

знаку преобладающего вклада от валентных электронов и электронов проводимости, поляризованных неоднородным электрическим полем локализованных зарядов ионных остовов (рис. 4.26).

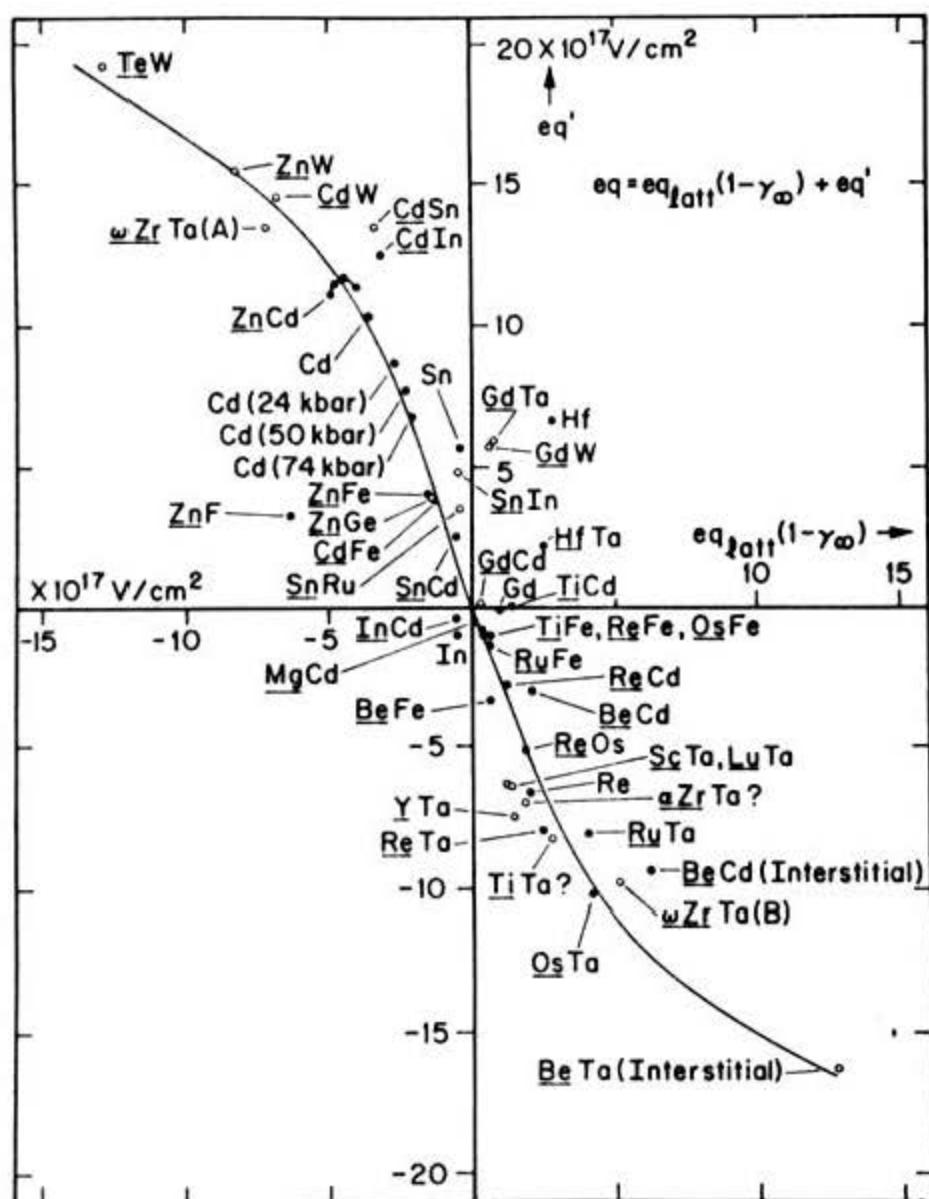


Рис. 4.26. Корреляция ионного (решеточного) и электронного вкладов в градиент электрического поля [57]

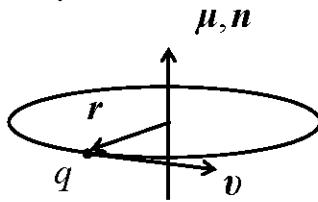
§7. Магнитное дипольное взаимодействие и мессбауэровский спектр

7.1. Магнитный момент ядра

При описании магнитного взаимодействия ядра с его окружением представим ядро в виде системы замкнутых электрических токов, создаваемых движущимися нуклонами в ядре. В соответствии с законами классической электродинамики найдем энергию их взаимодействия с внешним

магнитным полем. Таким путем можно определить для ядра магнитные мультипольные моменты и их операторы, записать гамильтониан взаимодействия.

В системе единиц измерения CGS **магнитный дипольный момент** кругового тока равен $\mu \equiv \frac{SJ}{c} \mathbf{n}$ (в системе SI – $\mu \equiv SJ\mathbf{n}$), где S – площадь поверхности, ограниченной круговым током, J – сила тока, \mathbf{n} – нормаль к поверхности кругового тока, согласованная с направлением тока по правилу буравчика (см. рис.). В случае движущегося заряда q массы m по орбите радиуса r с частотой ν и скоростью v для магнитного дипольного момента получим:



$$S = \pi r^2, J = q\nu = q \frac{\nu}{2\pi r};$$

$$\mu \equiv \frac{SJ}{c} \mathbf{n} = \frac{\pi r^2 q \nu}{c 2\pi r} \mathbf{n} = \frac{q}{2c} [\mathbf{r} \mathbf{v}] = \frac{q}{2mc} [\mathbf{r} \mathbf{p}]. \quad (4.120)$$

где \mathbf{p} – импульс движущегося заряда.

Заметим, что магнитный дипольный момент $\mu = \sum_i \frac{q_i}{2m_i c} [\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i]$ системы движущихся зарядов (замкнутых токов) является **аксиальным** (псевдо-) вектором в отличие от электрического дипольного момента системы зарядов $\mathbf{p} \equiv \sum_i q_i \mathbf{r}_i$, который является **полярным** вектором. В связи с этим характер четности магнитного момента μ кардинально отличается от характера четности электрического момента. Вследствие инвариантности ядерных сил относительно обращения времени или относительно зеркального отражения пространства все статические электрические моменты нечетного порядка и магнитные моменты четного порядка обращаются в нуль.

Таким образом, ядро может обладать дипольным, октупольным и т.д. магнитными моментами. Экспериментально было обнаружено, что вклад октупольного момента в энергию магнитного взаимодействия составляет лишь $\sim 10^{-5}$ часть от энергии дипольного взаимодействия и поэтому его можно практически не учитывать.

Запишем **орбитальный магнитный момент нуклона** в ядре:

$$\mu_l = \frac{q}{2mc} [\mathbf{r} \mathbf{p}] = g_l \frac{e\hbar}{2m_p c} \cdot \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r} \mathbf{p}] = g_l \mu_n \frac{1}{\hbar} \mathbf{l}. \quad (4.121)$$

Здесь e – заряд и m_p масса протона, \mathbf{l} – **орбитальный момент нуклона**, $\mu_n \equiv \frac{e\hbar}{2m_p c} \approx 5.05 \cdot 10^{-27}$ Дж/Гл – **ядерный магнетон**, $g_l \equiv \frac{\mu_l / \mu_n}{l / \hbar}$ – g -фактор

для орбитального движения нуклонов (протонов и нейтронов) в ядре (фактор связи магнитного и механического моментов), причем $g_l^p = 1$ и $g_l^n = 0$.

Введем в рассмотрение в соответствии с определением **оператор момента импульса** – $\hat{\mathbf{l}} \equiv \frac{1}{\hbar}[\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}}]$ (см. п. 10.3. в Приложении I). Тогда **оператор орбитального магнитного момента нуклона** в соответствии с (4.121) будет равен:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = g_l \mu_n \hat{\mathbf{l}}. \quad (4.122)$$

Кроме орбитального момента нуклоны обладают и собственными моментами количества движения – **спинами** \mathbf{s}_i , для которых g -факторы отличаются от единицы – $g_s^p = 5.585$ и $g_s^n = -3.826$. Следовательно, и спиновым магнитным моментом $\boldsymbol{\mu}_s$, оператор которого равен:

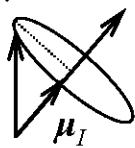
$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = g_s \mu_n \hat{\mathbf{s}}. \quad (4.123)$$

Таким образом, оператор магнитного момента ядра $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ будет равен:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_n \left(g_s^p \sum_{i(p)} \hat{\mathbf{s}}_i^p + g_l^p \sum_{i(p)} \hat{\mathbf{l}}_i^p + g_s^n \sum_{i(n)} \hat{\mathbf{s}}_i^n + g_l^n \sum_{i(n)} \hat{\mathbf{l}}_i^n \right). \quad (4.124)$$

Вследствие различия орбитального и спинового g -факторов нуклонов направление вектора магнитного момента ядра $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ не совпадает с направлением вектора **полного момента количества движения (спина) ядра I** (см. рис.), которому соответствует оператор

$$\hat{\mathbf{I}} = \sum_{i(p)} \hat{\mathbf{s}}_i^p + \sum_{i(p)} \hat{\mathbf{l}}_i^p + \sum_{i(n)} \hat{\mathbf{s}}_i^n + \sum_{i(n)} \hat{\mathbf{l}}_i^n. \quad (4.125)$$



Магнитный момент ядра $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ с большой частотой, определяемой внутриядерными взаимодействиями, прецессирует вокруг полного момента количества движения ядра I .

В эксперименте мы имеем дело с составляющей магнитного момента $\boldsymbol{\mu}_I$ вдоль полного механического момента (спина) ядра, для которой оператор равен

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_I = g \mu_n \hat{\mathbf{I}}, \quad (4.126)$$

где g – g -фактор ядра в данном состоянии ядра.

