



Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Спецкурсы

**«Физика ядерного гамма-резонанса  
в твердом теле»  
«Ядерный гамма-резонанс, как метод  
исследования твердых тел»**

Русаков Вячеслав Серафимович

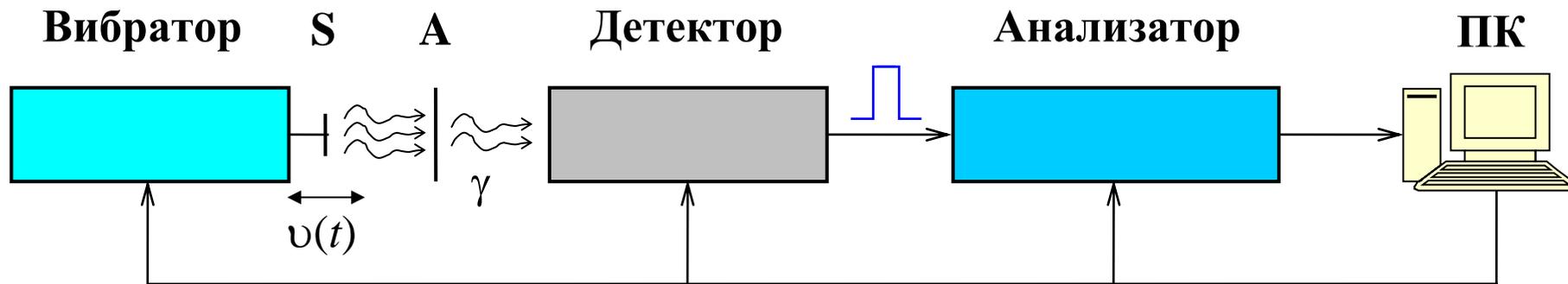
Москва - 2024

# **МАТЕРИАЛЫ К ГЛАВЕ II.**

## **ОСНОВЫ МЕССБАУЭРОВСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА**

- §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр**
- §2. Мессбауэровский спектр**
  - 2.1. Мессбауэровский спектр и эффект Доплера**
  - 2.2. Мессбауэровский спектр и распределение Пуассона**
- §3. Огибающая мессбауэровского спектра**
- §4. Величина эффекта и эффективная толщина образца**
- §5. Форма линии излучения, линии поглощения и резонансной линии**
  - 5.1. Форма линии Фойгта**
  - 5.2. Анализ применения различных профилей резонансной линии.**
- §6. Самопоглощение в источнике**
- §7. Геометрический эффект**
  - 7.1. Влияние изменения угловой апертуры регистрируемого пучка**
  - 7.2. Влияние угла вылета  $\gamma$ -кванта**
- §8. Качество спектра и оптимизация эксперимента**

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр

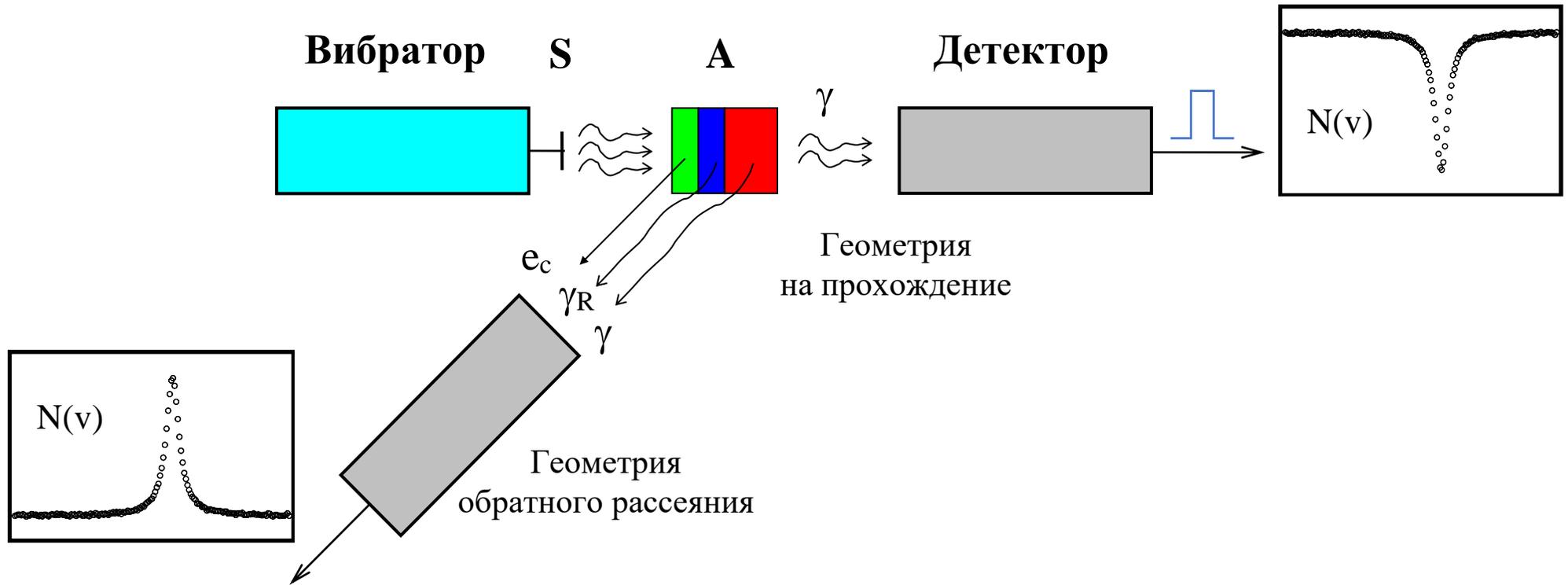


## Основные составляющие мессбауэровского спектрометра и их функциональные особенности:

- **вибратор** – задание доплеровской скорости движения источника относительно поглотителя (электродинамический вибратор);
- **источник S** – получение безотдачных  $\gamma$ -квантов мессбауэровского перехода;
- **поглотитель A** – реализация ядерного резонансного поглощения;
- **детектор** – регистрация  $\gamma$ -квантов мессбауэровского перехода (актов резонансного поглощения) и формирование электрических импульсов;
- **анализатор** – дискриминация, сортировка и накопление электрических импульсов;
- **ПК** – сбор информации и управление электронными блоками спектрометра  
(вибратор:  $v(t)$ ; детектор:  $U_{ФЭУ}$ ,  $K_{ус}$ ; анализатор: окно дискриминации – верхний и нижний пороги дискриминатора, число каналов  $n$ ).

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр

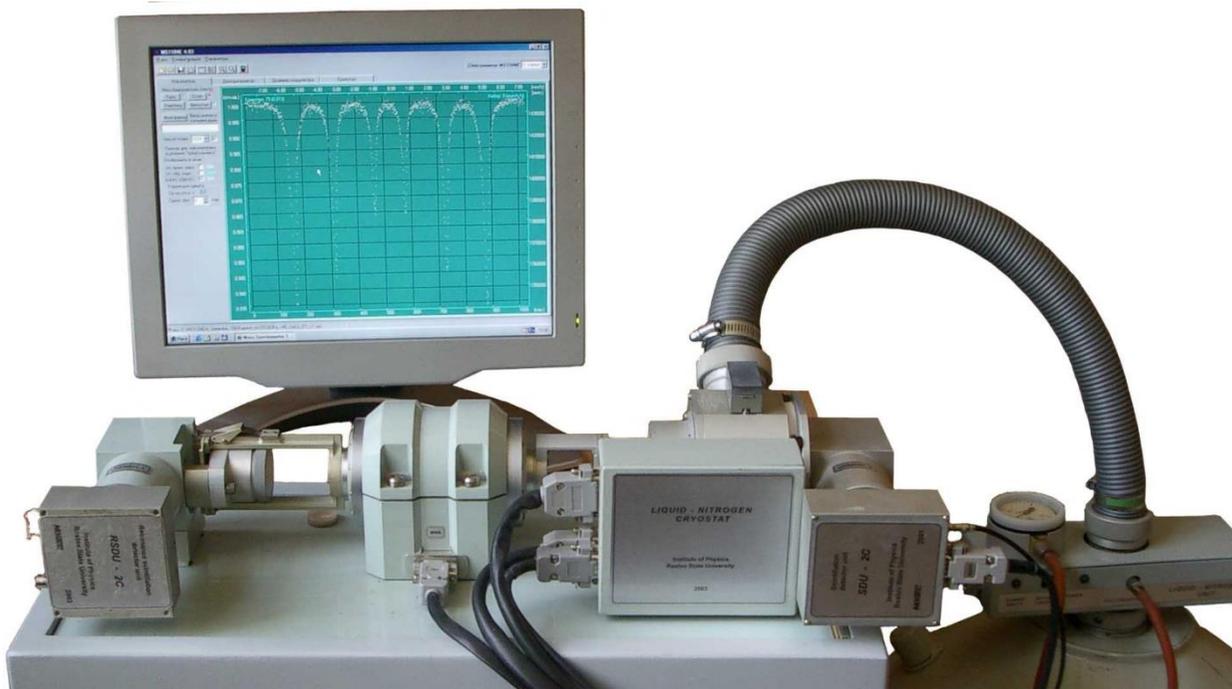
## Схема регистрации спектра



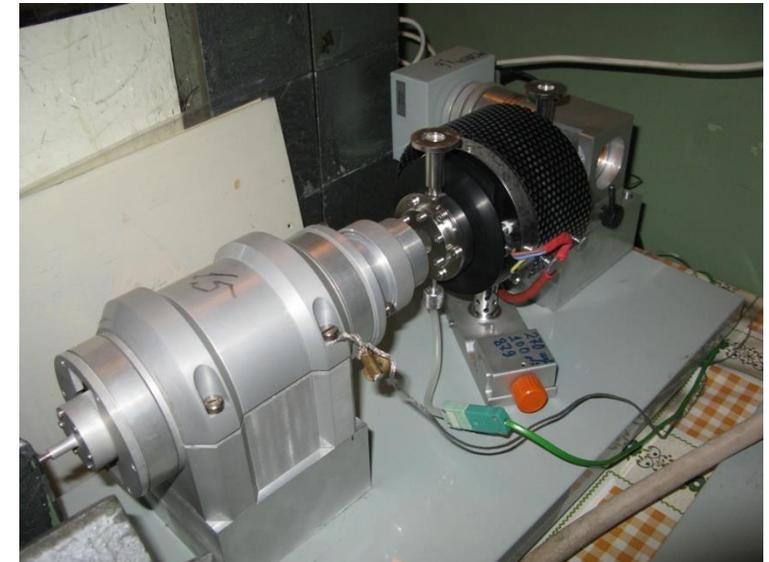
**Объект регистрации ( $d$  – глубина проникновения или выхода из образца):**

- $e_c$  – электроны конверсии ( $d < \sim 0.3$  мкм),
- $\gamma_R$  – кванты рентгеновского вторичного излучения ( $d \sim 20$  мкм),
- $\gamma$  –  $\gamma$ -кванты ( $d \sim 100$  мкм).

