

VILNIAUS UNIVERSITETAS
Fizikos fakultetas
Atomo ir branduolio fizikos laboratorija
FIZIKOS INSTITUTAS

Laboratoriniai darbai Nr. 19a – 19d

**Branduolio sužadintosios būsenos trukmės matavimas ir
hipersmulkiųjų sąveikų tyrimas Mesbauerio spektrometru**

Darbas Nr. 19a

Branduolio sužadintosios būsenos trukmės matavimas

Darbas Nr. 19b

Izomerinio poslinkio tyrimas

Darbas Nr. 19c

Magnetinės dipolinės hipersmulkiosios sandaros tyrimas

Darbas Nr. 19d

Elektrinės kvadrupolinės hipersmulkiosios sandaros tyrimas

Parengė A. Poškus

2010-02-02

Turinys

| | |
|--|-----------|
| Užduotys..... | 2 |
| Kontroliniai klausimai | 2 |
| 1. Mesbauerio spektroskopijos fizikiniai pagrindai | 4 |
| 1.1. Rezonanso sąvoka. Natūralusis linijos plotis | 4 |
| 1.2. Laisvo atomo atatranks energija. Spektro linijos Doplerio išplitimas | 5 |
| 1.3. Atomo atatranks energija kristale | 9 |
| 1.4. Mesbauerio spektrometro veikimo principas | 13 |
| 2. Branduolio sukinys ir elektromagnetiniai momentai..... | 18 |
| 2.1. Branduolio sukinys..... | 18 |
| 2.2. Branduolio magnetinis dipolinis momentas..... | 19 |
| 2.3. Branduolio elektrinis kvadrupolinis momentas | 23 |
| 3. Branduolio γ spinduliuotės ir sugerties spektrų hipersmulkių sandara | 26 |
| 3.1. Izomerinis poslinkis..... | 26 |
| 3.2. Magnetinė dipolinė hipersmulkių sandara | 29 |
| 3.2.1. Branduolio energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke | 29 |
| 3.2.2. Branduolio kvantinių šuolių tikimybės per laiko vienetą | 31 |
| 3.2.3. Branduolio magnetinio momento ir efektyvio magnetinio lauko tyrimas Mesbauerio spektrometru | 33 |
| 3.3. Elektrinė kvadrupolinė hipersmulkių sandara | 35 |
| 4. Tyrimo metodika | 38 |
| 4.1. Prietaisų aprašymas | 38 |
| 4.2. Impulsų amplitudžių spektro pavidalas. „Smilės išpjovimo“ sąvoka | 38 |
| 4.3. Matavimų tvarka..... | 40 |
| 4.4. Matavimo duomenų analizė | 46 |
| 4.4.1. Galutinio Mesbauerio spektro sudarymas iš dviejų "veidrodinių" spektrų | 46 |
| 4.4.2. Mesbauerio smailių parametrų skaičiavimas | 46 |
| 4.4.3. Mesbauerio spektrometro kalibravimas | 49 |
| 4.4.4. Greičių, linijų pločių ir hipersmulkiųjų sąveikų parametrų skaičiavimas | 50 |
| Literatūra..... | 51 |

Užduotys

Užduotys, kurios bendros darbams Nr.19a ÷ 19d:

1. Registruojant radioaktyviojo ^{57}Co šaltinio amplitudžių spektrą, išpjauti 14.4 keV liniją.
2. Tarp detektoriaus ir šaltinio patalpinti tiriamąjį sugėriklį (Fe_2O_3 sluoksni) ir maždaug 20 min. matuoti Mesbauerio spektrą.
3. Tarp detektoriaus ir šaltinio patalpinti Fe sugėriklį, kurio Mesbauerio spektro linijų Doplerio greičiai yra žinomi, ir išmatuoti Mesbauerio spektrą spektrometro kalibravimui.
4. Kalibravimo ir tiriamąjį Mesbauerio spektrus išsaugoti elektroniniu pavidalu.
5. Rasti kalibravimo ir tiriamojo spektrų smailių parametrus.
6. Rasti sąryšį tarp Mesbauerio spektrometro kanalo numerio ir šaltinio greičio.

Darbas Nr.19a:

Išmatuoti Mesbauerio spektro linijų pločius ir apskaičiuoti ^{57}Fe branduolio pirmosios sužadintosios būsenos gyvavimo trukmę.

Darbas Nr.19b:

Apskaičiuoti izomerinį poslinkį.

Darbas Nr.19c:

Apskaičiuoti sužadintojo ^{57}Fe branduolio magnetinį momentą ir jį veikiančią efektinę magnetinę indukciją.

Darbas Nr.19d:

Apskaičiuoti branduolio energijos lygmenų kvadrupolinio skilimo energiją.

Kontroliniai klausimai

Klausimai, kurie bendri darbams Nr. 19a ÷ 19d:

1. γ kvantų rezonansinės emisijos ir sugerties sąvoka. Kodėl atomų spinduliuotės rezonansinė emisija ir sugertis dujose yra įmanoma, o branduolių γ spinduliuotės rezonansinė emisija ir sugertis dujose yra praktiškai neįmanoma?
2. Kas lemia branduolio γ spinduliuotės spektro natūralųjį linijos plotį? Lorencio skirstinio formulė ir grafikas. Tipiški natūralieji linijos pločiai.
3. Energijos ir impulso tvermės dėsniai, kai branduolys išspinduliuoja arba sugeria γ kvantą (lygtys ir vektorinė diagrama impulso tvermės dėsnio aiškinimui). Atatrankos energijos sąvoka. Branduolio atatrankos energijos bendrosios išraiškos išvedimas.
4. Doplerinis linijos plotis (apibrėžtis ir išraiškos išvedimas). Doplerinio pločio tipiškos vertės.
5. Emisijos spektro linijos poslinkis atžvilgiu sugerties spektro linijos (su išvedimu). Šio poslinkio tipiškos vertės.
6. Atomų judėjimo kietajame kūne ir dujose skirtumai (atomų virpesių energijos diskretumas). Fonono sąvoka. Kietojo kūno Einšteino modelis.
7. Apytikslė befononės γ emisijos tikimybės išraiška Einšteino modelyje. Pagrindiniai veiksniai, nuo kurių priklauso befononio vyksmo tikimybė.

8. Mesbauerio reiškinių sąvoka. Mesbauerio spektrometro veikimo principas. Dviejų "veidrodinių" spektrų sąvoka. Kodėl vienas iš dažniausiai naudojamų šaltinių Mesbauerio spektroskopijoje yra ^{57}Fe ? Radioaktyviojo skilimo $^{57}\text{Co} \rightarrow ^{57}\text{Fe}$ schema.

Klausimai darbui Nr. 19a:

9. Sąryšis tarp Mesbauerio spektro smailės linijos integralo, pločio ir aukščio.
10. Branduolio spinduliuotės spektro linijos natūraliojo pločio išraiška Mesbauerio spektro smailės pločiu.

Klausimai darbui Nr. 19b:

9. Branduolio matmenų įtaka atomo elektrono potencinei energijai.
10. Izomerinio poslinkio sąvoka, jo išraiška branduolio ir atomo parametrais.
11. Valentinio elektrono prisijungimo arba netekimo įtaka izomeriniam poslinkiui (pavyzdžiai).

Klausimai darbui Nr. 19c:

9. Branduolio sukinio sąvoka; jo kvantinės savybės.
10. Magnetinio dipolinio momento sąvoka; jo kvantinės savybės. Branduolinis magnetonas ir Boro magnetonas; g daugiklio sąvoka. Kodėl branduolių magnetinės savybės pasireiškia žymiai silpniau, negu atomų?
11. Branduolio energijos lygmenų skilimo magnetiniame lauke aiškinimas.
12. Branduolio γ sugerties spektro magnetinė dipolinė hipersmulkioji sandara (leistiniai bei draustiniai kvantiniai šuoliai).
13. Būsenų su $I = 3/2$ ir $I = 1/2$ magnetinių momentų santykio išraiška Mesbauerio spektro smailių greičiais (išvedimas).
14. Efektinės magnetinės indukcijos išraiška Mesbauerio spektro kraštinių smailių greičių skirtumu (išvedimas).

Klausimai darbui Nr. 19d:

9. Branduolio sukinio sąvoka; jo kvantinės savybės.
10. Kodėl branduolio elektrinis dipolinis momentas lygus nuliui?
11. Branduolio elektrinio kvadrupolinio momento sąvoka ir jo ryšys su branduolio forma.
12. Įrodyti, kad branduolio elektrinio kvadrupolinio momento sąveikos su išoriniu elektriniu lauku energija yra proporcinga to lauko stiprio gradientui branduolio centre.
13. Elektrinė kvadrupolinė hipersmulkioji sandara. Kvadrupolinės sąveikos parametras.
14. Elektrinės kvadrupolinės sąveikos įtaka Mesbauerio spektro linijų išsidėstymui, kai branduolio energijos lygmenys yra skilę dėl magnetinės dipolinės sąveikos.

1. Mesbauerio spektroskopijos fizikiniai pagrindai

1.1. Rezonanso sąvoka. Natūralusis linijos plotis

Mesbauerio reiškiny – tai rezonansinė γ kvantų emisija ir sugertis. Čia terminas „rezonansinė“ reiškia, kad išspinduliuoto, o po to sugerto, fotono energija lygi branduolio kvantinio šuolio energijai, t.y., branduolio energijos lygmenų skirtumui.

Šviesos rezonansinė emisija ir sugertis atominėse sistemose žinoma jau daugiau kaip šimtą metų. Šio reiškinio tikslų aprašymą pateikia kvantinė mechanika. Kvantinės mechanikos požiūriu, šviesos spinduliuotė ir sugertis – tai kvantinių šuolių tarp atomo energijos lygmenų pasekmė. Atomų spinduliuotės spektrų linijų dažniai ν ir bangos ilgiai λ susiję su atomų kvantinių šuolių energijom E pagal formulę

$$E = h\nu = \hbar\omega = h\frac{c}{\lambda}; \quad (1.1.1)$$

čia $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ J·s yra Planko konstanta, $\hbar = h/(2\pi)$ yra redukuotoji Planko konstanta, o $c = 2.998 \cdot 10^8$ m/s yra šviesos greitis. Atomas gali sugerti tik tuos fotonus, kurių energijos yra lygios kvantinių šuolių energijoms.

Bendrais bruožais, branduolių γ kvantų rezonansinė emisija ir sugertis yra analogiška atomų šviesos rezonansinei emisijai ir sugerčiai: skirtumas yra tik tas, kad fotonai spinduliuojami ir sugeriami ne dėl kvantinių šuolių tarp atomo energijos lygmenų, o dėl kvantinių šuolių tarp branduolio energijos lygmenų. Tačiau fotonų, kuriuos spinduliuoja branduoliai, energija yra žymiai didesnė už infraraudonosios, regimosios ir ultravioletinės šviesos fotonų, kuriuos spinduliuoja atomai, energiją. Tai reiškia, kad branduolio atatrunkos energija, kai branduolys išspinduliuoja arba sugeria γ kvantą, yra žymiai didesnė už atomo atatrunkos energiją, kai atomas išspinduliuoja arba sugeria, pvz., regimosios šviesos fotoną. Atatrunka pasireiškia tuo, kad γ kvanto, kurį išspinduliuavo branduolys, energija yra mažesnė už kvantinio šuolio energiją, o γ kvanto, kurį branduolys gali sugerti, energija yra didesnė už kvantinio šuolio energiją. Jeigu šis energijų skirtumas tampa didesnis už spinduliuotės ir sugerties spektrų linijos pločius, tuomet rezonansas tampa neįmanomas. Regimosios šviesos atveju atomo atatrunkos energija visuomet yra mažesnė už linijos plotį, todėl rezonansas yra įmanomas.

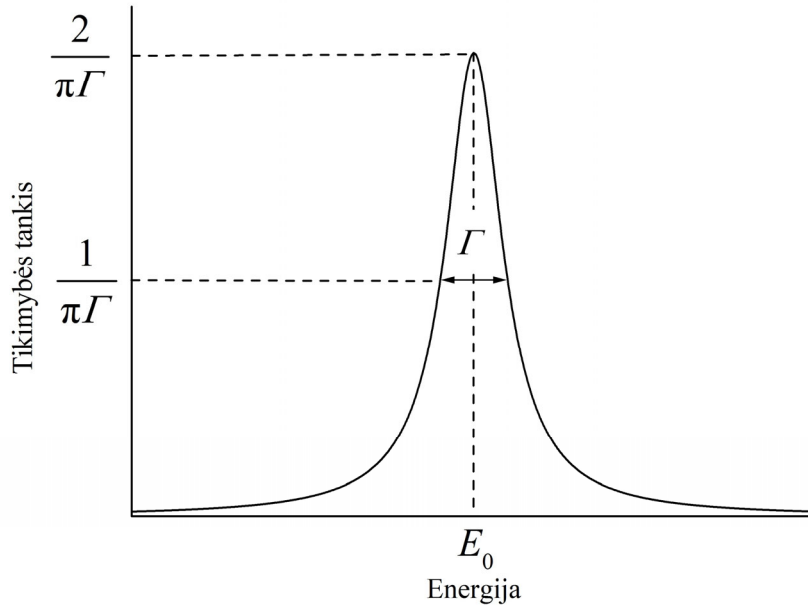
Čia reikėtų išsiaiškinti "spektrų linijos pločio" sąvoką. Linijos plotis atspindi fotonų energijos neapibrėžtumą. Yra keletas veiksnių, kurie gali sąlygoti tokį neapibrėžtumą. Vienas iš jų yra tas, kad atomo (arba branduolio) sužadintųjų būsenų energijos nėra tiksliai apibrėžtos. Vaizdžiai kalbant, sužadintieji energijos lygmenys yra "išplitę". Šį "išplitimą" tiksliai nusako atomo energijos tikimybės tankis $P(E)$. Šį tikimybės tankį galima apskaičiuoti, laikant, kad duotosios sužadintosios būsenos atomų skaičius N mažėja laike eksponentiškai, su laiko konstanta τ , kuri nusako tos būsenos gyvavimo trukmę (t.y., $N = N_0 \exp(-t/\tau)$). Tuomet gaunama, kad tikimybė aptikti atomą energijos intervale nuo E iki $E + dE$ yra lygi

$$P(E)dE = \frac{2\Gamma}{\pi} \cdot \frac{1}{4(E - E_0)^2 + \Gamma^2} dE; \quad (1.1.2)$$

čia konstanta Γ yra lygi

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}, \quad (1.1.3)$$

o E_0 yra energijos pasiskirstymo centroidė. Tikimybės tankio funkcija $P(E)$ pavaizduota 1.1 pav. Tokio pavidalo skirstinys, kurį nusako (1.1.2) formulė, vadinamas **Lorenco skirstiniu** arba **Breito ir Vignerio skirstiniu**. Matome, kad dydžio Γ prasmė – tai energijos pasiskirstymo plotis pusės maksimumo lygyje, kai sistema yra būsenos E_0 . Dydis Γ yra energijos neapibrėžtumo matas. Iš (1.1.3) išplaukia, kad energijos neapibrėžtumas yra atvirkščiai proporcingas duotosios būsenos gyvavimo trukmei: kuo nestabilesnė būsena, tuo



1.1 pav. Energijos pasiskirstymas dėl kvantinės būsenos nenuostovumo.

platesnis jos energijos pasiskirstymas. Kadangi pagrindinė (mažiausios energijos) būsena yra absoliučiai stabili, tai pagrindinės būsenos energija yra apibrėžta absoliučiai tiksliai ($\Gamma = 0$). Dydis Γ vadinamas **energijos lygmens pločiu**.

Kadangi energijos lygmenys yra išplitę, tai fotonų, kurie spinduliuojami, vykstant kvantiniams šuoliams tarp tų lygmenų, energijos taip pat nėra tiksliai apibrėžtos. T.y., fotonų energiją taip pat galima apibūdinti tam tikru energijos skirstiniu. Jeigu vienintelė fotonų energijos neapibrėžtumo priežastis yra baigtinė sužadintųjų energijos lygmenų gyvavimo trukmė, tuomet fotonų energijos pasiskirstymo plotis pusės maksimumo lygyje vadinamas **natūraliuoju linijos pločiu**. Jeigu galutinė būsena yra stabili, tuomet fotonų energijos pasiskirstymas yra tokios pačios formos ir tokio paties pločio, kaip pradinio lygmens energijos pasiskirstymas. Taigi, šiuo atveju natūralusis linijos plotis yra lygus sužadintojo energijos lygmens pločiui. Bendresniu atveju, kai kvantinis šuolis vyksta tarp dviejų nestabiliųjų būsenų, kurių pločiai yra Γ_1 ir Γ_2 , natūralusis linijos plotis lygus abiejų būsenų pločių sumai:

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2. \quad (1.1.4)$$

Sužadintųjų branduolių gyvavimo trukmės dažniausiai yra tarp 10^{-13} s ir 10^{-6} s. Atitinkamas natūralusis linijos plotis (1.1.3) yra tarp 10^{-10} ir 10^{-2} eV. Kaip bus parodyta 1.2 poskyryje, gama spinduliuotės atveju branduolio vidutinė atitransacijos energija yra didesnė už 10^2 eV. Todėl dujose γ spinduliuotės rezonansinės emisijos ir sugerties tikimybė yra labai maža.

Jeigu branduoliai, kurie spinduliuoja ir sugeria γ kvantus, yra kietojo kūno sudėtyje, tuomet tam tikromis sąlygomis (maža γ kvantų energija, stiprus atomų cheminis ryšys kristalo gardelėje, žema temperatūra) atitransacijos energija gali tapti praktiškai tiksliai lygi nuliui. Tokiu atveju tampa įmanoma γ kvantų rezonansinė emisija ir sugertis. Šį reiškinį 1957 m. atrado vokiečių fizikas Rudolfas Mesbaueris. Todėl γ kvantų rezonansinė emisija ir sugertis vadinama Mesbauerio reiškiniu.

Norint suprasti Mesbauerio reiškinių fizikinę esmę ir jo reikšmę, reikia žinoti, kokie veiksniai lemia branduolio spinduliuojamų arba sugeriamų fotonų energijų nuokrypio nuo kvantinio šuolio energijos dydį. Todėl, prieš aprašant patį Mesbauerio reiškinį, 1.2 ir 1.3 poskyriuose bus aprašyti γ spinduliuotės linijų išplitimas ir poslinkis.

1.2. Laisvo atomo atitransacijos energija. Spektro linijos Doplerio išplitimas

Tarkime, ω dažnio fotoną išspinduliuoja laisvas branduolys, kurio masė m , pradinė energija E_0 , o pradinis impulso vektorius \mathbf{p}_0 . Branduolio energiją ir impulsą po fotonų

išspinduliavimo žymėsime atitinkamai E_1 ir \mathbf{p}_1 , o fotono energiją ir impulsą – E_2 ir \mathbf{p}_2 (vektorinius dydžius žymėsime storu šriftu, o skaliarinius – kursyvu). Į natūralųjį linijos išplitimą neatsižvelgsime (t.y., laikysime, kad kvantinio šuolio energija yra tiksliai apibrėžta). Tuomet energijos ir impulso tvermės dėsniai yra tokio pavidalo:

$$\begin{cases} \frac{p_0^2}{2m} + \hbar\omega_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \hbar\omega, & (1.2.1a) \\ \mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2. & (1.2.1b) \end{cases}$$

Čia $\hbar\omega_0$ yra branduolio energijos lygmenų, tarp kurių vyksta šuolis, skirtumas, t.y., fotono energija branduolio atskaitos sistemoje. Fotono impulsas susijęs su jo bangos vektoriumi \mathbf{k} sąryšiu

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (1.2.2)$$

Fotono bangos skaičius k (bangos vektoriaus modulis) susijęs su bangos ilgiu λ sąryšiu

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (1.2.3)$$

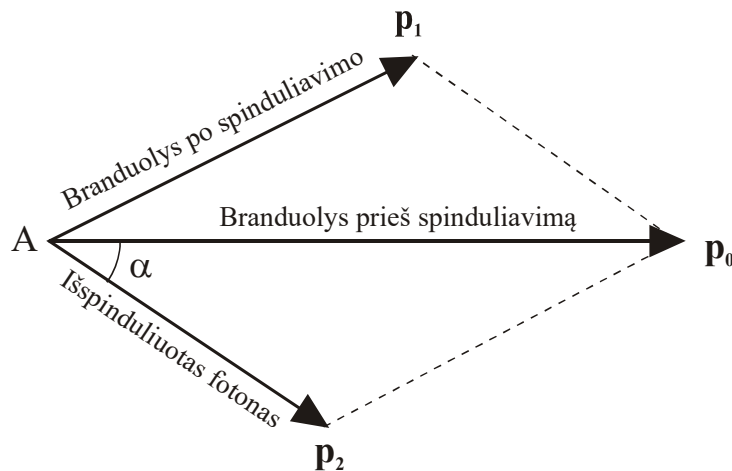
Impulso tvermės dėsnį iliustruoja 1.2 pav. Iš impulso tvermės dėsnio (1.2.1b) išplaukia, kad branduolio kinetinės energijos pokytis lygus

$$E_{\text{at}} \equiv \frac{p_1^2 - p_0^2}{2m} = \frac{1}{2m} [p_2^2 - 2(\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{p}_2)] \equiv \frac{p_2^2}{2m} - \frac{1}{m} p_0 p_2 \cos \alpha, \quad (1.2.4)$$

kur α yra kampas tarp pradinės branduolio judėjimo krypties ir γ kvanto krypties (žr. 1.2 pav.). Šis pokytis vadinamas branduolio *atatranks energija*. Iš energijos tvermės dėsnio (1.2.1a) išplaukia, kad fotono energijų skirtumas laboratorinėje ir branduolio atskaitos sistemose lygus atatranks energijai su minuso ženklu:

$$\hbar\omega - \hbar\omega_0 = -E_{\text{at}}. \quad (1.2.5)$$

Lygtys (1.2.1) ÷ (1.2.5) galioja ir tuo atveju, kai branduolys sugeria fotoną. Tačiau tuomet pradiniu branduolio impulsu reikia laikyti \mathbf{p}_1 , o galutiniu – \mathbf{p}_0 . Vadinasi, kai branduolys, kurio impulsas lygus \mathbf{p}_1 , sugeria fotoną, kurio impulsas \mathbf{p}_2 , o energija $\hbar\omega$, branduolio kinetinės energijos pokytis lygus $-E_{\text{at}}$. Čia E_{at} išreiškiamas ta pačia formule, kaip ir emisijos atveju, t.y., (1.2.4). Pvz., jeigu nejudantis branduolys išspinduliavimo fotoną ir įgijo impulsą \mathbf{p}_1 (t.y., jo kinetinė energija padidėjo dydžiu $p_1^2/2m$), tuomet tą fotoną galėtų sugerti kitas toks pats branduolys, kuris turi tokį patį impulsą \mathbf{p}_1 , ir po sugerties tas branduolys sustotų (t.y., jo kinetinė energija sumažėtų dydžiu $p_1^2/2m$).



1.2 pav. Impulso tvermės dėsnis, kai branduolys, kurio impulsas \mathbf{p}_0 , emituoja fotoną su impulsu \mathbf{p}_2 . Branduolio impulsas po emisijos yra \mathbf{p}_1 .

Fotono impulso \mathbf{p}_2 modulis lygus

$$p_2 = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad (1.2.6)$$

kur c yra šviesos greitis, o branduolio pradinio impulso modulis lygus

$$p_0 = mv_0, \quad (1.2.7)$$

kur v_0 yra branduolio pradinis greitis. Įrašę šias p_2 ir p_0 išraiškas į atatranksos energijos išraišką (1.2.4), randame

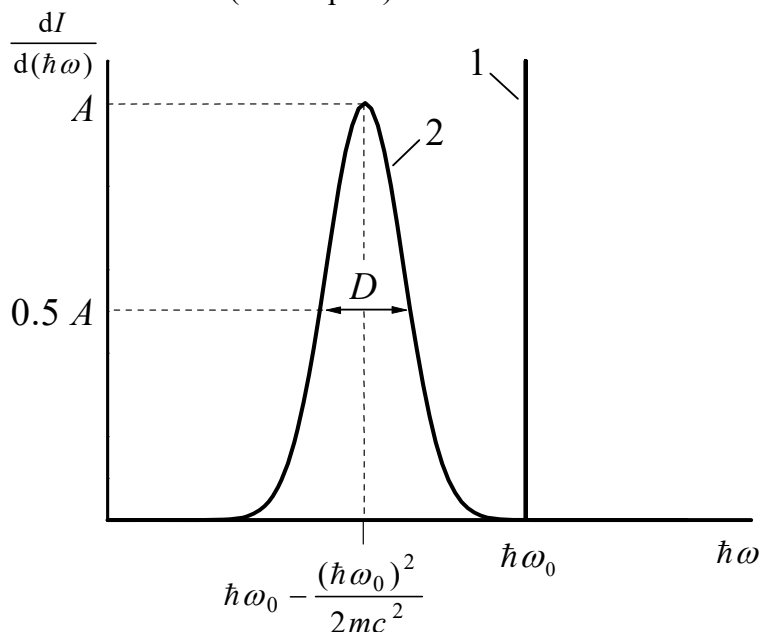
$$E_{\text{at}} = \frac{(\hbar\omega)^2}{2mc^2} - \frac{v_0}{c} \hbar\omega \cos \alpha. \quad (1.2.8)$$

Kaip bus parodyta žemiau, atatranksos energija E_{at} yra keliomis eilėmis mažesnė už $\hbar\omega_0$, t.y., santykinis fotono energijos pokytis dėl atatranksos ($E_{\text{at}}/\hbar\omega_0$) yra labai mažas. Todėl (1.2.8) formulėje dydį $\hbar\omega$ galima pakeisti dydžiu $\hbar\omega_0$:

$$E_{\text{at}} = \frac{(\hbar\omega_0)^2}{2mc^2} - \frac{v_0}{c} \hbar\omega_0 \cos \alpha. \quad (1.2.9)$$

Kaip matome, fotono energijos sumažėjimas sudarytas iš dviejų dėmenų: pirmasis dėmuo priklauso tik nuo branduolio masės m , o antrasis – tik nuo jo greičio. Pastarasis dėmuo nusako **Doplerio poslinkį**, t.y., fotono energijos pokytį, kuris atsiranda dėl spinduliuotės šaltinio judėjimo atžvilgiu stebėtojo. Tuo atveju, kai pirmasis dėmuo yra žymiai mažesnis už antrąjį (t.y., kai šaltinio masė m yra pakankamai didelė), fotono energijos pokytį sąlygoja tik Doplerio poslinkis.