Введем в рассмотрение **оператор проекции магнитного момента** ядра на ось квантования Z :

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_z = g \mu_n \hat{\mathbf{I}}_z, \quad (4.127)$$

где $\hat{\mathbf{I}}_z$ – оператор проекции спина ядра.

В квантовой механике величина магнитного момента ядра μ определяется как наблюдаемая величина проекции магнитного момента ядра в состоянии (основном или возбужденном) Ψ_{I,m_I} с максимальным магнитным квантовым числом проекции момента $m_I = I$, которая задается диагональным матричным элементом оператора $\hat{\mu}_z$:

$$\mu \equiv \langle \Psi_{I,I} | \hat{\mu}_z | \Psi_{I,I} \rangle = g\mu_n \langle \Psi_{I,I} | \hat{I}_z | \Psi_{I,I} \rangle = g\mu_n I. \quad (4.128)$$

В качестве примера в табл. 4.6 приведены ядерные магнитные характеристики изотопов ^{57}Fe и ^{119}Sn в основном (ground) и возбужденном (excited) состояниях [17].

Табл. 4.6. Ядерные магнитные характеристики изотопов ^{57}Fe и ^{119}Sn [17]

Изотоп	Состояние	I	g	μ, μ_n
^{57}Fe	Excited	3/2	-0.10353(3)	-0.15532(4)
	Ground	1/2	+0.18121(2)	+0.090604(9)
^{119}Sn	Excited	3/2	+0.422(12)	+0.633(18)
	Ground	1/2	-2.0922(6)	-1.0461(3)
^{151}Eu	Excited	7/2	+0.7403(6)	+2.591(2)
	Ground	5/2	+1.3887(3)	+3.4717(6)

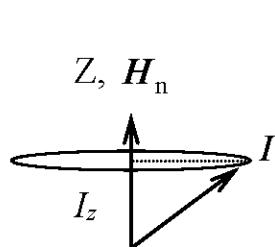
* Для возбужденного состояния ядер ^{119}Sn наши более поздние экспериментальные данные для целого ряда соединений дают несколько иное значение g -фактора и магнитного момента ядра: $g = 0.4511$ и $\mu = 0.67665$.

7.2. Гамильтониан магнитного взаимодействия и сверхтонкая структура ядерных уровней

Из классической электродинамики известно, что если магнитный момент μ поместить в постоянное во времени магнитное поле \mathbf{H} , то энергия их взаимодействия будет равна:

$$E_m = -\mu \cdot \mathbf{H}. \quad (4.129)$$

Следовательно, гамильтониан сверхтонкого магнитного взаимодействия ядра с внешним по отношению к нему постоянным полем \mathbf{H}_n можно записать как



$$\hat{H}_m = -\hat{\mu}_I \cdot \hat{\mathbf{H}}_n = -g\mu_n \hat{I} \cdot \hat{\mathbf{H}}_n. \quad (4.130)$$

Обычно направление внешнего по отношению к ядру поля \mathbf{H}_n выбирается за ось квантования — ось Z (см. рис.). В этом случае

$$\hat{H}_m = -g\mu_n \hat{I}_z \hat{\mathbf{H}}_n \quad (4.131)$$

и собственные значения гамильтониана \hat{H}_m , определяющие дополнительную энергию ядра во внешнем магнитном поле, равны:

$$E_m = \langle \Psi_{I,m_I} | \hat{H}_m | \Psi_{I,m_I} \rangle = -g\mu_n m_I H_n. \quad (4.132)$$

Как видим, магнитное дипольное взаимодействие полностью снимает вырождение ядерного энергетического уровня по **магнитному квантовому числу** m_I – квантовому числу проекции полного момента ядра. В результате чего энергетический уровень расщепляется на $2I + 1$ эквидистантных подуровня, разделенных интервалом $\Delta E_m = -g\mu_n H_n$ (магнитное сверхтонкое расщепление, рис. 4.27). При этом $g\mu_n H_n$ называется **константой сверхтонкого магнитного дипольного взаимодействия**, соответствующей данному уровню.

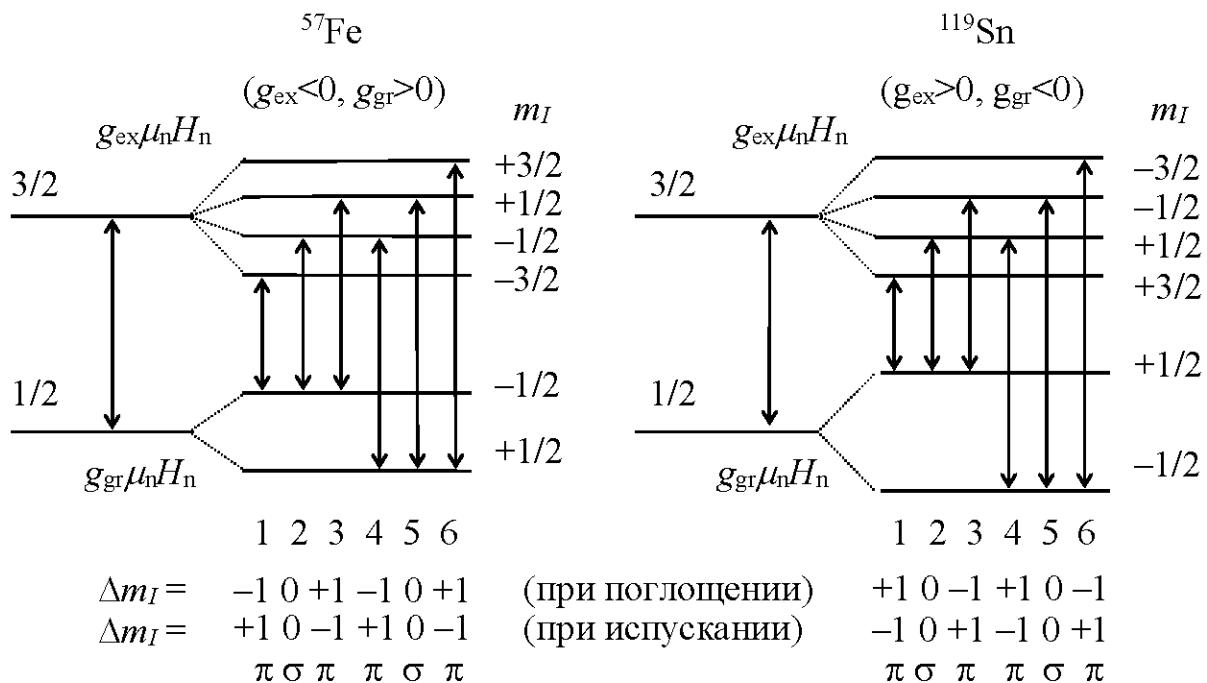


Рис. 4.27. Магнитное расщепление ядерных уровней и межуровневые переходы для ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn

При выявлении возможных переходов между основным и возбужденным уровнями необходимо использовать правило отбора (см. об этом §1 в Главе I и п. 5.3 в Главе IV). Возможны переходы только с изменением магнитного квантового числа $\Delta m_I = M = 0, \pm 1, \dots, \pm L$, где M – магнитное квантовое число и L – угловой момент излучения (для излучения M1 $L = 1$), что является следствием закона сохранения проекции момента импульса для системы ядро + γ -квант.

Для уровней с $I^{\text{gr}} = 1/2$ и $I^{\text{ex}} = 3/2$ возможны всего шесть переходов (рис. 4.26). По отношению к оси квантования (направлению магнитного поля H_n) излучение, соответствующее различным переходам, будет по-разному поляризовано:

$\Delta m_I = +1$ – циркулярно право-поляризованное излучение (π) ($\perp \mathbf{k}_\gamma$);
 $\Delta m_I = -1$ – циркулярно лево-поляризованное излучение (π) ($\perp \mathbf{k}_\gamma$);
 $\Delta m_I = 0$ – линейно поляризованное излучение (σ) ($\perp \mathbf{k}_\gamma$ и в плоскости оси квантования Z и \mathbf{k}_γ).

Всего будут наблюдаться четыре циркулярно поляризованных излучения (два правых и два левых) – π и два линейно поляризованных – σ (см. рис. 4.26). При этом относительно направления распространения γ -кванта \mathbf{k}_γ возможна лишь поляризация в плоскости, перпендикулярной \mathbf{k}_γ . Поэтому для конкретного направления \mathbf{k}_γ σ -излучение будет поляризовано линейно в плоскости оси квантования и вектора \mathbf{k}_γ .

В случае сверхтонкого магнитного дипольного взаимодействия мессбауэровский спектр представляет собой так называемый **зеемановский секстет** с попарно равными интенсивностями компонент (рис. 4.28 и 4.29).

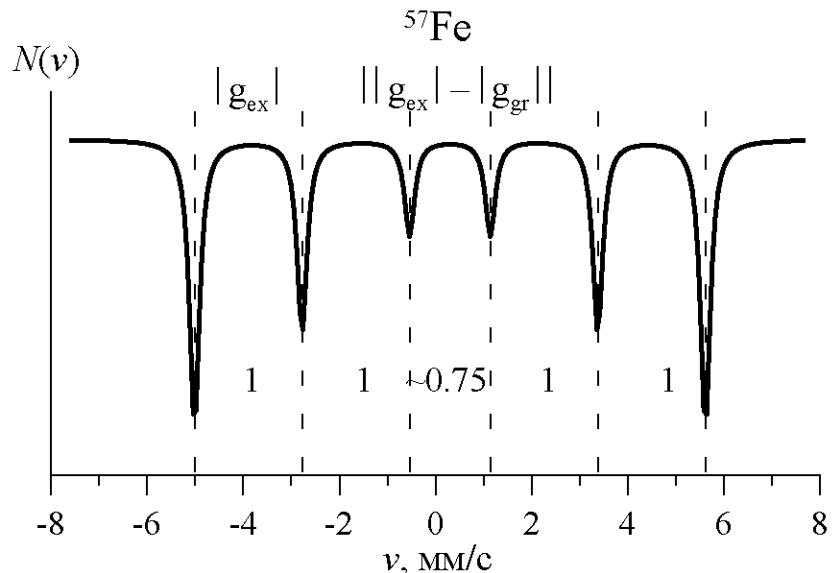


Рис. 4.28. Мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe при наличии магнитного дипольного взаимодействия

Компоненты в мессбауэровском спектре оказываются расположеными эквидистантно: $\Delta\nu_{12} = \Delta\nu_{23} = \Delta\nu_{45} = \Delta\nu_{56}$. При этом отношение расстояний между крайними и внутренними компонентами будет определяться только мессбауэровским изотопом, точнее его g -факторами основного и возбужденного состояний:

$$k \equiv \frac{\Delta\nu_{16}}{\Delta\nu_{34}} = \frac{3|g_{\text{ex}}| + |g_{\text{gr}}|}{\|g_{\text{ex}}\| - \|g_{\text{gr}}\|}. \quad (4.133)$$

С учетом значений, приведенных в табл. 4.6, для ядер ^{57}Fe – $k \cong 6.33$, а для ядер ^{119}Sn – $k \cong 2.10$.