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр



Мессбауэровский спектрометр  
MS-1104Em  
(НИИ физики Южного федерального университета)



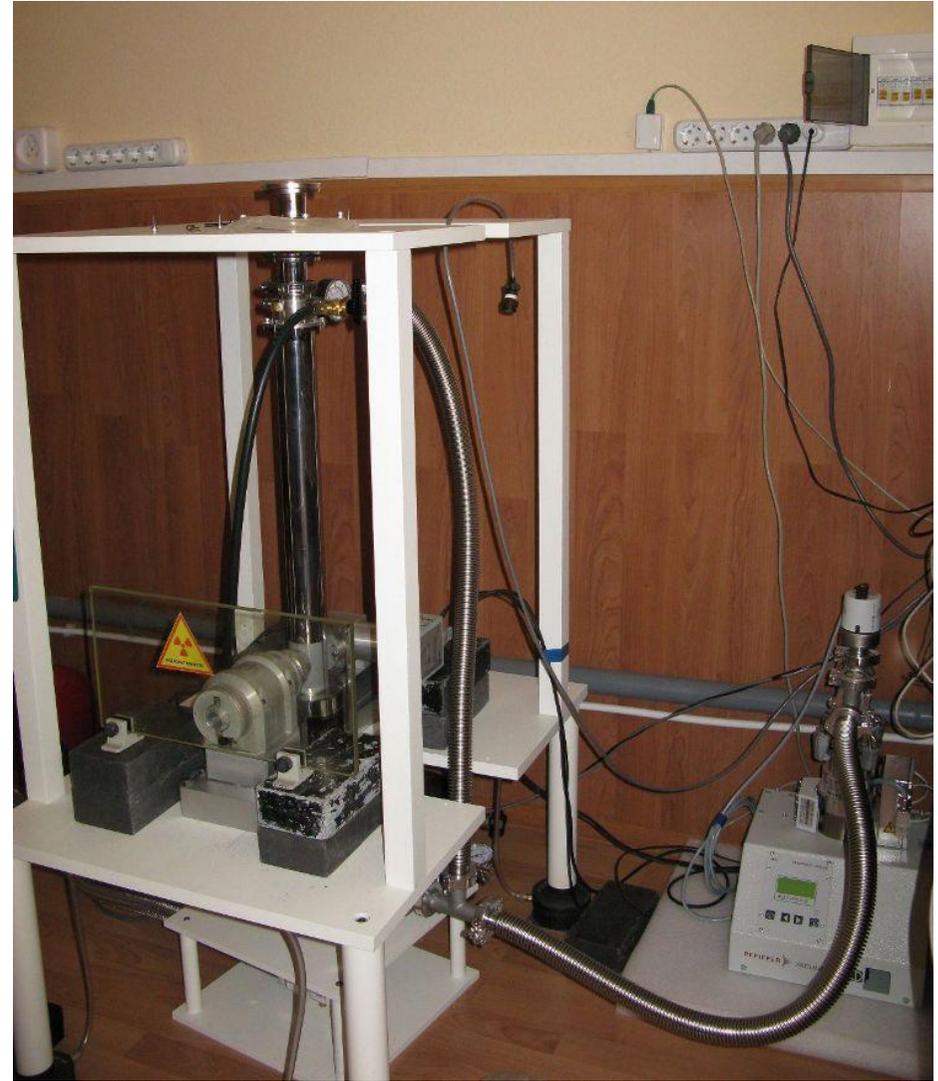
Мессбауэровская печь  
MBF-1100 (300 – 1100 K)  
(Wissenschaftliche Elektronik GmbH)

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр



Азотный криостат  
(78 – 300 K)

(ВНИИ физико-технических и радиотехнических измерений)



Гелиевый криостат замкнутого цикла  
SHI-850-5 (4.2 – 500 K)  
(JANIS RESEARCH)

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр

## Режимы работы спектрометра:

- **регистрация амплитудного спектра** – регистрация интенсивности счета электрических импульсов ( $\gamma$ -квантов) в зависимости от их амплитуды (энергии  $\gamma$ -квантов);

- **регистрация мессбауэровского (скоростного, энергетического) спектра** – регистрация интенсивности счета электрических импульсов ( $\gamma$ -квантов) в зависимости от доплеровской скорости движения источника относительно поглотителя  $v(t)$  (энергии  $\gamma$ -квантов).

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

а – постоянных ускорений пилообразной формы;

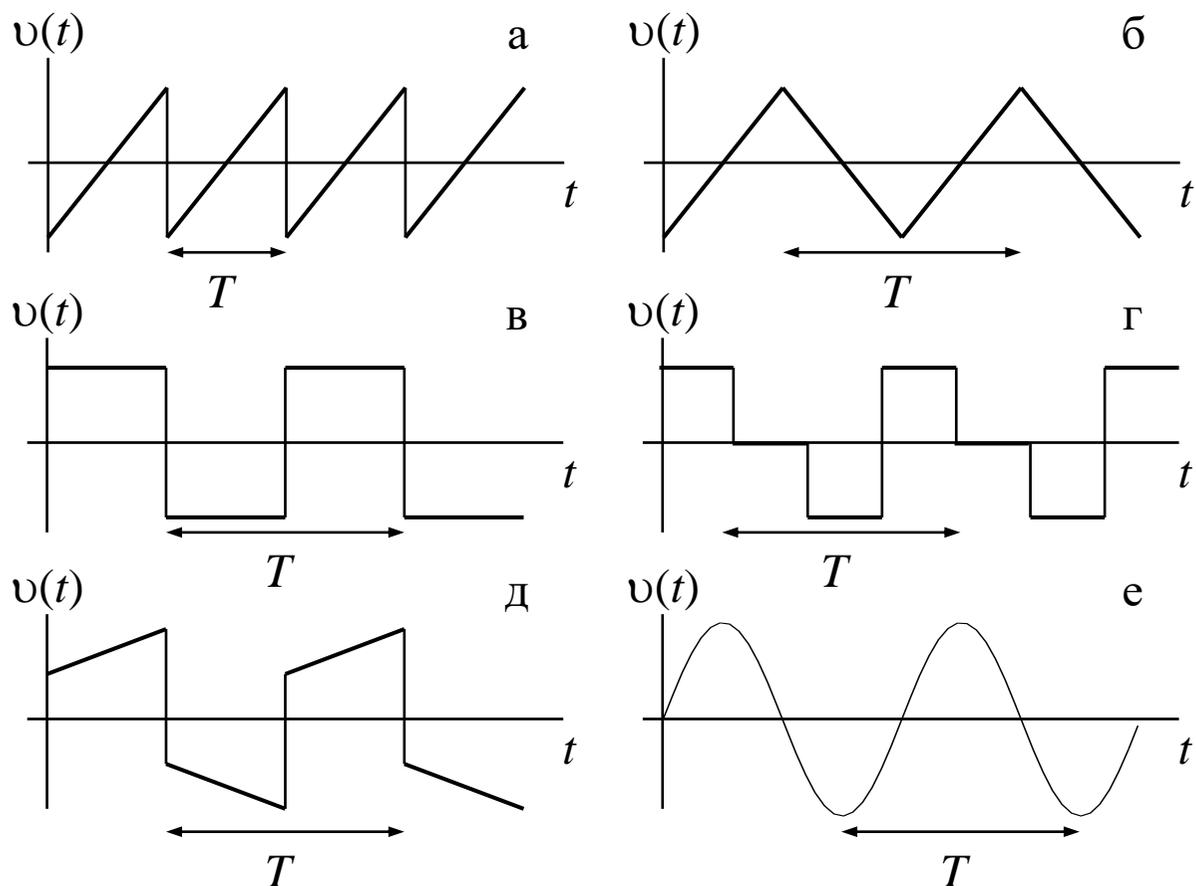
б – постоянных ускорений треугольной формы;

в – постоянных скоростей;

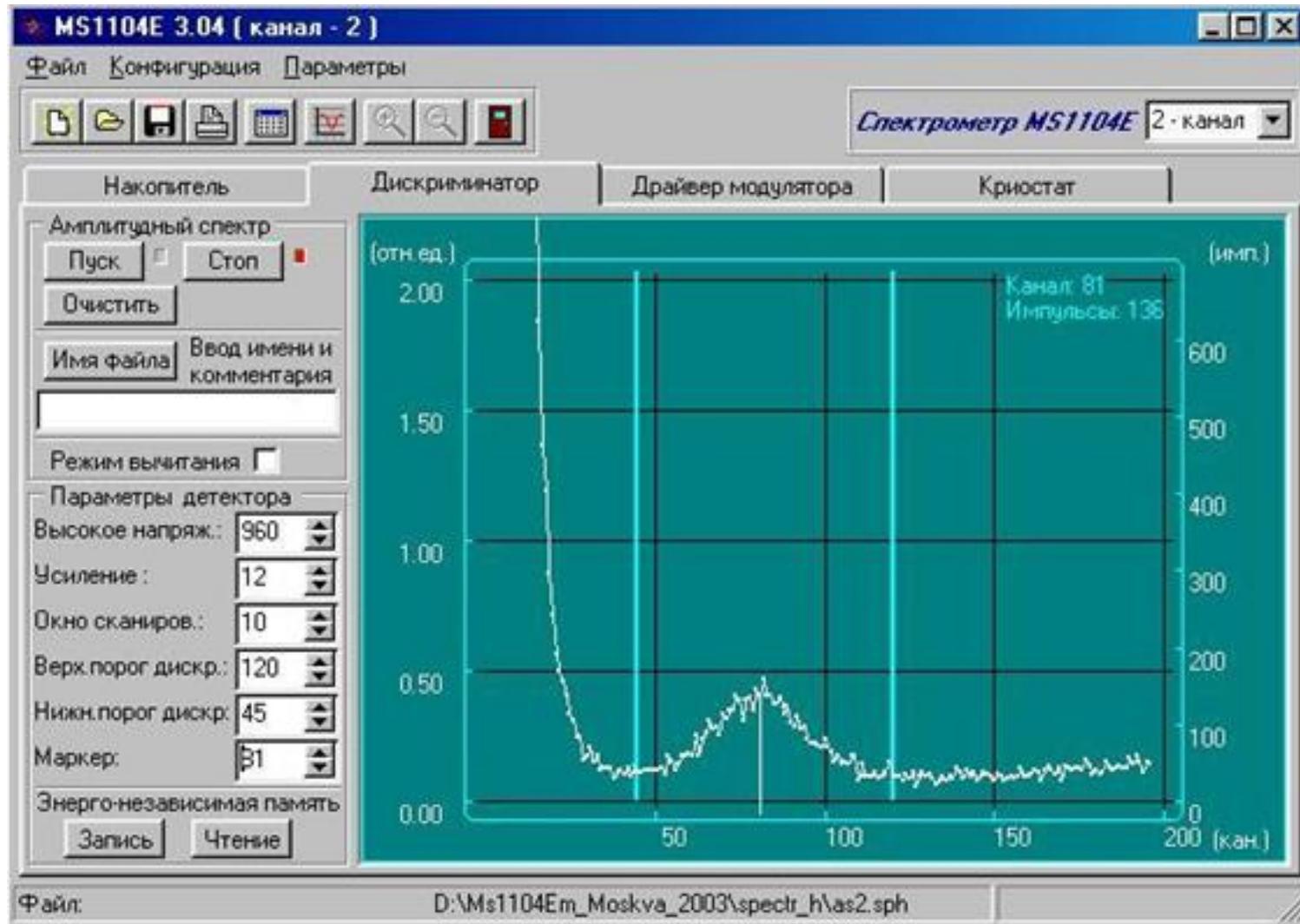
г – постоянных скоростей с фиксацией счета в "нулевом" канале;

д – трапецеидальный закон;

е – гармонический закон.

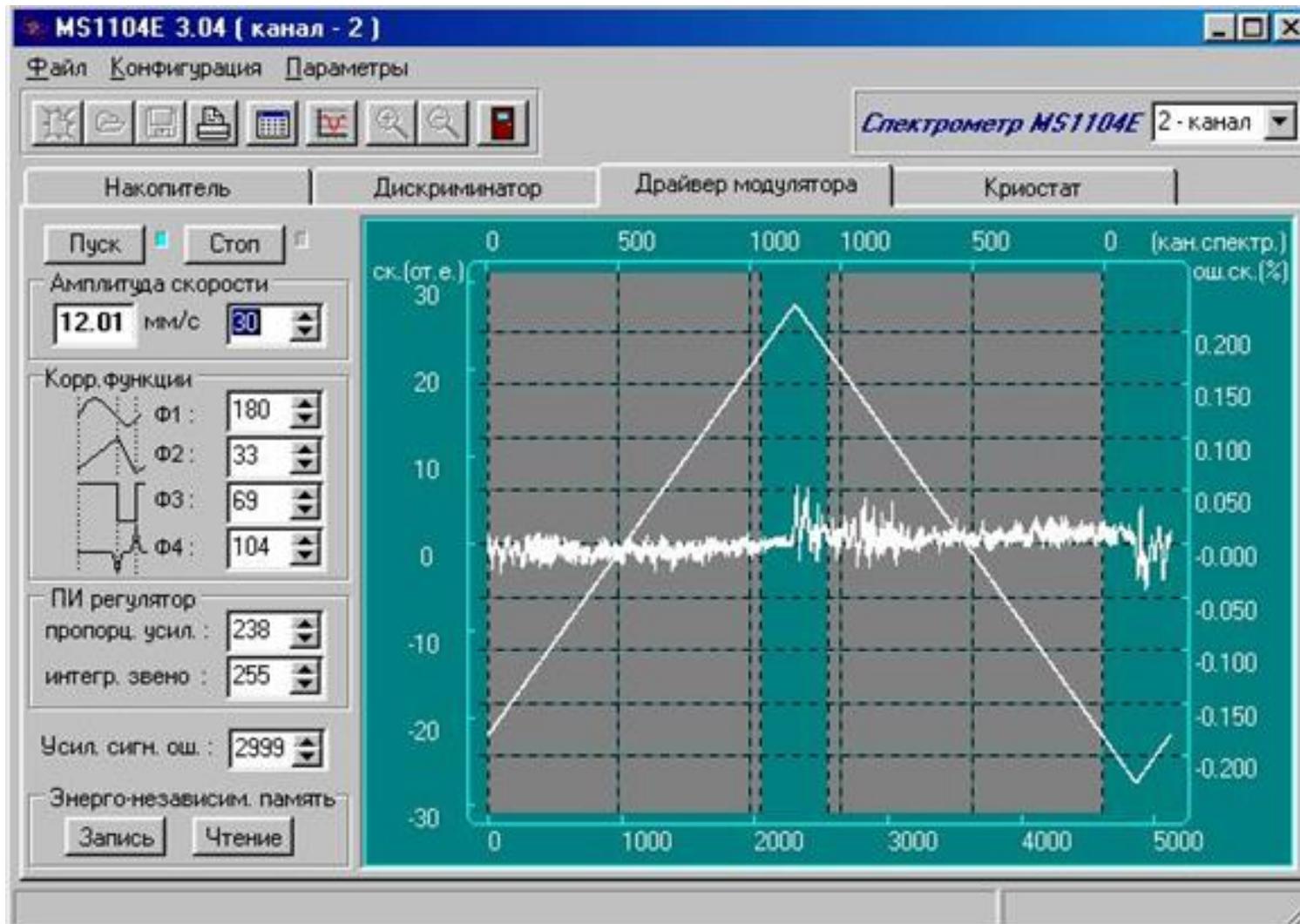


# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр



Амплитудный спектр в окне дискриминатора (выбор высокого напряжения на ФЭУ, коэффициента усиления и верхнего и нижнего порогов дискриминатора).

