых колебаний), легко определить направление и величину дополнительного смещения. Последнее дает возможность ввести поправку на координаты и получить истинную геометрию окружения. В таблице приведены результаты такой операции для тетраэдрической группы Cl_3 в соединении $[\text{Fe}_3\text{O}(\text{COOC}\text{Cl}_3)_8 \cdot 3\text{CH}_3\text{OH}] \times 1.5\text{H}_2\text{O}$, где без поправок геометрия искажена до нереальности, а после введения поправки на дополнительное смещение длины связей $\text{Cl}-\text{Cl}$ и валентные углы $\text{Cl}-\text{Cl}-\text{Cl}$ стали близкими к стандартным (1.75 Å; 109°).

Л и т е р а т у р а

- [1] Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. М.: Наука, 1979, т. 1, с. 226.

Поступило в Редакцию
27 октября 1987 г.

Письма в ЖТФ, том 14, вып. 5

12 марта 1988 г.

О РОЛИ НЕОДНОРОДНОГО УШИРЕНИЯ
ВО ВРЕМЕННЫХ МЁССБАУЭРОВСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ

В.В. Ломоносов, С.Б. Сазонов,
П.Ф. Самарин

В последние годы были выполнены эксперименты [1-4], в которых методом временной мёссбауэрской спектроскопии изучалась динамика во времени взаимодействия коротких, длительностью порядка времени жизни возбужденного состояния, волновых пакетов резонансного γ -излучения с резонансными средами. В этих экспериментах систематически наблюдалось отклонение интенсивности рассеянного мёссбауэрского излучения от теоретических расчетов.

Так, в работе [1] экспериментально изучалась временная зависимость интенсивности рассеянного излучения мёссбауэрского изо-

топа ^{57}Fe и было показано, что результаты измерений не согласуются с теорией. Теоретические расчеты в этой работе были выполнены в рамках полуклассической теории взаимодействия излучения с веществом. Влияние среды на распространяющуюся в ней электромагнитную волну сводится к введению комплексного коэффициента преломления.

Аналогичный эксперимент, но с использованием методики регистрации конверсионных электронов, а не непосредственно рассеянных χ -квантов, как в [1], выполнен в [2-4]. В этих работах были получены очень точные временные зависимости и авторы [2-3] констатировали такое же, как и в работе [1], отличие экспериментальных данных от теоретических расчетов, выполненных в рамках аналогичной модели. В работе [4] учтено влияние нерезонансного канала взаимодействия резонансного излучения с резонансной средой. Авторы [1], экспериментально оценив вклад этого канала, показали, что в их эксперименте этот эффект незначителен и им нельзя объяснить наблюдаемое расхождение эксперимента и теории. Соотношение резонансного и нерезонансного каналов рассматривалось авторами [4] свободным параметром и находилось из эксперимента. Произвольный выбор этого параметра и независимость его от разности частот мёссбауэровских переходов в источнике и в рассеивателе, что противоречит экспериментальным результатам, полученным в работе [6] для рассеивателей, аналогичных используемым в [2-3], не позволяют считать обоснованными результаты теоретического описания экспериментов Вайера [2-3], проведенного авторами [4].

Хорошо известно, что в реальных матрицах, в которых находятся мёссбауэровские изотопы, неизбежно существуют по объему матрицы градиенты внутренних цепей, и как следствие этого, собственные частоты мёссбауэровских переходов в ядрах, находящихся в неодинаковых условиях, могут быть смещены относительно друг друга. В результате экспериментально наблюдаемая спектральная линия мёссбауэровского перехода шире естественной. Это уширение называется неоднородным и учитывается интегрированием спектра излучения источника и сечения рассеяния по разбросу собственных частот мёссбауэровских переходов с весовой функцией, которая может иметь различный профиль — лоренцевый, гауссовый или фойгтовский [5].

В работах [1, 2, 4] при анализе экспериментальных данных эффекты, связанные с неоднородным уширением, не учитывались. В [3] неоднородное уширение источника и рассеивателя учитывалось внесением поправки в значение эффективной толщины рассеивателя, что не привело к согласию теории с экспериментом. По нашему мнению, это связано с тем, что такая процедура учета неоднородного уширения не достаточна для описания эксперимента по рассеянию.