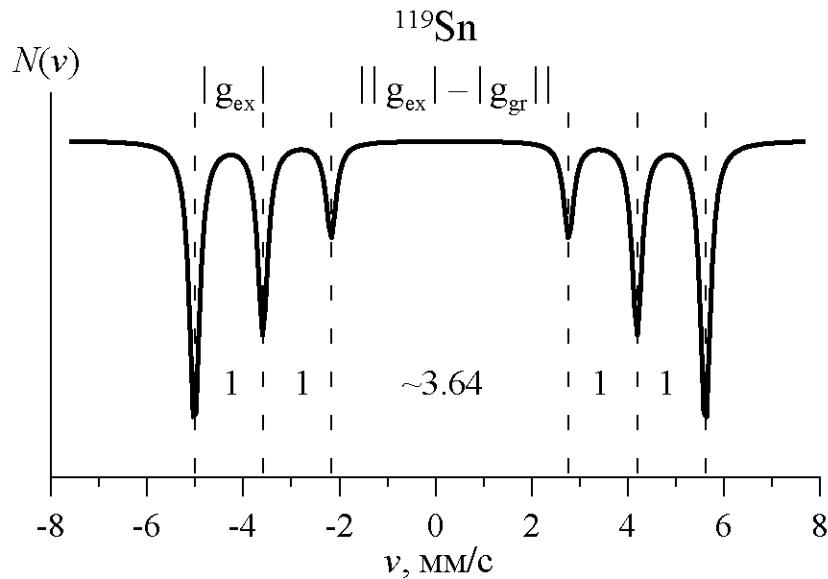


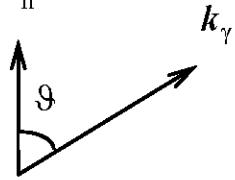
Рис. 4.29. Мессбауэровский спектр ядер ^{119}Sn при наличии магнитного дипольного взаимодействия

7.3. Интенсивности ядерных переходов

Относительные интенсивности переходов $I_{\text{ex} \rightarrow \text{gr}}$ между соответствующими подуровнями основного и возбужденного состояний (а, следовательно, и относительные интенсивности компонент магнитной сверхтонкой структуры мессбауэровского спектра) определяются квадратом модуля соответствующих матричных элементов оператора взаимодействия ядра с полем излучения (см. (4.91) в п. 5.3):

$$I_{\text{ex} \rightarrow \text{gr}} = \left| \left\langle \Psi_{I^{\text{ex}}, m_I^{\text{ex}}} \middle| \hat{H}(A) \right| \Psi_{I^{\text{gr}}, m_I^{\text{gr}}} \right|^2. \quad (4.134)$$

Эти интенсивности по-разному зависят от угла ϑ между волновым вектором γ -кванта \mathbf{k}_γ и осью квантования Z , направленного вдоль поля \mathbf{H}_n (см. рис.).



При чистом магнитном дипольном излучении (и поглощении) M1 (см. §1 в Главе I) с уровня $I = 3/2$ на уровень $I = 1/2$ в отсутствие электрического квадрупольного взаимодействия или в случае аксиально-симметричного электрического поля ($\eta = 0$) имеем (см., например, [4]):

$$\begin{aligned} & I_{\pm 3/2 \rightarrow \pm 1/2}(\vartheta) : I_{\pm 1/2 \rightarrow \pm 1/2}(\vartheta) : I_{\pm 1/2 \rightarrow \mp 1/2}(\vartheta) = \\ & = I_{1,6}(\vartheta) : I_{2,5}(\vartheta) : I_{3,4}(\vartheta) = \\ & = 3(1 + \cos^2 \vartheta) : 4(1 - \cos^2 \vartheta) : (1 + \cos^2 \vartheta). \end{aligned} \quad (4.135)$$

Соответствующие зависимости относительных интенсивностей I компонент магнитной сверхтонкой структуры мессбауэровского спектра (случай ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn) представлены на рис. 4.30.

В частных случаях при значениях $\vartheta = 0^\circ, 45^\circ$ и 90° (см. рис. 4.31) получим:

$$I_{1,6}(0^\circ) : I_{2,5}(0^\circ) : I_{3,4}(0^\circ) = 3 : 0 : 1,$$

$$I_{1,6}(45^\circ) : I_{2,5}(45^\circ) : I_{3,4}(45^\circ) = 3 : 4/3 : 1,$$

$$I_{1,6}(90^\circ) : I_{2,5}(90^\circ) : I_{3,4}(90^\circ) = 3 : 4 : 1.$$

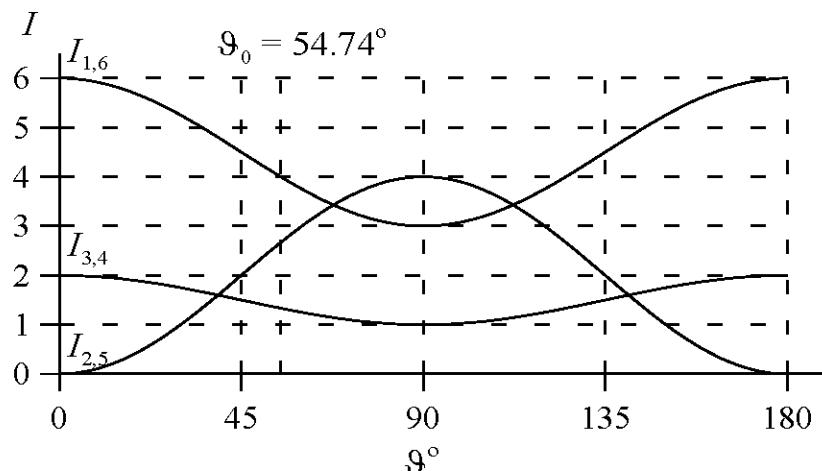


Рис. 4.30. Угловая зависимость относительных интенсивностей компонент магнитной сверхтонкой структуры мессбауэровского спектра

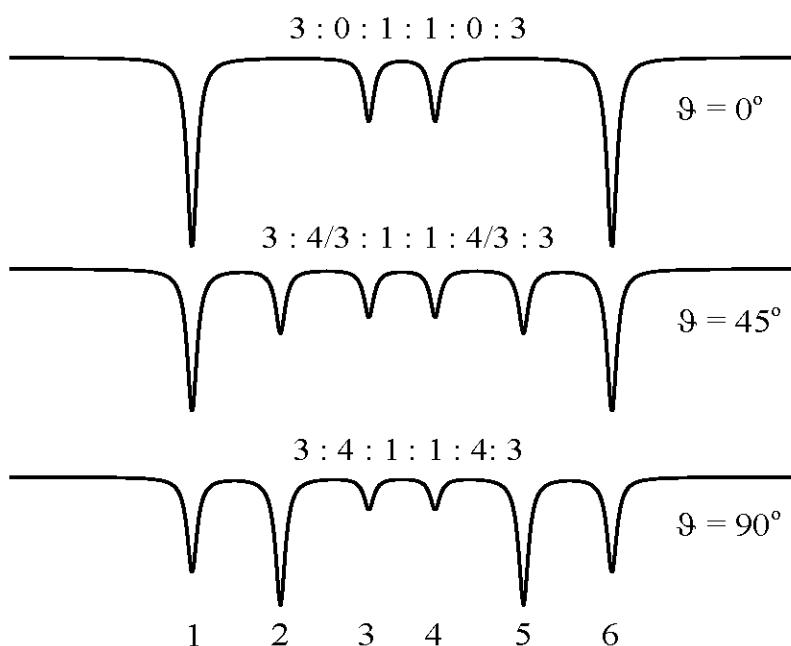


Рис. 4.31. Общий вид мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe , соответствующих различным значениям угла ϑ между волновым вектором γ -кванта k_γ и эффективным магнитным полем H_n

В случае поликристалла, если не наблюдается ярко выраженная анизотропия колебаний мессбауэровских ядер (эффект Гольданского-Карягина, см. п. 5.3 в Главе IV), то $\langle \cos^2 \vartheta \rangle_Q = 1/3$ и интенсивности линий в зеемановском секстете будут относиться как (см. (4.135)):

$$I_1 : I_2 : I_3 : I_4 : I_5 : I_6 = 3 : 2 : 1 : 1 : 2 : 3. \quad (4.136)$$

Как видим, соотношение интенсивностей компонент сверхтонкой структуры могут дать информацию о направлении эффективного поля H_n . Действительно, экспериментально найденное отношение интенсивностей второй и пятой компонент к первой и шестой

$$k(\vartheta) \equiv \frac{I_{2,5}}{I_{1,6}} = \frac{4(1 - \cos^2 \vartheta)}{3(1 + \cos^2 \vartheta)} \quad (4.137)$$