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр



Окно драйвера модулятора (вибратора)  
(контроль и коррекция формы  $v(t)$  и управление обратной связью в цепи управления  $v(t)$ ).

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр

## Методы регистрации спектра

**Что регистрируется** – прошедшие или рассеянные:

- $\gamma$ -кванты ( $d \sim 100$  мкм),
- электроны конверсии ( $d < \sim 0.3$  мкм),
- кванты рентгеновского вторичного излучения ( $d \sim 20$  мкм).

( $d$  – глубина проникновения или выхода из образца излучения и электронов конверсии – область образца, формирующего мессбауэровский спектр)

**Чем регистрируется:**

- сцинтиляционным детектором, который представляет собой сцинтиллятор NaJ(Tl) + фотоэлектронный умножитель (ФЭУ),
- полупроводниковым детектором,
- газовым пропорциональным счетчиком,
- резонансным детектором (регистрируется вторичное излучение резонансного поглотителя-конвертера, находящегося внутри детектора, неподвижного относительно источника, при этом движется исследуемый образец).

**Геометрия эксперимента:**

- на прохождение (пропускание, поглощение),
- рассеяния (в том числе обратного).

# §1. Схема проведения эксперимента. Мессбауэровский спектрометр

## Сцинтилляционный детектор

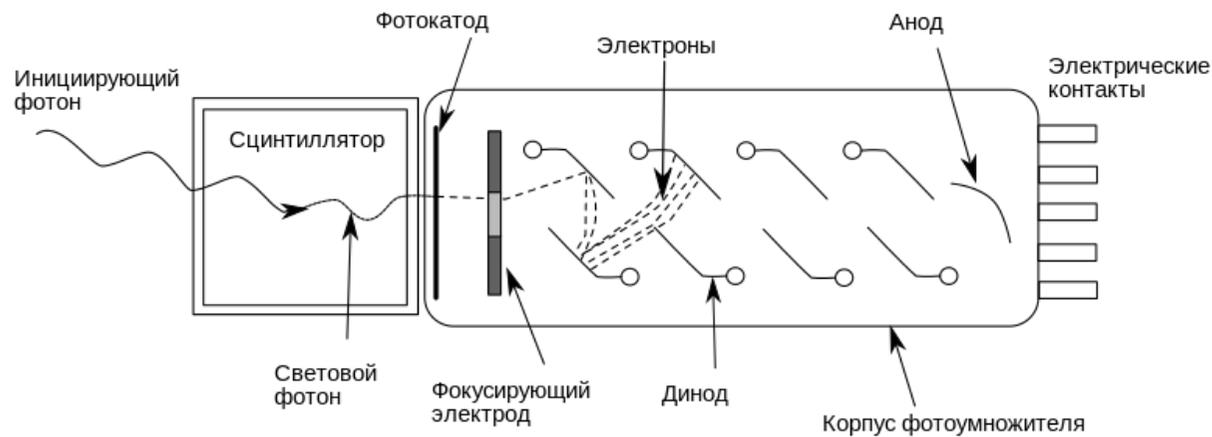


Схема сцинтилляционного детектора (сцинтиллятор NaJ(Tl) + фотоэлектронный умножитель).

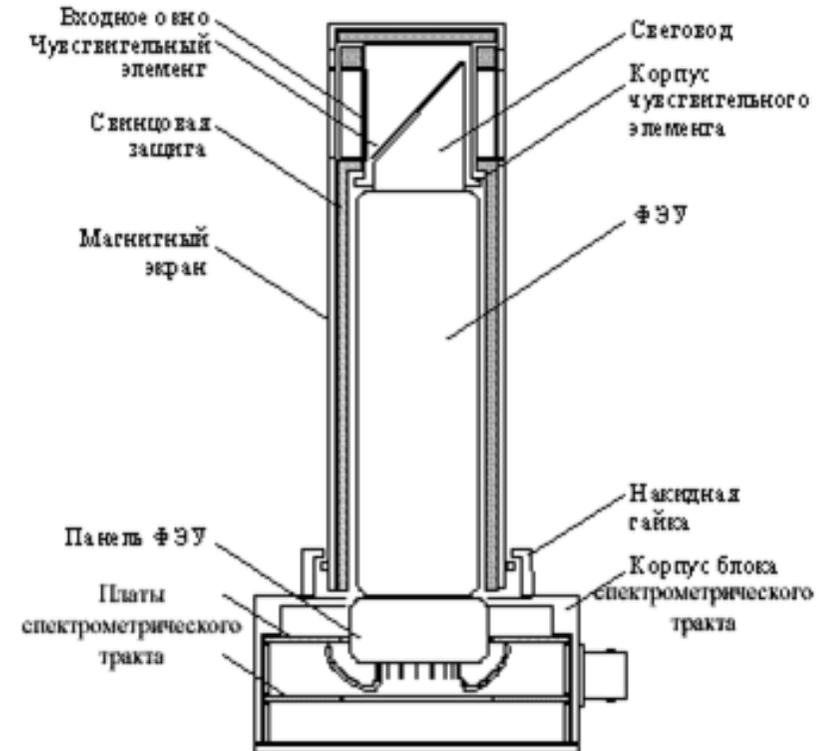


Схема конструкции модуля сцинтилляционного детектора SDU-2.

## §2. Мессбауэровский спектр

**Мессбауэровский (скоростной, энергетический) спектр**  $N(v_i) \equiv N_i$  – зависимость интенсивности счета  $\gamma$ -квантов, квантов рентгеновского вторичного излучения или электронов конверсии (фактически числа электрических импульсов, сформированных детектором и зарегистрированных анализатором в течение строго задаваемого интервала времени) от доплеровской скорости  $v_i$  ( $i$  – номер канала) движения источника относительно поглотителя.

$N_\infty$  – интенсивность счета импульсов в отсутствие резонанса;

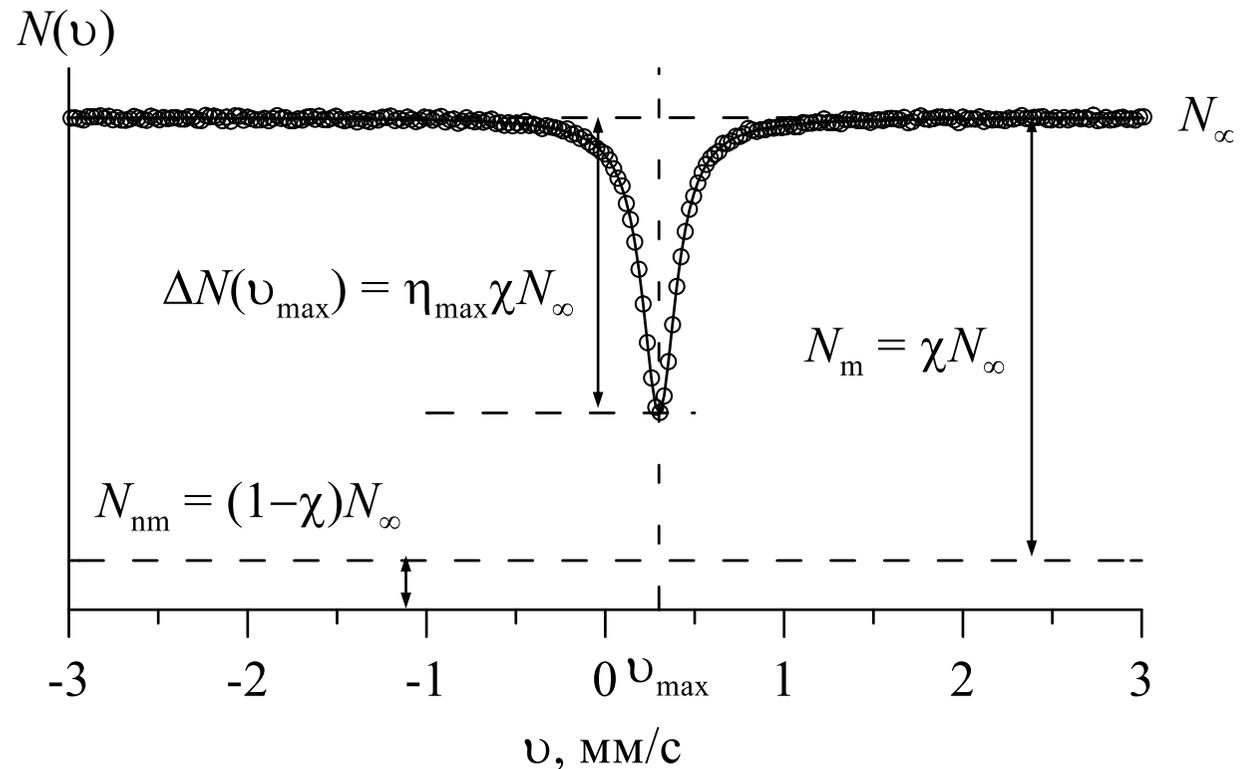
$N_\infty(v)$  – базовая линия;

$\chi$  – доля  $\gamma$ -квантов с энергией мессбауэровского перехода.

Величины эффекта:

$\Delta N(v) \equiv N_\infty - N(v)$  – "видимая",

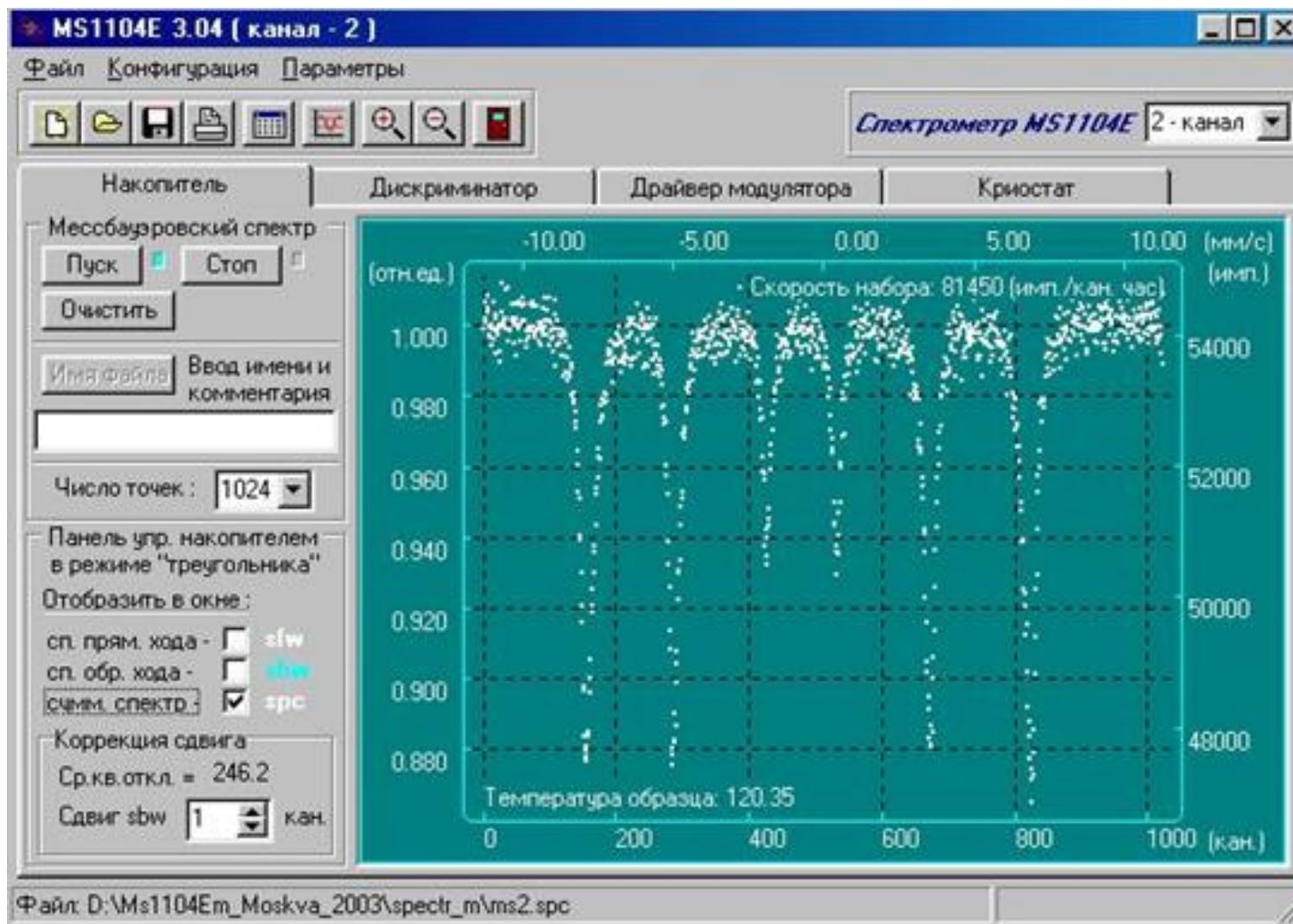
$\eta = \frac{\Delta N}{N_m} = \frac{\Delta N}{\chi N_\infty}$  – относительная.