Tarkime, kad duotasis atomas yra dujų sudėtyje. Dujų spinduliuotės spektras – tai atskirų atomų branduolių spinduliuotės spektrų suma. Dujų atomai nuolat chaotiškai juda, todėl skirtingi dujų atomai duotuoju momentu turi skirtingus greičius. Todėl skiriasi ir antrasis dėmuo spinduliuojančių atomų atatranksos energijos išraiškoje (1.2.9). Tai reiškia, kad šalia natūralaus spektro linijos išplitimo, kuri sąlygoja branduolio energijos lygmenų neapibrėžtumas, egzistuoja **Doplerio linijos išplitimas**, kuri sąlygoja skirtingų atomų greičių skirtumas spinduliuavimo momentu (žr. 1.3 pav.).



1.3 pav. Dujų atomų atatranksos ir jų šiluminio judėjimo įtaka spinduliuojamų fotonų energijos spektrui. 1 – natūralaus pločio linija, 2 – pasislinkusi dėl atatranksos linija, kuri išplitusi dėl atomų šiluminio judėjimo ir Doplerio reiškinio. $\hbar\omega_0$ – kvantinio šuolio energija. D yra Doplerio linijos plotis. Ordinačių ašyje atidėtas spinduliuotės intensyvumo spektrinis tankis, t.y., spinduliuotės galia, kuri tenka vienetiniam fotono energijų intervalui.

Kadangi visos atomo judėjimo kryptys yra vienodai tikėtinos, tai atatranks energijos (1.2.9) antrojo dėmens vidutinė algebrinė vertė lygi nuliui. Taigi, vidutinė atatranks energijos vertė lygi pirmajam dėmeniui:

$$\langle E_{\text{at}} \rangle = \frac{(\hbar\omega_0)^2}{2mc^2}. \quad (1.2.10)$$

Šis dėmuo nusako spinduliuotės spektro linijos poslinkį (kvantinio šuolio energijos $\hbar\omega_0$ atžvilgiu) į mažesniųjų energijų pusę dėl atatranks (žr. 1.3 pav.). Atitinkama sugerties spektro linija lygiai tokiu pačiu atstumu pasislenka į didesniųjų energijų pusę. Vadinasi, dėl branduolio atatranks sugerties ir emisijos linijų padėtyms spektre nesutampa (žr. 1.4 pav.). Dažnai "atatranks energija" vadinamas dydis (1.2.10), o ne dydis (1.2.9).

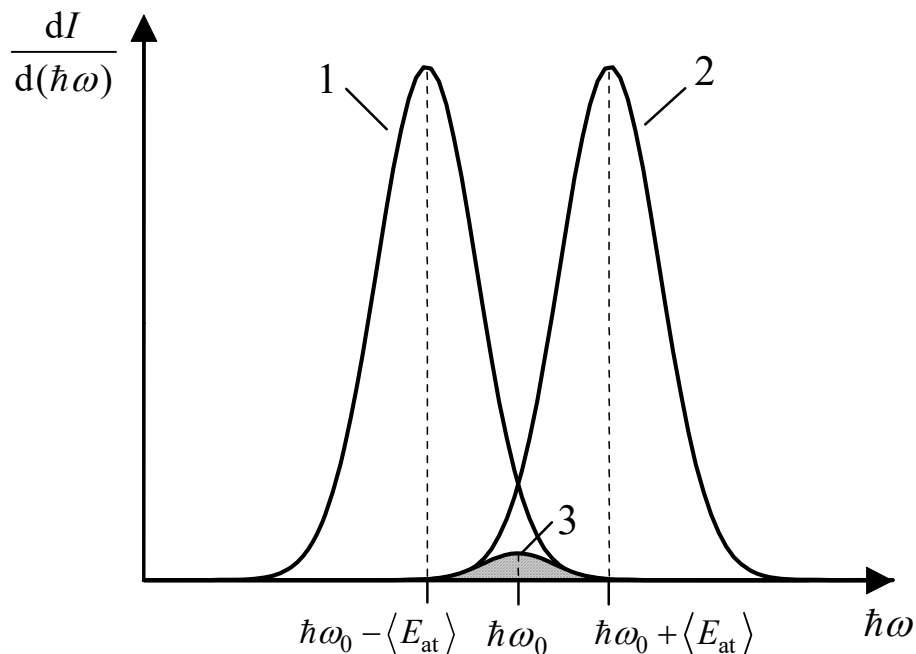
Rasime Doplerio išplitimo dydį. Tarkime, kad registruojami tik tie fotonai, kurie spinduliuojami X kryptimi. Atomų, kurie spinduliuoja šiuos fotonus, atatranks energijos išraišką (1.2.9) galima užrašyti šitaip:

$$E_{\text{at}} = \frac{(\hbar\omega_0)^2}{2mc^2} - \frac{v_x}{c} \hbar\omega_0. \quad (1.2.11)$$

Čia v_x yra atomo pradinio greičio projekcija į X kryptį. Kadangi E_{at} yra proporcinga v_x , tai atatranks energijos statistinio skirstinio pavidalą nusako dydžio v_x statistinis skirstinys, t.y., Maksvelio skirstinio funkcija:

$$f(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right); \quad (1.2.12)$$

čia k yra Bolcmano konstanta ($k = 1.38 \cdot 10^{23}$ J/kg), o T yra absoliučioji temperatūra. Tai yra Gauso skirstinys, kurio standartinis nuokrypis lygus $\sqrt{\frac{kT}{m}}$. Šio skirstinio plotis D matuojamas pusės maksimumo aukštyje (žr. 1.3 pav.). Tuomet D gaunamas, dauginant standartinį nuokrypį iš 2.35. Taigi, atatranks energijos išraiškos (1.2.11) antrojo dėmens statistinio skirstinio plotis lygus



1.4 pav. Sugerties spektro linijos poslinkis atžvilgiu spinduliuotės spektro linijos dėl atatranks. 1 – spinduliuotės spektro linija, 2 – sugerties spektro linija, 3 – funkcijų 1 ir 2 sandauga, kuri proporcinga fotono sugerties tikimybės energiniam tankiui. $\hbar\omega_0$ – kvantinio šuolio energija,

$$\langle E_{\text{at}} \rangle = \frac{(\hbar\omega_0)^2}{2mc^2} - \text{vidutinė atatranks energija.}$$

$$D = 2.35 \sqrt{\frac{kT}{m} \frac{\hbar \omega_0}{c}}. \quad (1.2.13)$$

Šis dydis nusako spektro linijos Doplerio išplitimą.

Esant tipiškomis branduolio masės vertėms (m yra $(10 \div 100)m_n$ eilės, kur m_n yra nukleono masė), kambario temperatūroje ($T = 300$ K) Doplerio linijos išplitimas yra $10^{-6} \cdot \hbar \omega_0$ eilės. Kadangi $\hbar \omega_0$ dažniausiai yra $10 \div 1000$ keV eilės, tai Doplerio išplitimas yra $0.01 \div 1$ eV eilės, t.y., keliomis eilėmis didesnis už natūralųjį linijos plotį (žr. 1.3 pav.).

Doplerio išplitimas lemia branduolių γ spinduliuotės spektro matavimų energinę skyrą. Taigi, dėl Doplerio išplitimo neįmanoma tirti šių spektrų smulkiosios sandaros: visos spektro linijos, kurios nutolusios viena nuo kitos mažiau negu per $0.01 - 1$ eV, susilieja į vieną plačią liniją.

Atstumas tarp emisijos ir sugerties spektro linijų lygus $2\langle E_{at} \rangle = \frac{(\hbar \omega_0)^2}{mc^2}$. Kai $\hbar \omega_0 = 100$ keV, o $m = 100m_n$, sugerties linijos poslinkis atžvilgiu emisijos linijos yra $2\langle E_{at} \rangle \approx 0.1$ eV, t.y., tos pačios eilės, kaip ir Doplerio linijos plotis D . Vadinasi, jeigu γ kvantus emituoja ir sugeria tos pačios rūšies branduoliai, tuomet tik maža dalis emituotų fotonų gali būti sugerti (žr. 1.4 pav.).

1.3. Atomo atatranks energija kristale

Kaip parodyta 1.2 poskyryje, dujų atomo γ spinduliuotės emisijos ir sugerties linija yra pasislinkusi dėl atatranks ir išplitusi dėl šiluminio judėjimo. Jeigu atomas yra kristalo gardelės sudėtyje, tuomet atatranks ir šiluminio judėjimo įtaka emisijos ir sugerties spektrui priklauso nuo atatranks energijos dydžio. Jeigu atomo atatranks energija yra didesnė už atomo cheminio ryšio energiją ($15 \div 30$ eV), tuomet γ kvanto spinduliuotės arba sugerties metu atomas bus „išmuštas“ iš savo pusiausvrios padėties ir jo spektras bus tokio paties pavidalo, kaip ir laisvo atomo atveju. Jeigu atatranks energija yra nepakankama cheminiam ryšiui nutraukti, tuomet γ kvantą išspinduliuavusio arba sugėrusio atomo atatranks impulsas perduodamas gretimoms atomams, su kuriais duotasis atomas susijęs cheminiu ryšiu. Šių atomų virpesiai, savo ruožtu, perduodami jų artimiausiems kaimynams, ir t.t. Tokiu būdu atatranks energija virsta daugelio atomų kolektyvinių virpesių energija ir pasireiškia kristalo temperatūros padidėjimu.

Ši kolektyvinį atomų judėjimą galima išreikšti skirtingo dažnio normaliųjų virpesių suma. **Normalusis virpesys** arba **normalioji moda** – tai toks kristalo atomų judėjimas, kai visi atomai harmoningai virpa vienodu dažniu ω_v (indeksas „v“ nurodo, kad turimas omenyje virpesių, o ne fotonų, dažnis). Normalieji virpesiai yra diferencialinių judėjimo lygčių (Lagranžo lygčių) atskirieji sprendiniai. Jų skaičius lygus kristalo laisvės laipsnių skaičiui, t.y., trigubam kristalo atomų skaičiui $3N$. Pakankamai aukštoje temperatūroje būna sužadinti visi $3N$ normaliųjų virpesių. Kaip žinoma iš kvantinės mechanikos, harmoninio osciliatoriaus (pvz., normaliojo virpesio), kurio dažnis ω_v , energija E_v gali kisti tik diskrečiai – $\hbar \omega_v$ dydžio kvantais:

$$E_v = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_v \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (1.3.1)$$

Kiekvieną normalųjį virpesį, savo ruožtu, galima išreikšti to paties dažnio įvairių kryptų plokščių mechaninės deformacijos bangų (garso bangų) suma. Kiekvienos tokios bangos energija išreiškiama (1.3.1) formule. Aprašant šių bangų sąveiką su elektronais, jas galima laikyti dalelėmis, kurių energija $\hbar \omega_v$, o judesio kiekis $\hbar k$; čia k yra bangos skaičius ($k = 2\pi/\lambda$, kur λ yra bangos ilgis). P.vz., tokia kvazidalelė gali sklaidyti laisvuosius elektronus (šio vyksmo metu galioja dviejų dalelių sistemos energijos ir impulso tvermės dėsnis). Šios kvazidalelės vadinamos **fononais**. Fonono energija – tai atitinkamo normaliojo virpesio

energijos kvantas $\hbar\omega_v$. Dydis n (1.3.1) formulėje nusako duotosios rūšies fononų skaičių (t.y., duotojo dažnio ir bangos vektoriaus fononų skaičių). Kristalo virpesių energija lygi visų kristale egzistuojančių fononų energijų sumai.

Taigi, atatrunkos energijos perdavimo kristalui procesą galima aprašyti šitaip: dėl atomo atatrunkos kristale padidėja kurios nors rūšies fononų skaičius. Atatrunkos energija virsta atsiradusių fononų energija.

Kietojo kūno modelis, kuris aprašo gardelės virpesius kaip esančių "dėžėje" fononų rinkinį, – tai vadinamasis **Debajaus modelis**. Pagal Debajaus modelį, egzistuoja tam tikras didžiausias fonono dažnis $(\omega_v)_{\max}$. Šį didžiausiąjį fononų dažnį įprasta nusakyti vadinamąja **Debajaus temperatūra** T_D , kuri apibrėžiama šitaip:

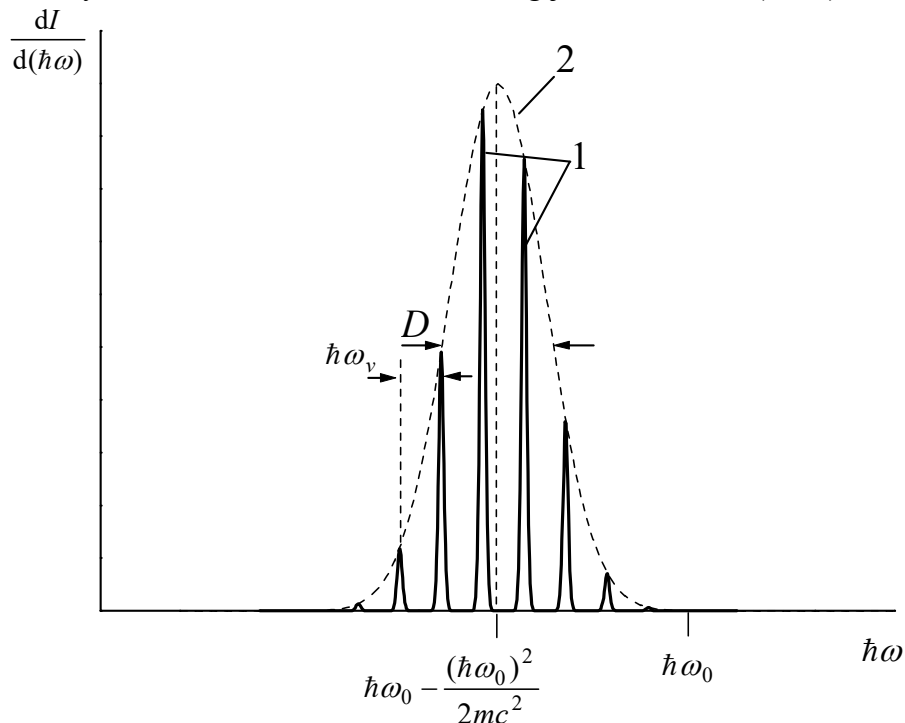
$$\hbar(\omega_v)_{\max} = kT_D. \quad (1.3.2)$$

Tipiška kietojo kūno Debajaus temperatūros vertė – keli šimtai kelvinų (pvz., geležies $T_D = 464$ K, silicio $T_D = 640$ K, deimanto $T_D = 2200$ K, švino $T_D = 96$ K).

Nors fononų sąvoka leidžia teisingai aprašyti daugelį kietojo kūno savybių (pvz., šiluminės talpos priklausomybę nuo temperatūros), tačiau spinduliuojamų ir sugeriamų γ kvantų energijos spektro, kai atomas yra kristalo gardelės sudėtyje, pagrindines ypatybes galima paaiškinti, ir nenaudojant fonono sąvokos – pagal vadinamąjį **Einšteino modelį**. Pagal šį modelį visi N atomų, iš kurių sudarytas monoatominis kristalas, virpa vienodu pastoviu cikliniu dažniu ω_v . Tuomet i -tojo atomo nuokrypis nuo pusiausvyros padėties aprašomas trim harmoninėm laiko funkcijom (po vieną – kiekvienai Dekarto koordinatei):

$$\begin{cases} x_i(t) = x_{i0} \cos(\omega_v t + \varphi_{ix}), \\ y_i(t) = y_{i0} \cos(\omega_v t + \varphi_{iy}), \\ z_i(t) = z_{i0} \cos(\omega_v t + \varphi_{iz}). \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (1.3.3)$$

Taigi, pagal šį modelį kristalas – tai $3N$ vienodo dažnio nepriklausomų vienmačių harmoninių osciliatorių rinkinys. Kiekvieno osciliatoriaus energija išreiškiama (1.3.1) formule. Todėl



1.5 pav. Kristalo atomo γ spinduliuotės energijos spektras pagal kietojo kūno Einšteino modelį. $\hbar\omega_0$ – kvantinio šuolio energija. $\hbar\omega_v$ – atomų virpesių energijos kvantas. 1 – spektro linijos, atitinkančios kristalo energijos padidėjimą dydžiais $4\hbar\omega_v$ ir $5\hbar\omega_v$ (žr. $\hbar\omega_0$ padėtį). 2 – spektro gaubtinė, kuri yra to paties pavidalo, kaip ir tų pačių atomų dujų spinduliuotės spektras toje pačioje temperatūroje (plg. su 1.3 pav. 2 kreive).

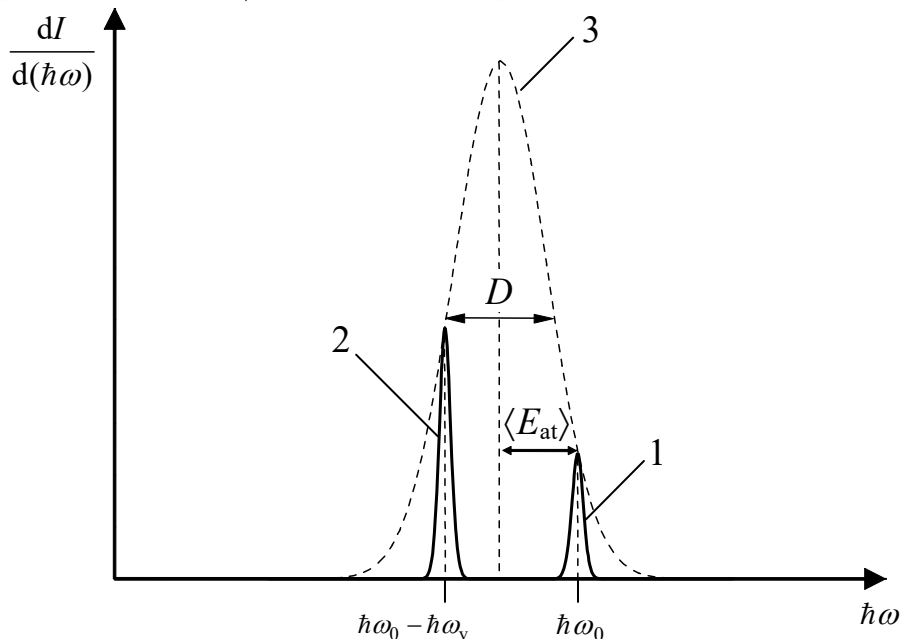
kristalo energijos pokytis dėl atitransos gali būti lygus tik sveikam osciliatoriaus energijos kvantų $\hbar\omega_v$ skaičiui. Pagal energijos tvermės dėsnį (1.2.5), tas pats teiginys galioja ir spinduliuojamų arba sugeriamų γ kvantų energijos pokyčiui, lyginant su kvantinio šuolio energija $\hbar\omega_0$. Vadinasi, pagal Einšteino modelį, kristalo atomo γ spinduliuotės energijos spektras sudarytas iš linijų, kurios atskirtos $\hbar\omega_v$ dydžio tarpais (žr. 1.5 pav.). Vidutinis atomų virpesių ciklinis dažnis kristaluose yra 10^{13} s^{-1} eilės. T.y., $\hbar\omega_v$ yra 0.01 eV eilės. Didėjant atomų cheminio ryšio stiprumui, $\hbar\omega_v$ auga. Tai galima suprasti, naudojant analogiją su spyruoklės virpesiais: didėjant spyruoklės standumui, jos virpesių dažnis didėja.

Tikslūs teoriniai skaičiavimai rodo, kad *vidutinė* kristalo atomų atitransos energija yra lygi laisvojo atomo vidutinei atitransos energijai (1.2.10). T.y., kvantinio šuolio metu spinduliuojamo γ kvanto energijos statistinis vidurkis, kaip ir laisvo atomo atveju, išreiškiamas formule

$$\langle \hbar\omega \rangle = \hbar\omega_0 - \langle E_{\text{at}} \rangle = \hbar\omega_0 - \frac{(\hbar\omega_0)^2}{2mc^2}, \quad (1.3.4)$$

kur m yra atomo masė. Be to, kristalo atomo spinduliuojamo γ kvanto energijos dispersija lygi tų pačių atomų dujų spinduliuotės energijos dispersijai, kurią sąlygoja atomų šiluminis judėjimas. Vadinasi, pilnutinis spinduliuotės spektro plotis yra toks pats, kaip ir dujų atveju, t.y., nusakomas (1.2.13) formule. Kai spektras yra diskretus, o linijų plotis yra vienodas, pilnutinį spektro plotį nusako jo gaubtinės plotis (žr. 1.5 pav.).

Vidutinė atitransos energija $\langle E_{\text{at}} \rangle$ yra proporcinga $(\hbar\omega_0)^2$ (žr. (1.2.10)), o Doplerio išplitimas D proporcingas $\hbar\omega_0$ (žr. (1.2.13)). Todėl, esant pakankamai mažai kvantinio šuolio energijai $\hbar\omega_0$, dydžių $\langle E_{\text{at}} \rangle$ ir D vertės gali pasidaryti tos pačios eilės, kaip virpesių energijos kvantas $\hbar\omega_v$ (t.y., 0.01 eV eilės), arba mažesnės. Pvz., tai galioja nuklido Fe^{57} γ spinduliuotės spektro 14.4 keV energijos linijai kambario temperatūroje: šiuo atveju $\langle E_{\text{at}} \rangle \approx 0.004 \text{ eV}$, o $D \approx 0.01 \text{ eV}$. Tuomet daugumoje γ kvanto spinduliuavimo arba sugerties įvykių gardelės energijos pokytis lygus $\hbar\omega_v$ arba 0 (žr. 1.6 pav.). T.y., įvykių, kuriuose atsiranda arba



1.6 pav. Kristalo atomo γ spinduliuotės energijos spektras pagal kietojo kūno Einšteino teoriją, kai vidutinė atitransos energija $\langle E_{\text{at}} \rangle$ ir Doplerio išplitimas D yra mažesni už atomų virpesių energijos kvantą $\hbar\omega_v$. $\hbar\omega_0$ – kvantinio šuolio energija. 1 – spektro linija, atitinkanti befononį procesą, 2 – spektro linija, atitinkanti vieno fonono atsiradimą, 3 – kreivė, kuri proporcinga tų pačių atomų dujų spinduliuotės spektrui toje pačioje temperatūroje.

išnyksta daugiau negu vienas fononas (daugiafononių vyksmų) tikimybė yra žymiai mažesnė už vienfononių ir befononių vyksmų tikimybę. Pastaruoju atveju – kai spinduliavimo arba sugerties metu fononų skaičius nepakinta – atatrunkos energija yra praktiškai tiksliai lygi nuliui (nes atatrunką patiria kristalas kaip visuma), o spinduliuojamo arba sugeriamo γ kvanto energija praktiškai tiksliai lygi kvantinio šuolio energijai $\hbar\omega_0$.

Laikant, kad γ kvantų spinduliavimo metu atsiranda vienas fononas arba fononų skaičius nepakinta, vidutinę spinduliuojamų γ kvantų energiją galima išreikšti šitaip:

$$\langle \hbar\omega \rangle = f \cdot \hbar\omega_0 + (1-f) \cdot (\hbar\omega_0 - \hbar\omega_v) = \hbar\omega_0 - (1-f) \cdot \hbar\omega_v. \quad (1.3.5)$$

Čia f yra befononio vyksmo tikimybė, o $1-f$ yra vieno fonono atsiradimo tikimybė, išspinduliuojant γ kvantą. Įrašę $\langle \hbar\omega \rangle$ išraišką (1.3.4) į (1.3.5), randame

$$f = 1 - \frac{\langle E_{at} \rangle}{\hbar\omega_v}. \quad (1.3.6)$$

Ši formulė apytiksliai aprašo befononio vyksmo tikimybės priklausomybę nuo vidutinės atatrunkos energijos ir vidutinio fononų dažnio (t.y., nuo atomų cheminio ryšio stiprumo): mažėjant vidutinei atatrunkos energijai $\langle E_{at} \rangle$ ir augant fononų dažniui ω_v , befononio vyksmo tikimybė auga. $\langle E_{at} \rangle$ yra tuo mažesnė, kuo didesnis γ spinduliuotės bangos ilgis (žr. (1.2.10) formulę), o ω_v yra tuo didesnis, kuo mažesnė atomų šiluminių virpesių amplitudė.

Fononinių vyksmų tikimybė auga (t.y., befononių vyksmų tikimybė mažėja), kylant temperatūrai, t.y., didėjant fononų skaičiui. (1.3.6) formulė galioja tik ribiniu žemų temperatūrų atveju, kai vidutinė harmoninio osciliatoriaus kvantinio skaičiaus n vertė (žr. osciliatoriaus energijos išraišką (1.3.1)) yra artima nuliui. Tikslioji befononio vyksmo tikimybės, spinduliuojant arba sugeriant γ kvantą, išraiška yra šitokia:

$$f = \exp(-4\pi^2 \langle x^2 \rangle / \lambda^2). \quad (1.3.7)$$

Čia $\langle x^2 \rangle$ yra atomo nuokrypio nuo pusiausvyros padėties projekcijos į γ spinduliavimo kryptį kvadrato vidurkis, o λ yra γ spinduliuotės bangos ilgis. Kylant temperatūrai, $\langle x^2 \rangle$ auga, todėl f mažėja.