может служить удобным параметром для определения ориентации эффективного поля H_n относительно направления волнового вектора γ -кванта k_γ (см. рис. 4.32), поскольку

$$\vartheta = \arccos\left(\sqrt{\frac{4 - 3k}{4 + 3k}}\right). \quad (4.138)$$

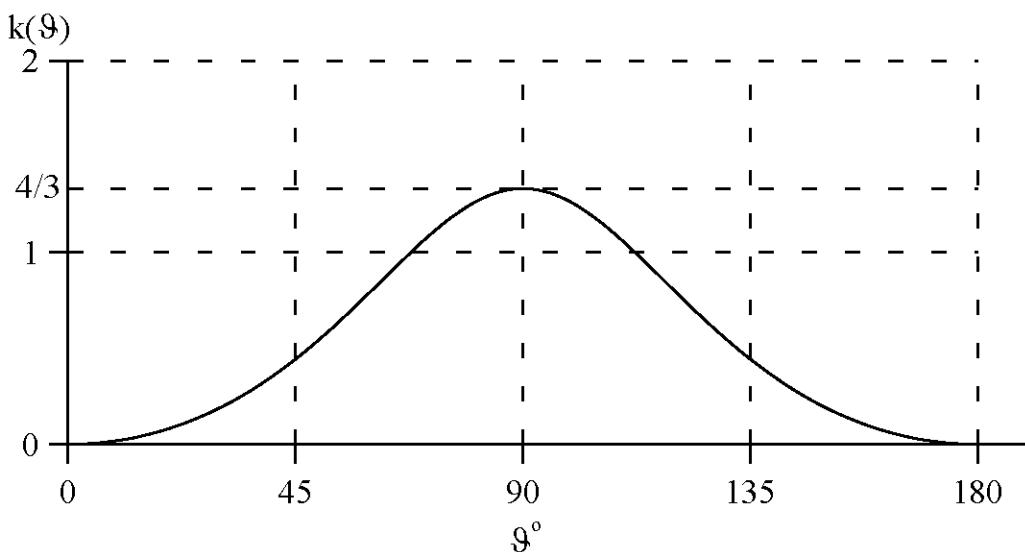


Рис. 4.32. Угловая зависимость отношения интенсивностей второй и пятой компонент к первой и шестой компонентам магнитной сверхтонкой структуры мессбауэровского спектра

§8. Эффективное магнитное поле на ядре

В общем случае **эффективное (сверхтонкое) магнитное поле** H_n в области расположения ядра состоит из нескольких вкладов, соответствующих различным механизмам сверхтонких магнитных взаимодействий.

Основными вкладами в поле \mathbf{H}_n являются следующие микроскопические вклады:

$\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$ – поле, обусловленное контактным взаимодействием Ферми с локализованными на ядре s-электронами (с учетом релятивистских эффектов еще и вклад от p-электронов) остова собственного атома, для ядер ^{57}Fe он является основным вкладом;

\mathbf{H}_L – поле, создаваемое суммарным орбитальным моментом \mathbf{L} электронов, принадлежащих мессбауэровскому атому;

\mathbf{H}_S – поле, создаваемое результирующим спином \mathbf{S} электронов "своей" (атома, которому принадлежит мессбауэровское ядро) электронной оболочки;

\mathbf{H}_{ce} – поле, обусловленное контактным взаимодействием ядра с электронами проводимости.

Существуют еще четыре макроскопических вклада, учитывающих роль магнитных моментов ионов, окружающих мессбауэровский атом, и внешнее поле:

\mathbf{H}_{dip} – поле, обусловленное диполь-дипольным взаимодействием ядра с локализованными магнитными моментами окружающих атомов (расположенных внутри макроскопической сферы);

\mathbf{H}_{Lor} – поле Лоренца – поле, создаваемое непрерывной безграничной намагниченной средой внутри макроскопической полой сферы (токами намагничивания на внутренней поверхности полости);

\mathbf{H}_{dem} – размагничивающее поле, обусловленное пространственной ограниченностью образца (создаваемое токами намагничивания на внешней поверхности образца);

\mathbf{H}_0 – внешнее магнитное поле.

Сумму последних трех вкладов называют **макроскопическим внутренним полем или локальным полем**.

В соответствии с принципом суперпозиции магнитных полей:

$$\mathbf{H}_n = \underbrace{\mathbf{H}_{\text{Fermi}} + \mathbf{H}_L + \mathbf{H}_S + \mathbf{H}_{\text{ce}}}_{\text{микроскопические вклады от электр. оболочки и элтр. проводимости}} + \underbrace{\mathbf{H}_{\text{dip}} + \overbrace{\mathbf{H}_{\text{Lor}} + \mathbf{H}_{\text{dem}} + \mathbf{H}_0}^{\text{локальное поле}}}_{\text{макроскопические вклады}}. \quad (4.139)$$

Рассмотрим величину и направление каждого из вкладов на примере мессбауэровского атома железа.

8.1. Фермиевский вклад

Контактное взаимодействие Ферми – взаимодействие ядра с локализованными на ядре s-электронами остова собственного мессбауэровского атома описывается сверхтонким полем Ферми [58]:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}_{\text{Fermi}} &= -\frac{8\pi}{3}\mu_B \sum_n (|\psi_{ns}^{\uparrow}(0)|^2 - |\psi_{ns}^{\downarrow}(0)|^2) \mathbf{i} = \\
 &= -\frac{8\pi}{3}\mu_B \sum_n (\rho_{ns}^{\uparrow}(0) - \rho_{ns}^{\downarrow}(0)) \mathbf{i} = -\frac{8\pi}{3}\mu_B \sum_n \Delta\rho_{ns}^{\uparrow\downarrow}(0) \mathbf{i}, \quad (4.140)
 \end{aligned}$$

где $\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m_e c} \cong 9.27 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл – магнетон Бора, $\rho_{ns}^{\uparrow}(0)$ и $\rho_{ns}^{\downarrow}(0)$ – плотности s-электронов остова атома на ns -оболочке со спином "вверх" (\mathbf{i} – единичный вектор в направлении "вверх" и "вниз", соответственно, и $\Delta\rho_{ns}^{\uparrow\downarrow}(0)$ – спиновая плотность в области расположения ядра.

Спаренные s-электроны с противоположно направленными спинами взаимно компенсируют друг друга $\Delta\rho_{ns}^{\uparrow\downarrow}(0)=0$ и дают нулевой вклад в сверхтонкое поле. Однако происходит поляризация внутренних s-электронов ионного остова, вызванная результирующим спином d-электронов [59]. Вследствие обменного взаимодействия d-электронов (электронов в незаполненной оболочке с нескомпенсированным спином) с s-электронами происходит деформация электронных облаков в первую очередь внутренних по отношению к d- s-электронов (см. рис. 4.33).

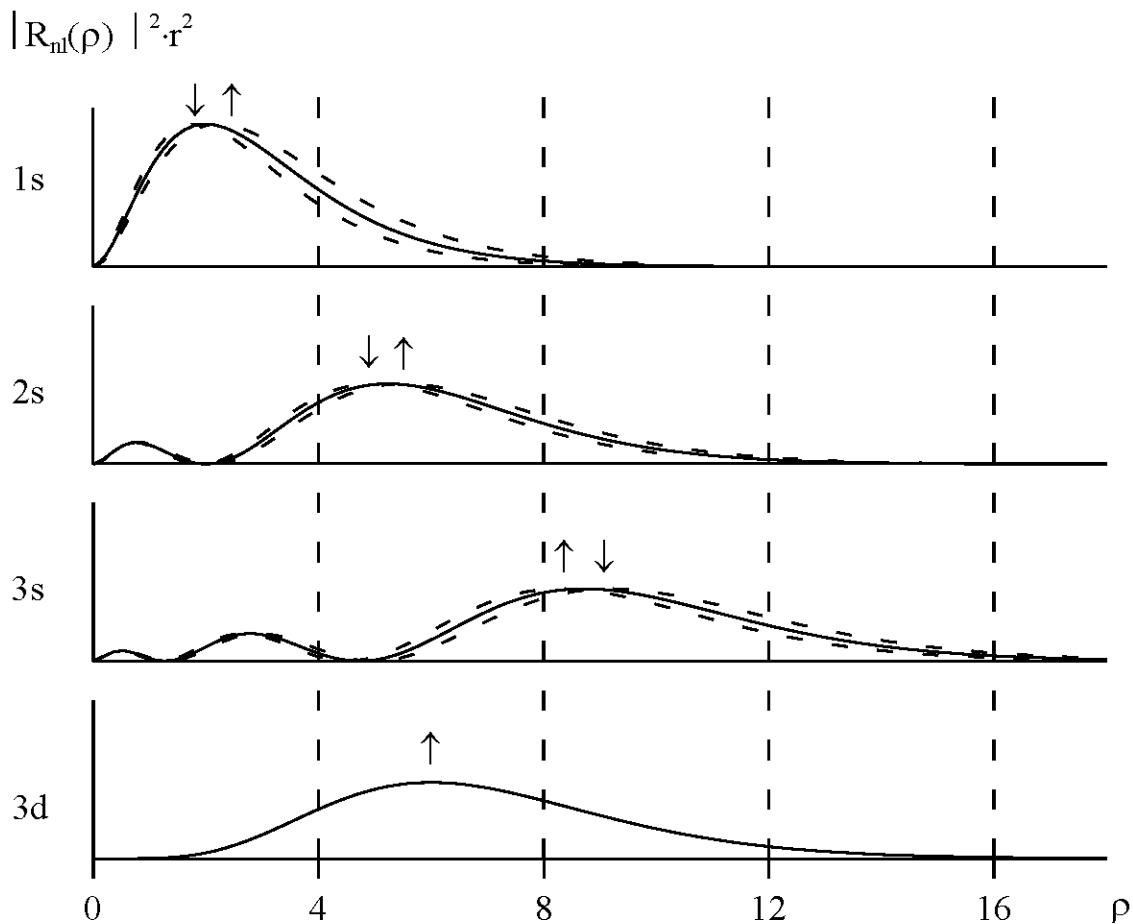


Рис. 4.33. Изменение спиновой плотности s-электронов из-за обменного взаимодействия с d-электронами ионов железа

В соответствии с принципом Паули невзаимодействующие электроны с антипараллельными спинами могут находиться ближе друг к другу, чем в случае параллельных спинов. Если учесть кулоновское взаимодействие, то в первом случае оно приведет к более эффективному отталкиванию, чем во втором [4]. Как видим, при параллельных спинах электронов между ними возникает как бы эффективное притяжение, а при антипараллельных – отталкивание (см. рис. 4.32). В результате меняется пространственное распределение электронной плотности. Эффективная плотность в области расположения ядра внутренних s-электронов со спином, направленным также как у d-электронов (вверх), убывает. Для электронов с противоположно направленным спином (вниз) эта плотность возрастает. Как видно на рис. 4.32 $\Delta\rho_{1s}^{\uparrow\downarrow} < 0$, $\Delta\rho_{2s}^{\uparrow\downarrow} < 0$ и $\Delta\rho_{3s}^{\uparrow\downarrow} > 0$. При этом расчеты показывают, что $|\Delta\rho_{1s}^{\uparrow\downarrow}| + |\Delta\rho_{2s}^{\uparrow\downarrow}| > |\Delta\rho_{3s}^{\uparrow\downarrow}|$. Следовательно, полное изменение спиновой плотности всегда отрицательно – $\Delta\rho^{\uparrow\downarrow} < 0$.