Мессбауэровский спектр в отсутствие сверхтонких расщеплений ядерных уровней.

## §2. Мессбауэровский спектр

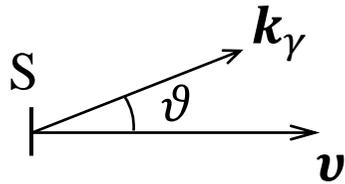
Мессбауэровский (скоростной, энергетический) спектр  $N(\nu_i) \equiv N_i$ .



Мессбауэровский спектр в окне накопителя.

## §2. Мессбауэровский спектр

### 2.1. Мессбауэровский спектр и эффект Доплера



Эффект Доплера:

$$E_\gamma = \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta} E_0.$$

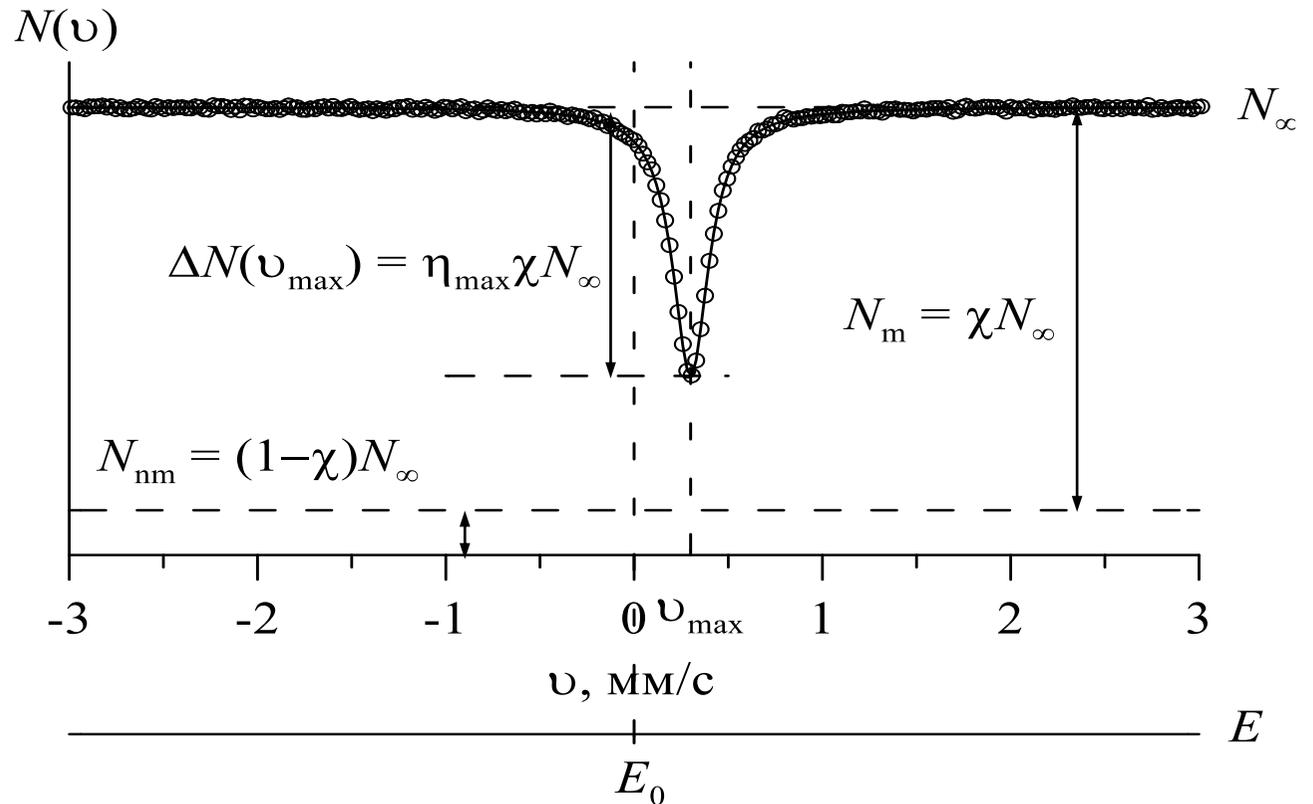
Продольный ( $\vartheta = 0$ ) эффект Доплера при  $v \ll c$ :

$$E_\gamma = \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{1 - \frac{v}{c}} E_0 \cong E_0 + E_0 \frac{v}{c};$$

$\chi$  – доля "мессбауэровских"  $\gamma$ -квантов ( $\gamma$ -квантов мессбауэровского перехода).

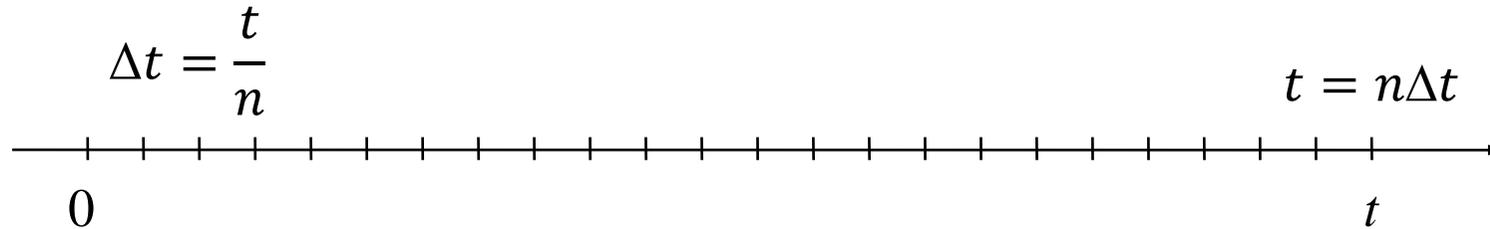
**Оценка** скорости движения источника относительно поглотителя  $\Delta v_\Gamma$ , при которой энергия  $\gamma$ -кванта изменится на естественную ширину уровня  $\Gamma_\tau$ , для ядер  $^{57}\text{Fe}$   $\Gamma_\tau \cong 5 \cdot 10^{-9}$  эВ,  $E_0 \cong 14.41$  кэВ и:

$$\Delta v_\Gamma \cong c \frac{\Gamma_\tau}{E_0} \cong 3 \cdot 10^8 \frac{5 \cdot 10^{-9}}{14.41 \cdot 10^3} \cong 0.97 \cdot 10^{-4} \text{ м/с} = 0.097 \text{ мм/с}.$$



## 2.2. Мессбауэровский спектр и распределение Пуассона

Пусть  $P_t(N)$  – вероятность испускания (поглощения, регистрации)  $N$   $\gamma$ -квантов за время  $t$ . Разобьем весь интервал  $t$  на малые интервалы  $\Delta t \equiv t/n$  такие, что  $n \equiv \frac{t}{\Delta t} \gg \langle N \rangle = \langle \nu \rangle t$ , где  $\langle \nu \rangle$  – средняя частота актов испускания (поглощения, регистрации)  $\gamma$ -квантов.



$P_t(N) = P_n(N)$  – вероятность того, что при  $n$  испытаниях  $N$  раз реализуется регистрация (**бином. распр.**), вероятность которой при одном испытании  $p \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$  и  $np \rightarrow const$ .

**Процесс регистрации  $\gamma$ -квантов контролируется (описывается) предельным случаем биномиального распределения – распределением Пуассона  $P(N)$ :**

$$P_n(N) = C_n^N p^N (1-p)^{n-N} \xrightarrow{n \rightarrow \infty, p \rightarrow 0; np = const} P_t(N) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle},$$

$$\langle N \rangle = np, S_N = \sqrt{np} = \sqrt{\langle N \rangle}.$$

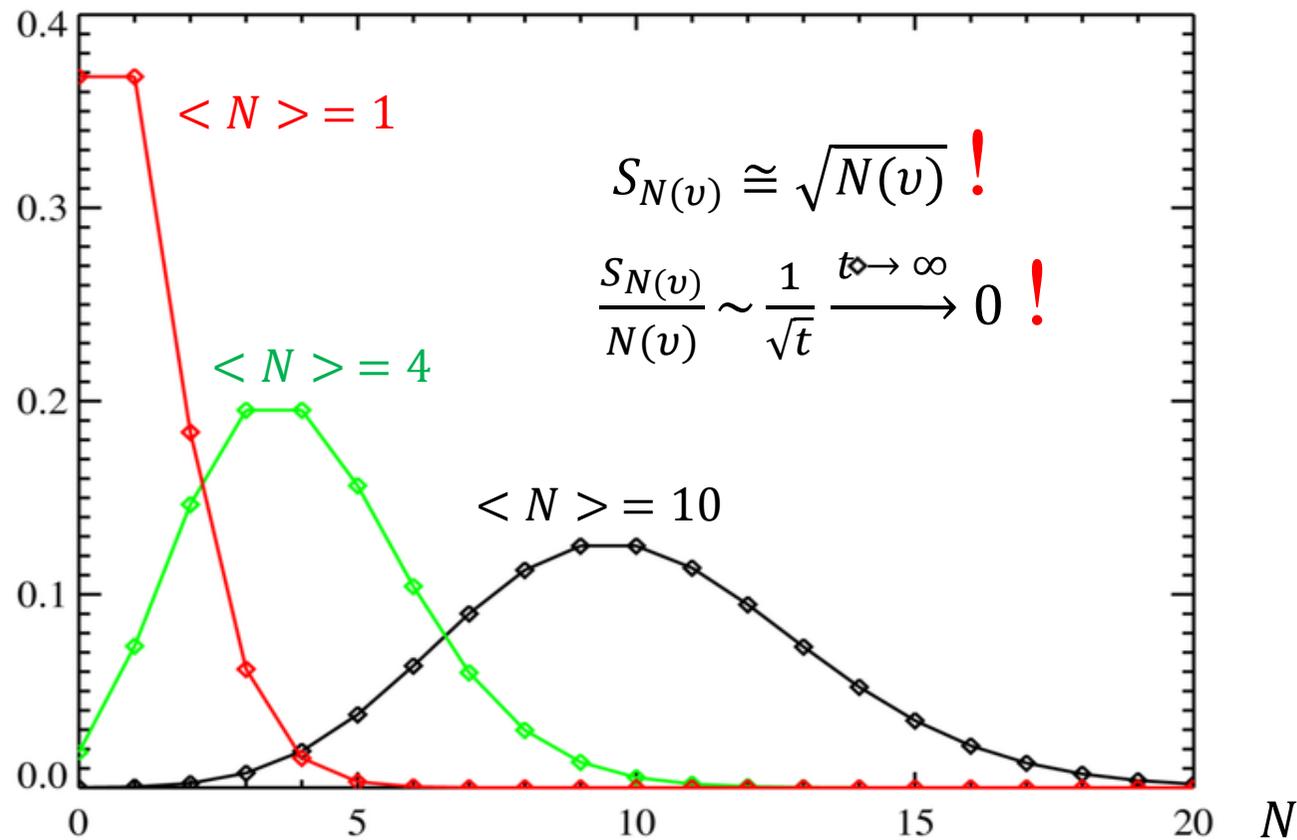
Для мессбауэровского спектра стандартное отклонение (статистических ошибок)  $N(\nu)$ :

$$\underline{S_{N(\nu)}} = \sqrt{\langle N(\nu) \rangle} \cong \underline{\sqrt{N(\nu)}}.$$

При  $t \rightarrow \infty$ :  $S_{N(\nu)} \rightarrow \infty$  и  $N(\nu) \rightarrow \infty$ , однако  $\frac{S_{N(\nu)}}{N(\nu)} = \frac{\sqrt{N(\nu)}}{N(\nu)} = \frac{1}{\sqrt{N(\nu)}} \sim \frac{1}{\sqrt{t}} \rightarrow 0$ .