Характер взаимодействия поля с ядром рассеивателя зависит от соотношения частоты падающего излучения и частоты резонансного перехода в ядре. Это проявляется, в частности, в том, что, как

предсказывает теория [1], интенсивность рассеянного излучения осциллирует во времени с периодом, обратно пропорциональным разности собственных частот мёссбауэровского перехода в источнике и в рассеивателе. Поэтому наличие разброса этих частот, например за счет неоднородного уширения, должно влиять на временные интенсивности излучения, рассеянного на резонансной среде. Последовательный анализ экспериментальных результатов необходимо проводить, интегриру выражение для временной зависимости интенсивности, полученное при фиксированном значении разности резонансных частот, по всем возможным значениям этой разности с некоторой весовой функцией. Таким образом, необходимо вычислить

$$\bar{I}(t) = \int dx F(x) I(\Delta, t), \quad (1)$$

где $\Delta = \Delta_0 + x$, $\Delta_0 = \omega_0 - \omega_0'$ – разница собственных частот мёссбауэровского перехода в источнике и в рассеивателе. $F(x)$ – весовая функция, в случае лоренцевого профиля имеющая вид $F(x) =$

$$= \frac{\Gamma/2}{x^2 + \Gamma^2/4}, \text{ где } \Gamma \text{ – экспериментально наблюдаемое уширение естественных линий источника и рассеивателя. Выражение для } I(\Delta, t) \text{ было получено в [1] :}$$

$$I(\Delta, t) \sim \frac{B}{4\Delta^2} e^{-\Gamma_0 t} \left\{ 1 + \sum_{N=0}^{\infty} (-1)^N \cdot \left(\frac{B}{4\Delta^2 t} \right)^N \cdot \left[\frac{1}{2N+1} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \sum_{m=0}^{2N} (-1)^m \left(J_m(\sqrt{Bt}) \cdot J_{2N-m}(\sqrt{Bt}) + J_{2N-m+1}(\sqrt{Bt}) \cdot J_{m+1}(\sqrt{Bt}) \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2(2N+2)}{t\Delta} \sin \left(\frac{B}{4\Delta} + t\Delta \right) J_{2N+2}(\sqrt{Bt}) - \frac{4(2N+1)}{\sqrt{Bt}} \cos \left(\frac{B}{4\Delta} + t\Delta \right) J_{2N+1}(\sqrt{Bt}) \right] \right\} \quad (2)$$

$$\text{для } \frac{4\Delta^2 t}{B} > 1;$$

$$I(\Delta, t) \sim e^{-\Gamma_0 t} \left\{ 1 - \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(-1)^{N+1}}{2N+1} \cdot \left(\frac{4\Delta^2 t}{B} \right)^N \times \right. \\ \left. \times \sum_{m=0}^{2N+1} (-1)^m \left[J_{2N+1-m}(\sqrt{Bt}) J_{m-1}(\sqrt{Bt}) + J_{2N+2-m}(\sqrt{Bt}) J_m(\sqrt{Bt}) \right] \right\}$$

$$\text{для } \frac{4\Delta^2 t}{B} \leq 1.$$

$J_\nu(y)$ – функции Бесселя, Γ_0 – естественная ширина, B – эффективная толщина рассеивателя. В рассматриваемых случаях можно усреднять интенсивность, а не амплитуду рассеянного излучения,