Направление вклада H_{Fermi} по отношению к μ_d .

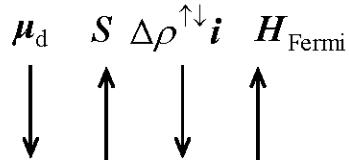
В соответствии с (4.140) направление H_{Fermi} всегда сонаправлено спину 3d-оболочки S и противоположно направлено собственному магнитному моменту атома μ_d , определяемому этим спином (см. рис.).

Результирующее поле Ферми H_{Fermi} , как показывают расчеты, равно разности больших величин и весьма чувствительно к ионному окружению. Поэтому ошибка в расчетах может быть большой.

Оценка вклада:

$$H_{\text{Fermi}} \approx k \cdot 100 \text{ кЭ.}$$

В соответствии с теоретическими расчетами вклад H_{Fermi} пропорционален величине магнитного момента 3d-оболочки атома железа $H_{\text{Fermi}} = -k\mu_{\text{Fe}}$ с коэффициентом $k \approx 126 \text{ кЭ}/\mu_B$ (см., например, [43÷45]). Во многих случаях для ядер ^{57}Fe фермиевский вклад является основным и обеспечивает практически пропорциональную зависимость величины сверхтонкого поля H_n на ядре от магнитного момента d-оболочки μ_{Fe} : $H_n = -k\mu_{\text{Fe}}$. В то же время, для кристаллических и аморфных сплавов редкая земля – железо обычно используется коэффициент пропорциональности $k \approx 145 \text{ кЭ}/\mu_B$ (см., например, [11]).



8.2. Орбитальный вклад

В соответствии с классической теорией электромагнетизма электрон с зарядом $q_i = -e$ и массой m_e , движущийся со скоростью \mathbf{v}_i в точке с радиус-вектором \mathbf{r}_i относительно ядра, создает на ядре поле (в системе CGS):

$$\mathbf{H}_{l_i} = \frac{q_i}{c} \cdot \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{v}_i]}{r_i^3} = -\frac{e}{m_e c} \cdot \frac{[\mathbf{r}_i \mathbf{p}_i]}{r_i^3}. \quad (4.141)$$

Соответствующий ему оператор будет:

$$\hat{\mathbf{H}}_{l_i} = -\frac{e\hbar}{m_e c} \cdot \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3} = -2\mu_B \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3},$$

где – оператор момента импульса (орбитального момента) электрона при движении его по орбите.

В квантово-механической записи в случае центрально-симметричного поля электронного остова атома на орбитали $n_l l m_i$ равно:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{l_i} &= -2\mu_B \left\langle \Psi_{n_l l m_i} \left| \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3} \right| \Psi_{n_l l m_i} \right\rangle = -2\mu_B \left\langle R_{n_l l_i} Y_{l_i m_i} \left| \frac{\hat{\mathbf{l}}_i}{r_i^3} \right| R_{n_l l_i} Y_{l_i m_i} \right\rangle = \\ &= -2\mu_B \left\langle R_{n_l l_i} \left| r_i^{-3} \right| R_{n_l l_i} \right\rangle \left\langle Y_{l_i m_i} \left| \hat{\mathbf{l}}_i \right| Y_{l_i m_i} \right\rangle = -2\mu_B \left\langle r_i^{-3} \right\rangle_{n_l l_i} \left\langle \hat{\mathbf{l}}_i \right\rangle_{l_i m_i}. \end{aligned} \quad (4.142)$$

Здесь $R_{n_l l_i}$ и $Y_{l_i m_i}$ – радиальная и угловая составляющие волновой функции $\Psi_{n_l l m_i}$ электрона на орбитали $n_l l m_i$.

Наблюдаемое поле от орбитального движения всех электронов с одной оболочки nl будет:

$$\mathbf{H}_L = \sum_i \mathbf{H}_{l_i} = -2\mu_B \sum_i \left\langle r_i^{-3} \right\rangle_{n_l l_i} \left\langle \hat{\mathbf{l}}_i \right\rangle_{l_i m_i} = -2\mu_B \left\langle r_i^{-3} \right\rangle_{nl} \sum_i \left\langle \hat{\mathbf{l}}_i \right\rangle_{l_i m_i}. \quad (4.143)$$

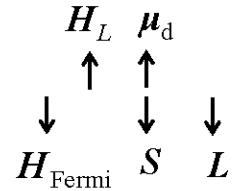
Как видим (см. рис. 4.144), орбитальный момент электронов \mathbf{L} дает вклад в сверхтонкое поле только в том случае, если сумма средних значений моментов $\hat{\mathbf{l}}_i$ отлична от нуля. В результате расщепления энергетических уровней иона железа в электрическом кристаллическом поле (см. рис. 4.21 и табл. 4.4) среднее значение каждой компоненты орбитального момента электрона в каждом орбитальном состоянии равно нулю и, следовательно, орбитальный вклад равен нулю. В этом случае говорят, что орбитальный момент "заморожен".

Однако в результате спин-орбитального взаимодействия наблюдается некоторое изменение орбитального движения электронов, что приводит к "размораживанию" небольшой части орбитального момента, имеющей порядок отношения постоянной спин-орбитальной связи λ (4.119) к параметру расщепления Δ в кристаллическом поле (см. рис. 4.21) – λ/Δ . Изменение движения электронов, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием

ствием, можно представить себе как электрический ток, наводимый спином в электронной оболочке иона. Возникающий при этом орбитальный момент ведет к понижению энергии. Такой "наведенный орбитальный момент" вносит определенный вклад и в эффективное поле в области расположения ядра.

Направление вклада по отношению к $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$.

В соответствии со вторым правилом Хунда (см. п. 6.3) у электронных оболочек, заполненных менее чем наполовину, спин S и орбитальный момент L противоположно направлены. В этом случае орбитальный вклад в сверхтонкое магнитное поле сонаправлен основному вкладу Ферми. У оболочек, заполненных более чем наполовину, спин S и орбитальный момент L сонаправлены и орбитальный вклад противоположен направлению основному вкладу Ферми (см. рис.).



Оценка вклада:

$$|\mathbf{H}_L| = \left| 2\mu_B \langle r^{-3} \rangle_{nl} \langle \mathbf{L} \rangle_{lm} \right| \cong 2 \cdot 9.3 \cdot 10^{-21} \cdot a_0^{-3} |\langle \mathbf{L} \rangle_{lm}| = 126 \kappa \Theta \cdot |\langle \mathbf{L} \rangle_{lm}|;$$

$$H_L \cong k \cdot 10 \text{ к}\Theta.$$

8.3. Спиновый вклад \mathbf{H}_S

Для одного i -го электрона со спином \mathbf{s}_i магнитный момент равен

$$\boldsymbol{\mu}_{s_i} = g_s \mu_B \mathbf{s}_i = -2\mu_B \mathbf{s}_i. \quad (4.145)$$

Этот момент создает в области расположения ядра магнитное поле:

$$\mathbf{H}_{s_i} = \frac{3\mathbf{r}_i(\boldsymbol{\mu}_{s_i} \mathbf{r}_i) - \boldsymbol{\mu}_{s_i} r_i^2}{r_i^5} = -2\mu_B \frac{3\mathbf{r}_i(\mathbf{s}_i \mathbf{r}_i) - \mathbf{s}_i r_i^2}{r_i^5}. \quad (4.146)$$

Для системы электронов:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_S &= \sum_i \mathbf{H}_{s_i} = -2\mu_B \sum_i \frac{3\mathbf{r}_i(\mathbf{s}_i \mathbf{r}_i) - \mathbf{s}_i r_i^2}{r_i^5}. \quad (4.147) \\ H_{S,\alpha} &= -2\mu_B \sum_i \frac{3x_{i\alpha} \sum_\beta s_{i\beta} x_{i\beta} - \sum_\beta \delta_{\alpha\beta} s_{i\beta} r_i^2}{r_i^5} = \\ &= -2\mu_B \sum_i \sum_\beta \frac{3x_{i\alpha} x_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_i^2}{r_i^5} s_{i\beta}. \end{aligned}$$

В квантовомеханической записи наблюдаемое магнитное поле от электронов в одной оболочке nl будет равно:

$$\mathbf{H}_S = -2\mu_B \sum_i \left\langle R_{n_l l_i} Y_{l_i m_i} \left| \frac{\hat{3\mathbf{r}_i}(\hat{\mathbf{s}}_i \mathbf{r}_i) - \hat{\mathbf{s}}_i r_i^2}{r_i^5} \right| R_{n_l l_i} Y_{l_i m_i} \right\rangle, \quad (4.148)$$

$$\begin{aligned}
H_{S,\alpha} &= -2\mu_B \sum_i \left\langle R_{n_l l_i} Y_{l_i m_i} \left| \sum_\beta \frac{3x_{i\alpha} x_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_i^2}{r_i^5} s_{i\beta} \right| R_{n_l l_i} Y_{l_i m_i} \right\rangle = \\
&= -2\mu_B \sum_i \sum_\beta s_{i\beta} \left\langle r_i^{-3} \right\rangle_{n_l l_i} \left\langle \frac{3x_{i\alpha} x_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_i^2}{r_i^2} \right\rangle_{l_i m_i} = \\
&= -2\mu_B \left\langle r^{-3} \right\rangle_{nl} \sum_i \sum_\beta s_{i\beta} \left\langle F_{\alpha\beta}(\varphi, \vartheta) \right\rangle_{lm_i}. \tag{4.149}
\end{aligned}$$

Пусть ось α – ось спинов электронов, которые коллинеарны, тогда $s_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta} s_i$, $S = \sum_i s_i$ и

$$H_{S,\alpha} = -2\mu_B \left\langle r^{-3} \right\rangle_{nl} \sum_i \left\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \right\rangle_{lm_i} s_i. \tag{4.150}$$

Здесь среднее берется по орбитальным с ненулевым спином.