## 2.2. Мессбауэровский спектр и распределение Пуассона

$$P_t(N) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle}$$



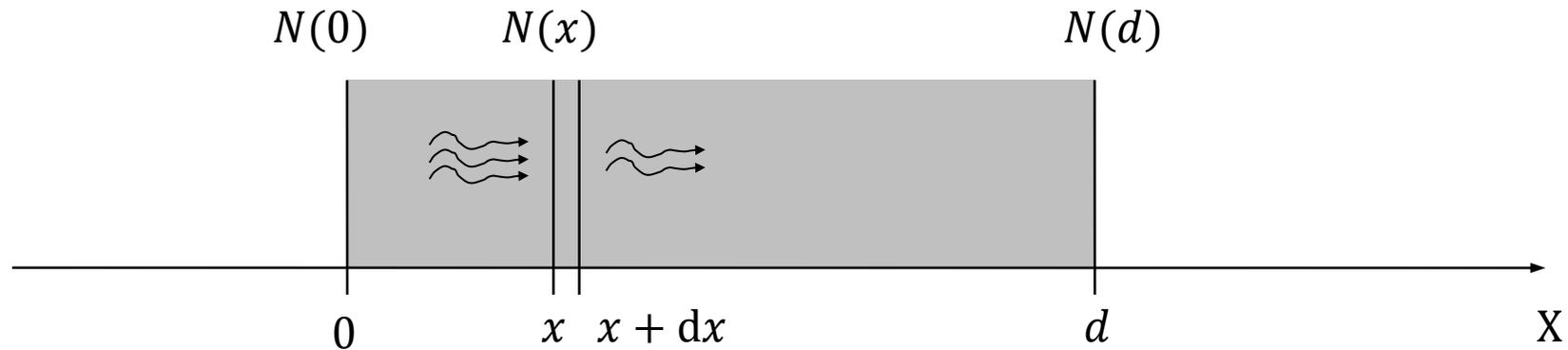
В геометрии поглощения –  $N(v) \in 10^4 - 10^6$ .

В геометрии рассеяния –  $N(v) \in 10^1 - 10^4$ .

### §3. Огибающая мессбауэровского спектра

**Огибающая мессбауэровского спектра**  $N \equiv \langle N(\nu) \rangle$  – зависимость математического ожидания (среднего значения) регистрируемой интенсивности счета импульсов от доплеровской скорости  $\nu$  движения источника относительно поглотителя.

Получим формулу для огибающей спектра в случае геометрии на прохождение.



Интенсивность (среднее значение плотности) потока  $\gamma$ -квантов  $N(E, x)$  с энергией  $E$  внутри поглотителя в точке с координатой  $x$ :

$$N(E, x) = N_{m,r}(E, x) + N_{m,nr}(E, x) + N_{nm}(E, x).$$

Здесь:

$N_{m,r}(E, x)$  и  $N_{m,nr}(E, x)$  – плотности потока  $\gamma$ -квантов с энергией  $E$  мессбауэровского перехода ("мессбауэровских"  $\gamma$ -квантов) (m), испущенных без отдачи ("резонансных") (r) и с отдачей ("не резонансных") (nr) соответственно;

$N_{nm}(E, x)$  – плотность потока  $\gamma$ -квантов с энергией  $E$  не мессбауэровского перехода ("не мессбауэровских"  $\gamma$ -квантов) (nm).

### §3. Огибающая мессбауэровского спектра

В соответствии с определениями сечения резонансного поглощения  $\sigma_a(E)$  "мессбауэровских резонансных"  $\gamma$ -квантов, вероятностей эффекта Мессбауэра для ядер в поглотителе  $f_a$  и источнике  $f_s$ , а также линейных коэффициентов нерезонансного поглощения (фото-эффект) и рассеяния (Комптон-эффект) "мессбауэровских"  $\mu_m$  и "не мессбауэровских"  $\mu_{nm}$   $\gamma$ -квантов в поглотителе запишем изменение плотности потока при прохождении слоя  $dx$  поглотителя.

Для "мессбауэровских резонансных"  $\gamma$ -квантов:

$$dN_{m,r}(E, x) \equiv N_{m,r}(E, x + dx) - N_{m,r}(E, x) = -N_{m,r}(E, x)\sigma_a(E)f_a n(x)dx - N_{m,r}(E, x)\mu_m dx,$$

$$N_{m,r}(E, x) = N_{m,r}(E, 0)e^{-\sigma_a(E)n_a(x)f_a}e^{-\mu_m x}; N_{m,r}(E, 0) = N_m(0)f_s W_s(E, \nu),$$

где  $W_s(E, \nu)$  – линия излучения источника,  $\int_0^\infty W_s(E, \nu)dE = 1$ ,

$n(x)$  и  $n_a(x) \equiv \int_0^x n(x)dx$  – объемная и поверхностная концентрации резонансных ядер.

Для "мессбауэровских не резонансных"  $\gamma$ -квантов:

$$dN_{m,nr}(E, x) = -N_{m,nr}(E, x)\mu_m dx, N_{m,nr}(E, x) = N_{m,nr}(E, 0)e^{-\mu_m x}.$$

Для "не мессбауэровских"  $\gamma$ -квантов:

$$dN_{nm}(E, x) = -N_{nm}(E, x)\mu_{nm} dx, N_{nm}(E, x) = N_{nm}(E, 0)e^{-\mu_{nm} x}.$$

### §3. Огибающая мессбауэровского спектра

Для плотности потока регистрируемых  $\gamma$ -квантов  $N(E, d)$  с энергией  $E$  после прохождения образца-поглотителя толщиной  $d$  (поверхностной концентрацией мессбауэровских ядер  $n_a(d) = n_a$ ) при движении источника относительно поглотителя со скоростью  $v$  будем иметь:

$$\begin{aligned} N(E, d) &= N_{m,r}(E, d) + N_{m,nr}(E, d) + N_{nm}(E, d) = \\ &= N_m(0) f_s W_s(E, v) e^{-\sigma_a(E) n_a f_a} e^{-\mu_m d} + N_{m,nr}(E, 0) e^{-\mu_m d} + N_{nm}(E, 0) e^{-\mu_{nm} d}. \end{aligned}$$

Плотность потока всех регистрируемых  $\gamma$ -квантов  $N(d, v)$  после прохождения поглотителя получим интегрированием по энергии  $E$ :

$$\begin{aligned} N(d, v) &= \int_0^\infty N(E, d) dE = \\ &= N_m(0) e^{-\mu_m d} f_s \int_0^\infty e^{-\sigma_a(E) n_a f_a} W_s(E, v) dE + N_{m,nr}(0) e^{-\mu_{nm} d} + N_{nm}(0) e^{-\mu_{nm} d}. \end{aligned}$$

С учетом  $N_{m,nr}(0) = N_m(0)(1 - f_s)$  и нормировки линии излучения источника  $\int_0^\infty W_s(E, v) dE = 1$  получим:

$$\begin{aligned} N(d, v) &= \\ &= N_m(0) e^{-\mu_m d} f_s \int_0^\infty e^{-\sigma_a(E) n_a f_a} W_s(E, v) dE + (1 - f_s) N_m(0) e^{-\mu_m d} \int_0^\infty W_s(E, v) dE + N_{nm}(d) = \\ &= N_{nm}(d) + N_m(0) e^{-\mu_m d} - N_m(0) e^{-\mu_m d} f_s \int_0^\infty (1 - e^{-\sigma_a(E) n_a f_a}) W_s(E, v) dE. \end{aligned}$$

### §3. Огибающая мессбауэровского спектра

Введем в рассмотрение:

$N_\infty$  – плотность потока (интенсивность счета импульсов) всех  $\gamma$ -квантов после поглотителя толщиной  $d$  при больших доплеровских скоростях движения источника относительно поглотителя, т.е. в отсутствие резонанса (базовая линия):

$$N_\infty \equiv N_{nm}(d) + N_m(0)e^{-\mu_m d} = N_{nm}(d) + N_m(d),$$

$\chi$  – доля "мессбауэровских"  $\gamma$ -квантов ( $\gamma$ -квантов мессбауэровского перехода) в потоке после поглотителя в отсутствие резонанса:

$$\chi = \frac{N_m(d)}{N_\infty}.$$

В результате плотность потока всех регистрируемых  $\gamma$ -квантов после прохождения поглотителя (огибающая мессбауэровского спектра) будет иметь вид:

$$N(\nu) \equiv N(d, \nu) = N_\infty - N_\infty \chi f_s \int_0^\infty (1 - e^{-f_a n_a \sigma_a(E)}) W_s(E, \nu) dE.$$

### §3. Огибающая мессбауэровского спектра

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

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

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

где  $v_k^a$  – положение  $k$ -ой линии и  $p_a$  – число компонент для  $a$ -го парциального спектра,

$W_s(E, \nu, \Gamma_\tau) = W_L(E, \nu, \Gamma_\tau) = \frac{2}{\pi \Gamma_\tau} \cdot \frac{1}{1 + \left( \frac{E - E_0 - E_0 \nu / c}{\Gamma_\tau / 2} \right)^2}$  – линия излучения источника,

$W_a(E, v_k^a, \Gamma_\tau) = W_L(E, v_k^a, \Gamma_\tau) = \frac{2}{\pi \Gamma_\tau} \cdot \frac{1}{1 + \left( \frac{E - E_0 - E_0 v_k^a / c}{\Gamma_\tau / 2} \right)^2}$  –  $k$ -ая линия поглощения в  $a$ -ом парци-

альном спектре ( $\int_0^\infty W_L(E, \nu) dE = 1$ ).

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

## §4. 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:

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

**(Нормированная) площадь (интенсивность) спектра:**

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

Относительная величина эффекта и нормированная площадь спектра определяются только свойствами источника и исследуемого образца и не зависят от параметров настройки спектрометра!!!

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

$$\underline{N(\nu)} = N_\infty - N_\infty \chi f_s \int_0^\infty (1 - e^{-\sum t_a \alpha_a(E)}) W_s(E, \nu) dE = \underline{N_\infty - N_\infty \chi f_s \sum t_a \int_0^\infty \alpha_a(E) W_s(E, \nu) dE};$$

$$\underline{\eta(\nu)} = f_s \int_0^\infty (1 - e^{-\sum t_a \alpha_a(E)}) W_s(E, \nu) dE = f_s \sum t_a \int_0^\infty \alpha_a(E) W_s(E, \nu) dE = \underline{\sum \eta_a(\nu)}, \underline{\eta_a \sim f_a n_a};$$

$$\underline{S} = \frac{c}{E_0} f_s \int_0^\infty (1 - e^{-\sum t_a \alpha_a(E)}) dE = \frac{c}{E_0} f_s \sum t_a \int_0^\infty \alpha_a(E) dE = \frac{c}{E_0} \cdot \frac{\pi \Gamma_\tau}{2} f_s \sum t_a = \underline{\sum S_a}, \underline{S_a \sim f_a n_a}.$$

## §5. Форма линии излучения, поглощения и резонансной линии

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

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

Основные причины изменения формы и уширения

- линии излучения:

- локальная неоднородность окружения ядер в матрице источника,
- эффект самопоглощения (при большой начальной активности источника);

- линии поглощения:

- локальная неоднородность окружения ядер в образце;

- резонансных линий в спектре:

- изменение формы линий излучения и поглощения,
- эффект насыщения,
- геометрический эффект,
- качество работы вибратора спектрометра (нелинейность по скорости, паразитные вибрации и т.д.),
- в ряде случаев способ регистрации  $\gamma$ -квантов (например, при резонансном детектировании).