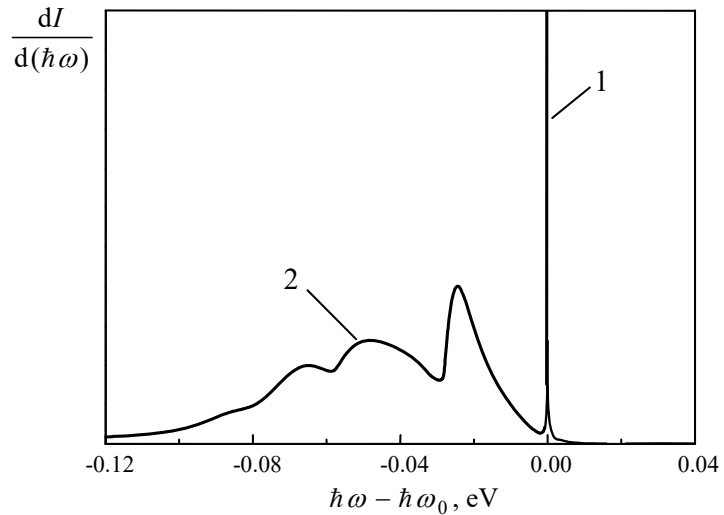
Taigi, pagrindiniai veiksniai, nuo kurių priklauso befononio vyksmo tikimybė, kristalo atomui spinduliuojant arba sugeriant γ kvantą, yra šie:

- 1) Kvantinio šuolio energija $\hbar\omega_0$, kuri lemia vidutinę atatrunkos energiją $\langle E_{at} \rangle$. Befononio vyksmo tikimybė auga, mažėjant šuolio energijai (t.y., mažėjant $\langle E_{at} \rangle$).
- 2) Atomo cheminio ryšio gardelėje stiprumas, kuris lemia didžiausią fononų dažnį, t.y., Debajaus temperatūrą (žr. (1.3.2)). Befononio vyksmo tikimybė auga, didėjant ryšio stiprumui (t.y., augant Debajaus temperatūrai).
- 3) Aplinkos temperatūra, kuri lemia fononų skaičių kristale. Befononio vyksmo tikimybė auga, mažėjant aplinkos temperatūrai (t.y., mažėjant fononų skaičiui).

Realiųjų kristalų γ spinduliuotės spektro pavidalas skiriasi nuo to, kuris gaunamas pagal kietojo kūno Einšteino modelį. Pagrindiniai skirtumai yra šie:

- a) Realiųjų kristalų fononų energijos spektras yra tolydus, todėl visos fononinės linijos susilieja į vieną plačią juostą (žr. 1.7 pav.). Dėl šios priežasties, kai befononio vyksmo tikimybė yra maža (kaip 1.5 pav.), kietojo kūno γ spinduliuotės spektras yra panašus į dujų γ spinduliuotės spektrą (žr. 1.3 pav. 2 kreivę).
- b) Befononės spektro linijos plotis sutampa su natūraliuoju linijos pločiu, kurį sąlygoja lygmenų energijos neapibrėžtumas (žr. 1.1 poskyrį). Šis plotis yra žymiai mažesnis už fononinio spektro plotį (žr. 1.7 pav.). Todėl tuo atveju, kai befononio vyksmo tikimybė siekia bent kelis procentus (kaip 1.6 pav.), befononio maksimumo amplitudė daugelį kartų viršija fononinių linijų amplitudes (žr. 1.7 pav.). Taip yra todėl, kad befononio vyksmo tikimybė yra lygi *ploto* po šia linija ir ploto po visu spektru santykiui.

1.7 pav. Metalinės būsenos ^{191}Ir branduolių, γ spinduliuotės teorinis spektras žemoje temperatūroje. $\hbar\omega_0$ – kvantinio šuolio energija (129 keV). 1 – befononis maksimumas, 2 – fononinė spektro dalis. Befononės linijos plotas lygus 5.7 % viso spektro ploto.

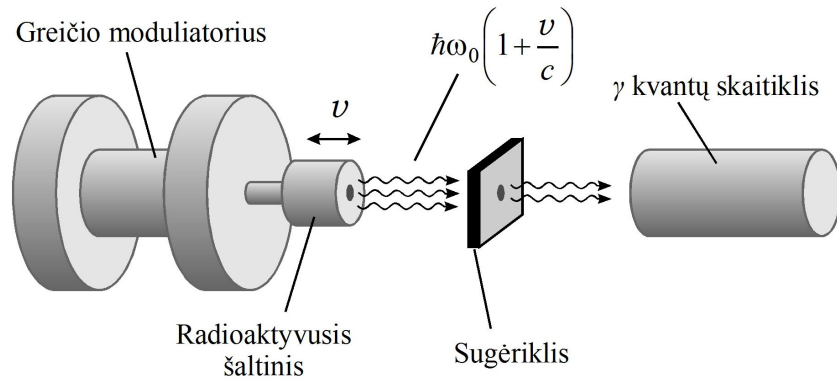


1.4. Mesbauerio spektrometro veikimo principas

1.3 poskyryje buvo aprašyta befononė γ kvantų emisija, kurios esmė yra ta, kad atatrunkos energija perduodama ne atskiram atomui, o visam kristalui. Dėl šios priežasties atatrunkos energija yra praktiškai lygi nuliui, ir yra spinduliuojama natūralaus pločio nepasislinkusi linija. Tie patys samprotavimai galioja ir atvirkštiniam vyksmui – γ kvantų sugerčiai. T.y., kai atomai yra kristalo sudėtyje, galima realizuoti tokį vyksmą, kai branduoliai sugeria γ kvantus be atatrunkos. Tokiu atveju γ kvantų sugertis vyksta tik tuomet, kai krintančiųjų γ kvantų energija yra tiksliai lygi kvantiniame šuolyje dalyvaujančių energijos lygmenų skirtumui. Aišku, kad tai įmanoma tik tuomet, kai spinduliuotė sugeria tos pačios rūšies branduoliai, kurie ją spinduliuoja (nes skirtingų branduolių kvantinių šuolių energijos yra skirtingos). Vadinasi, norint pasiekti rezonansinę γ kvantų sugertį, reikia naudoti sugėriklį, kuriame yra tos pačios rūšies branduolių, kaip ir radioaktyviajame šaltinyje.

Tokia γ kvantų sugertis ir emisija, kai atatrunkos energija lygi nuliui, vadinama **Mesbauerio reiškiniu**. Kitais žodžiais, Mesbauerio reiškiny – tai befononė rezonansinė γ kvantų emisija ir sugertis. Svarbiausia rezonansinės γ spinduliuotės be atatrunkos ypatybė yra mažas befononės linijos plotis. Jis sutampa su natūraliuoju linijos pločiu Γ . Šis dydis nusako Mesbauerio spektrometrų energinę skyrą, t.y., siauriausią sugerties spektro sritį, kurią įmanoma ištirti spektrometru. Pagal (1.1.3) formulę, natūralųjį linijos plotį lemia branduolio sužadintosios būsenos gyvavimo trukmė τ . Mesbauerio spektroskopijoje naudojamų radioaktyviųjų nuklidų branduolių sužadintosios būsenos trukmė yra $10^{-10} \div 10^{-6}$ s eilės. Atitinkama energinė skyra yra $10^{-6} \div 10^{-10}$ eV eilės. Todėl tokiu spektrometru galima tirti branduolio sugerties spektro linijos formą. Be to, ši energija yra mažesnė už branduolio sąveikos su jį supančiais elektronais energiją. Todėl Mesbauerio spektrometru galima tirti branduolio energijos lygmenų poslinkį ir suskilimą, kurį sąlygoja minėtoji sąveika.

Mesbauerio spektrometro schema pateikta 1.8 pav. Medžiaga (sugėriklis), kurioje yra tiriamojo nuklido branduoliai, švitinama to paties nuklido sužadintų branduolių spinduliuote. Tiriamasis nuklidas ir matavimų sąlygos parinkti taip, kad būtų pakankamai didelė befononės emisijos ir sugerties tikimybė. Todėl spinduliuojama natūralaus pločio linija. Siekiant gauti sugerties spektrą (t.y., spinduliuotės energijos nuostolių priklausomybę nuo krintančiųjų fotonų energijos), fotonų energija keičiama siaurame intervale, kurio plotis yra $10^{-8} \div 10^{-6}$ eV eilės. Tuo tikslu panaudojamas Doplerio poslinkis, kuris atsiranda, judant spinduliuotės šaltiniui link sugėriklio arba nuo jo kelių mm/s arba cm/s greičiu. T.y., spinduliuotės šaltinis periodiškai artinamas prie sugėriklio ir tolinamas nuo jo. Tuomet „skanuojamoji“ energijos vertė yra proporcinga šaltinio momentiniam greičiui v atžvilgiu sugėriklio ir yra lygi $\hbar\omega_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right)$, kur $\hbar\omega_0$ yra spinduliuojamų γ kvantų energija šaltinio atskaitos sistemoje, o c yra šviesos greitis. Vadinasi, greičio pokytis Δv atitinka energijos pokytį



1.8 pav. Mesbauerio spektrometro veikimo principas.

$$\Delta E = \hbar \omega_0 \Delta v / c . \quad (1.4.1)$$

Pvz., jeigu $\hbar \omega_0 = 15 \text{ keV}$, tuomet 10^{-7} eV didumo nuokrypį nuo $\hbar \omega_0$ atitinka greitis $v = 10^{-7} \text{ eV} / 15 \text{ keV} \cdot c = 0.2 \text{ cm/s}$. Sugerties spektras sudaromas, padalinus visą greičio v kitimo intervalą į kelias dešimtis arba kelis šimtus mažesnių vienodo pločio intervalų ("kanalų") ir išmatavus praėjusių pro sugėriklį γ kvantų skaičių N , kai šaltinio greitis priklauso kiekvienam iš šių intervalų. Tokiu būdu gaunama skaičiaus N , kuris proporcingas praėjusios spinduliuotės intensyvumui, priklausa nuo šaltinio greičio. Ši priklausoma vadinama **Mesbauerio spektru** (jo pavyzdys pavaizduotas 1.9 pav.). Kartais Mesbauerio spektre ant ordinačių ašies atidedamas ne užregistruotų fotonų skaičius N , o santykinė sugertis, t.y., vieneto ir pralaidumo $N(v) / N_{\max}$ skirtumas:

$$\alpha(v) = (N_{\max} - N(v)) / N_{\max} . \quad (1.4.2)$$

Šis dydis – tai **Mesbauerio efekto** kiekybinė išraiška. Mesbauerio spektro linijos plotis matuojamas pusės minimumo gylio lygyje (žr. 1.9 pav). Idealiuoju atveju (kai šaltinis ir sugėriklis yra ploni ir nėra vibracijų), sugerties spektro linija yra apverstos Lorencio kreivės formos (žr. 1.9 pav. ir 1.1 pav.), o jos plotis yra lygus šaltinio ir sugėriklio natūraliųjų linijos pločių sumai, t.y., 2Γ , kur Γ yra šaltinio (ir sugėriklio) natūralusis linijos plotis. Tokiu atveju iš Lorencio skirstinio išraiškos (1.1.2) išplaukia, kad greičio vienetais išreikštas Mesbauerio spektro linijos plotis yra lygus

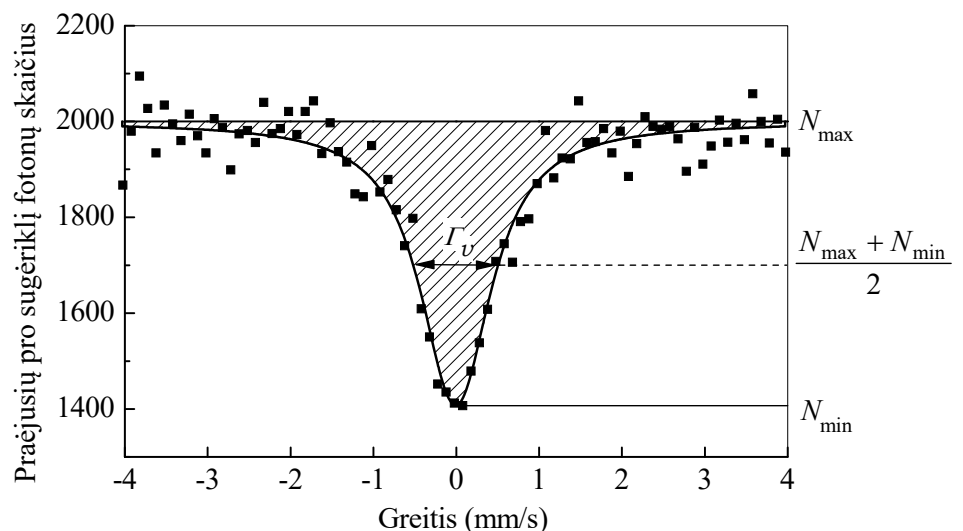
$$\Gamma_v = \frac{2S}{\pi(N_{\max} - N_{\min})} , \quad (1.4.3)$$

kur S yra Mesbauerio spektro linijos integralas greičio atžvilgiu (užstrichuotasis plotas 1.9 pav.), o energijos vienetais išreikštas natūralusis linijos plotis yra

$$\Gamma = \hbar \omega_0 \frac{\Gamma_v}{2c} . \quad (1.4.4)$$

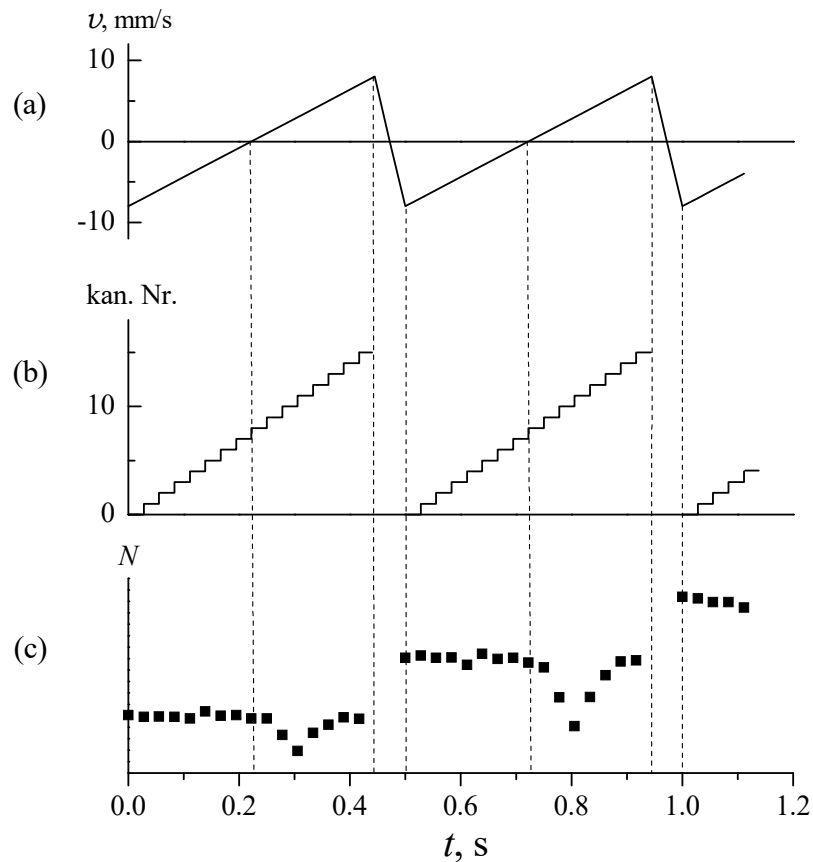
Sugėriklio storiui didėjant, Mesbauerio spektro linijos plotis auga dėl γ kvantų sklaidos ir nerezonansinės sugerties (pvz., vykstant fotoefektui). Be to, didelę įtaką linijos pločiui ir visam spektro pavidalui gali turėti netolygus šaltinio greičio kitimas.

1.9 pav. Mesbauerio spektro pavyzdys, kai sugėriklio branduolių aplinka yra tiksliai tokia pati, kaip ir radioaktyviojo šaltinio branduolių aplinka. Γ_v yra greičio vienetais išreikštas Mesbauerio linijos plotis. Užstrichuotasis plotas nusako spektro minimumo integralą S , kuris proporcingas kvantinio šuolio tikimybei per laiko vienetą.

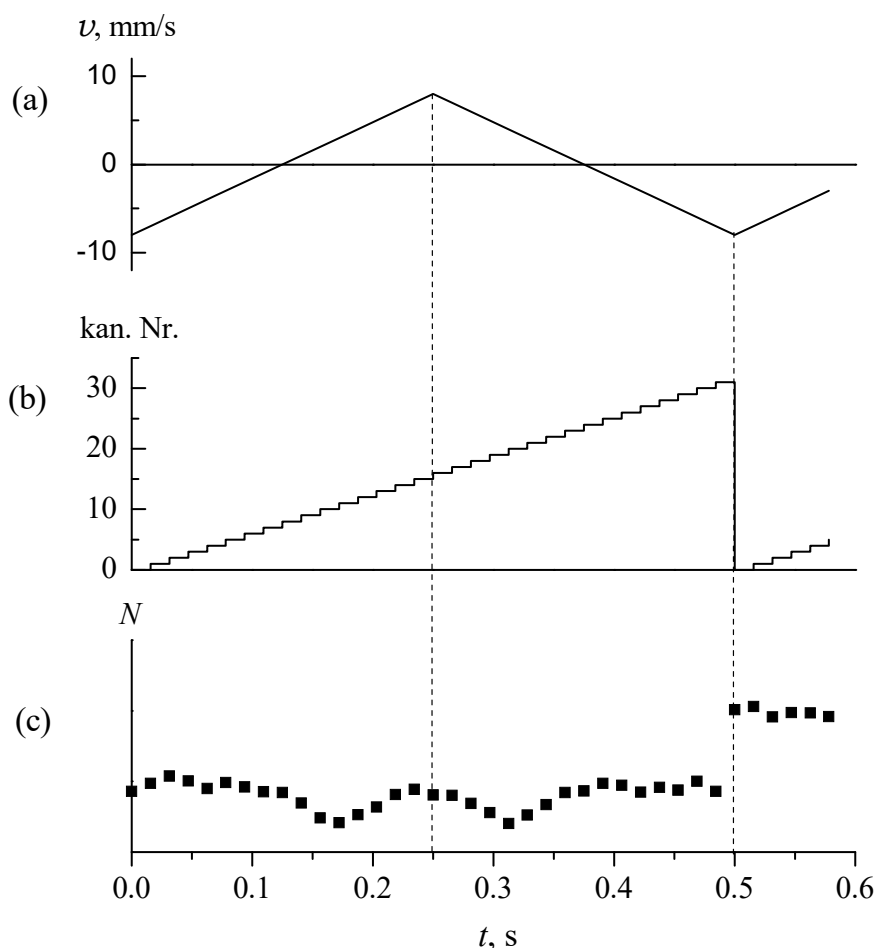


Norint, kad fotonų skaičiaus N prieklausa nuo kanalo numerio tiksliai atspindėtų praėjusių pro bandinį be sugerties γ kvantų energijos spektrą, reikia, kad vienam kanalui tenkanti pilnutinė matavimo trukmė t būtų vienoda visiems kanalams. Taip yra todėl, kad spektrą nusako duotos energijos fotonų skaičius *per laiko vienetą* N/t . Šis matavimo laiko pastovumas įgyvendinamas, naudojant tiesinę šaltinio greičio priklausomybę nuo laiko. T.y., matavimo metu šaltinis juda pastoviu pagreičiu, o jo koordinatės priklausomybė nuo laiko yra parabolinė. Greičio vertė nuosekliai „pereina“ per visus kanalus, išbūdama kiekviename jų vienodą laiko tarpą. Kadangi vieno tokio perėjimo trukmė yra per maža, kad būtų užregistruotas pakankamas fotonų skaičius, tai praktikoje naudojama periodinė pjūklinė greičio priklausomybė nuo laiko (žr. 1.10a pav.). Kiekvieno periodo metu duotajame kanale užregistruotas fotonų skaičius pridedamas prie pilnojo tame kanale užregistruotų fotonų skaičiaus (žr. 1.10c pav.). 1.10 pav. atveju spektrometras registruoja spektrą tik greičio augimo metu. Tačiau galima ir šiek tiek kitokia spektrometro veikla, kai spektras registruojamas ne tik augant greičiui, bet ir jam mažėjant (žr. 1.11 pav.). Tokiu atveju gaunami du „veidrodiniai“ spektrai – vienas užregistruotas greičio augimo metu, o kitas – greičio mažėjimo metu (žr. 1.11c pav.). Abiems spektrams registruoti naudojamas vienodas kanalų skaičius. Pilnasis fotonų skaičius, kuris buvo užregistruotas, kai šaltinio greitis priklausė duotajam greičių intervalui, apskaičiuojamas, sudėjus „veidrodinius“ kanalus abiejuose spektruose. Pvz., jeigu pirmasis spektras įrašytas į kanalus su numeriais $0 \div 255$, o antrasis – į kanalus $256 \div 511$, tuomet pirmojo spektro kanalą, kurio numeris n_k , atitinka antrojo spektro kanalą, kurio numeris $511 - n_k$.

Jeigu duotojo nuklido branduolių aplinka sugėriklyje yra lygiai tokia pati, kaip ir šaltinyje, tuomet sugerties spektras bus lygiai tokio paties pavidalo, kaip ir emisijos. Todėl rezonansinė sugertis galės vykti, tik nejudant šaltiniui atžvilgiu sugėriklio (žr. 1.9 pav.). Jeigu



1.10 pav. Mesbauerio spektro registravimo laikinės diagramos, kai spektras registruojamas šaltinio greičio augimo metu. v – šaltinio greitis atžvilgiu sugėriklio, N – pilnutinis viename kanale užregistruotas γ kvantų skaičius.



1.11 pav. Mesbauerio spektro registravimo laikinės diagramos, kai registruojami du veidrodiniai spektrai: vienas – augant šaltinio greičiui, o kitas – jam mažėjant. Žymenys tokie patys, kaip 1.10 pav.

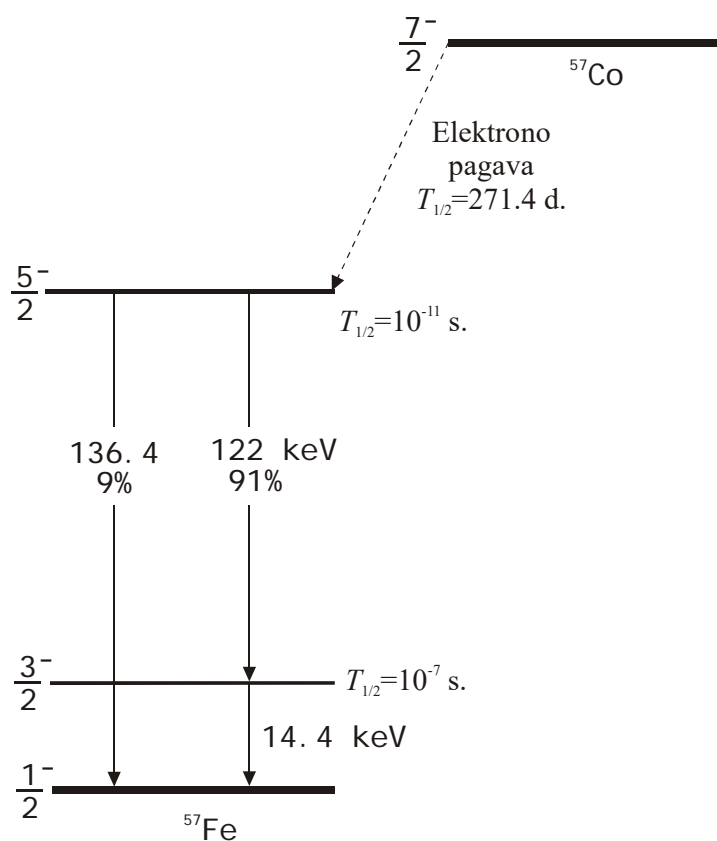
branduolio aplinka sugėriklyje skiriasi nuo jo aplinkos šaltinyje, tuomet sugerties linija bus pasislinkusi atžvilgiu emisijos linijos. T.y., rezonansinė sugertis vyks, tik esant tam tikram šaltinio greičiui atžvilgiu sugėriklio, kurį atitinkantis Doplerio poslinkis kompensuoja minėtąjį poslinkį. Jeigu, be to, sugerties spektro linija yra suskilusi, tuomet rezonansinė sugertis bus stebima, esant kelioms diskrečioms greičio vėrtėms. Žinant greičio vėrtes, kurioms esant, vyksta rezonansinė sugertis, galima įvertinti duotojo izotopo energijos lygmenų skirtumą sugėriklyje ir šaltinyje. Pagal šį skirtumą galima įvertinti branduolio elektroninės aplinkos skirtumus sugėriklyje ir šaltinyje.

Taigi, Mesbauerio reiškiny s leidžia išmatuoti labai mažus sugėriklio ir šaltinio branduolių spinduliuojamų γ kvantų energijų *skirtumus*, tačiau neleidžia tiesiogiai išmatuoti γ kvantų *pilnutinių* energijų. γ kvantų, kuriuos spinduliuoja sužadintieji branduoliai, energijos yra žinomos ($10 \div 1000$) eV tikslumu. Tačiau, panaudojant Mesbauerio reiškini, γ kvanto energijų *skirtumą* sugėriklyje ir šaltinyje galima išmatuoti 10^{-10} eV tikslumu.

Praktiniam Mesbauerio reiškinio pritaikymui labiausiai tinka tie nuklidai, kurie tenkina šias dvi sąlygas:

- 1) didelė befononių vyksmų tikimybė (nemažesnė už kelis procentus),
- 2) didelė sužadintos būsenos gyvavimo trukmė (mažas linijos plotis).