Если проанализировать сомножитель, зависящий от угловой части волновой функции системы электронов $\left\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \right\rangle_{lm}$ (см. табл. 4.4) и схему расщепления уровней электрона в кристаллическом поле (рис. 4.21), то легко прийти к следующим умозаключениям, которые справедливы в отсутствие спин-орбитального взаимодействия.

1. В кубическом кристаллическом поле вклад \mathbf{H}_S равен нулю.
2. Для иона Fe^{3+} в любом кристаллическом поле в высокоспиновом состоянии вклад \mathbf{H}_S равен нулю.
3. Для иона Fe^{2+} в кристаллическом поле в низкоспиновом состоянии вклад \mathbf{H}_S равен нулю.
4. Направление поля \mathbf{H}_S зависит от знака $\left\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \right\rangle_{lm}$.

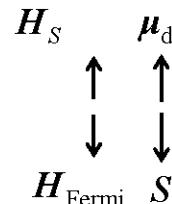
Направление вклада по отношению к $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$.

В случае, когда $\left\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \right\rangle_{lm} > 0$, спиновый вклад противоположно направлен основному вкладу Ферми (см. рис.).

Оценка вклада:

$$H_S = -2\mu_B \left\langle r^{-3} \right\rangle_{nl} \left\langle F_\alpha(\varphi, \vartheta) \right\rangle_{lm} S \cong -126 \text{ кЭ} \cdot \left\langle F_\alpha \right\rangle S,$$

$$H_S \cong k \cdot 10 \text{ кЭ}.$$



8.4. Вклад электронов проводимости

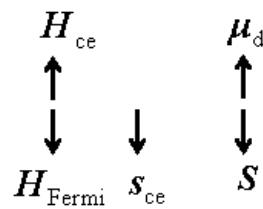
Поскольку электроны проводимости имеют конечную плотность в области расположения ядра, то по аналогии с контактным взаимодействием Ферми вклад от электронов проводимости будет равен

$$\mathbf{H}_{ce} = -\frac{8\pi}{3} \mu_B \left(|\psi_{ce}^\uparrow(0)|^2 - |\psi_{ce}^\downarrow(0)|^2 \right) \mathbf{i}, \tag{4.151}$$

где $|\psi_{ce}^{\uparrow}(0)|^2$ и $|\psi_{ce}^{\downarrow}(0)|^2$ – плотности в области расположения ядра электронов проводимости со спином "вверх" и "вниз", соответственно.

Направление вклада по отношению к H_{Fermi}

Если вследствие обменного взаимодействия спин электронов проводимости направлен также как и спин мессбауэровского иона, то вклад от электронов проводимости будет иметь противоположное направление направлению основного, фермиевского, вклада.



В общем случае направление спина электронов проводимости определяется не только спином мессбауэровского иона, но и направлениями спинов окружающих его ионов. Если воспользоваться теорией косвенного обменного взаимодействия через электроны проводимости – теорией Рудермана-Кителя-Косуи-Иосиды (РККИ) (см., например, [60]), то можно показать, что степень и направление поляризации спина электрона проводимости в существенной мере зависит от расстояния его до поляризующего иона.

На рис. 4.34, взятого из работы [60] приведено схематическое изображение обменного взаимодействия легких и тяжелых редкоземельных элементов R с переходным металлом, осуществляющегося через электроны проводимости.

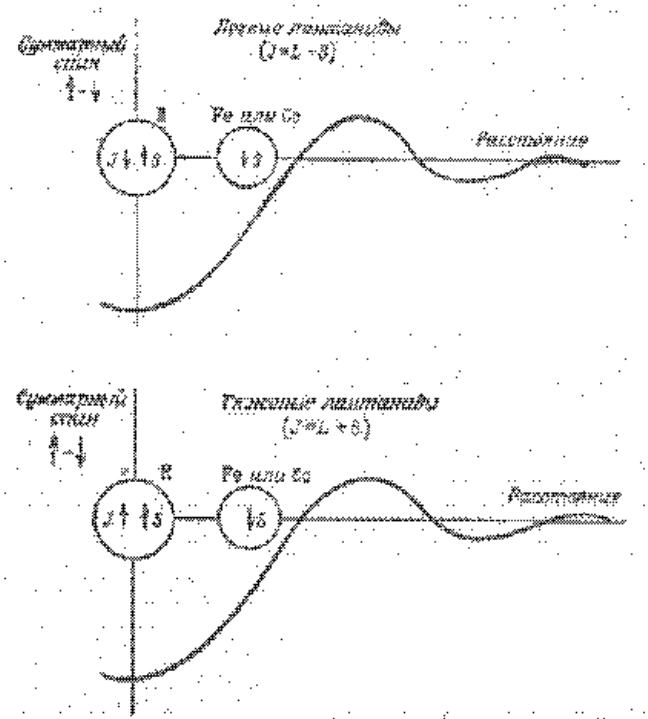


Рис. 4.34. Схематическое изображение взаимодействия легких и тяжелых редкоземельных элементов с переходным металлом, осуществляющегося через электроны проводимости [60]

На рисунке учтено, что для атомов редкой земли R знак поляризации электронов проводимости отрицателен, а для атомов Fe – положителен. Оценка вклада (из эксперимента):

$$H_{ce} \approx 0 \div 50 \text{ кЭ.}$$

Пример экспериментального определения величины вклада электронов проводимости см., например, работу [61].

8.5. Макроскопические вклады

Последние три вклада \mathbf{H}_m в поле на ядре мессбауэровского атома обусловлены магнитным полем, создаваемым магнитными моментами окружающих атомов. Эти вклады макроскопической природы. В исследуемом образце конечных размеров и заданной формы проведем макроскопическую сферу радиуса R с центром в точке наблюдения – в области расположения мессбауэровского ядра (рис. 4.35).

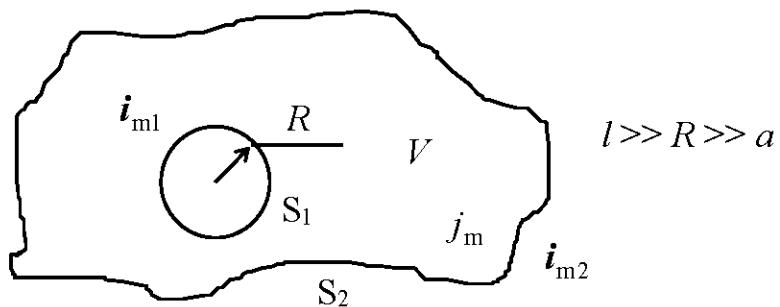


Рис. 4.35. К вопросу о макроскопических вкладах в сверхтонкое поле \mathbf{H}_n

На рис. 4.34 S_1 и S_2 – внутренняя и внешняя поверхности части образца (V) без вещества внутри сферы, \mathbf{j}_m и \mathbf{i}_{m1} , \mathbf{i}_{m2} – плотности объемного и поверхностных токов намагничивания. Радиус сферы R с одной стороны должен быть гораздо больше межатомного расстояния, определяемого параметром элементарной ячейки a , а с другой – гораздо меньше характерного линейного размера l неоднородности намагниченности образца $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ (например, размер домена).