## 5.1. Форма линии Фойгта

При сильной неоднородности в окружении мессбауэровских ядер в источнике (или поглотителе) положение линии излучения (или поглощения) лоренцевского профиля для одного ядра является случайной величиной.

Случайная величина, являющаяся результатом одновременного влияния большого числа случайных факторов, каждый из которых по своему воздействию не превышает заметным образом остальные, имеет нормальное (гауссовское) распределение:

$$W_G(x, \Gamma_G) = \frac{2}{\Gamma_G} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{\Gamma_G/2}\right)^2 \ln 2}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} W_G(x, \Gamma_G) dx = 1, \quad \Gamma_G - \text{ширина на } 1/2 \text{ высоты.}$$

С учетом (случайной) неоднородности окружения мессбауэровских ядер можно описать форму линий с помощью **функции Фойгта (Voigt function)**  $W_V(E, \Gamma_s)$  – интеграла свертки лоренцевской  $W_L(x)$  и гауссовской  $W_G(x)$  функций:

$$W_V(E, \nu, \Gamma_s) = \int_{-\infty}^{\infty} W_L(E - x, \nu, \Gamma_\tau) W_G(x, \Gamma_G^s) dx - \text{линия излучения источника.}$$

$$W_V(E, \nu_k^a, \Gamma_a) = \int_{-\infty}^{\infty} W_L(E - x, \nu_k^a, \Gamma_\tau) W_G(x, \Gamma_G^a) dx - \text{k-ая линия поглощения.}$$

При этом сечение резонансного поглощения равно:

$$\sigma_a(E) = \sigma_0 \alpha_a(E) = \sigma_0 \frac{\pi \Gamma_\tau}{2} \sum_{k=1}^{p_a} \beta_k^a W_V(E, \nu_k^a, \Gamma_a).$$

## 5.1. Форма линии Фойгта

**Огибающая мессбаэровского спектра** в случае достаточно тонкого образца при учете локальной неоднородности в источнике и поглотителе представляется в виде суперпозиции резонансных линий (компонент) спектра, форма которых описывается **функцией Фойгта**:

$$N(\nu) = N_\infty - N_\infty \chi f_s \sum t_a \int_0^\infty \alpha_a(E) W_s(E, \nu) dE = N_\infty - N_\infty \chi f_s \frac{\pi \Gamma_\tau}{2} \sum t_a \sum_{k=1}^{p_a} \beta_k^a W_V(\nu, \nu_k^a, \Gamma_{\text{exp}}).$$

При этом гауссовская компонента этой функции имеет ширину линии  $\Gamma_G$ , а лоренцевская компонента – ширину  $\Gamma_L$ :

$$\Gamma_L = 2\Gamma_\tau, \Gamma_G = \sqrt{(\Gamma_G^s)^2 + (\Gamma_G^a)^2} \left( \Phi(W_L(x, \Gamma_L)) = e^{-\frac{\Gamma_L}{2}|z|}, \Phi(W_G(x, \Gamma_G)) = e^{-\left(\frac{\Gamma_G}{2}\right)^2 \frac{x^2}{4 \ln 2}} \right);$$

(Фурье-образ интеграла свертки равен произведению Фурье-образов сворачиваемых функций).

Наиболее близкой к реальной форме линии в спектре является функция Фойгта.

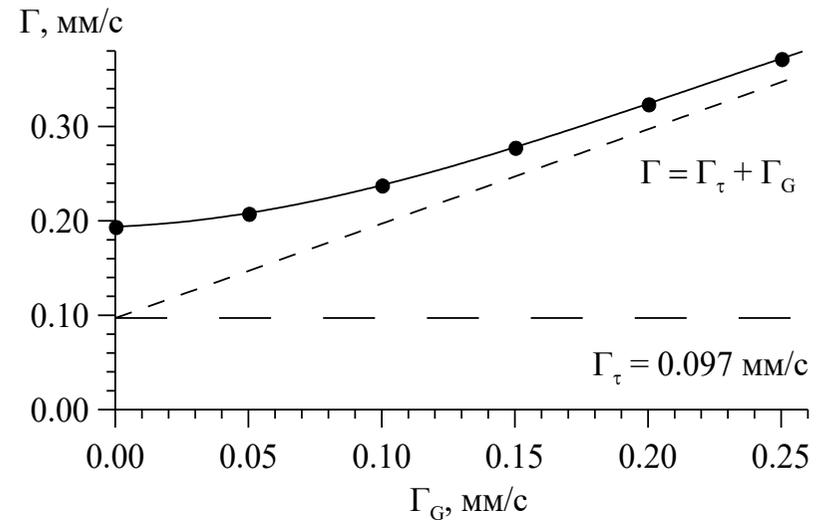
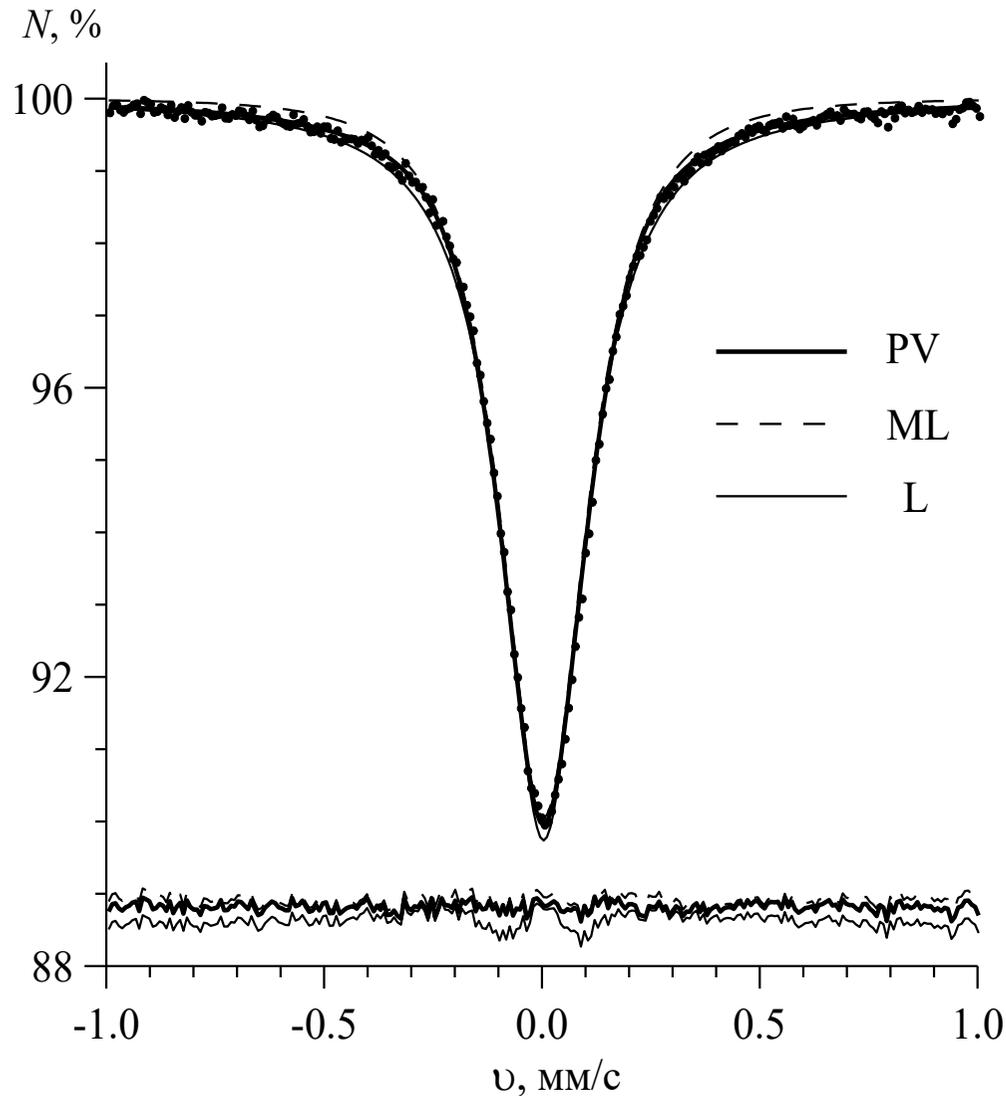
Наилучшим для использования приближением в случае симметричной формы реальной резонансной линии является **функция псевдо-Фойгта**:

$$W_{PV}(E, \Gamma) = (1 - \alpha) W_L(E, \Gamma_L) + \alpha W_G(E, \Gamma_G), \Gamma = \Gamma_L = \Gamma_G.$$

Для описания асимметричных резонансных линий, которые могут возникнуть при регистрации с помощью резонансного детектора, используется обычно **модифицированная функция Лоренца**:

$$W_{ML}(E, \Gamma) \sim \frac{1}{1 + \left(\frac{E-E_0}{\Gamma/2}\right)^2 + \alpha \left(\frac{E-E_0}{\Gamma/2}\right)^3 + \beta \left(\frac{E-E_0}{\Gamma/2}\right)^4}.$$

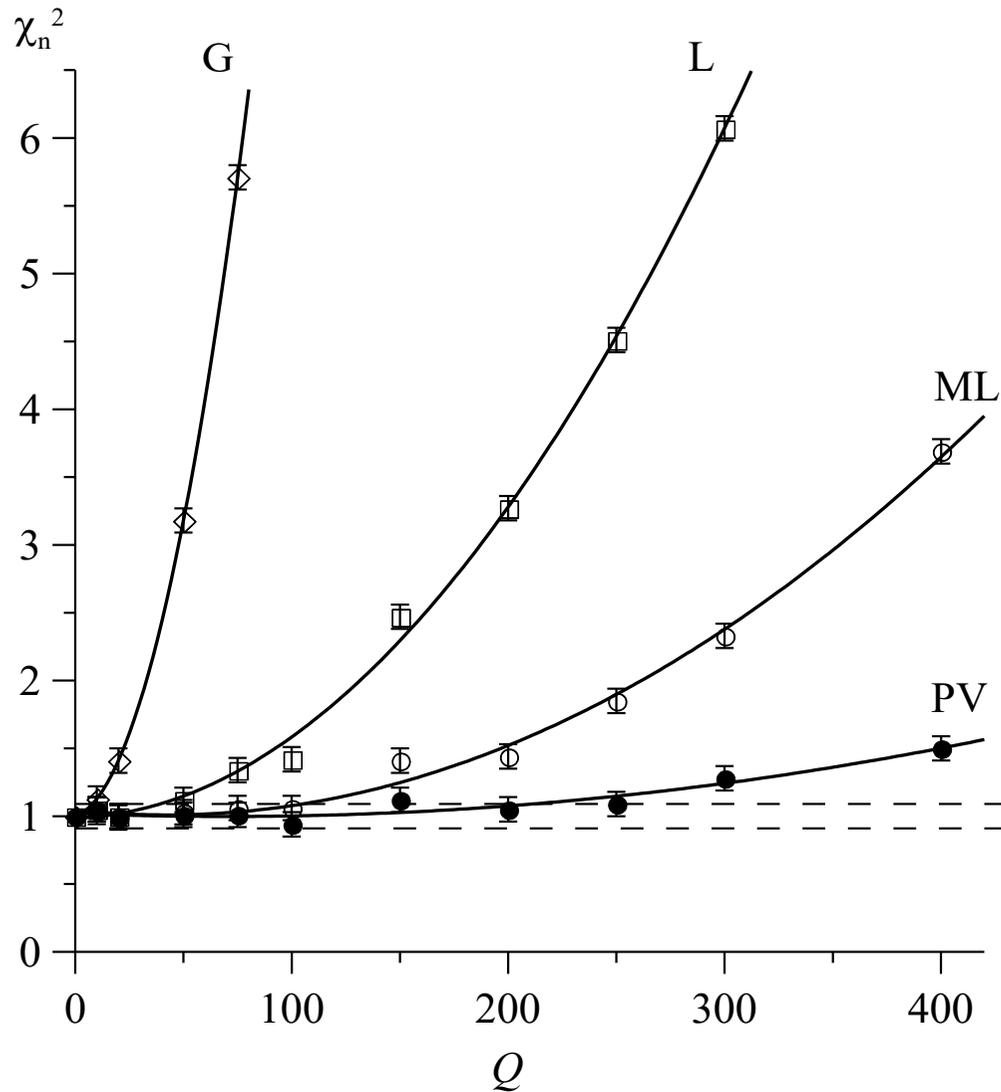
## 5.2. Анализ применения различных профилей резонансной линии



Зависимость ширины модельного спектра  $\Gamma$  от ширины гауссовской компоненты  $\Gamma_G$  (для ядер  $^{57}\text{Fe}$ ).