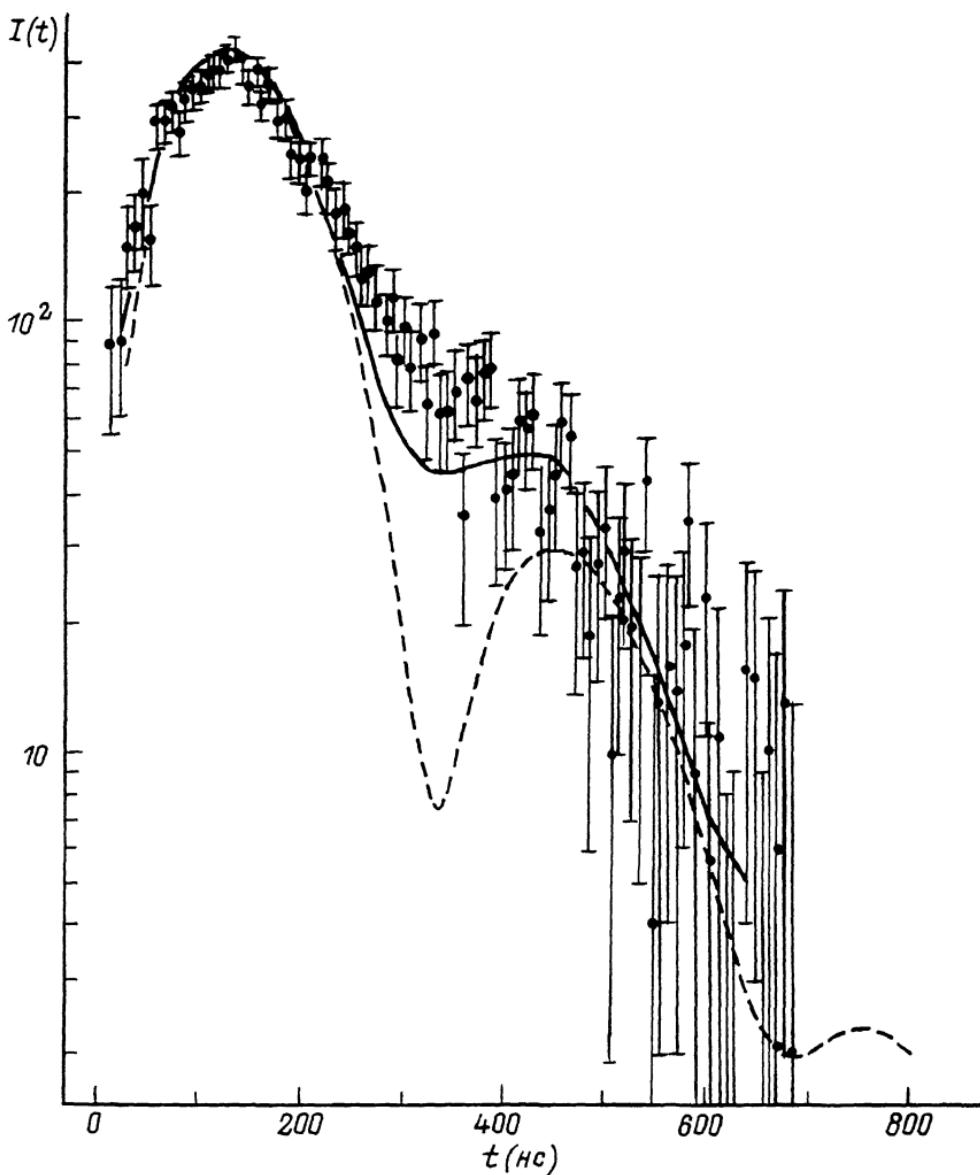


Рис. 1. Результаты эксперимента [1] и теоретического расчета, выполненного с усреднением (сплошная кривая) и без усреднения (штриховая кривая) по неоднородному уширению. Источник: ^{57}Co в Fe , рассеиватель: $4.5 \cdot 10^{-3}$ мм Fe , $\Delta\omega = 3\%$.

так как, с одной стороны, в эту интенсивность дают вклад независимые мёссбауэровские ядра источника, возникающие в различные моменты времени, а с другой – для рассеивателя справедливо сделанное авторами [1] для поликристаллических образцов допущение о сложении интенсивностей излучения, рассеянного на разных ядрах.