В соответствии с принципом суперпозиции:

$$\mathbf{H}_m = \mathbf{H}_{\text{dip}} + \mathbf{H}_{S_1} + \mathbf{H}_{S_2} + \mathbf{H}_V \equiv \mathbf{H}_{\text{dip}} + \mathbf{H}_{\text{Lor}} + \mathbf{H}_{\text{dem}} + \mathbf{H}_V. \quad (4.152)$$

Если считать, что среда однородно намагничена, т.е. $\text{rot} \mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_m = 0$, то $\mathbf{H}_V = 0$ и

$$\mathbf{H}_m = \mathbf{H}_{\text{dip}} + \mathbf{H}_{\text{Lor}} + \mathbf{H}_{\text{dem}}. \quad (4.153)$$

A. Диполь-дипольный вклад \mathbf{H}_{dip} – поле от локализованных магнитных моментов окружающих атомов, находящихся внутри сферы достаточно большого радиуса R , вычисляется с помощью простого суммирования вкладов от каждого из локализованных моментов:

$$\mathbf{H}_{\text{dip}} = \sum_k \frac{3\mathbf{r}_k(\boldsymbol{\mu}_k \cdot \mathbf{r}_k) - \boldsymbol{\mu}_k r_k^2}{r_k^5}, \quad (4.154)$$

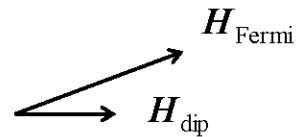
$$\begin{aligned} H_{\text{dip},\alpha} &= \sum_k \frac{3x_{k\alpha} \sum_\beta \mu_{k\beta} x_{k\beta} - \sum_\beta \delta_{\alpha\beta} \mu_{k\beta} r_k^2}{r_k^5} = \sum_\beta \sum_k \mu_{k\beta} \frac{3x_{k\alpha} x_{k\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_k^2}{r_k^5} = \\ &= \sum_\beta \sum_t \mu_\beta^t \left(\sum_{i(t)} \frac{3x_{i\alpha} x_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_i^2}{r_i^5} \right) = \sum_t \sum_\beta \mu_\beta^t S_{\alpha\beta}^t; \end{aligned} \quad (4.155)$$

$$S_{\alpha\beta}^t \equiv \sum_{i(t)} \frac{3x_{i\alpha} x_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} r_i^2}{r_i^5}; \quad (4.156)$$

$$\mathbf{H}_{\text{dip}} = \sum_t \boldsymbol{\mu}^t \mathbf{S}^t. \quad (4.157)$$

При этом сумма берется сначала по $i(t)$ – по всем атомам одного сорта (с одинаковыми локализованными магнитными моментами μ^t), а затем по t – по атомам разного сорта. Сфера выбирается настолько большой, чтобы диполь-дипольный вклад практически не зависел от ее радиуса. Заметим, что этот вклад в сверхтонкое магнитное поле, как и решеточный вклад в компоненты тензора ГЭП ($\varphi_{\alpha\beta}^{\text{lat}} = \sum_t \varphi_{\alpha\beta}^t = \sum_t q^t S_{\alpha\beta}^t$, см. формулу (4.99)), определяется той же матрицей решеточных сумм $S_{\alpha\beta}^t$ (см. (4.109) в п. 6.2).

Направление вклада по отношению к $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$ в общем случае может быть произвольным (рис.). Оно зависит от точечной симметрии позиции, занимаемой мессбауэровским атомом, и ориентации локализованных магнитных моментов окружающих его атомов.



Оценка величины вклада (из эксперимента и результата расчета):

$$H_{\text{dip}} \cong 0 \div 10 \text{ кЭ.}$$

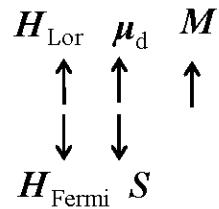
Б. Поле Лоренца \mathbf{H}_{Lor} – поле внутри макроскопической полой сферы, создаваемое безграничной непрерывной однородно намагниченной средой (или – поле, создаваемое поверхностными токами намагничивания \mathbf{i}_{ml} , текущими по поверхности сферы Лоренца S_1) равно (см. п. 12 в Приложении I):

$$\mathbf{H}_{\text{Lor}} = \frac{4\pi}{3} \mathbf{M} = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{\boldsymbol{\mu}}{v}, \quad (4.158)$$

где \mathbf{M} – намагниченность единицы объема среды; $\boldsymbol{\mu}$ – магнитный момент формульной единицы вещества (или атомов в элементарной ячейке); v – объем, приходящийся на формульную единицу (или элементарную ячей-

ку). Поле Лоренца обусловлено атомами с полностью ориентированными моментами в домене магнетика.

Направление вклада всегда ориентировано вдоль направления намагниченности \mathbf{M} (см. рис.). По отношению к вкладу $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$ – по-разному. В случае коллинеарной магнитной структуры – вдоль или противоположно $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$.



Оценка величины вклада – для фаз Лавеса типа RFe₂: $Z = 9$ – число формульных единиц в элементарной ячейке; $\mathbf{M} = \frac{\mu}{v}$; $a \approx 7 \text{ \AA}$ – параметр кубической элементарной ячейки; $v \approx 7 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3$; ферримагнетик с $\mu_R \approx 9 \mu_B$ и $\mu_{Fe} \approx 2 \mu_B$; $\mu = Z(\mu_R - 2\mu_{Fe}) \approx 8(9 - 4) \mu_B = 40 \mu_B$;

$$H_{\text{Lor}} = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{\mu}{v} = \frac{4\pi \cdot 40 \cdot 9.3 \cdot 10^{-21}}{3 \cdot 7^3 \cdot 10^{-24}} \approx 4.5 \text{ кЭ}.$$

В. Размагничивающее поле \mathbf{H}_{dem} , учитывающее форму образца (поле, создаваемое поверхностью токами намагничивания i_{m2} , текущими по поверхности S_2 образца), равно (см. п. 13 в Приложении I):

$$\mathbf{H}_{\text{dem}} = -\beta \mathbf{M} = -\beta \frac{\mu}{v}. \quad (4.159)$$

Здесь β – **размагничивающий фактор**, который в общем случае является тензором. Этот вклад зависит от ориентации доменов в образце. Если частицы многодоменные, то $\mathbf{H}_{\text{dem}} \approx 0$, если однодоменные, то вклад определяется формой частицы.

Приведем наиболее характерные примеры значений размагничивающего фактора β (в системе CGS; см. рис. 4.36).

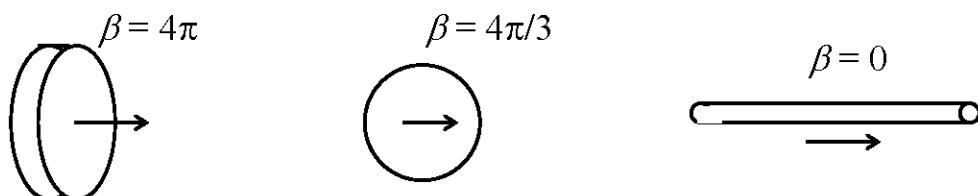


Рис. 4.36. Примеры взаимосвязи формы образца (частиц) и размагничивающего фактора β

1. Плоский тонкий образец с направлением намагниченности вдоль нормали к поверхности – $\beta = 4\pi$.

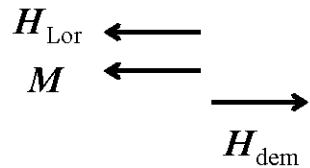
2. Сферические магнитные частицы – $\beta = 4\pi/3$.

3. Длинные тонкие иглы с направлением намагниченности вдоль игл или многодоменный образец в отсутствие внешнего поля – $\beta = 0$.

Заметим, что в случае сферических магнитных частиц
 $\mathbf{H}_{\text{Lor}} + \mathbf{H}_{\text{dem}} = 0$.

Направление вклада.

По отношению к $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$ ориентировано по разному, но всегда противоположно направлению поля Лоренца \mathbf{H}_{Lor} (рис.).



Оценка величины вклада:

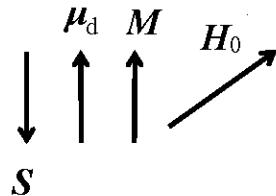
$$H_{\text{dem}} \approx 0 \div 10 \text{ кЭ.}$$

Заметим, что при форме магнитных частиц близких к сферической сумма двух макроскопических вкладов – поля Лоренца (4.159) и размагничивающего поля (4.160) оказывается близка к нулю:

$$\mathbf{H}_{\text{Lor}} + \mathbf{H}_{\text{dem}} \approx 0.$$

Г. Внешнее поле \mathbf{H}_0 .

Направление вклада по отношению к $\mathbf{H}_{\text{Fermi}}$ ориентировано по разному, в зависимости от взаимной ориентации собственного момента мессбауэровского атома μ_d и внешнего поля \mathbf{H}_0 (см. рис.).



Оценка величины вклада:

$$H_0 = 0 \div 70 \text{ кЭ.}$$

§9. Комбинированное сверхтонкое взаимодействие

Гамильтониан комбинированного сверхтонкого взаимодействия (одновременно магнитного дипольного и электрического квадрупольного взаимодействий) равен (см., например, [4]; см. с (4.82) и (4.129)):

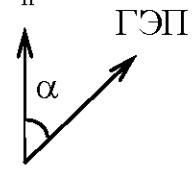
$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{comb}} &= \hat{H}_{\text{m}} + \hat{H}_Q = -g\mu_n \hat{I}_z H_n + \frac{eQ}{2I(2I-1)} \left(\varphi_{xx} \hat{I}_x^2 + \varphi_{yy} \hat{I}_y^2 + \varphi_{zz} \hat{I}_z^2 \right) = \\ &= -g\mu_n \hat{I}_z H_n + \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \left[3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 + \frac{\eta}{2} (\hat{I}_+^2 + \hat{I}_-^2) \right]. \end{aligned} \quad (4.160)$$

Когда энергия дипольного магнитного сверхтонкого взаимодействия существенно больше энергии квадрупольного электрического сверхтонкого взаимодействия – $|\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$ и тензор градиента электрического поля аксиально-симметричен – $\eta = 0$, собственные значения гамильтониана комбинированного сверхтонкого взаимодействия E_{com} будут равны:

$$\begin{aligned} E_{\text{com}} &= E_{\text{m}} + E_Q = \\ &= -g\mu_n m_I H_n + \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)} \left(3m_I^2 - I(I+1) \right) \frac{3\cos^2 \alpha - 1}{2}, \end{aligned} \quad (4.161)$$

где α – угол между сверхтонким полем H_n и главной осью тензора ГЭП (см. рис.).