Результаты обработки модельного мессбауэровского спектра ядер  $^{57}\text{Fe}$  с качеством  $Q = \Delta N_{\text{max}}/S_{N_{\text{max}}} = 150$  и шириной  $\Gamma_G = 0.10 \text{ mm/s}$  при использовании различных форм резонансной линии.

## 5.2. Анализ применения различных профилей резонансной линии



Критерий согласия Пирсона (функционал "хи-квадрат"):

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left( \frac{N_i - \bar{N}_i}{S_{N_i}} \right)^2,$$

$$\overline{\chi^2} = n - m, S_{\chi^2} = \sqrt{2(n - m)},$$

$(n - m)$  – число степеней свободы,

$n$  – число каналов в спектре,

$m$  – число варьируемых параметров.

Нормированный функционал "хи-квадрат":

$$\chi_n^2 \equiv \frac{\chi^2}{\overline{\chi^2}} = \frac{\chi^2}{n - m},$$

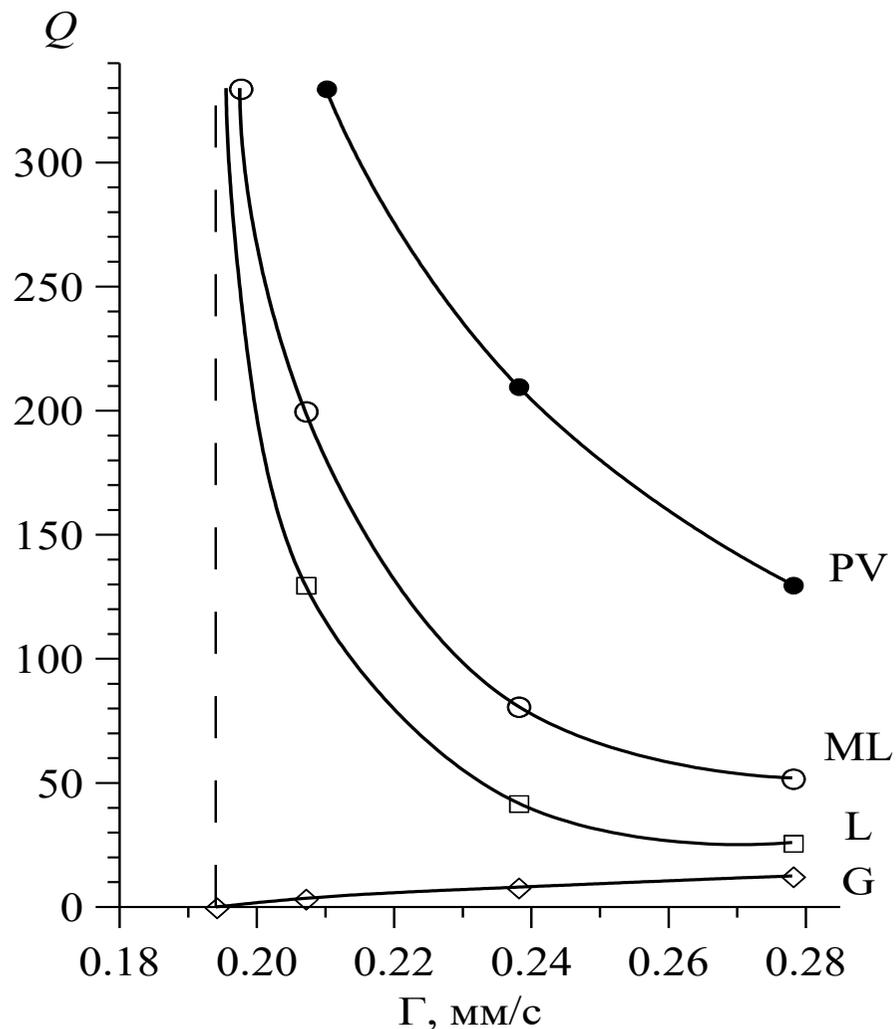
$$\overline{\chi_n^2} = 1, S_{\chi_n^2} = \sqrt{2/(n - m)}.$$

Зависимость нормированного значения "хи-квадрат"  $\chi_n^2$  от качества обрабатываемого спектра

$$Q = \Delta N_{\max} / S_{N_{\max}}$$

при  $\Gamma_G = 0.10$  мм/с.

## 5.2. Анализ применения различных профилей резонансной линии



**Область применимости формы резонансной линии** – область, ограниченная с одной стороны линией границы  $Q(\Gamma)$  для данной формы (профиля), а с другой – осью абсцисс (ширин  $\Gamma$ ).

Самой большой областью применимости обладает **функция псевдо-Фойгта**, далее, в порядке убывания размера области: модифицированная функция Лоренца, функция Лоренца и функция Гаусса.

Границы области применимости различных форм резонансной линии при обработке мессбауэровских спектров для изотопа  $^{57}\text{Fe}$ .

## §6. Самопоглощение в источнике

Интенсивность мессбауэровских резонансных  $\gamma$ -квантов с энергией  $E$  на поверхности источника с однородным распределением по глубине материнского изотопа:

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

$S_s$  – площадь активной поверхности источника,

$x_0$  – максимальная глубина внедрения материнских ядер в источнике,

$m(t) = m(0)e^{-t/T}$  – объемная концентрация материнских ядер ( $m(t \uparrow) \downarrow$ );

$T$  – среднее время жизни материнского ядра ( $T_{1/2} = \ln 2 \cdot T \cong 0.693 \cdot T$ ),

$\chi$  – доля  $\gamma$ -квантов с энергией мессбауэровского перехода,

$\alpha$  – коэффициент (внутренней) конверсии,

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

$\sigma_s(E) = \sigma_0 \alpha_s(E)$  – сечение резонансного поглощения мессб. ядер в источнике,

$t_s(t) = \sigma_0 f_s n_s(t)$  – эффективная толщина дочерних мессбауэровских ядер в источнике,

$n_s(t) = n(t)x_0$  – поверхностная концентрация дочерних мессб. ядер ( $n(t \uparrow) \uparrow$ ),

$n(t) = m(0) - m(t) = m(0)(1 - e^{-t/T})$  – объемная концентрация мессб. ядер,

$\mu$  – линейный коэффициент нерезонансного поглощения (и рассеяния).

Линия излучения источника может существенно изменить свою форму и эффективную ширину, особенно при большой начальной интенсивности ( $m(0)$ ) и со временем, когда число  $n(t)$  дочерних резонансных (мессбауэровских) ядер становится велико –  $t_s(t) > 1$ .

## §6. Самопоглощение в источнике

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

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

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

Если резонансное поглощение преобладает над нерезонансным –  $\mu x_0 \ll t_s(t)$  (в случае большой активности источников, предназначенных в основном для исследования резонансного рассеяния  $\gamma$ -квантов), тогда при одинаковой лоренцевской форме линий источника и поглотителя  $W_s(E) = \frac{2}{\pi \Gamma_s} \alpha_s(E)$ :

$$\begin{aligned} N(E, t) &= S_s x_0 \frac{m(t)}{T} \cdot \frac{\chi}{1+\alpha} f_s W_s(E) \frac{1-e^{-\alpha_s(E)t_s(t)-\mu x_0}}{\alpha_s(E)t_s(t)+\mu x_0} \cong \\ &\cong S_s x_0 \frac{m(t)}{T} \cdot \frac{\chi}{1+\alpha} f_s W_s(E) \frac{1-e^{-\alpha_s(E)t_s(t)}}{\alpha_s(E)t_s(t)} \cong \\ &\cong S_s x_0 \frac{m(t)}{T} \cdot \frac{\chi}{1+\alpha} f_s \frac{2}{\pi \Gamma_s} \cdot \frac{1-e^{-\alpha_s(E)t_s(t)}}{t_s(t)}, \quad (m(t \uparrow) \downarrow; t_s(t \uparrow) \uparrow). \end{aligned}$$

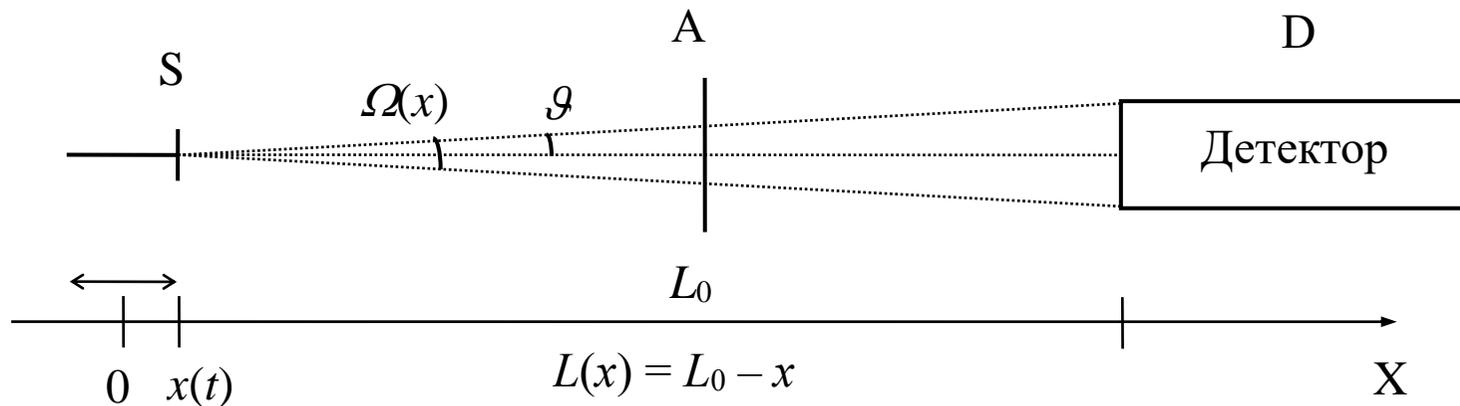
Искажение формы линии источника усиливается со временем, при этом ее ширина на половине ее высоты  $\Gamma_{sa}$  возрастает со временем по закону:

$$\Gamma_{sa} \cong \Gamma_s (1 + t_s(t)/4).$$

## §7. Геометрический эффект

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

**Влияние изменения угловой апертуры  $\Omega$  регистрируемого пучка** (коллимации пучка детектором при  $d_A \geq d_D$  и  $d_S \ll d_D$ ) (при  $d_A \leq d_D$  эффект определяется  $d_A$  и  $L_{SA}$ ).



Пусть  $d_D \ll L_0$  и  $x \ll L_0$ , тогда угловая апертура  $\Omega(x)$  регистрируемого потока  $\gamma$ -квантов:

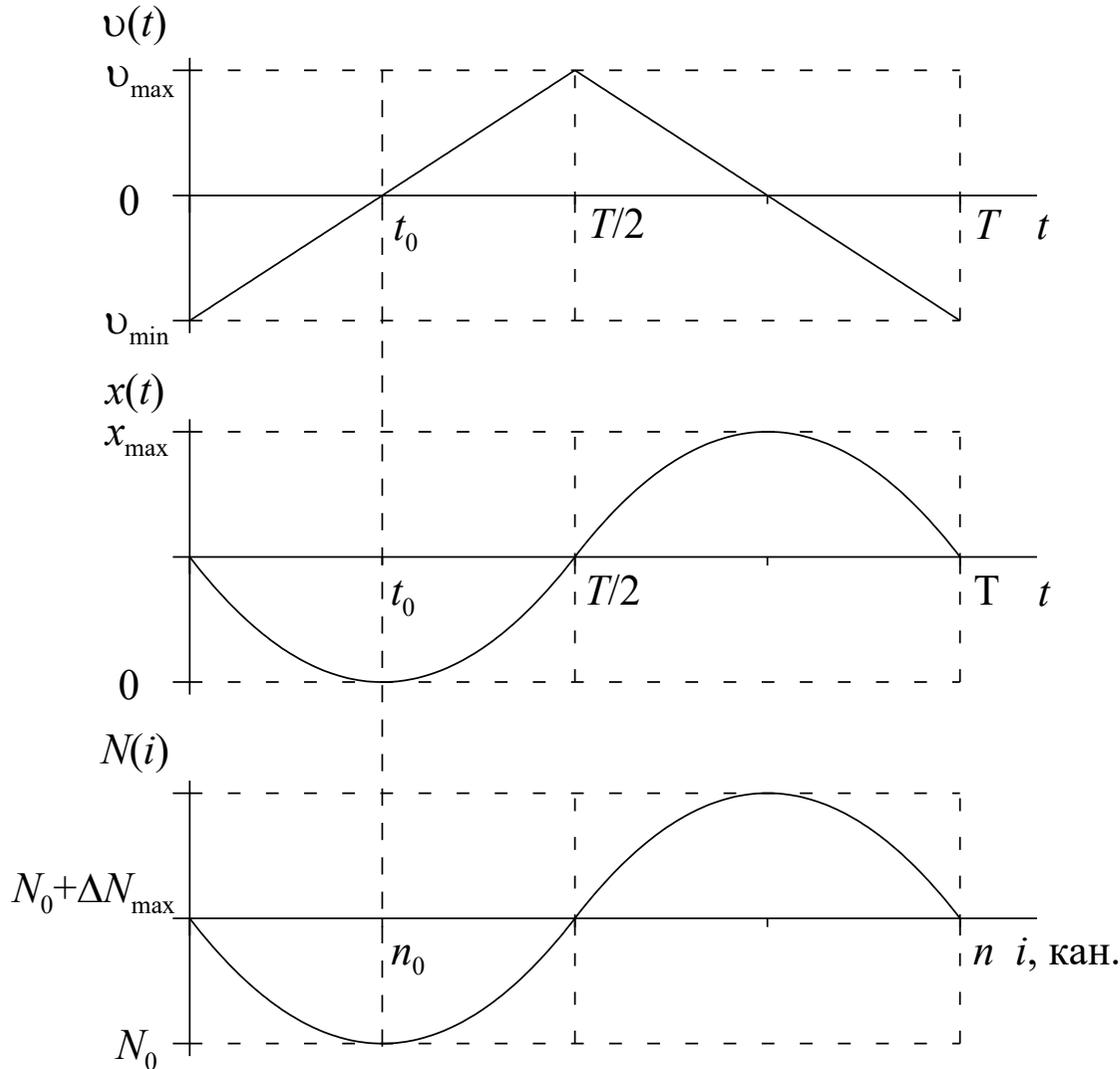
$$\Omega(x) \cong \frac{\pi d_D^2}{4L^2(x)} = \frac{\pi d_D^2}{4(L_0 - x)^2} = \frac{\pi d_D^2}{4L_0^2} \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{x}{L_0}\right)^2} \cong \frac{\pi d_D^2}{4L_0^2} \left(1 + \frac{2x}{L_0}\right) = \Omega_0 \left(1 + \frac{2x}{L_0}\right).$$

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

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

## §7. Геометрический эффект

При движении источника с постоянным ускорением  $a$  и треугольной формой временной зависимости скорости движения источника относительно поглотителя  $v(t)$  при  $t \leq T/2=2t_0$ :



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

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

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

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

$$\Delta N_{\max} = N_0 \alpha \left( \frac{\Delta v}{2} \right)^2 = N_0 \frac{T \Delta v}{8 L_0}.$$

## §7. Геометрический эффект

В результате геометрического эффекта экспериментальный мессбауэровский спектр будет **модулирован параболической функцией от доплеровской скорости  $\nu(t)$** .

**Оценим** величину геометрического эффекта и статистику, при которой им можно пренебречь. При  $\Delta\nu = 20$  мм/с,  $T = 0.1$  с и  $L_0 = 10$  см:

$$\Delta N_{\max} = N_0 \frac{T\Delta\nu}{8L_0} \leq S_{N_0} = \sqrt{N_0}, \quad N_0 \leq \left( \frac{8L_0}{T\Delta\nu} \right)^2 = \left( \frac{8 \cdot 0.1}{0.1 \cdot 20 \cdot 10^{-3}} \right)^2 = 160000 \text{ имп.}$$

При использовании треугольной формы временной зависимости скорости  $\nu(t)$  движения источника относительно поглотителя одновременно регистрируются два зеркально отображенных 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.

Геометрический эффект можно избежать также, если с доплеровской скоростью будет двигаться однородный поглотитель с достаточно большим диаметром (так, чтобы не модулировать угловую апертуру пучка  $\Omega(L_{SA})$ ).

### **Влияние угла вылета $\gamma$ -кванта.**

Поскольку из-за не равного нулю угла  $\vartheta$  вылета  $\gamma$ -кванта из источника его энергия равна  $E_\gamma(\nu) \cong E_0 + E_0 \frac{\nu}{c} \cos \vartheta$ , то будет наблюдаться смещение резонансных линий в область больших по абсолютной величине задаваемых значений доплеровской скорости  $\nu$  и асимметрия линий с их одновременным уширением.

## §8. Качество спектра и оптимизация эксперимента

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

Наиболее важные факторы, определяющие качество спектра:

- набранное число импульсов при расстройке резонанса  $N_\infty$  – статистика в спектре, определяет разрешение в спектре по интенсивности;
- число точек в спектре, приходящихся на резонансную линию, – линейная плотность точек в спектре, определяет разрешение в спектре по доплеровской скорости;
- исследуемый диапазон скоростей  $\Delta\nu$ , слишком узкий диапазон приводит к потере резонансных линий в спектре и/или потери точности определения базовой линии  $N_\infty$ ;
- геометрия эксперимента (геометрические эффекты)
- качество работы аппаратуры (отклонения от закона  $\nu(t)$ , шумы в электрон. части и др.).

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

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

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

$$Q(\nu) = \frac{N_\infty - N(\nu)}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_\infty - N(\nu)}{\chi N_\infty} \chi \sqrt{N_\infty} = \eta(\nu) \chi \sqrt{N_\infty} = \eta(\nu) \chi \sqrt{n_\infty} \sqrt{t} \sim \sqrt{t} \quad (\text{при } t \ll T_{1/2}).$$

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

## §8. Качество спектра и оптимизация эксперимента

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

**Выбор оптимальной толщины образца (при данной настройке спектрометра).**

Параметром  $K_{обр}$  для выбора оптимальной толщины образца (без учета т.н. "эффекта насыщения") может служить **максимальное качество спектра  $Q(\nu_{max})$**  – качество спектра при доплеровской скорости  $\nu_{max}$ , при которой видимая величина эффекта  $\Delta N(\nu_{max})$  максимальна при заданном времени съемки  $t$ :

$$\underline{K_{обр}} \equiv Q(\nu_{max}) = \frac{\Delta N(\nu_{max})}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_\infty - N(\nu_{max})}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{n_\infty - n(\nu_{max})}{\sqrt{n_\infty}} \sqrt{t}.$$

**Выбор оптимального режима работы спектрометра.**

Так как относительная величина эффекта  $\eta(\nu)$  зависит только от используемого источника и исследуемого образца, то параметром  $K_{апп}$ , характеризующим оптимальность настройки аппаратуры (выбора детектора, окна дискриминатора, коэффициента усиления, напряжения на фотоэлектронном умножителе и т.д.) может служить отношение качества спектра  $Q(\nu)$  к относительной величине эффекта  $\eta(\nu)$  при заданном времени съемки  $t$ :

$$\underline{K_{апп}} \equiv \frac{Q(\nu)}{\eta(\nu)} = \chi \sqrt{N_\infty} = \frac{\chi N_\infty}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_m}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{N_\infty - N_{nm}}{\sqrt{N_\infty}} = \frac{n_\infty - n_{nm}}{\sqrt{n_\infty}} \sqrt{t}.$$

## §8. Качество спектра и оптимизация эксперимента

### Сравнение эффективности работы различных мессбауэровских спектрометров.

Для этого достаточно сравнить параметры  $K_{\text{апп}}$  спектрометров или максимальные качества  $Q_{\text{max}}$  спектров одного и того же образца, получаемых на разных спектрометрах при одинаковом времени съемки  $t$ . Если же времена съемки разные, то достаточно сравнить для разных спектрометров величины  $K_{\text{апп}}/\sqrt{t}$  или  $Q_{\text{max}}/\sqrt{t}$ .

Для определения параметра  $K_{\text{апп}} = \frac{\chi N_{\infty}}{\sqrt{N_{\infty}}} = \frac{N_{\infty} - N_{\text{nm}}}{\sqrt{N_{\infty}}}$  необходимо знать: интенсивность счета в отсутствие резонанса  $N_{\infty}$  и интенсивность счета "не мессбауэровских"  $\gamma$ -квантов ( $\gamma$ -квантов с энергией не мессбауэровского перехода)  $N_{\text{nm}}$ .

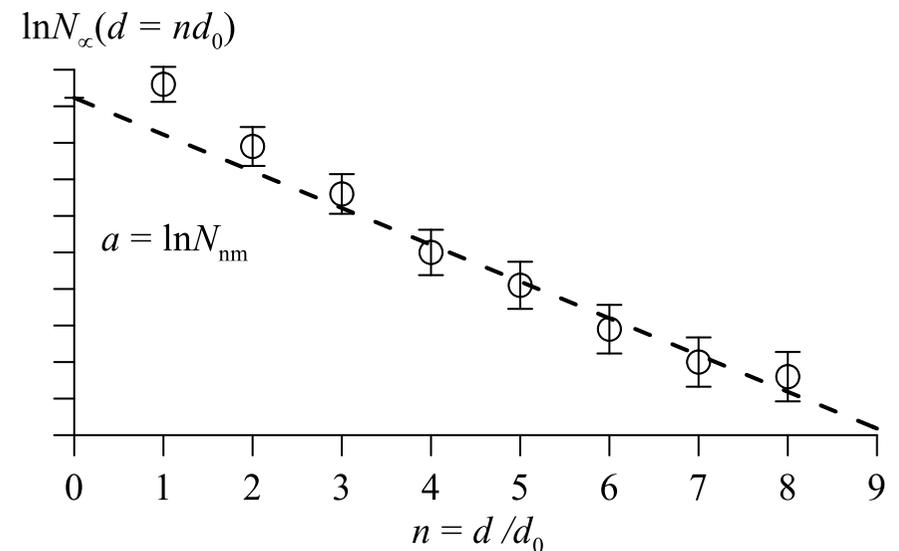
Для мессбауэровских ядер  $^{57}\text{Fe}$  проводится серия простых опытов с нерезонансными поглотителями различной толщины (например, наборами медных фольг одинаковой толщины  $d_0$ ).

При  $\mu_m \gg \mu_{\text{nm}}$ :

$$N_{\infty}(d) = N_m e^{-\mu_m d} + N_{\text{nm}} e^{-\mu_{\text{nm}} d} \cong N_{\text{nm}} e^{-\mu_{\text{nm}} d}.$$

$$\begin{aligned} \ln N_{\infty}(d) &\cong \ln N_{\text{nm}} - \mu_{\text{nm}} d = \alpha - \mu_{\text{nm}} d = \\ &= \alpha - \mu_{\text{nm}} d_0 n. \end{aligned}$$

$$N_{\text{nm}} = e^{\alpha}; K_{\text{апп}} = \frac{N_{\infty} - e^{\alpha}}{\sqrt{N_{\infty}}}.$$



## Массовые коэффициенты поглощения рентгеновского и $\gamma$ -излучения для некоторых химических элементов ( $\mu_m$ , см<sup>2</sup>/г)

Порядковый номер	Химический элемент	Энергия фотонов, E, кэВ				
		1,24	5	12,4	49,6	124
1	H	13,7	0,62	0,45	0,36	0,29
6	C	1100	14,0	1,40	0,186	0,142
7	N	1800	30,5	2,20	0,195	0,144
8	O	2600	45,5	3,20	0,206	0,145
11	Na	5300	132	8,80	0,287	0,150
12	Mg	340	185	11,7	0,330	0,152
13	Al	520	235	15,2	0,380	0,155
14	Si	740	290	18,2	0,442	0,159
17	Cl	1700	430	29,7	0,667	0,176
19	K	2350	540	40	0,86	0,191
20	Ca	2800	625	48	0,98	0,200
24	Cr	4100	136	80,5	1,60	0,241
25	Mn	4350	148	90	1,79	0,253
26	<u>Fe</u>	4700	162	100	2,02	0,265
28	Ni	5600	193	121	2,51	0,303
29	<u>Cu</u>	6000	212	130	2,79	0,328
30	Zn	6400	227	141	3,07	0,35
42	Mo	3650	544	54,8	7,50	0,79
50	Sn	5900	940	84	11,3	1,20
82	Pb	4100	900	75	9,2	3,41
92	U	4820	755	101	13,1	3,91

## Оценка физических величин

**Оценка** доли  $\rho$  испущенных после резонансного поглощения  $\gamma$ -квантов, которая регистрируется детектором с диаметром окна  $d_D$ :

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

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

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

$$S_{N(\nu_{\text{max}})} = \sqrt{N(\nu_{\text{max}})} = \sqrt{N_\infty - \Delta N(\nu_{\text{max}})} = \sqrt{N_\infty - \eta_{\text{max}} \chi N_\infty} = \sqrt{N_\infty (1 - \eta_{\text{max}} \chi)},$$

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

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