Veiksniai, nuo kurių priklauso befononių vyksmų tikimybė, buvo išvardinti 1.3 poskyrio pabaigoje. Optimalus šios tikimybės dydžio ir sužadintos būsenos gyvavimo trukmės derinys buvo rastas geležies izotope ^{57}Fe . Šis izotopas sudaro 2.19 % natūralios geležies. Sužadintos būsenos ^{57}Fe branduoliai gaunami, panaudojant kobalto izotopo ^{57}Co radioaktyvųjų virsmą – elektrono pagavą. Šio virsmo metu vienas iš vidinių Co atomo elektronų yra branduolio



1.12 pav. Radioaktyviojo skilimo $^{57}\text{Co} \rightarrow ^{57}\text{Fe}$ schema.

pagaunamas ir vienas branduolio protonas virsta neutronu, išspinduliuojant neutriną. Todėl branduolio krūvio skaičius ir elektronų skaičius atome sumažėja vienetu: ^{57}Co atomas virsta ^{57}Fe atomu, kurio branduolys yra sužadintos būsenos. Šio proceso pusamžis yra 271.4 paros. ^{57}Fe branduolys gali pereiti į pagrindinę būseną tiesiogiai arba per tarpinį lygmenį (žr. 1.12 pav.). Tiesioginio šuolio metu spinduliuojami 136.4 keV energijos fotonai, o šuolio per tarpinį lygmenį metu – 122 keV ir 14.4 keV fotonai. Šuolio per tarpinį lygmenį tikimybė yra maždaug 10 kartų didesnė už tiesioginio šuolio tikimybę. Rezonansinėje emisijoje ir sugertyje dalyvauja tik 14.4 keV energijos fotonai, nes tik šis šuolis turi Mesbauerio spektroskopijai reikalingas savybes: mažą energiją ir didelę gyvavimo trukmę ($1.4 \cdot 10^{-7}$ s).

Naudojant nuklidą ^{57}Co , Mesbauerio reiškinį galima stebėti kambario temperatūroje. Daugumai kitų nuklidų Mesbauerio reiškinys tampa pastebimas tik žemose temperatūrose.

1960 m. amerikiečių fizikai Robertas Paundas ir Glenas Rebka panaudojo Mesbauerio reiškinį fotono energijos pokyčio Žemės gravitaciniame lauke matavimui. Pagal reliatyvistinį ekvivalentiškumo principą, elektromagnetinės spinduliuotės dažnio kitimas dėl šaltinio judėjimo su pagreičiu g atžvilgiu stebėtojo yra lygiavertis spinduliuotės dažnio kitimui gravitaciniame lauke, kurio laisvojo kritimo pagreitis yra g , kai spinduliuotės sklaidimo kryptis yra lygiagreti gravitacinės jėgos kryptiai. Viena iš R. Paundo ir G. Rebkos eksperimentų spinduliuotės detektorius buvo $H = 22.6$ m aukštyje virš $^{57}\text{Co}/^{57}\text{Fe}$ šaltinio (Harvardo universiteto bokšte), o kitame šaltinis ir detektorius buvo sukeisti vietomis. Fotonui nueinant H atstumą aukštyn, jo energija E sumažėja dydžiu $\Delta E = m_f g H$; čia $m_f = E/c^2$ yra fotono masė, o $g = 9.8$ m/s² yra laisvojo kritimo pagreitis prie Žemės paviršiaus. Taigi, santykinis fotono energijos sumažėjimas lygus $\Delta E / E = gH / c^2 = 9.8 \cdot 22.6 / (3 \cdot 10^8)^2 = 2.46 \cdot 10^{-15}$. Fotonui nueinant tą patį atstumą žemyn, jo energija tokiu pačiu dydžiu išauga. Santykinis fotono energijų skirtumas dviejuose minėtuose eksperimentuose yra lygus $2gH / c^2 = 4.92 \cdot 10^{-15}$. Tai atitinka Mesbauerio spektrometro šaltinio greičių skirtumą $4.92 \cdot 10^{-15} \cdot c = 1.48 \cdot 10^{-6}$ m/s. Išmatuotasis fotono energijų skirtumas 10% tikslumu sutapo su tuo, kurį numato ekvivalentiškumo principas. Šis eksperimentas tapo dar vienu reliatyvumo teorijos patvirtinimu.

2. Branduolio sukiny ir elektromagnetiniai momentai

Mesbauerio spektroskopijos metodais galima tirti įvairius silpnus efektus, kurie turi įtakos branduolio energijos lygmenims. Viena tokių efektų grupė – tai branduolio energijos lygmenų pokytis dėl branduolio magnetinio dipolinio ir elektrinio kvadrupolinio momentų sąveikos su magnetiniu ir elektriniu laukais, kuriuos sukuria branduolį supantys elektronai bei jonai. Prieš aptariant tuos efektus, reikia suprasti minėtųjų momentų fizikinę prasmę ir jų savybes. Todėl šiame skyriuje yra pateiktos įvadinės žinios apie branduolio sukinių ir magnetinį dipolinį bei elektrinį kvadrupolinį momentus.

2.1. Branduolio sukiny

Branduolio sukiniu vadinamas branduolio pilnutinis judesio kiekio momentas. Tai yra vektorinis dydis, kurį žymėsime \mathbf{I} . Šio dydžio savybės yra tokios pačios, kaip ir bet kurios kitos prigimties judesio kiekio momento savybės, t.y., jo modulio galimosios vertės yra¹

$$|\mathbf{I}| = \sqrt{I(I+1)}\hbar \quad (I = 0, 1, 2, \dots), \quad (2.1.1)$$

o jo projekcija į bet kurią apibrėžtą kryptį erdvėje gali būti lygio tik šioms vertėms

$$I_z = m_I \hbar \quad (m_I = I, I-1, \dots, -I+1, -I). \quad (2.1.2)$$

"Sukinio" sąvokos prasmė branduolio fizikoje šiek tiek skiriasi nuo tos sąvokos prasmės atomo fizikoje. Atomo fizikoje "sukiniu" vadinamas dalelių *vidinis* judesio kiekio momentas, kuris nėra susijęs su dalelių judėjimu erdvėje. Šalia jo, egzistuoja ir *orbitinis* judesio kiekio momentas, kurį sąlygoja elektringųjų dalelių judėjimas. Pvz., atomo pilnutinis judesio kiekio momentas \mathbf{J} yra lygus jo elektronų sukinių ir orbitinių momentų sumai:

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^Z (\mathbf{l}_i^{(e)} + \mathbf{s}_i^{(e)}); \quad (2.1.3)$$

čia $\mathbf{l}_i^{(e)}$ yra i -tojo elektrono orbitinio judesio kiekio momento vektorius, o $\mathbf{s}_i^{(e)}$ yra to elektrono sukinių judesio kiekio momento vektorius. Analogiškai išreiškiamas ir branduolio pilnutinis judesio kiekio momentas:

$$\mathbf{I} = \sum_{i=1}^A (\mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i); \quad (2.1.4)$$

čia \mathbf{l}_i ir \mathbf{s}_i yra i -tojo nukleono (protono arba neutrono) orbitinis ir sukinių judesio kiekio momentai. Kadangi, pradėjus tirti branduolių judesio kiekio momentus, dar nebuvo žinoma branduolio vidinė sandara, tai pilnutinis momentas \mathbf{I} buvo pavadintas branduolio "sukiniu".

Priklausomai nuo to, kuria tvarka sumuojami atskirų nukleonų orbitiniai ir sukinių momentai, pilnutinį momentą \mathbf{I} galima skaičiuoti dviem būdais:

$$\mathbf{I} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (2.1.5a)$$

kur \mathbf{L} yra branduolio nukleonų pilnutinis orbitinis judesio kiekio momentas, o \mathbf{S} yra pilnutinis sukinių judesio kiekio momentas, arba

$$\mathbf{I} = \sum_{i=1}^A \mathbf{j}_i, \quad (2.1.5b)$$

kur \mathbf{j}_i yra i -tojo nukleono pilnutinis judesio kiekio momentas.

Be to, kartais pasireiškia branduolio ir elektronų pilnutinis judesio kiekio momentas, kurį žymėsime \mathbf{F} :

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}. \quad (2.1.6)$$

Vektoriams \mathbf{F} ir \mathbf{J} galioja tie patys kvantiniai dėsniniai, kaip ir vektoriui \mathbf{I} (žr. (2.1.1) ir (2.1.2)). Atitinkamus kvantinius skaičius žymėsime F, m_F, J, m_J .

¹ Judesio kiekio momento vektorių žymėsime stačiu pastorintu šriftu, o atitinkamą kvantinį skaičių – pasvirusiu šriftu (pvz., \mathbf{I} ir I). Judesio kiekio momento vektoriaus modulis bus nurodomas įprastiniu būdu, pvz., $|\mathbf{I}|$.

Kadangi protonų, neutronų ir elektronų sukinių yra lygūs $1/2$, tai kvantiniai skaičiai I ir J gali būti sveiki arba pusiniai, priklausomai nuo to, ar nukleonų ir elektronų skaičiai yra lyginiai, ar nelyginiai.

Branduolių pagrindinių būsenų sukinius galima skaičiuoti pagal tokias taisykles:

1. Visų lyginių-lyginių branduolių (t.y., branduolių su lyginiu protonų skaičiumi Z ir lyginiu neutronų skaičiumi N) pagrindinės būsenos sukiny yra $I=0$. Taip yra dėl to, kad nukleonams energiška naudinga sudaryti vienaarūšių nukleonų poras su priešingai orientuotais sukiniiais (t.y., skirtingų nukleonų sukiniai kompensuoja vienas kitą).
2. Branduolių su nelyginiu $A = Z + N$ (t.y., branduolių, kuriuose vienas iš dviejų skaičių Z ir N yra lyginis, o kitas nelyginis) sukinių beveik visuomet lemia vienintelio "nesuporuotojo" nukleono pilnutinio judesio kiekio momento kvantinis skaičius j , nes likusieji $A-1$ nukleonų sudaro poras su priešingais sukiniiais.
3. Nelyginių-nelyginių branduolių sukinių lemia dviejų nesuporuotųjų nukleonų (vieno protono ir vieno neutrono) pilnutinių judesio kiekio momentų vektorinė suma: $\mathbf{I} = \mathbf{j}_p + \mathbf{j}_n$, todėl yra galimos kelios vertės. Empiriškai nustatyta, kad pagrindinėje būsenoje protono ir neutrono vidiniai sukiniai (\mathbf{s}_p ir \mathbf{s}_n) dažniausiai būna orientuoti viena kryptimi.

2.2. Branduolio magnetinis dipolinis momentas

Klasikinėje fizikoje sistemos magnetinį dipolinį momentą $\boldsymbol{\mu}$ sąlygoja elektringųjų dalelių judėjimas, todėl $\boldsymbol{\mu}$ apibūdina elektros srovių pasiskirstymą sistemoje. Kvantinėje mechanikoje taip pat egzistuoja analogiškas sąryšis tarp magnetinio dipolinio momento ir elektringųjų dalelių judėjimo, tačiau yra dar vienas veiksnys, kuris neturi klasikinio analogo: dalelių vidinis judesio kiekio momentas (sukiny) taip pat turi įtaką magnetiniam momentui.

Trumpai apžvelgsime klasikinės elektrodinamikos teiginius, iš kurių gaunami magnetiniai dipoliniai momentai. Magnetinės indukcijos vektorius \mathbf{B} yra lygus vektorinio potencialo \mathbf{A} rotoriumi:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (2.2.1)$$

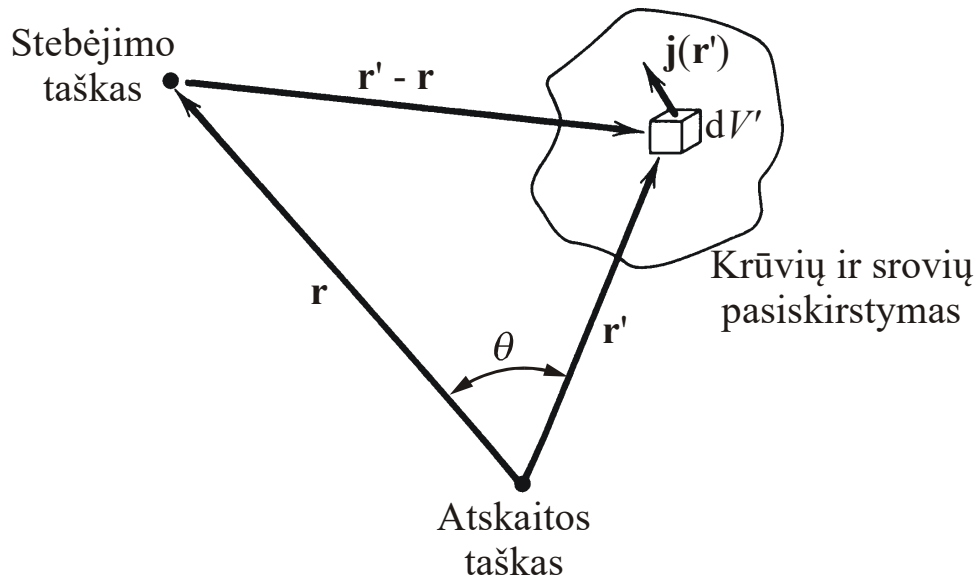
(čia ∇ yra diferencialinis operatorius "nabla", o ženklas " \times " žymi dviejų vektorių vektorinę sandaugą). Išreikšime vektorinį potencialą, kuri sukuria tam tikrame tūryje pasiskirsčiusi elektros srovė (žr. 2.1 pav.). Ši pasiskirstymą apibūdina srovės tankio \mathbf{j} priklausoma nuo spindulio vektoriaus \mathbf{r}' (štrichas šio spindulio vektoriaus žymenyje nurodo, kad turimas omenyje lauko šaltinio, o ne stebėjimo taškas). Žinant šią vektorinę funkciją $\mathbf{j}(\mathbf{r}')$, galima apskaičiuoti elektromagnetinio lauko vektorinį potencialą \mathbf{A} bet kuriame stebėjimo taške \mathbf{r} :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}') dV'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}; \quad (2.2.2)$$

čia μ_0 yra magnetinė konstanta ($\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ H/m), o integralas skaičiuojamas visoje erdvės srityje, kur srovės tankis skiriasi nuo nulio. Daugumoje praktikoje svarbių atvejų šios srities matmenys yra žymiai mažesni už atstumą tarp jos ir stebėjimo taško. Tuomet, pasirinkus atskaitos tašką srovių pasiskirstymo srityje (arba arti jos), galioja nelygybė $|\mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r}|$. Todėl galima daugiklį $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ išreikšti dydžio $|\mathbf{r}'|$ laipsniais ir toje išraiškoje palikti tik 2 arba 3 mažiausio laipsnio dėmenis:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^3} + \left[\frac{3}{2r} \left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} \right)^2 - \frac{r'^2}{2r^3} \right] + \dots; \quad (2.2.3)$$

čia $r \equiv |\mathbf{r}|$, $r' \equiv |\mathbf{r}'|$, o ženklas " \cdot " žymi dviejų vektorių skaliarinę sandaugą. Įrašę (2.2.3) į (2.2.2) ir suintegravę, gauname vektorinio potencialo išraišką dydžio $1/r$ laipsniais. Pirmasis dėmuo yra proporcingas $1/r$ ir srovės tankio integralui. Kadangi srovė teka tik integravimo srities viduje, tas integralas lygus nuliui. Vadinas, pirmasis nenulinis dėmuo vektorinio potencialo skleidinyje $1/r$ laipsniais yra



2.1 pav. Srovės elementas $\mathbf{j}(\mathbf{r}')dV'$ turi įtakos vektoriniam potencialui stebėjimo taške \mathbf{r} . Pilnutinis vektorinis potencialas kiekviename taške randamas, integruojant visą srovių pasiskirstymą.

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \int \mathbf{j}(\mathbf{r}')(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')dV' + \dots$$

Pasinaudojus keliom vektorinėm tapatybėm, įrodoma, kad šį reiškinį galima išreikšti tokiu pavidalu:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{r}}{r^3} + \dots; \quad (2.2.4)$$

čia vektorius $\boldsymbol{\mu}$ yra elektros srovių pasiskirstymo *magnetinis dipolinis momentas*:

$$\boldsymbol{\mu} \equiv \frac{1}{2} \int \mathbf{r}' \times \mathbf{j}(\mathbf{r}')dV'. \quad (2.2.5)$$

Taigi, magnetinis dipolinis momentas lemia pirmąjį nenulinį dėmenį magnetinio lauko, kurį sukuria duotasis srovių pasiskirstymas, išraiškoje.

Remiantis klasikine magnetinio dipolinio momento išraiška (2.2.5), galima gauti to momento kvantmechaninę išraišką. Tuo tikslu visų pirma pasinaudojame tuo, kad srovės tankis \mathbf{j} yra lygus elektros krūvio tankio ρ ir dalelių vidutinio greičio vektoriaus \mathbf{v} sandaugai:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r}')\mathbf{v}(\mathbf{r}'). \quad (2.2.6)$$

Taigi, (2.2.5) integralo pointegralinė funkcija yra proporcinga $\mathbf{r}' \times \mathbf{v}(\mathbf{r}')$. Ši vektorinė sandauga – tai dalelės orbitinis judesio kiekio momentas \mathbf{l} , padalintas iš dalelės masės m . Perėjimas prie kvantinės mechanikos pasireiškia, tuo, kad elektros krūvio tankis ρ pakeičiamas dalelės krūvio e ir jos tikimybės tankio $|\psi(\mathbf{r}')|^2$ sandauga, kur $\psi(\mathbf{r}')$ yra dalelės banginė funkcija. Kadangi $|\psi(\mathbf{r}')|^2 \equiv \psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$, kur ψ^* yra kompleksiskai jungtinė funkcija, tai

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}')\mathbf{l}\psi(\mathbf{r}')dV'.$$

Be to, pereinant prie kvantinės mechanikos, judesio kiekio momentą \mathbf{l} reikia pakeisti jo operatoriumi $\hat{\mathbf{l}}$:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}')\hat{\mathbf{l}}\psi(\mathbf{r}')dV', \quad (2.2.7)$$

$$\mu_z = \frac{e}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}')\hat{l}_z\psi(\mathbf{r}')dV'; \quad (2.2.8)$$

čia μ_z yra magnetinio dipolinio momento z dedamoji, o \hat{l}_z yra judesio kiekio momento z dedamosios operatorius (operatorius veikia funkciją, kuri užrašyta operatoriaus žymens dešinėje). Pagal kvantinės mechanikos postulatus, \hat{l}_z (2.2.7) ir (2.2.8) reiškiniai įeinantys integralai – tai judesio kiekio momento vektoriaus ir jo projekcijos į z ašį vidurkiai. Jeigu banginė funkcija ψ atitinka būseną, kurioje dalelės judesio kiekio momento projekcija į z ašį (l_z) yra tiksliai apibrėžta, tuomet kitos dvi projekcijos (l_x ir l_y) yra neapibrėžtos, o jų vidurkis lygus nuliui (vaizdžiai kalbant, judesio kiekio momento vektorius "precesuoja" aplink z ašį). Tokiu atveju judesio kiekio momento vektoriaus vidurkis (ir magnetinis momentas) yra lygiagretus z ašiai, o magnetinio momento z dedamoji yra lygi

$$\mu_z = \frac{e\hbar}{2m} m_l \quad (m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l). \quad (2.2.9)$$

Nors tiksloji kvantmechaninė magnetinio momento išraiška yra (2.2.7), tačiau "branduolio magnetiniu momentu" susitarta vadinti didžiausią įmanomą μ_z vertę, kuri, pagal (2.2.9), yra lygi

$$\mu = \frac{e\hbar}{2m} l. \quad (2.2.10)$$

Dydis $e\hbar/(2m)$ vadinamas **magnetonu**. Įrašę vietoj m protono masę, gauname **branduolinį magnetoną** μ_N :

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} = 3.15245 \cdot 10^{-8} \text{ eV/T}. \quad (2.2.11)$$

Įrašę vietoj m elektrono masę, gauname **Boro magnetoną**:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.78838 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}. \quad (2.2.12)$$

Taigi, $\mu_N \ll \mu_B$. Todėl atomo elektronų magnetinės savybės pasireiškia žymiai stipriau, negu branduolio magnetinės savybės. Įprastines magnetines medžiagų savybes (pvz., feromagnetizmą) lemia tik atomų elektronų magnetiniai momentai.

Branduolinis magnetonas yra branduolių magnetinių momentų "natūralusis" matavimo vienetas. Be to, kadangi magnetinio momento projekcija į duotąją ašį yra proporcinga judesio kiekio momento projekcijai į tą ašį, tai magnetinio momento projekciją įprasta išreikšti tokiu pavidalu:

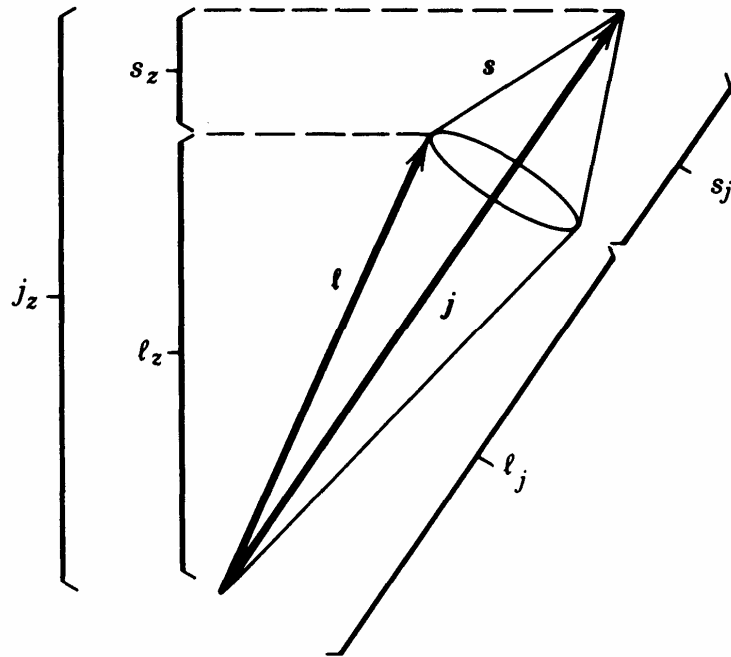
$$\mu_z = \frac{g_l l_z \mu_N}{\hbar} = g_l m_l \mu_N; \quad (2.2.13)$$

čia g yra vadinamasis **g daugiklis** – nukleono magnetinio momento ir atitinkamo judesio kiekio momento projekcijų į duotąją kryptį santykis, išreikštas μ_N/\hbar vienetais. Apatinis indeksas " l " nurodo, kad turimas omenyje orbitinis g daugiklis, kuris nusako orbitinių magnetinio ir judesio kiekio momentų santykį (analogiškai apibrėžiami ir sukininis bei pilnutinis g daugikliai, kurie nusako, atitinkamai, sukininių ir pilnutinių momentų santykius). Protono atveju orbitinio magnetinio momento projekcija išreiškiamą (2.2.9) sąryšiu. Palyginus su (2.2.13), akivaizdu, kad protono orbitinis g daugiklis lygus $g_l = 1$. Neutrono orbitinis g daugiklis lygus 0, nes neutronas neturi elektros krūvio.

Iki šiol buvo kalbama tik apie magnetinius momentus, kurie susiję su elektringųjų dalelių (tiksliau, branduolio protonų) orbitiniu judėjimu. Atsižvelgus į nukleonų vidinius judesio kiekio momentus (sukinius), nukleono magnetinio dipolinio momento projekcijos išraišką (2.2.13) reikia modifikuoti:

$$\mu_z = \frac{(g_l \langle l_z \rangle + g_s \langle s_z \rangle) \mu_N}{\hbar} \equiv g_j m_j \mu_N; \quad (2.2.14)$$

čia g_s ir g_j yra nukleono sukininis ir pilnutinis g daugikliai, o m_j yra nukleono pilnutinio judesio kiekio projekcijos kvantinis skaičius. Kaip ir anksčiau, pilnutinis magnetinis momentas μ yra lygus didžiausiai įmanomai magnetinio dipolinio momento projekcijai μ_z , t.y.,



2.2 pav. Pilnutinio judesio kiekio vektorius \mathbf{j} precesuoja aplink z ašį taip, kad projekcija j_z lieka pastovi, o orbitinio ir sukinio judesio kiekio momentų vektoriai \mathbf{l} ir \mathbf{s} tuo pat metu precesuoja aplink vektorių \mathbf{j} . Vektorių \mathbf{l} ir \mathbf{s} projekcijos į \mathbf{j} (t.y., l_j ir s_j) lieka pastovios, tačiau l_z ir s_z kinta.

$$\mu = g_j j \hbar. \quad (2.2.15)$$

Kai j_z yra tiksliai apibrėžtas, l_z ir s_z neturi tiksliai apibrėžtų verčių (būtent todėl (2.2.13a,b) reiškiniuose vietoj žymenų l_z ir s_z naudojami kvantmechaniniai vidurkiai $\langle l_z \rangle$ ir $\langle s_z \rangle$). Taip yra dėl to, kad būsenoje su tiksliai apibrėžtais j ir j_z vektoriai \mathbf{l} ir \mathbf{s} precesuoja apie pilnutinio judesio kiekio momento vektorių \mathbf{j} (žr. 2.2 pav.).

Protonų $g_s = 5.5856912$, o neutronų $g_s = -3.8260837$. Taigi, protono sukinio ir magnetinio momento projekcijų ženklai yra vienodi, o neutrono – priešingi. Matome, kad nukleonų sukininiai g daugikliai labai skiriasi nuo vertės $g_s = 2$, kuri gaunama, išsprendus Dirako lygtį taškinei krūvio $\pm e$ elektringajai dalelei, kurios sukinio kvantinis skaičius $s = 1/2$ (tokios dalelės pavyzdys – elektronas). Tai yra vienas iš požymių, kurie rodo, kad protonas ir neutronas nėra elementariosios dalelės (tokios, kaip elektronas) ir kad jie turi vidinę struktūrą. Nukleono magnetinis momentas atsiranda dėl nukleonų sudarančių elektringųjų dalelių (kvarkų) judėjimo ir dėl jų sukinių.