В частности для спина ядра $I = 3/2$ (случай ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn в возбужденном состоянии):



$$E_{\text{comb}} = E_m + E_Q = -g_{ex}\mu_n m_I H_n + \frac{e^2 q Q}{4} \left(m_I^2 - \frac{5}{4} \right) \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2}. \quad (4.162)$$

Как видим, в этом случае, наряду с магнитным расщеплением возникает дополнительное квадрупольное смещение ε энергетических уровней (рис. 4.37) и соответствующее им смещение компонент мессбаузеровского спектра (рис. 4.38):

$$\varepsilon = \frac{e^2 q Q}{4} \cdot \frac{3 \cos^2 \alpha - 1}{2}. \quad (4.163)$$

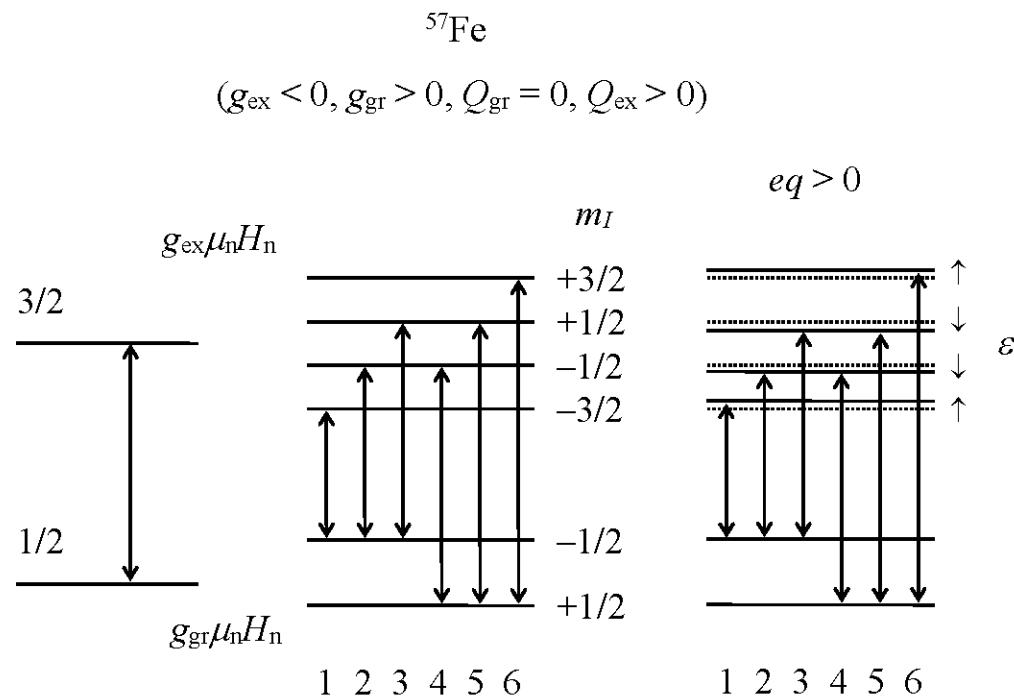


Рис. 4.37. Схема ядерных уровней при комбинированном СТВ
в случае $|\mu_n H_n| \gg |e^2 q Q|$

Мессбаузерский спектр представляет собой зеемановский секстет, у которого компоненты смещаются на одну и ту же величину квадрупольного смещения $|\varepsilon|$. При этом внешняя пара компонент смещается в одну, а две внутренние пары компонент – в противоположную (рис. 4.38) сторону оси додлеровских скоростей.

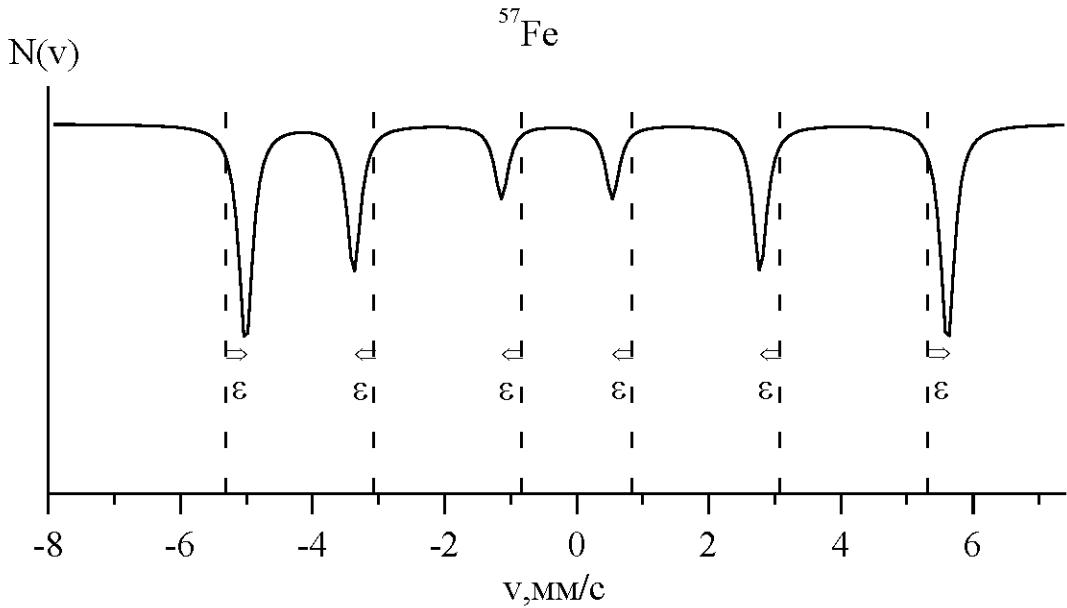


Рис. 4.38. Мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe при комбинированном СТВ в случае $|\mu_{\text{n}}H_{\text{n}}| \gg |e^2qQ|$

Во втором порядке малости в разложении энергии комбинированного сверхтонкого взаимодействия ядра по энергии квадрупольного взаимодействия взаимное положение компонент парциальных спектров на шкале доплеровских скоростей будут определяться следующими соотношениями [62]:

$$\nu_{1,6} = \delta + \varepsilon \mp a_+ \mp \mu_n \frac{|g_g| + 3|g_e|}{2} H_n, \quad (4.164)$$

$$\nu_{2,5} = \delta - \varepsilon \pm a_- \mp \mu_n \frac{|g_g| + |g_e|}{2} H_n, \quad (4.165)$$

$$\nu_{3,4} = \delta - \varepsilon \mp a_- \mp \mu_n \frac{|g_g| - |g_e|}{2} H_n. \quad (4.166)$$

Здесь μ_n – ядерный магнетон; g_g и g_e – g -факторы для основного и возбуждённого состояний ядра; $a_{\pm}^{(i)}$ – слагаемые, обусловленные учетом константы квадрупольного взаимодействия во втором порядке малости в разложении энергии сверхтонкого взаимодействия ядра с его окружением и равные:

$$a_{\pm} = \frac{3}{4} \cdot \frac{e^2 q Q}{4} \cdot \frac{e^2 q Q}{|g_e| \mu_n H_n} \left[\cos^2 \alpha \pm \frac{\sin^2 \alpha}{8} \right] \sin^2 \alpha. \quad (4.167)$$

В этом случае компоненты спектра испытывают дополнительные смещения: внешние компоненты в разные стороны на величину a_+ , а средние и внутренние компоненты навстречу друг другу на величину a_- (рис. 4.39).

Заметим, что, если применять обычно используемые формулы для определения сдвига мессбауэровской линии δ_{exp} , квадрупольного смещения компонент спектра ε_{exp} и эффективного магнитного поля $H_{n_{\text{exp}}}$ (см. §4 в Главе V), то с учетом (4.164÷4.166) получим:

$$\delta_{\text{exp}} \equiv \frac{\nu_6 + \nu_5 + \nu_2 + \nu_1}{4} = \delta, \quad (4.168)$$

$$\varepsilon_{\text{exp}} \equiv \frac{\nu_6 - \nu_5 - (\nu_2 - \nu_1)}{4} = \varepsilon, \quad (4.169)$$

$$H_{n_{\text{exp}}} \equiv \nu_6 - \nu_1 = H_n + 2a_+. \quad (4.170)$$

Другими словами сдвиг δ и квадрупольное смещение ε будут в данном приближении определяться правильно, а значение эффективного магнитного поля будет завышено (занижено) на величину $2a_+$.

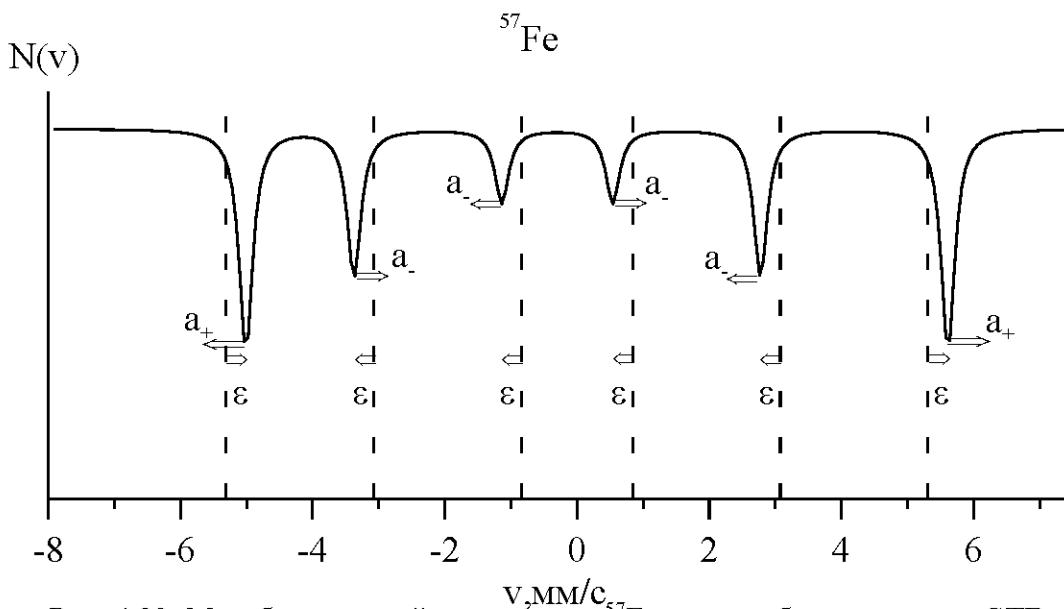


Рис. 4.39. Мессбауэровский спектр ядер ^{57}Fe при комбинированном СТВ в случае учета второго порядка малости в разложении энергии СТВ