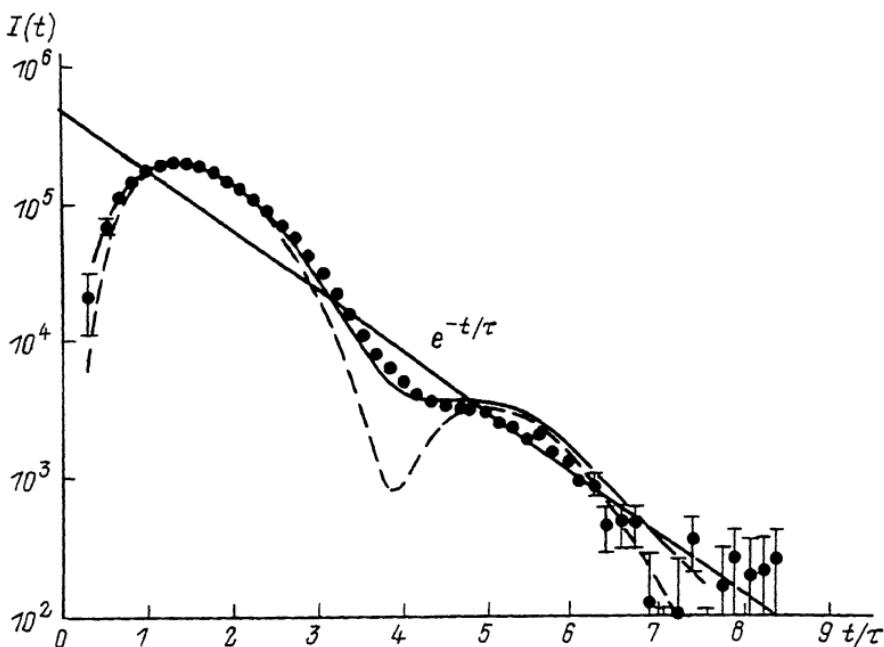


Рис. 2. Результаты эксперимента [2] и теоретического расчета, выполненного с усреднением (сплошная кривая) и без усреднения (штриховая кривая) по неоднородному уширению. Источник: ^{57}Co в Rh, рассеиватель: $\text{K}_4\text{Fe}(\text{CN})_6$, $\Delta\omega = 1.66 \Gamma_0$.

На рис. 1 и 2 приведены результаты экспериментов, полученные в работах [1–2], а также результаты расчетов, проведенных с усреднением и без усреднения по неоднородному уширению. Величина Γ принималась равной всего $0.2 \Gamma_0$, что отвечало условиям экспериментов. Приведенные кривые показывают, что временные зависимости рассеянного резонансного излучения очень чувствительны даже к разбросу резонансных частот, ширина распределения которого составляет всего 20% естественной ширины. Учет этого распределения позволил существенно сблизить результаты теории и эксперимента.

Заметим, что усреднение по величине неопределенности в значении толщины рассеивателя Δb , которая всегда имеет место в реальном эксперименте, не должно приводить к заметным изменениям расчетных кривых, так как для мёссбауэровского излучения длина волны $\lambda \ll \Delta b$. Это подтверждают и непосредственные расчеты.

Большая чувствительность временных интенсивностей рассеянного резонансного излучения к величине b , как показывают расчеты, к профилю линии разброса собственных частот источника и рассеивателя, позволяет использовать методику временных измерений как высокочувствительный метод исследования различных факторов, определяющих форму линии мёссбауэровских переходов.

Авторы выражают благодарность Пажину Ю.Ф., Черемисину С.М., Корсунскому И.Л. и Донцову Ю.П. за плодотворные обсуждения результатов работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Thieberger P., Moragues J.A., Sunyar A.W. - Phys. Rev., 1968, v. 171, N 2, p. 425-435.
- [2] Drost H., v. Lojewski H., Palow K., Wallenstein R., Weyer G. 5th Int. Conf. on Mössbauer Spectroscopy, 1973, Bratislava, p. 713-716.
- [3] Drost H., Palow K., Weyer G. - J. de Phys., 1974, v. C6-35, p. 679-681.
- [4] Vapirev E.I., Kamennov P.S., Dimitrov V., Balabanski D. - Nucl. Instr. and Meth., 1984, v. 219, N 1, p. 375-383.
- [5] Evans M.J., Black P.J. - J. Phys. C.: Solid St. Phys., 1970, v. 3, N 10, p. 2167-2177.
- [6] Bara J.J. - Phys. stat. sol (a), 1980, vol. 58, N 2, p. 349-359.

Поступило в Редакцию
18 ноября 1987 г.

Письма в ЖТФ, том 14, вып. 5

12 марта 1988 г.

К ВОПРОСУ ОБ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ЭФФЕКТАХ В СПЕКТРЕ ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

В.А. Базылев, В.В. Головизин, А.В. Демура

В работе [1] было показано, что спектральная плотность тормозного излучения (ТИ) релятивистской заряженной частицы, движущейся в ориентированном кристалле, в области частот $\omega_0 \ll \omega \ll E$ (где ω_0 - характерная частота излучения при канализировании, E - полная энергия частицы) отличается от интенсивности ТИ в аморфной мишени лишь множителем

$$G = \int d\vec{r}_1 \rho(\vec{r}_1) T(\vec{r}_1), \quad (1)$$

где $\rho(\vec{r}_1)$ - плотность потока частиц в канале, $T(\vec{r}_1)$ - эффективная плотность рассеивателей, \vec{r}_1 - поперечная координата частицы (по отношению к рассматриваемому семейству осей или плоскостей). Единственной ориентационно зависимой величиной в (1) является плотность потока частиц $\rho(\vec{r}_1)$, причем при углах влета частиц ψ , превышающих 2-3 критических угла канализирования ψ_c , зависимость $\rho(\vec{r}_1)$ от ψ является весьма слабой. В соответствии