Nukleono pilnutinį g daugiklį g_j išreikšime nukleono pilnutinio judesio kiekio momento kvantiniu skaičiumi j . Visų pirma pasinaudosime tuo, kad

$$\langle l_z \rangle = j_z - \langle s_z \rangle = m_j \hbar - \langle s_z \rangle. \quad (2.2.16)$$

Įrašę (2.2.16) į (2.2.14), gauname

$$\mu_z = \left[g_l m_j + \frac{(g_s - g_l) \langle s_z \rangle}{\hbar} \right] \mu_N. \quad (2.2.17)$$

2.2 pav. akivaizdu, kad $\langle s_z \rangle$ yra lygus vektoriaus \mathbf{s}_j , kuris nusako vektoriaus \mathbf{s} projekciją į vektorių \mathbf{j} , projekcijai į z ašį. Tai reiškia, kad

$$\langle s_z \rangle = \langle \mathbf{s}_j | \frac{j_z}{|\mathbf{j}|} \equiv \frac{\langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{j} \rangle}{|\mathbf{j}|} \cdot \frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}} = \frac{m_j \langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{j} \rangle}{j(j+1)\hbar}. \quad (2.2.18)$$

$\langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{j} \rangle$ išreiškiamas, pakėlus kvadratu vektorinį sąryšį $\mathbf{l} = \mathbf{j} - \mathbf{s}$:

$$|\mathbf{l}|^2 = |\mathbf{j}|^2 + |\mathbf{s}|^2 - 2\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}. \quad (2.2.19)$$

Iš čia išreiškę $\mathbf{s} \cdot \mathbf{j}$ ir atsižvelgę į tai, kad aptariamuju atveju visi trys moduliai $|\mathbf{l}|$, $|\mathbf{j}|$ ir $|\mathbf{s}|$ yra tiksliai apibrėžti (jie skaičiuojami pagal bendrąją judesio kiekio momento modulio išraišką (2.1.1)), gauname

$$\langle \mathbf{s} \cdot \mathbf{j} \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]. \quad (2.2.20)$$

Įrašę (2.2.20) į (2.2.18), randame:

$$\langle s_z \rangle = \frac{m_j \hbar}{2j(j+1)} [j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)]. \quad (2.2.21)$$

Dabar pasinaudosime tuo, kad nukleono $s = 1/2$, o j gali būti lygus tik dviems vertėms (pagal bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę):

$$j = l \pm \frac{1}{2}. \quad (2.2.22)$$

Vadinasi esant duotam j , orbitinis kvantinis skaičius l gali būti lygus tik $j \mp \frac{1}{2}$. Atitinkamai, $\langle s_z \rangle$ gali būti lygus tik šioms dviems vertėms:

$$\text{Kai } j = l + \frac{1}{2}, \quad \langle s_z \rangle = \frac{m_j \hbar}{2j}; \quad (2.2.23)$$

$$\text{Kai } j = l - \frac{1}{2}, \quad \langle s_z \rangle = -\frac{m_j}{2(j+1)} \hbar.$$

Įrašę (2.2.21) į (2.2.17) ir palyginę gautąsias lygybes su (2.2.14), gauname tokias nukleono pilnutinio g daugiklio išraiškas:

$$\text{Kai } j = l + \frac{1}{2}, \quad g_j = g_l \left(1 - \frac{1}{2j} \right) + \frac{g_s}{2j}; \quad (2.2.24)$$

$$\text{Kai } j = l - \frac{1}{2}, \quad g_j = g_l \frac{j + \frac{3}{2}}{j+1} - \frac{g_s}{2j(j+1)}.$$

Branduolio magnetinio momento projekcija yra lygi visų nukleonų magnetinių momentų projekcijų sumai:

$$\mu_z = \frac{1}{\hbar} \sum_{i=1}^A (g_{l,i} \langle l_{z,i} \rangle + g_{s,i} \langle s_{z,i} \rangle) \mu_N \equiv g_I m_I \mu_N; \quad (2.2.25)$$

$$\mu \equiv (\mu_z)_{\max} = g_I I \mu_N; \quad (2.2.26)$$

čia g_I yra branduolio g daugiklis, m_I yra branduolio pilnutinio judesio kiekio momento ("sukinio") projekcijos kvantinis skaičius, o I yra branduolio sukinio kvantinis skaičius. Nėra bendros teorijos, pagal kurią būtų galima apskaičiuoti reiškinį (2.2.25), nes nukleonų tarpusavio sąveika yra stipri, o jų sukinių tarpusavio orientacijos nėra pakankamai gerai žinomos. Atskirais atvejais branduolio magnetinį dipolinį momentą galima apskaičiuoti, naudojantis kai kuriais supaprastinimais, kurie išplaukia iš branduolio modelių. Pvz., jeigu A yra nelyginis, tuomet kartais galima laikyti, kad branduolio pagrindinėje būsenoje $A - 1$ nukleonų sudaro "poras", kurių kiekvienoje nukleonų judesio kiekio momentai kompensuoja vienas kitą. Tokiu atveju branduolio magnetinis momentas yra lygus likusiojo "nesuporuotojo" nukleono magnetiniam momentui, kurį nusako (2.2.14) ir (2.2.24) lygybės.

2.3. Branduolio elektrinis kvadrupolinis momentas

Dabar aptarsime krūvių (o ne srovių) pasiskirstymą branduolyje. Stebėjimo taške \mathbf{r} elektrostatinis (skaliarinis) potencialas φ yra lygus

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}') dV'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}; \quad (2.3.1)$$

čia ϵ_0 yra elektrinė konstanta ($\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12}$ F/m), o $\rho(\mathbf{r}')$ yra elektros krūvio tankis taške \mathbf{r}' . Ši išraiška yra analogiška magnetinio vektorinio potencialo išraiškai (2.2.2). Kaip ir magnetinį vektorinį potencialą, elektrostatinį skaliarinį potencialą išreiškiame dydžio $1/r$ laipsniais:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r} \int \rho(\mathbf{r}') dV' + \frac{1}{r^2} \int \rho(\mathbf{r}') r' \cos \theta dV' + \frac{1}{r^3} \int \rho(\mathbf{r}') r'^2 \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) dV' + \dots \right]; \quad (2.3.2)$$

čia θ yra kampas tarp vektorių \mathbf{r} ir \mathbf{r}' (žr. 2.1 pav.). Be to, kaip ir anksčiau, laikome, kad $r' \ll r$. Integralas, kuris įeina į pirmąjį dėmenį laužtiniuose skliaustuose, – tai pilnutinis branduolio krūvis Ze . Antrasis integralas – tai branduolio **elektrinio dipolinio momento** projekcija į \mathbf{r} kryptį. Šis integralas normaliomis sąlygomis yra lygus nuliui. Taip yra dėl to, kad branduoliui yra būdinga simetrija koordinačių inversijos atžvilgiu. **Koordinačių inversija** – tai tokia koordinačių transformacija, kurios metu visų branduolio taškų spinduliai vektoriai \mathbf{r}' pakeičiami priešingais vektoriais $-\mathbf{r}'$. **Simetrija inversijos atžvilgiu** reiškia, kad sistemos būseną po inversijos yra neatskiriama nuo būsenos prieš inversiją. Visų sistemų, kurioms būdinga tokia simetrija, banginės funkcijos yra apibrėžto lyginumo (lyginės arba nelyginės). Lyginė funkcija po inversijos nepasikeičia ($\psi(-\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$), o nelyginė funkcija pakeičia tik ženklą ($\psi(-\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r})$). Pereinant prie kvantinės mechanikos, erdvinio krūvio tankį $\rho(\mathbf{r}')$ reikia pakeisti reiškiniumi $e\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$. Kadangi $\psi(\mathbf{r}')$ yra apibrėžto lyginumo, tai reiškinys $e\psi^*(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')$ visuomet yra lyginė funkcija. Tačiau $\cos \theta$ yra nelyginė funkcija, nes inversijos metu kampas θ pakeičiamas kampu $\pi - \theta$. Vadinasi, antrojo integralo (2.3.2) reiškinyje pointegralinė funkcija yra nelyginė, todėl tas integralas lygus nuliui. Taigi, **branduolio elektrinis dipolinis momentas yra lygus nuliui**.

Trečiasis integralas (2.3.2) reiškinyje apibrėžia vadinamąjį branduolio **elektrinį kvadrupolinį momentą**, kurį žymėsime Q' :

$$eQ' = \int \rho(\mathbf{r}') r'^2 \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) dV'. \quad (2.3.3)$$

Kaip matome, kvadrupolinis momentas priklauso ne vien nuo krūvio pasiskirstymo $\rho(\mathbf{r}')$, bet ir nuo vektoriaus \mathbf{r} krypties, kurios atžvilgiu atskaitomas kampas θ (koordinačių ašį, kuri lygiagreti vektoriui \mathbf{r} , žymėsime z). Siekiant panaikinti šią kampinę priklausomybę, "branduolio kvadrupolinį momentu" susitarta vadinti Q' vertę, kuri gaunama, kai branduolio sukinio projekcija į atskaitos ašį z yra didžiausia (analogiškas susitarimas yra naudojamas ir magnetinio dipolinio momento apibrėžtyje). Jeigu branduolys yra sferoido (sukimosi elipsoido) formos, tuomet taip apibrėžtoji z ašis sutampa su branduolio simetrijos ašimi z' . Atitinkamą kvadrupolinį momentą žymėsime Q_0 :

$$eQ_0 = \int \rho(\mathbf{r}') r'^2 \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta' - 1) dV'; \quad (2.3.4)$$

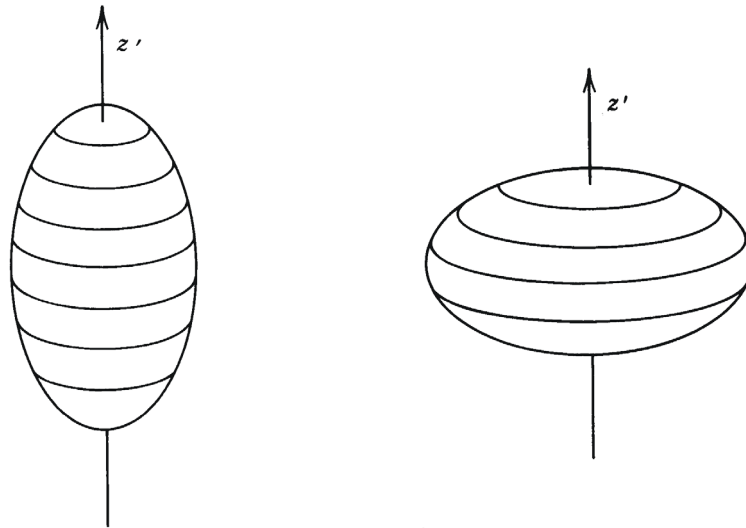
čia θ' yra kampas, atskaitytas nuo branduolio simetrijos ašies z' . Tarkime, kad kampas tarp duotosios ašies z ir branduolio simetrijos ašies z' yra lygus β . Tuomet, pasinaudojus žinomais sąryšiais tarp sferinių kampinių koordinačių "pradinėje" koordinačių sistemoje (kuri atitinka z' ašį) ir "pasuktoje" koordinačių sistemoje (kuri atitinka z ašį), galima įrodyti, kad

$$Q' = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1) Q_0. \quad (2.3.5)$$

Branduolio elektrinis kvadrupolinis momentas Q_0 atspindi branduolio formos nuokrypį nuo sferos. Sferinių branduolių $Q_0 = 0$. Jeigu $Q_0 > 0$, branduoliai yra šiek tiek "ištempti" simetrijos ašies kryptimi z' (t.y., (2.3.4) reiškinyje dydžio $r'^2 (3 \cos^2 \theta' - 1) \equiv 3z'^2 - r'^2$ vidurkis yra teigiamas). Tokį atvejį iliustruoja 2.3a pav. Jeigu $Q_0 < 0$, branduoliai yra šiek tiek "suspausti" kryptimi z' (t.y., (2.3.4) reiškinyje dydžio $r'^2 (3 \cos^2 \theta' - 1) \equiv 3z'^2 - r'^2$ vidurkis yra neigiamas). Tokį atvejį iliustruoja 2.3b pav.

Pereinant prie kvantinės mechanikos, aukščiau apibrėžtuosius dydžius Q_0 ir Q' reikia pakeisti kvadrupolinio momento operatoriaus kvantmechaniniais vidurkais atitinkamose kvantinėse būsenose. Kiekvieną kvantinę būseną nusako branduolio sukinio projekcija į z ašį. Kadangi branduolio sukinio vektorius yra lygiagretus branduolio simetrijos ašiai, tai kampas tarp sukinio vektoriaus ir z ašies yra tapatus kampui β , kuris įeina į (2.3.5) sąryšį. Antra vertus, iš (2.1.1) ir (2.1.2) išplaukia, kad šio kampo kosinusas yra lygus

$$\cos \beta \equiv \frac{I_z}{|\mathbf{I}|} = \frac{m_l}{\sqrt{I(I+1)}}. \quad (2.3.6)$$



(a) Ištemptasis sferoidas ($Q_0 > 0$) (b) Suplotasis sferoidas ($Q_0 < 0$)

2.3 pav. Ištemptasis ir suplotasis krūvio pasiskirstymai.

Didžiausią I_z vertę atitinka didžiausioji m_l vertė, t.y., $m_l = I$. Vadinasi, aukščiau apibrėžtojo kvadrupolinio momento Q_0 kvantinis analogas yra kvadrupolinio momento operatoriaus vidurkis būsenoje $m_l = I$. Šią kvadrupolinio momento vertę žymėsime Q . Kvadrupolinio momento vertę, kuri atitinka bet kurią kitą sukinio orientaciją atžvilgiu z ašies, galima išreikšti dydžiu Q' , pasinaudojus (2.3.5) ir (2.3.6) sąryšiais, iš kurių išplaukia, kad kvadrupolinio momento verčių būsenose $m_l = m_{l1}$ ir $m_l = m_{l2}$ santykis yra lygus

$$\frac{Q'(m_l)}{Q'(m'_l)} = \frac{3 \cos^2 \beta(m_l) - 1}{3 \cos^2 \beta(m'_l) - 1} = \frac{3m_l^2 - I(I+1)}{3m'_l{}^2 - I(I+1)}. \quad (2.3.7)$$

Kaip minėta, $Q \equiv Q'|_{m_l=I}$. Įrašę $m'_l = I$ į (2.3.7) ir išreiškę $Q'(m_l)$, gauname:

$$Q'(m_l) = \frac{3m_l^2 - I(I+1)}{I(2I-1)} Q. \quad (2.3.8)$$

Kai $I=0$ arba $I=1/2$, kvadrupolinis momentas yra lygus nuliui, nes abiem šiais atvejais $3m_l^2 - I(I+1) = 0$ (norint tuo įsitikinti, pakanka prisiminti, kad, kai $I=0$, kvantinis skaičius m_l taip pat lygus nuliui, o kai $I=1/2$, kvantinis skaičius m_l gali būti lygus tik $\pm 1/2$).

3. Branduolio γ spinduliuotės ir sugerties spektrų hipersmulkioji sandara

Branduolio energijos lygmenų pokyčiai (ir atitinkami gama spinduliuotės spektro pokyčiai), kuriuos sukelia branduolio sąveika su jo aplinka, apibendrintai vadinami energijos lygmenų (arba gama spektro) *hipersmulkioji sandara*. Žemiau aprašyta trijų tipų hipersmulkioji sandara:

- 1) izomerinis poslinkis – energijos lygmenų ir γ spektro linijų poslinkis dėl branduolio elektrostatinės sąveikos su elektronais, kurių banginės funkcijos išsiskverbia į branduolio vidų;
- 2) magnetinė dipolinė hipersmulkioji sandara – lygmenų ir spektro linijų skilimas dėl branduolio magnetinio momento sąveikos su magnetiniu lauku, kurį sukuria aplinkiniai elektronai;
- 3) elektrinė kvadrupolinė hipersmulkioji sandara – energijos lygmenų ir γ spektro linijų skilimas dėl branduolio elektrinio kvadrupolinio momento sąveikos su nevienalyčiu elektriniu lauku, kurį sukuria aplinkiniai elektronai.

3.1. Izomerinis poslinkis

Atomo fizikoje branduolys dažniausiai laikomas taškiniu. Tuomet elektrono ir branduolio sąveikos potencinė energija yra lygi

$$U_t(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}, \quad (3.1.1)$$

kur r yra atstumas tarp branduolio ir elektrono. Atsižvelgus į tai, kad branduolio matmenys yra baigtiniai, (3.1.1) sąryšį galima naudoti tik branduolio išorėje (t.y., erdvės srityje $r > R$, kur R yra branduolio spindulys). Branduolio viduje elektrono ir branduolio sąveikos energijos priklauso nuo r yra kitokio pavidalo. Šią priklausą lengviausia gauti, kai branduolys laikomas tolygiai įelektrinta sfera. Tuomet branduolio viduje potencinė energija lygi

$$U|_{r < R} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{R} \left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]. \quad (3.1.2)$$

Todėl atomo energijos lygmenys šiek tiek skiriasi nuo tų, kurie gaunami taškinio branduolio modelyje¹. Išreikšime šį energijos lygmenų pokytį. Pasinaudosime tuo, kad apibrėžtos kvantinės būsenos atomo pilnutinė energija yra lygi branduolio vidinės energijos E_b , elektrono kinetinės energijos vidurkio $\langle K_e \rangle$ ir sąveikos potencinės energijos vidurkio $\langle U \rangle$ sumai:

$$E = E_b + \langle K_e \rangle + \langle U \rangle; \quad (3.1.3)$$

Pagal bendrąją kvantmechaninio vidurkio išraišką,

$$\langle U \rangle = \int \psi^* U \psi dV, \quad (3.1.4)$$

kur ψ yra elektrono banginė funkcija (integruojama visa erdve). Šį integralą galima išskaidyti į du integralus – branduolio tūriu ir jo aplinkos tūriu – kurių pointegralinės funkcijos yra, atitinkamai, (3.1.2) ir (3.1.1):

$$\langle U \rangle = \int_{r < R} \psi^* U \psi dV + \int_{r > R} \psi^* U_t \psi dV. \quad (3.1.5)$$

Taškinio branduolio atveju pirmajame integrale vietoj U reikėtų naudoti U_t . Apytikslės potencinės energijos $U_t(r)$ pakeitimas "tiksliaja" potencine energija $U(r)$ neturi žymios įtakos elektrono banginei funkcijai ψ ir kinetinės energijos vidurkiui $\langle K \rangle$, nes potencinė energija pasikeičia labai mažoje erdvės srityje $r < R$. Taigi, atomo energijos (3.1.3) poslinkį atžvilgiu vertės, kuri atitinka taškinį branduolį, lemia tik vidutinės potencinės energijos pokytis:

¹ Kadangi branduolio ir elektronų sąveikos energija yra viso atomo energijos dalis, tai čia kalbama ne apie branduolio energijos lygmenis, o apie atomo energijos lygmenis (turint omenyje lygmenis, kurie priklauso ne vien nuo elektronų sistemos būsenos, bet ir nuo branduolio būsenos). Šia prasme, "branduolio energijos lygmenys" – tai atomo energijos lygmenų posistemė, tarp kurių vyksta kvantiniai šuoliai, kai kinta branduolio būsena, esant pastoviai elektronų sistemos būsenai.

$$\Delta E = \int_{r < R} \psi^* U \psi dV - \int_{r < R} \psi^* U_i \psi dV = \int_{r < R} \psi^* (U - U_i) \psi dV = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{r < R} |\psi|^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3} \right) dV. \quad (3.1.6)$$

Kadangi R yra $\sim 10^4$ kartų mažesnis už pirmąjį Boro spindulį, tai erdvės srityje $r < R$ funkcija ψ yra praktiškai pastovi ir lygi $\psi(0)$. Vadinasi,

$$\Delta E = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} |\psi(0)|^2 \int_{r < R} \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3} \right) dV. \quad (3.1.7)$$

Apskaičiuavę šį integralą, gauname:

$$\Delta E = \frac{Ze^2}{10\epsilon_0} |\psi(0)|^2 R^2. \quad (3.1.8)$$

Tai yra skirtumas tarp atomo energijos, kai branduolio krūvis yra tolygiai pasiskirstęs R spindulio sferoje, ir atomo energijos, kai branduolys yra taškinis. Visų elektronų, kurių orbitinis judesio kiekio momentas yra nenulinis (t.y., p elektronų, d elektronų, f elektronų ir t.t.), banginės funkcijos yra lygios nuliui taške $r = 0$. Be to, s elektronų banginės funkcijos modulis taške $r = 0$ sparčiai mažėja, augant pagrindiniam kvantiniui skaičiui (t.y., elektronų sluoksnio numeriui). Todėl energijos pokytį ΔE lemia branduolio sąveika su 1s elektronais. Įrašius į (3.1.8) reiškinį ^{57}Fe branduolio spindulį ($R = 5 \cdot 10^{-15}$ m) ir 1s elektronų banginės funkcijos išraišką vandeniliškajam atomui, kurio branduolio krūvio skaičius $Z = 26$, gaunama $\Delta E \approx 0.044$ eV. Tačiau γ spektroskopijoje tiesiogiai matuojama ne atomo energija, o jos pokytis, vykstant kvantiniams šuoliams tarp dviejų branduolio energijos lygmenų (t.y., γ kvanto energija). Pvz., jeigu šuolis vyksta tarp sužadintojo ir pagrindinio lygmenų, tuomet, pagal (3.1.8), γ kvanto energijos pokytis dėl elektronų banginės funkcijos išsiskverbimo į branduolio vidų yra lygus

$$\Delta E_{\text{suž}} - \Delta E_{\text{pagr}} = \frac{Ze^2}{10\epsilon_0} |\psi(0)|^2 (R_{\text{suž}}^2 - R_{\text{pagr}}^2). \quad (3.1.9)$$

Kadangi šis reiškinys nusako γ kvanto energijos pokytį *atžvilgiu atomo su taškiniu branduoliu*, tai tiesiogiai šio pokyčio išmatuoti neįmanoma (nes tam reikėtų bandinio, kurį sudaro atomai su taškiniais branduoliais). Tačiau, pasinaudojus Mesbauerio reiškinium, įmanoma išmatuoti reiškinio $\Delta E_{\text{suž}} - \Delta E_{\text{pagr}}$ verčių skirtumą sugėriklyje ir šaltinyje. Šis skirtumas (išreikštas energijos arba greičio vienetais) ir yra vadinamas **izomeriniu poslinkiu**¹:

$$\delta \equiv (\Delta E_{\text{suž}} - \Delta E_{\text{pagr}})_a - (\Delta E_{\text{suž}} - \Delta E_{\text{pagr}})_s = \frac{Ze^2}{10\epsilon_0} (|\psi_a(0)|^2 - |\psi_s(0)|^2) (R_{\text{suž}}^2 - R_{\text{pagr}}^2); \quad (3.1.10)$$

čia indeksas "a" žymi sugėriklį ("absorberį"), o indeksas "s" žymi šaltinį. Kadangi $R_{\text{suž}}$ ir R_{pagr} skiriasi nežymiai, galima užrašyti

$$R_{\text{suž}}^2 - R_{\text{pagr}}^2 \approx \frac{d}{dR} (R^2) \Delta R = 2R \Delta R; \quad (3.1.11)$$

čia ΔR yra sužadintojo ir pagrindinės būsenos branduolių spindulių skirtumas:

$$\Delta R \equiv R_{\text{suž}} - R_{\text{pagr}}, \quad (3.1.12)$$

o $R \equiv (R_{\text{suž}} + R_{\text{pagr}}) / 2 \approx R_{\text{suž}} \approx R_{\text{pagr}}$. Įrašę (3.1.11) į (3.1.10), gauname:

$$\delta = \frac{Ze^2}{5\epsilon_0} R^2 \frac{\Delta R}{R} (|\psi_a(0)|^2 - |\psi_s(0)|^2). \quad (3.1.13)$$

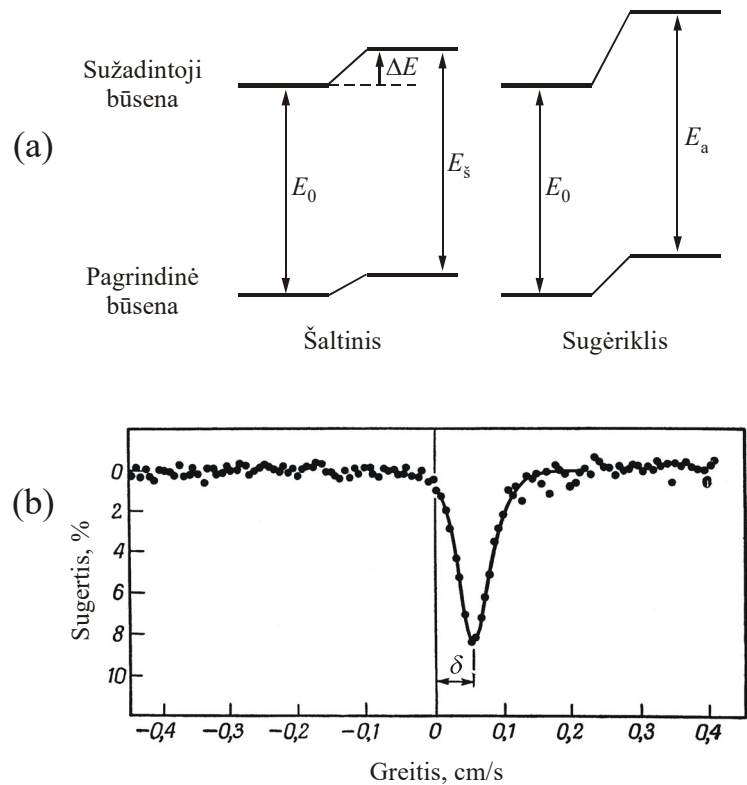
Izomerinis poslinkis δ visuomet būna keliom eilėm mažesnis už lygmens poslinkį (3.1.8), nes branduolio spindulio santykinis pokytis $\Delta R / R$ dažniausiai būna nežymus (tipiška vertė yra 0.01% eilės), o elektronų tankių sugėriklyje ir šaltinyje skirtumą $|\psi_a(0)|^2 - |\psi_s(0)|^2$ lemia

¹ Žodis "izomerinis" atspindi tą faktą, kad energijų skirtumas priklauso nuo dviejų izomerų (t.y., vienodos sudėties, tačiau skirtingos energijos branduolių) spindulių skirtumo.

atomo išorinių sluoksnių s elektronų erdvinio pasiskirstymo pokyčiai, kurių indėlis į pilnutinį elektronų tankį prie branduolio yra žymiai mažesnis už 1s elektronų indėlį.

Matome, kad izomerinio poslinkio išraiška (3.1.13) yra sudaryta iš dviejų daugiklių: daugiklį prieš skliaustus galima pavadinti "branduoliniu daugikliu", nes jis priklauso nuo branduolio parametrų – branduolio spindulio R ir jo santykinio pokyčio $\Delta R / R$, – o daugiklį skliaustuose galima vadinti "atominiu daugikliu", nes jis priklauso nuo atomo elektroninės konfigūracijos. Kaip bus parodyta toliau, kiti hipersmulkiosios sandaros efektai taip pat yra išreiškiami dviem daugikliais, kurių vienas priklauso nuo branduolio parametrų, o kitas – nuo branduolio elektroninės aplinkos parametrų. Tai apsunkina tų efektų matavimo duomenų aiškinimą, nes, norint nustatyti vieną daugiklį, reikia žinoti kito daugiklio vertę. Pvz., norint pagal išmatuotąją izomerinį poslinkį nustatyti sugėriklio ir šaltinio erdvinio elektros krūvio tankių branduolio centre skirtumą $e(|\psi_a(0)|^2 - |\psi_s(0)|^2)$, reikia nepriklausomai išmatuoti (arba apskaičiuoti) sužadintojo branduolio spindulio pokytį ΔR . Geležies izotopo ^{57}Fe atveju $\Delta R / R = -18 \cdot 10^{-4}$, t.y., sužadintoje būsenoje ^{57}Fe branduolio spindulys sumažėja. Daugumos kitų branduolių spindulys sužadintoje būsenoje yra didesnis, negu pagrindinėje (pvz., alavo izotopo ^{119}Sn $\Delta R / R = 1.0 \cdot 10^{-4}$). Kadangi ^{57}Fe atveju $\Delta R < 0$, tai, pagal (3.1.13), ^{57}Fe atveju teigiamas izomerinis poslinkis reiškia, kad elektronų tankis prie branduolio sumažėja, o neigiamas izomerinis poslinkis reiškia, kad elektronų tankis prie branduolio išauga. Matavimai patvirtina šią išvadą: nustatyta, kad, kai ^{57}Fe atomas netenka valentinio s elektrono, izomerinis poslinkis lygus $\delta_s = +2.05$ mm/s, o kai ^{57}Fe atomas gauna papildomą s elektroną, izomerinis poslinkis lygus $\delta_s = -2.05$ mm/s. Taigi, naudojant izomerinį poslinkį, galima kiekybiškai įvertinti atomo elektronų konfigūracijos pokytį, kai susidaro cheminis ryšys: kuo didesnis izomerinis poslinkis, tuo stipresnis cheminio ryšio joninis pobūdis. Pvz., Fe elektronų konfigūracijos pokytį galima išreikšti santykiu $\delta / |\delta_s|$, kur $|\delta_s| = 2.05$ mm/s.

Nors izomerinį poslinkį tiesiogiai sukelia tik s elektronų tankio pokytis atomo centre, tačiau kitų elektronų netekimas arba prisijungimas taip pat gali sukelti žymų izomerinį poslinkį, nes jie dalinai ekranuoja s elektronus ir tokiu būdu veikia s elektronų erdvinį pasiskirstymą. Pvz., nustatyta, kad divalentės ir trivalentės geležies druskos turi skirtingus izomerinius poslinkius, nors Fe^{2+} ir Fe^{3+} jonų elektronų konfigūracijos skiriasi tik vienu 3d elektronu. Taip yra todėl, kad, Fe^{2+} jonui netekus 3d elektrono ir virtus Fe^{3+} jonu, sumažėja 3d elektronų ekranuojantis poveikis, todėl sustiprėja 3s elektronus veikiantis kuloninis elektrinis laukas ir 3s elektronai yra šiek tiek "pritraukiami" prie branduolio, t.y., elektronų krūvio tankis atomo centre *išauga*.



3.1 pav. Izomerinis poslinkis. (a) Šaltinio ir sugėriklio energijos lygmenys. (b) Atitinkamas Mesbauerio spektras (sugėriklis – bromo fericianidas 20 K temperatūroje; šaltinis – ^{57}Co chromo aplinkoje).

Izomerinį poslinkį iliustruoja 3.1 pav. 3.1a pav. pavaizduoti branduolio energijos lygmenys šaltinyje ir sugėriklyje. Šiuo atveju kvantinio šuolio energija yra didesnė sugėriklyje, negu šaltinyje, t.y., izomerinis poslinkis yra teigiamas. Atitinkamai, Mesbauerio spektro minimumas atitinka teigiamą šaltinio greitį (žr. 3.1b pav.), t.y., rezonansinė sugertis tampa įmanoma tik tuomet, kad šaltinis artėja link sugėriklio.

Izomerinio poslinkio skaičiavimas, kai sugėriklio branduolių energijos lygmenys yra suskilę (pvz., žr. 3.2 pav. ir 3.3 pav.), yra paaiškintas 3.3 poskyrio pabaigoje.

3.2. Magnetinė dipolinė hipersmulkių sandara

3.2.1. Branduolio energijos lygmenų skilimas magnetiniame lauke

Branduolio magnetinio momento galimųjų projekcijų į duotąją ašį skaičius yra lygus branduolio sukinio galimųjų projekcijų skaičiui, t.y., $2I + 1$ (žr. (2.1.2)). Kai nėra išorinio magnetinio lauko, visos branduolio magnetinio momento orientacijos yra lygiavertės ir atitinka vienodą energiją (kitais žodžiais, minėtosios ašies pasirinkimas neturi jokios įtakos matavimų rezultatams). Naudojant kvantinės mechanikos terminologiją, tas pats teiginys formuluojamas šitaip: izoliuoto branduolio energijos lygmenys yra išsigimę; lygmens išsigimimo laipsnis yra lygus $2I + 1$. Esant išoriniam magnetiniam laukui, branduolys įgyja papildomą potencinę energiją, kuri lygi

$$E_M = -\mu_z B; \quad (3.2.1)$$

čia μ_z yra branduolio pilnutinio magnetinio dipolinio momento vektoriaus projekcija į išorinio lauko kryptį, o B yra išorinio lauko magnetinė indukcija. Projekciją μ_z nusako (2.2.25) lygybė:

$$\mu_z = m_I g_I \mu_N \quad (m_I = -I, -I+1, \dots, I-1, I); \quad (3.2.2)$$

čia g_I yra branduolio g daugiklis, m_I yra branduolio pilnutinio judesio kiekio ("sukinio") vektoriaus projekcija į lauko kryptį, išreikšta \hbar vienetais, I yra branduolio sukinio kvantinis skaičius, o μ_N yra branduolinis magnetonas. Vadinasi, branduolio sąveikos su išoriniu magnetiniu lauku energija (3.2.1) gali būti lygi tik šioms vėrtėms:

$$E_M = -m_I g_I \mu_N B \quad (m_I = -I, -I+1, \dots, I-1, I). \quad (3.2.3)$$

Tai reiškia, kad, esant išoriniam magnetiniam laukui, branduolio energijos lygmuo skyla į $2I + 1$ lygmenų, tarp kurių yra $g_I \mu_N B$ didumo intervalai. γ kvanto, kuris sugeriamas arba

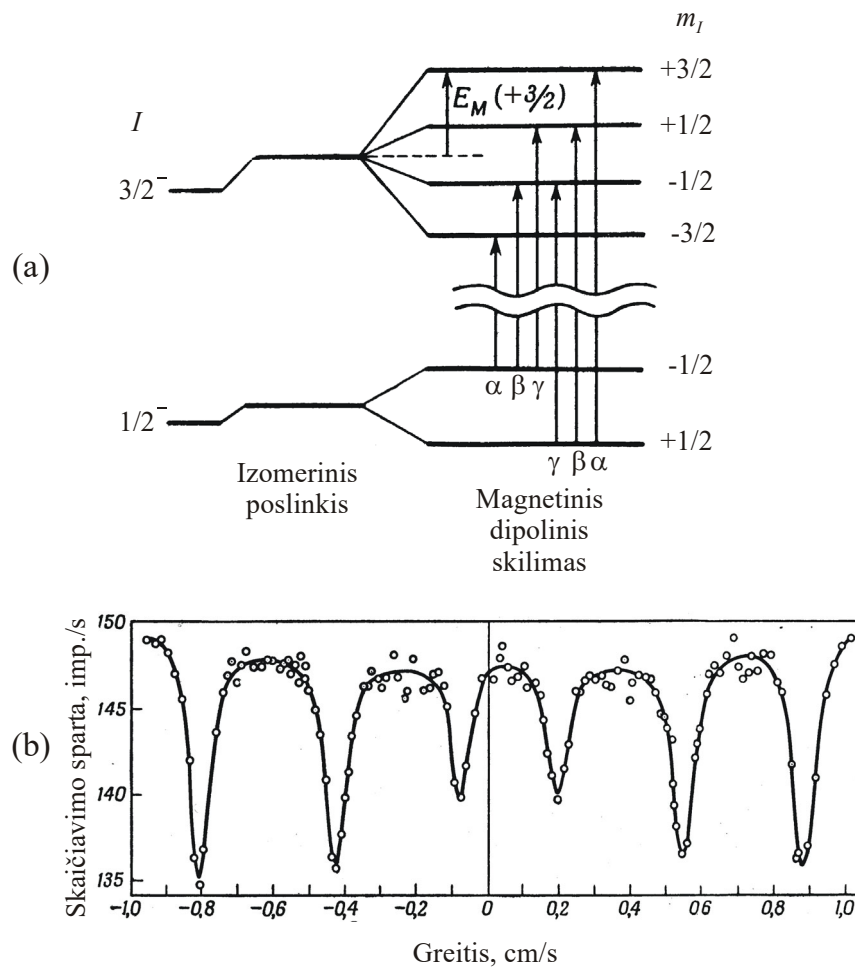
emituojamas, vykstant šuoliui tarp pagrindinio ir sužadintojo lygmenų, energija priklauso nuo abiejų tų lygmenų hipersmulkiosios sandaros. Pagal (3.2.3), to γ kvanto energija yra lygi

$$\hbar\omega = (\hbar\omega)_0 - (g_{\text{suž}}m_{\text{suž}} - g_{\text{pagr}}m_{\text{pagr}})\mu_N B; \quad (3.2.4)$$

čia $(\hbar\omega)_0$ yra γ kvanto energija, kai nėra magnetinio dipolinio skilimo, $g_{\text{suž}}$ ir $m_{\text{suž}}$ yra dydžių g_I ir m_I vertės sužadintoje būsenoje, o g_{pagr} ir m_{pagr} yra jų vertės pagrindinėje būsenoje.

Geriausiais ištirtas branduolio energijos lygmenų skilimas dėl jo pilnutinio dipolinio magnetinio momento sąveikos su efektiniu magnetiniu lauku, kurį sukuria branduolį supantys elektronai. Šis lygmenų skilimas vadinamas **magnetine dipoline hipersmulkiaja sandara**. Šiuo atveju branduolį veikiančio efektinio magnetinio lauko indukcijos vektorius \mathbf{B} yra proporcingas atomo elektronų pilnutinio judesio kiekio momento vektoriui \mathbf{J} . Šis laukas vadinamas "efektiniu", nes jis neturi tiksliai apibrėžtos krypties (jo kryptis yra susijusi su \mathbf{J} kryptimi, kuri nėra fiksuota). Sąveikos energiją galima skaičiuoti pagal (3.2.3) formulę. Akivaizdu, kad, kaip ir izomerinio poslinkio atveju, sąveikos energija yra proporcinga dviem parametrams – branduolio parametrai g_I ir atominiam parametrai B . Vadinasi, norint pagal išmatuotąją E_M vertę nustatyti vieną iš šių dviejų parametru, reikia žinoti kito parametro vertę.

3.2a pav. yra pavaizduota ^{57}Fe branduolio pagrindinio ir pirmojo sužadintojo lygmenų magnetinė dipolinė hipersmulkioji sandara. Šios energijos lygmenų diagramos kairėje yra nurodyti branduolio sukinio kvantiniai skaičiai I , o skilusiųjų lygmenų dešinėje yra nurodyti atitinkami sukinio projekcijos kvantiniai skaičiai m_I . Šalia I verčių nurodytas branduolio būsenos lyginumas (viršutinis indeksas "-" reiškia, kad branduolio banginė funkcija yra nelyginė, o ženklas "+" reikštų, kad banginė funkcija yra lyginė). Pagrindinėje būsenoje ("1/2 -") ^{57}Fe branduolio magnetinio momento ir sukinio projekcijų ženklai yra vienodi (t.y., $g_{\text{pagr}} > 0$), todėl, pagal (3.2.3), E_M mažėja, augant m_I . Sužadintos būsenos ("3/2 -") magnetinio momento ir sukinio projekcijų ženklai yra priešingi (t.y., $g_{\text{suž}} < 0$), todėl E_M didėja, augant m_I .



3.2 pav. (a) ^{57}Fe branduolio pagrindinio ir pirmojo sužadintojo energijos lygmenų magnetinė hipersmulkių sandara ir leistiniai kvantiniai šuoliai. (b) Atitinkamas Mesbauerio spektras. Sugėriklis – trivalentės geležies oksidas Fe_2O_3 (antiferomagnetikas).

Šaltinio ir sugėriklio energijos lygmenų skilimas pasireiškia spinduliuotės ir sugerties spektrų linijų skilimu. Kvantiniai šuoliai, kurie atitinka eksperimentiškai stebimasias sugerties spektro linijas, yra pavaizduoti 3.2a pav. rodyklėmis.

3.2.2. Branduolio kvantinių šuolių tikimybės per laiko vienetą

Vykstant kvantiniam šuoliui tarp dviejų branduolio lygmenų, kurie atitinka sukinio kvantinius skaičius (I, m_I) ir (I', m_I') , išspinduliuojamas arba sugeriamas vadinamosios "multipolinės spinduliuotės" fotonas, t.y., fotonas, kuris turi apibrėžtą judesio kiekio momentą \mathbf{L} ir apibrėžtą to momento projekciją L_z . Pagal judesio kiekio momento tvermės dėsnį,

$$\mathbf{L} = \mathbf{I}' - \mathbf{I}, \quad (3.2.5)$$

kur \mathbf{I}' yra aukštesniojo energijos lygmens judesio kiekio momento vektorius, o \mathbf{I} yra žemesniojo lygmens judesio kiekio momento vektorius. Fotono judesio kiekio momento ir jo projekcijos kvantinius skaičius žymėsime L ir m_L . Kvantinis skaičius L nusako multipolinės spinduliuotės eilę. L -tosios eilės multipolinė spinduliuotė dar vadinama " 2^L -poline spinduliuote". Pritaikius bendrąją judesio kiekio momentų sudėties taisyklę ir atsižvelgus į tai, kad multipolinė spinduliuotė su $L = 0$ neegzistuoja, gaunamos tokios sąlygos, kurias turi tenkinti skaičiai L ir m_L :

$$\text{kai } I \neq I': |I - I'| \leq L \leq I + I'; \quad (3.2.6a)$$

$$\text{kai } I = I': 1 \leq L \leq I + I'; \quad (3.2.6b)$$

$$m_L = m_I' - m_I; \quad (3.2.7)$$

$$-L \leq m_L \leq L; \quad (3.2.8)$$

čia štrichuoti žymenys atitinka aukštesnį energijos lygmenį.

L ir m_L vertės pilnai nusako spinduliuotės elektromagnetinio lauko pasiskirstymą erdveje, tačiau nieko nesako apie jo poliarizaciją ir lyginumą. Kadangi Maksvelio lygtys, kurios apibrėžia elektromagnetinės spinduliuotės lauką, yra simetriškos inversijos atžvilgiu, tai kiekvieną L ir m_L porą atitinka dviejų priešingų lyginumų multipolinė spinduliuotė. Multipolinė

spinduliuotė, kurios magnetinis laukas keičia ženklą, atlikus koordinačių inversiją, vadinama "nelygine multipoline spinduliuote" (kitais žodžiais, jos lyginumas yra -1), o multipolinė spinduliuotė, kurios magnetinis laukas nekeičia ženklo po inversijos, vadinama "lygine multipoline spinduliuote" (kitais žodžiais, jos lyginumas yra $+1$). L -tosios eilės multipolinė spinduliuotė, kurios lyginumas yra $(-1)^L$, vadinama **elektrine multipoline spinduliuote** (tokios spinduliuotės magnetinis laukas yra tiksliai skersinis, o elektrinis laukas yra tik apytiksliai skersinis, t.y., jis turi mažą išilginę komponentę, kurios amplitudė yra atvirkščiai proporcinga atstumo iki branduolio kvadratui¹). L -tosios eilės multipolinė spinduliuotė, kurios lyginumas yra $(-1)^{L+1}$, vadinama **magnetine multipoline spinduliuote** (tokios spinduliuotės elektrinis laukas yra tiksliai skersinis, o magnetinis laukas turi mažą išilginę komponentę). Elektrinės multipolinės spinduliuotės poliarizacija yra statmena tos pačios eilės magnetinės multipolinės spinduliuotės poliarizacijai. Iš Maksvelio lygčių išplaukia, kad elektrinio lauko lyginumas yra priešingas magnetinio lauko lyginumui. Vadinasi, L -tosios eilės elektrinės multipolinės spinduliuotės elektrinio lauko lyginumas yra $(-1)^{L+1}$, o L -tosios eilės magnetinės multipolinės spinduliuotės elektrinio lauko lyginumas yra $(-1)^L$. Kvantiniai šuoliai, kuriuose atsiranda arba sugerama L -tosios eilės elektrinė multipolinė spinduliuotė, yra vadinami "elektriniais šuoliais" ir žymimi "EL" (t.y., $E1$, $E2$ ir t.t.), o šuoliai, kuriuose dalyvauja L -tosios eilės magnetinė multipolinė spinduliuotė, yra vadinami "magnetiniais šuoliais" ir žymimi "ML" (t.y., $M1$, $M2$ ir t.t.). Iš (3.2.6a,b) išplaukia, kad bendruoju atveju, vykstant šuoliui tarp duotųjų dviejų energijos lygmenų, gali būti spinduliuojama arba sugerama įvairių eilių multipolinė spinduliuotė. Tačiau kiekvieną galimą spinduliuotės eilę L atitinka tik vieno tipo šuolis (t.y., šuolis su duotu L gali būti tik elektrinis arba tik magnetinis). Leistinąjį kvantinio šuolio (ir spinduliuotės) tipą nusako ši "lyginumo atrankos taisyklė": jeigu šuolio metu branduolio būsenos lyginumas nepakinta, tada šuolyje gali dalyvauti tik lyginė multipolinė spinduliuotė (t.y., nelyginiam L yra galimas tik ML šuolis, o lyginiam L yra galimas tik EL šuolis), o jeigu šuolio metu būsenos lyginumas pakinta, tada šuolyje gali dalyvauti tik nelyginė multipolinė spinduliuotė (t.y., nelyginiam L yra galimas tik EL šuolis, o lyginiam L yra galimas tik ML šuolis).

Kvantinio šuolio tikimybė labai priklauso nuo jo multipolinės eilės ir tipo. Kai gama spinduliuotės bangos ilgis yra žymiai didesnis už branduolio matmenis (t.y., fotono energija neviršija kelių MeV), savaiminių elektrinių kvantinių šuolių tikimybę per laiko vienetą galima apskaičiuoti pagal šias apytiksles formules:

$$\begin{aligned}\lambda(E1) &= 1.0 \cdot 10^{14} A^{2/3} E^3, \\ \lambda(E2) &= 7.3 \cdot 10^7 A^{4/3} E^5, \\ \lambda(E3) &= 34 A^2 E^7, \\ \lambda(E4) &= 1.1 \cdot 10^{-5} A^{8/3} E^9;\end{aligned}\tag{3.2.9}$$

čia λ yra šuolio tikimybė per laiko vienetą (s^{-1}), A yra branduolio masės skaičius, o E yra šuolio energija (MeV). Savaiminių magnetinių kvantinių šuolių tikimybių per laiko vienetą apytikslės išraiškos yra tokios:

¹ Nors daugumą reiškinių galima paaiškinti, laikant, kad abu laukai yra skersiniai, tačiau būtent minėtoji maža išilginė dedamoji sąlygoja tą faktą, kad multipolinės spinduliuotės laukas turi nenulinį judesio kiekio momentą. Ši išvada išplaukia iš elektromagnetinės spinduliuotės lauko judesio kiekio momento tūrinio tankio išraiškos: $\mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) / c^2$; čia \mathbf{r} yra spindulys vektorius branduolio atžvilgiu (jo kryptis sutampa su spinduliuotės fazinio greičio ir bangos vektoriaus kryptimi), \mathbf{E} yra elektrinio lauko stiprio vektorius, o \mathbf{H} yra magnetinio lauko stiprio vektorius ($\mathbf{E} \times \mathbf{H}$ yra Pointingo vektorius). Sandauga $\mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{H})$ nėra lygi nuliui tik tuomet, kai Pointingo vektorius nėra lygiagretus \mathbf{r} , t.y., kai bent vienas iš laukų \mathbf{E} ir \mathbf{H} nėra skersinis. Tuomet, vaizdžiai kalbant, spinduliuotės energijos srautas yra šiek tiek "užsuktas" atžvilgiu branduolio, todėl spinduliuotės laukas turi nenulinį judesio kiekio momentą.

$$\begin{aligned}
\lambda(M1) &= 5.6 \cdot 10^{13} E^3, \\
\lambda(M2) &= 3.5 \cdot 10^7 A^{2/3} E^5, \\
\lambda(M3) &= 15 A^{4/3} E^7, \\
\lambda(M4) &= 4.5 \cdot 10^{-6} A^2 E^9.
\end{aligned}
\tag{3.2.10}$$

Indukuotųjų kvantinių šuolių (pvz., šuolių, kurių metu sugeriami γ kvantai) tikimybės per laiko vienetą yra kitokios (jos proporcingos spinduliuotės energijos spektriniam tankiui), tačiau jų santykiai yra lygūs atitinkamų savaiminių šuolių tikimybių santykiams (tai išplaukia iš Einšteino elementariosios kvantinės spinduliuotės teorijos). (3.2.9) ir (3.2.10) formulėse akivaizdu, kad, esant kelių MeV eilės arba mažesnei kvantinio šuolio energijai E , šuolio tikimybė per laiko vienetą sparčiai mažėja, augant multipolinei eilei L . Todėl tais atvejais, kai yra įmanomos kelios L vertės, pasireiškia tik šuoliai, kurie atitinka mažiausią L .

Reikia turėti omenyje, kad (3.2.9) ir (3.2.10) reiškiniai nusako tik *tipiškų* λ verčių didumo eilę. Atskirais atvejais pagal tas formules apskaičiuotoji λ vertė gali skirtis nuo tikrosios vertės 2 ÷ 3 eilėmis.

3.2a pav. atvejui pritaikius multipolinės spinduliuotės eilės atrankos taisyklę (3.2.6a) ir lyginumo atrankos taisyklę, gaunama, kad yra galimi tik $M1$ ir $E2$ šuoliai (t.y., kvantiniame šuolyje tarp vienodo lyginumo būsenų su $I=1/2$ ir $I'=3/2$ gali dalyvauti tik magnetinė dipolinė ir elektrinė kvadrupolinė spinduliuotė). Įrašę šuolio energiją ($E=0.0144$ MeV) ir masės skaičių ($A=57$) į (3.2.9) ir (3.2.10) formules, gauname, kad savaiminio $M1$ šuolio tikimybė per laiko vienetą yra 10^8 s⁻¹ eilės, o savaiminio $E2$ šuolio tikimybė per laiko vienetą yra artima 10 s⁻¹. Taigi, šiuo atveju $E2$ šuoliai beveik nepasireiškia, nes jų tikimybė yra 10^7 kartų mažesnė už $M1$ šuolių tikimybę. Kadangi $M1$ šuolio atveju $L=1$, tai, pagal (3.2.8), yra galimi tik šuoliai, kurių metu $m_L=0, \pm 1$. Todėl šuoliai " $-1/2 \rightarrow +3/2$ " ir " $1/2 \rightarrow -3/2$ " nevyksta: jų atveju $m_L=\pm 2$. Vadinasi, vyksta tik šeši šuoliai, kurie pavaizduoti 3.2a pav.

3.2.3. Branduolio magnetinio momento ir efektinio magnetinio lauko tyrimas Mesbauerio spektrometru

Magnetinės hipersmulkiosios sandaros tyrimai dažniausiai atliekami su fero-, feri- ir antiferomagnetinėmis medžiagomis, nes tose medžiagose efektinis magnetinis laukas yra ypač stiprus ir dėl to yra lengviau išskirti hipersmulkiają sandarą, negu kitose medžiagose. Pirmasis sėkmingas tokio pobūdžio eksperimentas buvo atliktas su ⁵⁷Fe metalinėje geležyje. Alavo izotopo ¹¹⁹Sn lygmenų hipersmulkioji sandara buvo iširta feromagnetiniame junginyje Mn₂Sn. Analogiški tyrimai buvo atlikti su nuklidais ¹⁹⁷Au, ¹⁶¹Dy, ¹⁶⁹Tm ir kt. Pakankamai stiprūs magnetiniai laukai gaunami ir nemagnetinių atomų branduolių atveju, kai tie atomai yra įvairiuose magnetiniuose junginiuose arba feromagnetinių medžiagų lydiniuose.

γ spinduliuotės spektro magnetinė hipersmulkioji sandara gali pasireikšti ne tik sugėriklyje, bet ir šaltinyje. Tokiu atveju Mesbauerio spektras taptų labai sudėtingas. Siekiant to išvengti, šaltinio branduoliai talpinami į diamagnetiko (paladžio, rodžio, nerūdijančio plieno ir t.t.) gardele. Tuomet šaltinio spinduliuotės spektras neturi magnetinės hipersmulkiosios sandaros (t.y., sudarytas iš vienos neskilusios linijos) ir išmatuotame Mesbauerio spektre minimumų skaičius sutampa su leistinių kvantinių šuolių skaičiumi (žr. 3.2b pav.). Iš (3.2.3) išplaukia, kad tokiu atveju Mesbauerio spektro minimumų Doplerio greičiai yra proporcingi reiškiniui

$$(\hbar\omega)_a - (\hbar\omega)_s = \delta - (g_{\text{suž}} m_{\text{suž}} - g_{\text{pagr}} m_{\text{pagr}}) \mu_N B;
\tag{3.2.11}$$

čia $(\hbar\omega)_a$ ir $(\hbar\omega)_s$ yra γ kvantų energijos sugėriklyje ("absorberyje") ir šaltinyje, o $\delta \equiv (\hbar\omega)_{0a} - (\hbar\omega)_{0s}$ yra 3.1 poskyryje aprašytasis izomerinis poslinkis.

Magnetinės hipersmulkiosios sandaros linijos yra išsidėsčiusios simetriškai atžvilgiu spektro centro. 3.2a pav. dvi linijos, kurios atitinka šuolius tarp lygmenų su $m_I = \pm 1/2$ ir lygmenų su $m_I = \pm 3/2$, pažymėtos α raide, dvi linijos, kurios atitinka šuolius $+1/2 \rightarrow +1/2$ ir $-1/2 \rightarrow -1/2$, pažymėtos β , o dvi linijos, kurios atitinka šuolius $+1/2 \rightarrow -1/2$, ir $-1/2 \rightarrow +1/2$, pažymėtos γ . Kad tos linijos būtų išskirtos, natūralusis Mesbauerio spektro linijos plotis turi

būti mažesnis už intervalą tarp polygmenių $g_I \mu_N B$ (žr. (3.2.3)). Jeigu magnetinio lauko, kuris veikia branduolio magnetinį momentą, visos kryptys yra vienodai tikėtinos (pvz., polikristalinio sugėriklio atveju), tuomet multipolinė spinduliuotė, kuri dalyvauja kvantiniuose šuoliuose, yra nepoliarizuota, o α , β ir γ linijų santykinis intensyvumas yra $3:2:1$. Vadinasi, pagal linijų intensyvumų santykį (t.y., pagal Mesbauerio spektro minimumų integralų santykį) galima nustatyti, tarp kurių polygmenių vyksta atitinkami kvantiniai šuoliai. Fe_2O_3 Mesbauerio spektre, kuris pavaizduotas 3.2b pav., tos linijos yra išsidėsčiusios tokia tvarka: $\alpha, \beta, \gamma, \gamma, \beta, \alpha$.

Išsiaiškinsime, kaip pagal hipersmulkiosios sandaros sandų padėtis Mesbauerio spektre nustatyti sužadintojo ir nesužadintojo branduolio magnetinių momentų santykį bei efektinio magnetinio lauko indukciją. Pažymėkime kiekvienos linijų poros (α, β ir γ) Doplerio greičių skirtumus ν_α, ν_β ir ν_γ . P.v.z., ν_γ yra dviejų mažiausio intensyvumo (3.2b pav. – ketvirtosios ir trečiosios) linijų Doplerio greičių skirtumas. Tada iš 3.2a pav. akivaizdu, kad skirtumas $\nu_\gamma - \nu_\beta$ yra proporcingas dvigubam intervalui tarp sužadintojo lygmens polygmenių, kurie atitinka $m_I = \pm 1/2$, o suma $\nu_\beta + \nu_\gamma$ yra proporcinga dvigubam intervalui tarp pagrindinio lygmens polygmenių. Vadinasi, minėtųjų intervalų santykis yra lygus

$$\frac{g_{\text{suž}} \mu_N B}{g_{\text{pagr}} \mu_N B} \equiv \frac{g_{\text{suž}}}{g_{\text{pagr}}} = \frac{\nu_\gamma - \nu_\beta}{\nu_\beta + \nu_\gamma}. \quad (3.2.12)$$

Taigi, sužadintojo ir pagrindinio lygmenų g faktorių santykio ženklą galima lengvai nustatyti pagal Mesbauerio spektro γ linijų padėtį (kaip minėta, γ linijų intensyvumas yra mažiausias). Turint omenyje, kad, didėjant kvantinio šuolio energijai, atitinkamos Mesbauerio spektro smailės Doplerio greitis didėja (žr. (1.4.1) formulę), iš 3.2a pav. aišku, kad, esant tokiam polygmenių išsidėstymui kaip 3.2a pav., abiejų γ linijų Doplerio greičiai visada bus tarp abiejų β linijų Doplerio greičių, o pastarieji bus tarp abiejų α linijų Doplerio greičių (t. y. $\nu_\gamma < \nu_\beta < \nu_\alpha$). Vadinasi, šiuo atveju dvi mažiausio intensyvumo Mesbauerio spektro smailės bus vidurinės (t. y. trečioji ir ketvirtoji, kaip 3.2b pav.). Tai rodo, kad $g_{\text{suž}}$ ir g_{pagr} ženklai yra priešingi ($g_{\text{suž}} / g_{\text{pagr}} < 0$; žr. (3.2.12) formulę). g_{pagr} arba $g_{\text{suž}}$ ženklo pakeitimas pasireiškia tuo, kad pasikeičia atitinkamo lygmens polygmenių tvarka (žr. 3.2a pav.). Toks vieno lygmens polygmenių sukeitimas vietomis pasireiškia tuo, kad Mesbauerio spektro β ir γ smailės taip pat susikeičia vietomis. Todėl, kai $g_{\text{suž}}$ ir g_{pagr} ženklai yra vienodi, dvi mažiausio intensyvumo Mesbauerio spektro smailės nėra vidurinės (t. y. jos yra pirmoji ir šeštoji arba antroji ir penktoji), o jų Doplerio greičių skirtumas yra didesnis negu β smailių (t. y. $\nu_\gamma > \nu_\beta$). Įrašę (3.2.12) į (2.2.26), išvedame pirmosios sužadintosios ir pagrindinės būsenų magnetinių momentų santykio išraišką Doplerio greičių skirtumais, kai pagrindinio lygmens $I = 1/2$, o sužadintojo lygmens $I = 3/2$:

$$\frac{\mu_{3/2}}{\mu_{1/2}} = \frac{\frac{3}{2} g_{\text{suž}}}{\frac{1}{2} g_{\text{pagr}}} = 3 \frac{\nu_\gamma - \nu_\beta}{\nu_\beta + \nu_\gamma} \quad (3.2.13)$$

(čia apatinis indeksas prie „ μ “ nurodo branduolio sukinių kvantinį skaičių I). Taigi, žinant pagrindinės būsenos magnetinį momentą $\mu_{1/2}$, pagal Mesbauerio spektrą galima apskaičiuoti sužadintosios būsenos magnetinį momentą. Pagrindinių būsenų branduolių magnetiniai momentai dažniausiai matuojami branduolinio magnetinio rezonanso metodu. ^{57}Fe branduolio pagrindinės būsenos magnetinis momentas lygus $\mu_{1/2} = (0.0903 \pm 0.0007) \mu_N$, o Mesbauerio spektroskopijos metodu gautoji pirmosios sužadintosios būsenos magnetinio momento vertė lygi $\mu_{3/2} = -(0.155 \pm 0.004) \mu_N$.

Efektinio magnetinio lauko indukciją B galima nustatyti pagal Doplerio greičių skirtumą ν_α :

$$\nu_\alpha = \frac{c}{\hbar \omega_0} \left[\hbar \omega \left(+\frac{1}{2} \rightarrow +\frac{3}{2} \right) - \hbar \omega \left(-\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{3}{2} \right) \right]; \quad (3.2.14)$$

čia $\hbar\omega_0$ yra šaltinio spinduliuotės γ kvantų energija, o laužtiniuose skliaustuose yra didžiausios ir mažiausios šuolių energijų skirtumas (žr. 3.2a pav.). Akivaizdu, kad tas skirtumas yra lygus

$$2(E_{M \max, \text{ pagr}} + E_{M \max, \text{ suž}}) = 2(|g_{\text{ pagr}}| I_{\text{ pagr}} + |g_{\text{ suž}}| I_{\text{ suž}}) \mu_N B.$$

Įrašę šį reiškinį į (3.2.14) ir pasinaudoję tuo, kad šiuo atveju $I_{\text{ pagr}} = 1/2$, $I_{\text{ suž}} = 3/2$, gauname:

$$v_\alpha = \frac{c}{\hbar\omega_0} (|g_{\text{ pagr}}| + 3|g_{\text{ suž}}|) \mu_N B = \frac{c}{\hbar\omega_0} |g_{\text{ pagr}}| \left(1 + 3 \frac{|g_{\text{ suž}}|}{|g_{\text{ pagr}}|} \right) \mu_N B. \quad (3.2.15)$$

Tokiu būdu išmatuotoji efektinės magnetinės indukcijos B vertė metalinėje geležyje yra lygi (33.0 ± 0.3) T.

3.3. Elektrinė kvadrupolinė hipersmulkių sandara

Branduolio krūvio pasiskirstymo sąveikos su išoriniu elektriniu lauku energija yra lygi

$$E = \int \rho(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') dV'; \quad (3.3.1)$$

čia φ yra išorinio elektrinio lauko potencialas (integruojama branduolio tūriu). Potencialą φ atskaitysime nuo branduolio centro (t.y., laikysime, kad branduolio centre $\varphi = 0$). Tuomet funkcijos $\varphi(\mathbf{r}')$ skleidinys Teiloro eilute branduolio centro aplinkoje yra tokio pavidalo:

$$\varphi(\mathbf{r}') = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \varphi}{\partial x'_i} \Big|_{\mathbf{r}'=0} x'_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'_i \partial x'_j} \Big|_{\mathbf{r}'=0} x'_i x'_j + \dots; \quad (3.3.2)$$

čia, kad būtų trumpiau, koordinatės atskaitomos nuo branduolio centro ir naudojami žymenys $x'_1 \equiv x'$, $x'_2 \equiv y'$ ir $x'_3 \equiv z'$. Įrašius (3.3.2) į (3.3.1), gaunama energijos išraiška, kuri sudaryta iš tokio pavidalo dėmenų: dipolinis dėmuo, kuris lygus trijų integralų sumai

$$\sum_{i=1}^3 \int \rho(\mathbf{r}') x'_i \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'_i} \Big|_{\mathbf{r}'=0} dV' \equiv \int \rho(\mathbf{r}') x' \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \Big|_{\mathbf{r}'=0} dV' + \int \rho(\mathbf{r}') y' \frac{\partial \varphi}{\partial y'} \Big|_{\mathbf{r}'=0} dV' + \int \rho(\mathbf{r}') z' \frac{\partial \varphi}{\partial z'} \Big|_{\mathbf{r}'=0} dV', \quad (3.3.3)$$

ir kvadrupolinis dėmuo, kuris lygus devynių integralų sumai

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \int \rho(\mathbf{r}') x'_i x'_j \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'_i \partial x'_j} \Big|_{\mathbf{r}'=0} dV'. \quad (3.3.4)$$

Visi trys integralai, kurie sudaro dipolinį dėmenį (3.3.3), yra lygūs nuliui, nes tų integralų pointegralinės funkcijos yra nelyginės (t.p. žr. 2.3 poskyrį). Vadinasi, branduolio energiją išoriniame elektriniame lauke lemia kvadrupolinis dėmuo (aukštesniųjų eilių dėmenų vaidmuo yra žymiai mažesnis, negu kvadrupolinio dėmens). Tarkime, kad išoriniam elektriniam laukui yra būdinga cilindrinė simetrija z ašies atžvilgiu (ta ašis nebūtinai sutampa su branduolio simetrijos ašimi z'). Tuomet, laikant, kad taškas $z = 0$ atitinka branduolio centrą, kvadrupolinį indėlį į energiją galima išreikšti tokiu pavidalu:

$$E_Q = \frac{1}{4} eQ' \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right)_{z=0}; \quad (3.3.5)$$

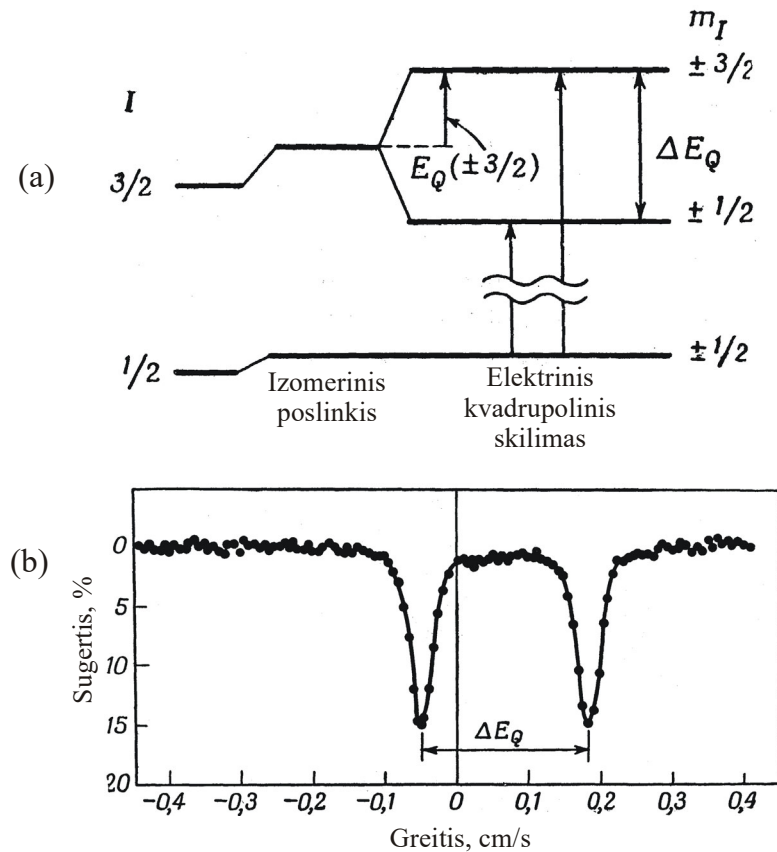
čia štrichas kvadrupolinio momento žymenyje Q' nurodo, kad jis skaičiuojamas ne atžvilgiu branduolio simetrijos ašies z' , o atžvilgiu išorinio lauko simetrijos ašies z . Įrašę kvadrupolinio momento Q' išraišką (2.3.8) į (3.3.5), gauname:

$$E_Q = \frac{1}{4} eQ \frac{3m_l^2 - I(I+1)}{I(2I-1)} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right)_{z=0}, \quad (3.3.6)$$

kur m_l nusako branduolio sukinių projekciją į išorinio lauko simetrijos ašį (žr. (2.1.2)). Elektrinio lauko stiprio z komponentė yra

$$\mathcal{E}_z = -\frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (3.3.7)$$

Vadinasi, branduolio elektrinio kvadrupolinio momento sąveikos su išoriniu elektriniu lauku energija (3.3.6) yra proporcinga elektrinio lauko stiprio gradientui branduolio centre. Tą gradientą žymėsime $-q$:



3.3 pav. (a) ^{57}Fe branduolio energijos lygmenų elektrinė kvadrupolinė hipersmulkioji sandara. (b) Atitinkamas Mesbauerio spektras. Sugėriklis – biferocinilas (20 K temperatūroje), šaltinis – ^{57}Co chromo matricoje.

$$-q \equiv -\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right|_{z=0} \equiv \left. \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} \right|_{z=0}. \quad (3.3.8)$$

Taigi, ši sąveika pasireiškia tik tuomet, kai elektrinis laukas yra nevienalytis ir kai jo gradientas branduolio centre skiriasi nuo nulio. Tokiu atveju branduolio energijos lygmuo, kuris atitinka apibrėžtą I vertę, skyla į kelis polygmenis, kurių skaičius yra lygus dydžio m_I^2 galimųjų verčių skaičiui, t.y., $I + 1$. Šis energijos lygmenų skilimas (ir atitinkamas branduolio spinduliuotės bei sugerties spektrų linijų skilimas) vadinamas **elektrine kvadrupoline hipersmulkiąja sandara**. Matome, kad branduolio kvadrupolinė sąveika su nevienalyčiu elektriniu lauku tik dalinai pašalina energijos lygmenų išsigimimą: kvantinių būsenų, kurios atitinka priešingas m_I vertes, energijos lieka vienodos.

Kadangi Mesbauerio spektroskopijai reikalingi šaltiniai, kurių spinduliuotės spektras sudarytas tik iš vienos neskilusios linijos, tai šaltinyje neturi pasireikšti nei magnetinis dipolinis, nei elektrinis kvadrupolinis skilimas. Kaip minėta 3.2 poskyryje, magnetinio dipolinio skilimo išvengiama, talpinant šaltinio atomus į diamagnetinį kristalą. Kvadrupolinio skilimo išvengiama, naudojant, pvz., kubinės simetrijos kristalus. Tokio kristalo gardelės mazguose elektrinio lauko gradientas yra lygus nuliui.

Elektrinės kvadrupolinės hipersmulkiosios sandaros pavyzdys pateiktas 3.3 pav. Šiame pavyzdyje stebimi kvantiniai šuoliai tarp ^{57}Fe branduolio energijos lygmenų. Pagrindinės būsenos energijos lygmuo neskyla, nes toje būsenoje $I = 1/2$. Pirmasis sužadintasis energijos lygmuo skyla į du lygmenis, kurių žemesnysis atitinka $m_I = \pm 1/2$, o aukštesnysis atitinka $m_I = \pm 3/2$. Pagal (3.3.6), to dubleto sandų energijų skirtumas yra

$$\Delta E_Q = \frac{e^2 q Q}{2}. \quad (3.3.9)$$

Greičio vienetais išreikšta kvadrupolinio skilimo energija – tai **kvadrupolinės sąveikos parametras**:

$$\Delta = c \frac{\Delta E_Q}{\hbar \omega_0} = \frac{e^2 q Q c}{2 \hbar \omega_0}. \quad (3.3.10)$$

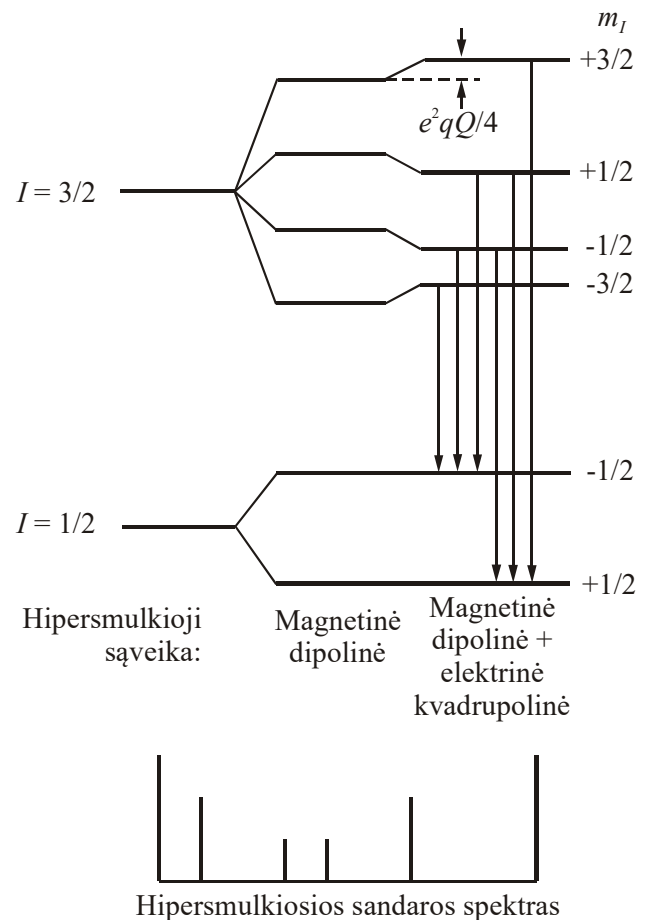
Elektrinė kvadrupolinė ir magnetinė dipolinė hipersmulkioji sandara gali pasireikšti vienu metu. Pvz., išnagrinėsime elektrinės kvadrupolinės sąveikos įtaką ^{57}Fe Mesbauerio spektrui, kuris pavaizduotas 3.2b pav. Kaip parodyta 3.2 pav., α linijos atitinka šuolį iš būsenos su $m_I = \pm 1/2$ į būseną su $\pm 3/2$, o β ir γ linijos atitinka šuolius tarp būsenų, kurių $m_I = \pm 1/2$. Jeigu nebūtų kvadrupolinės sąveikos, tuomet Mesbauerio spektro linijų išsidėstymas būtų simetriškas atžvilgiu vidutinio greičio. Jeigu elektrinio lauko gradientui yra būdinga ašinė simetrija atžvilgiu efektyvio magnetinio lauko krypties, tuomet elektrinė kvadrupolinė sąveika pasireiškia tuo, kad branduolio, kurio sukinio kvantinis skaičius $I = 3/2$, energijos lygmenys su $m_I = \pm 1/2$ ir lygmenys su $m_I = \pm 3/2$ pasislenka vienodu atstumu $\Delta E_Q/2$ priešingom kryptim (žr. 3.4 pav.). Energijos lygmenys, kurie atitinka būseną $I = 1/2$, nepakinta. Vadinasi, α linijų energijų pokytis yra priešingas β ir γ linijų energijų pokyčiui. Šio pokyčio modulis lygus $\Delta E_Q/2$, o atitinkamų greičių pokyčio modulis lygus $\Delta/2$. T.y., jeigu Mesbauerio spektre keturios centrinės linijos pasislenka į kairę, tuomet dvi kraštinės linijos tokiu pačiu atstumu pasislenka į dešinę, ir atvirkščiai (žr. 3.5 pav.). Vadinasi, šiuo atveju dėl elektrinės kvadrupolinės sąveikos 1 ir 6 linijų greičių vidurkis nustoja būti lygus 2 ÷ 5 linijų greičių vidurkiui, ir šių dviejų vidurkių skirtumo modulis yra Δ :

$$\Delta = \left| \frac{v_1 + v_6}{2} - \frac{v_2 + v_3 + v_4 + v_5}{4} \right|; \quad (3.3.11)$$

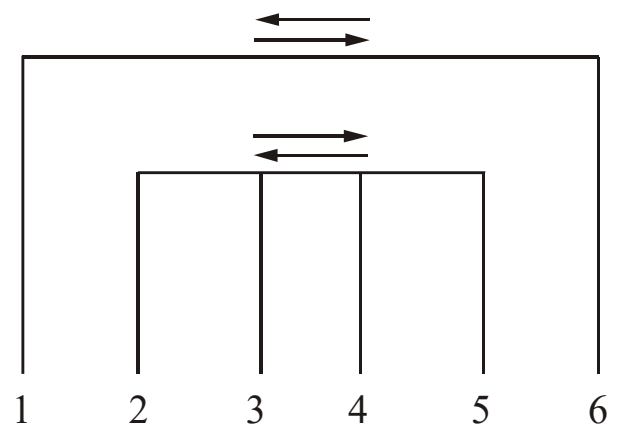
čia v_i yra i -tąją Mesbauerio spektro liniją atitinkantis šaltinio greitis atžvilgiu sugėriklio.

Jeigu pasireiškia tik magnetinė dipolinė arba tik elektrinė kvadrupolinė sąveika, tuomet izomerinis poslinkis yra lygus visų stebimųjų Doplerio greičių aritmetiniam vidurkiui (nes tuomet visų linijų išsidėstymas yra simetriškas atžvilgiu vidutinio greičio). Kai vienu metu veikia magnetinė dipolinė ir elektrinė kvadrupolinė sąveikos, tuomet izomerinis poslinkis, kuris atitinka kvantinius šuolius tarp būsenų su $I = 1/2$ ir $I = 3/2$, turi būti skaičiuojamas šitaip:

$$\delta = \frac{1}{2} \left(\frac{v_1 + v_6}{2} + \frac{v_2 + v_3 + v_4 + v_5}{4} \right). \quad (3.3.12)$$



3.4 pav. Energijos lygmenys su $I = 3/2$ hipersmulkusis skilimas, kai elektrinio lauko gradientas yra lygiagretus magnetinės indukcijos vektoriui.



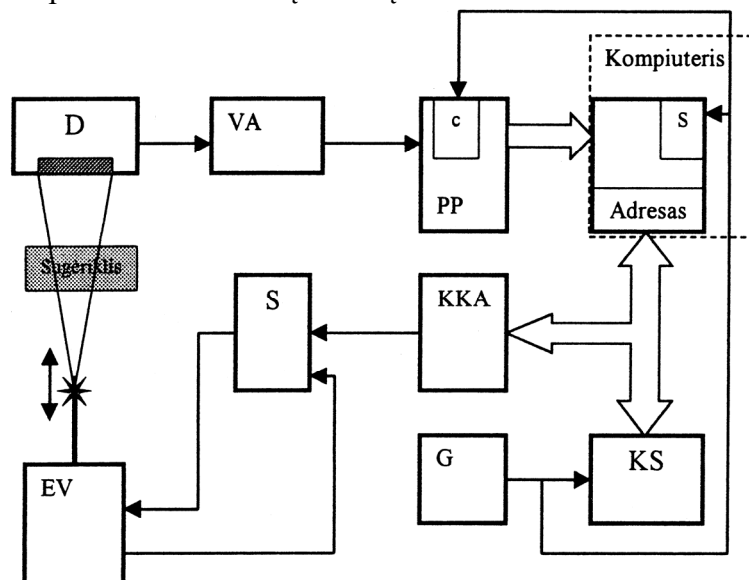
3.5 pav. Magnetinės dipolinės hipersmulkiosios sandaros spektro linijų du galimi poslinkiai, kuriuos sukelia elektrinė kvadrupolinė sąveika. Skaičiais sužymėtos linijos, o rodyklės rodo galimus poslinkius. Jeigu 1 ir 6 linijos slenka į kairę, tai 2, 3, 4 ir 5 linijos slenka į dešinę, ir atvirkščiai.

4. Tyrimo metodika

4.1. Prietaisų aprašymas

Šiam darbui naudojamas Mesbauerio spektrometras, kuris yra Fizikos institute (Savonorių pr. 231), mokomojoje laboratorijoje. Mesbauerio spektrometro struktūrinė schema pateikta 4.1 pav. γ kvantai iš šaltinio per sugėriklį patenka į detektorių D, kurio išėjimo impulso amplitudė yra proporcinga γ kvanto energijai. Detektorius D – tai dujinis proporcingasis skaitiklis, užpildytas didelio atominio numerio inertinėmis dujomis (pvz., ksenonu). Tokie detektoriai tinka mažos energijos (iki kelių dešimčių kiloelektronvoltų) γ kvantų spektro tyrimui. Vienkanalis analizatorius VA atrenka tik tam tikros amplitudės impulsus (t.y., registruojami tik tam tikros energijos γ kvantai). Spektrometro valdymo schemas aprašymas, kuris pateiktas kitoje pastraipoje, yra paimtas iš mokomosios priemonės [4].

Impulsai skaičiuojami skaitikliu PP, kurį į nulinę padėtį nustato generatoriaus G impulso užpakalinis frontas. Priekinis šio impulso frontas PP turinį sumuoja atmintyje A. Adresą formuoja kanalų skaitiklis KS, kurio duomenų magistralė sujungta su atminties adreso magistrale ir keitiklio "kodas-analogas" (KKA) skaitmeniniais įėjimais. Analoginis KKA išėjimas sujungtas su galios stiprintuvu, valdančiu elektromagnetinį šaltinio judėjimo mechanizmą. Neigiamą grįžtamą ryšį užtikrina ritė, prijungta prie antro (invertuojančio) stiprintuvo įėjimo. Tokiu būdu šaltinio judėjimo greitis susiejamas su atminties adresu (kanalo numeriu). Generatoriaus G dažnis atitiks šaltinio judėjimo greitį atžvilgiu sugėriklio, o KS skirsninių skaičius – spektrometro kanalų skaičių.



4.1 pav. Mesbauerio spektrometro struktūrinė schema (iš [4])

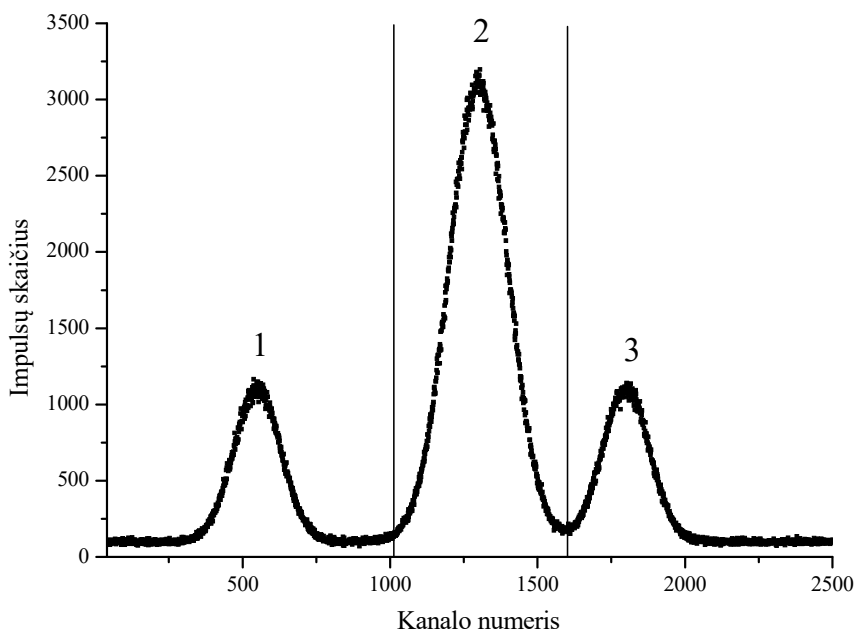
4.2. Impulsų amplitudžių spektro pavidalas. „Smailės išpjovimo“ sąvoka

Prieš pradėdant registruoti Mesbauerio spektrą, reikia „išpjauti“ 14.4 keV liniją. Taip yra todėl, kad rezonansinėje sugertyje dalyvauja tik 14.4 keV energijos γ kvantai, kuriuos spinduliuoja sužadintieji ^{57}Fe branduoliai. Tačiau, be tų γ kvantų, ^{57}Fe dar spinduliuoja 122 keV ir 136.4 keV energijos fotonus (žr. 1.12 pav.). Be to, dėl γ kvantų sąveikos su šaltinio ir sugėriklio medžiaga bei dėl vidinės konversijos gali atsirasti ir būdingoji rentgeno spinduliuotė. Šie fotonai nedalyvauja rezonansinėje sugertyje. Vadinasi, jie sąlygoja tik pastovų foną, kuris prisideda prie naudingo signalo ir padidina matavimų atsitiktines paklaidas. Todėl pageidautina, kad būtų registruojama kuo mažiau impulsų, kuriuos sukelia ne ^{57}Fe sužadintųjų branduolių spinduliuojami 14.4 keV energijos γ kvantai, o kitos kilmės fotonai.

Kadangi proporcingojo skaitiklio impulsų vidutinė amplitudė yra apytiksliai proporcinga γ kvantų energijai, tai impulsai, kuriuos sukelia 122 keV ir 136.4 keV energijos fotonai, turi žymiai didesnę amplitudę, negu impulsai, kuriuos sukelia 14.4 keV energijos

fotonai. Tačiau impulsų, kuriuos sukelia būdingoji rentgeno spinduliuotė, amplitudė yra artima impulsų, kuriuos sukelia 14.4 keV energijos γ kvantai, amplitudei. Būdingoji rentgeno spinduliuotė atsiranda dėl to, kad γ kvantai jonizuoja medžiagos atomus, išmušdami iš jų vidinių sluoksnių elektronus (tai yra vadinamasis fotoefektas). Vidiniame elektronų sluoksnyje atsiradusi vakansija yra užpildoma, vykstant elektrono kvantiniam šuoliui iš aukštesniojo elektronų sluoksniu. Šio vyksmo metu išspinduliuojamas būdingosios rentgeno spinduliuotės fotonas, kurio energija, priklausomai nuo elemento atominio numerio, gali būti nuo kelių keV iki kelių dešimčių keV. Be to, būdingoji rentgeno spinduliuotė atsiranda ir dėl vadinamosios vidinės konversijos – kai branduolys sužadino energiją perduoda vienam iš vidinių elektronų, tokiu būdu atsirandant vakansijai vidiniame elektronų sluoksnyje. Šiame darbe labiausiai pasireiškia rodžio (Rh) ir geležies (Fe) būdingoji rentgeno spinduliuotė, nes $^{57}\text{Co} / ^{57}\text{Fe}$ šaltinis yra rodžio matricoje. Rodžio būdingosios rentgeno spinduliuotės spektro K_{α} ir K_{β} linijų energija yra atitinkamai 20 keV ir 23 keV, o geležies – atitinkamai 6.4 keV ir 7.1 keV. Kadangi proporcingasis skaitiklis negali išskirti vieno elemento K_{α} ir K_{β} linijų, tai impulsų amplitudžių spektre abi tos linijos pasireiškia viena smaile. Todėl mažų energijų srityje (1 ÷ 30 keV) impulsų amplitudžių spektras atrodo maždaug taip, kaip parodyta 4.2 pav. Šiuo atveju 14.4 keV energijos kvantus atitinka antroji smailė. Pirmoji smailė atitinka Fe būdingąją rentgeno spinduliuotę, o trečioji smailė – Rh būdingąją rentgeno spinduliuotę. Vadinasi, 4.2 pav. atveju impulsų amplitudžių spektro sritis, kurią reikia išpjauti, yra tarp dviejų vertikaliųjų linijų.

Nors, išpjovus 14.4 keV smailę, nebus registruojami detektoriaus impulsai, kuriuos sukelia rentgeno spinduliuotės fotonai, tačiau tie fotonai vis tiek pasieks proporcingąjį skaitiklį ir sukels jame elektronų griūtis. Po kiekvienos elektronų griūtis skaitiklyje įvyksta tam tikri maži negrįžtami pokyčiai, o likęs jo eksploataavimo laikas sumažėja. Norint sumažinti tokį detektoriaus "dėvėjimąsi", reikia sumažinti rentgeno spinduliuotės santykinę svorį spinduliuotėje, kuri pasiekia detektorių (ir tuo pat metu neprarasti "naudingųjų" fotonų, kurių energija 14.4 keV). Tuo tikslu tarp detektoriaus ir šaltinio patalpinama aliuminio folija. Aliuminio sugerties koeficientas, esant 7 keV energijai, yra maždaug 200 cm^{-1} , o esant 14.4 keV energijai – maždaug 20 cm^{-1} . T.y., praėjus 0.01 cm storio aliuminio foliją, Fe būdingosios rentgeno spinduliuotės intensyvumas sumažėja $\exp(200 \cdot 0.01) = e^2 \approx 7$ kartus, o ^{57}Fe branduolio pirmosios sužadintosios būsenos spinduliuotės intensyvumas sumažėja tik maždaug $\exp(20 \cdot 0.01) = e^{0.2} \approx 1.2$ karto.








4.2 pav. Apytikslis vaizdas valdymo programos lango darbiname plote, kai yra išpjauama 14.4 keV energijos smailė. Šioje veikoje matomas impulsų amplitudžių diferencialinis spektras (t.y., kanalo numeris yra proporcingas impulso amplitudei). Smailė, kurią reikia išpjauti, pažymėta numeriu 2. Smailės 1 ir 3 atitinka būdingąją rentgeno spinduliuotę, kurios indėlių reikia pašalinti. Išpjautąją spektro sritį nurodo dvi vertikalios linijos.

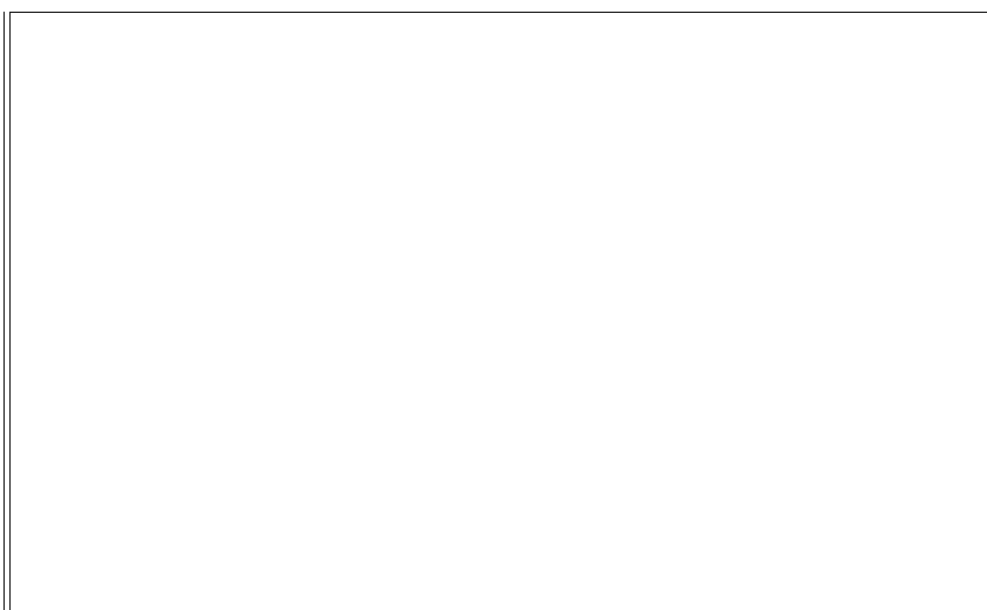
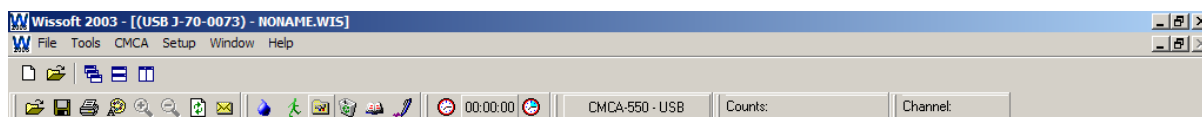
4.3. Matavimų tvarka

Matavimai atliekami, naudojant Mesbauerio spektrometro kompiuterinio valdymo programą **Wissoft 2003**. Spektrai atvaizduojami personalinio kompiuterio monitoriaus ekrane. Matavimo metu spektras atnaujinamas kas kelias sekundes. Žemiau yra pateikta trumpa programos **Wissoft 2003** naudojimo instrukcija.

Programą **Wissoft 2003** reikia startuoti tik po to, kai yra įjungti ir paruošti darbui visi Mesbauerio spektrometro blokai (spektrometrą turėtų įjungti ir paruošti darbui Fizikos instituto darbuotojas). Programos lango viršutinėje dalyje yra mygtukų juosta, kuri skirta įvairių programos nustatymų keitimui (žr. 4.3 pav.). Šiam darbui svarbiausieji mygtukai yra:

- 1) duomenų kaupimo proceso startavimo arba sustabdymo mygtukas. Šis mygtukas gali būti dviejų pavidalų: kai nevyksta spektro registravimas, tai yra žalios spalvos „žmogeliukas“ , o jeigu vyksta duomenų kaupimas, tuomet tai yra raudonos spalvos „žmogeliukas“ ;
- 2) duomenų kaupimo nustatymų keitimo mygtukas (bylos ženklas );
- 3) programos atminties išvalymo (duomenų ištrynimo) mygtukas („šiukšlių dėžė“ ).


Startavus programą, visų pirma reikia išvalyti jos atmintį (mygtukas ). Išvalius atmintį, programos pagrindinis langas atrodo taip, kaip parodyta 4.3 pav.





4.3 pav. Programos **Wissoft 2003** pagrindinis langas, išvalius atmintį.

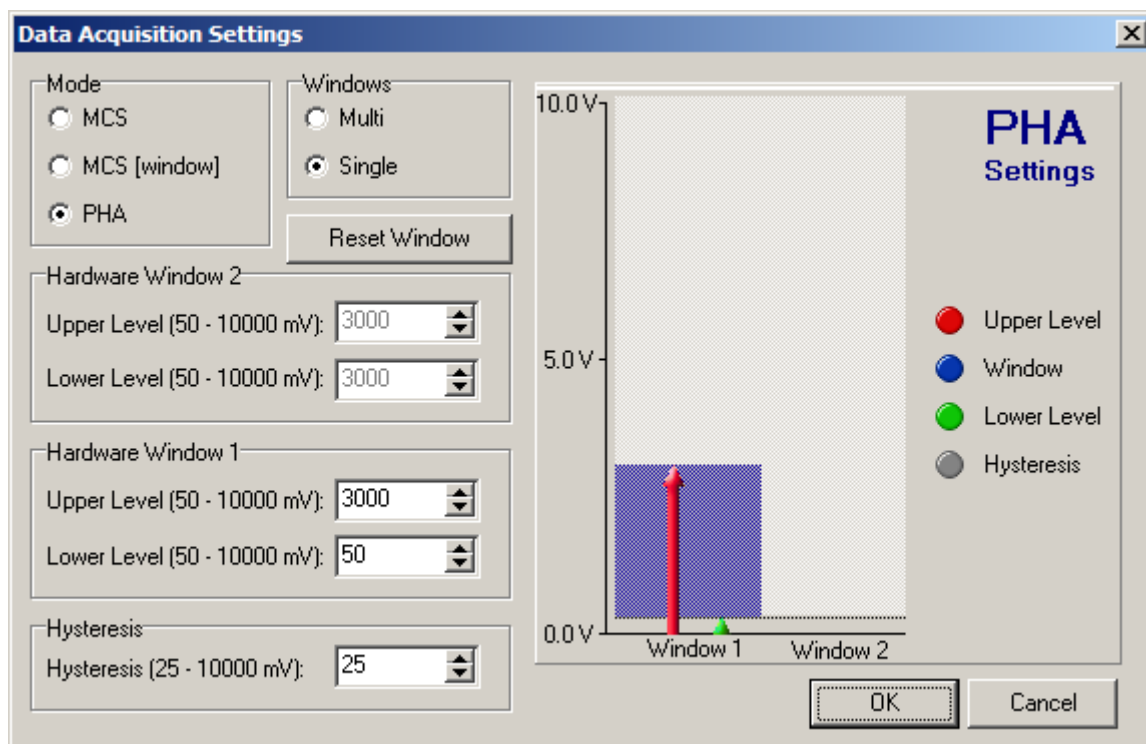
Matavimai yra sudaryti iš dviejų pagrindinių etapų – 14.4 keV smailės išpjovimas ir Mesbauerio spektro registravimas. Esminis skirtumas tarp šių dviejų etapų yra tas, kad, išpjauant 14.4 keV smailę, kanalo numeris nusako proporcingojo skaitiklio *impulso amplitudę* (t.y., kiekvienas kanalas atitinka tam tikrą siaurą amplitudžių intervalą), o Mesbauerio spektro registravimo metu kanalo numeris nusako *šaltinio greitį atžvilgiu sugėriklio* (t.y., kiekvienas kanalas atitinka tam tikrą siaurą greičių intervalą).

1. 14.4 keV smailės išpjovimas

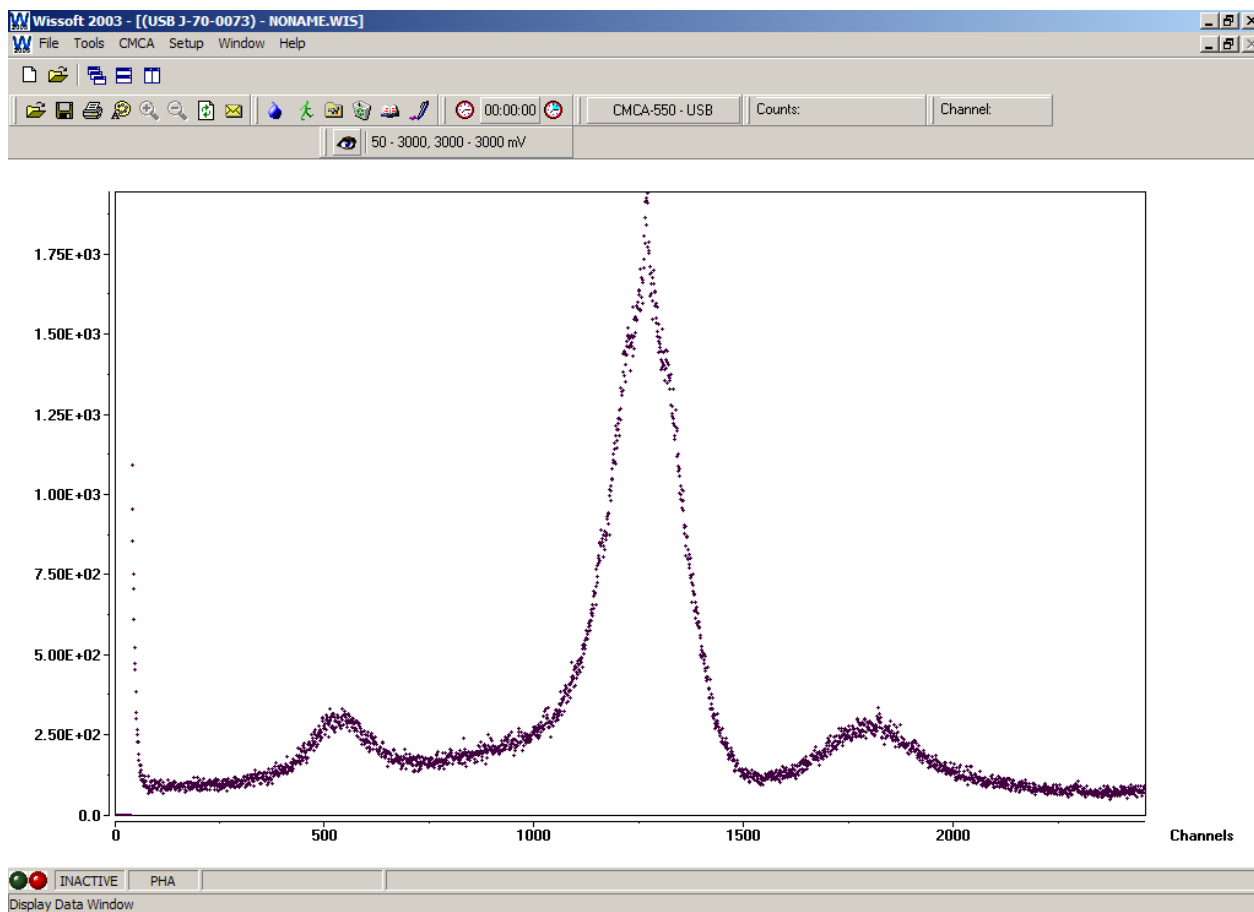
Norint išpjauti reikalingą impulsų amplitudžių spektro sritį, reikia visų pirma nurodyti programai, kad spektrometro kanalo numeris turi būti susietas su impulsų amplitude (o ne su šaltinio greičiu). Tuo tikslu reikia spragtelėti duomenų kaupimo nustatymų mygtuką  ir atsidariusiame dialogo lange "Data Acquisition Settings" užduoti tokius parametrus:

- parametrų grupėje "Mode" turi būti pažymėtas laukelis "PHA";
- parametrų grupėje "Windows" turi būti pažymėtas laukelis "Single";
- parametrų grupėje "Hardware Window 1" reikia užduoti didžiausią ir mažiausią registruojamų impulsų amplitudes. Amplitudės išreikštos milivoltais (mV). Šias ribines amplitudes rekomenduojama pasirinkti taip, kad tiriamoji linija apytiksliai atitiktų amplitudžių intervalo centrą. Kadangi tiriamosios linijos energija yra 14.4 keV, o vienas milivoltas apytiksliai atitinka 10 eV, tai didžiausiąją amplitudę ("Upper Level") galima pasirinkti lygia, pvz., 3000 mV, o mažiausiąją amplitudę ("Lower Level") galima prilyginti, pvz., 50 mV (mažiausioji amplitudė turi būti šiek tiek didesnė už nulį, siekiant nufiltruoti ypač mažų amplitudžių triukšmo impulsus).

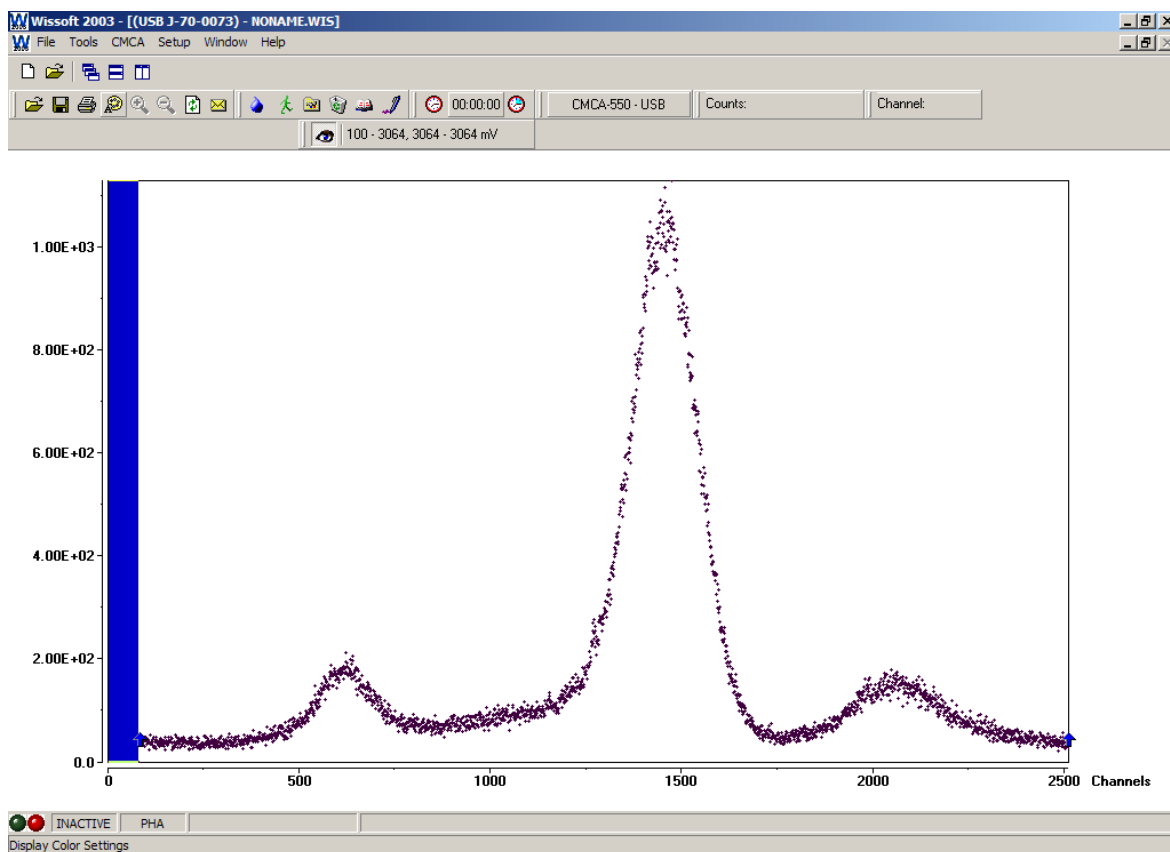
Taigi, galutinis lango "Data Acquisition Settings" pavidalas galėtų būti toks, kaip parodyta 4.4 pav. Po to reikia spragtelėti mygtuką "OK" ir programos pagrindinio lango įrankių juostoje spragtelėti duomenų kaupimo pradžios mygtuką . Spektrometras pradės registruoti proporcingojo skaitiklio impulsų amplitudžių spektrą (žr. 4.5 pav.). Išryškėjus visoms smailėms (po kelių minučių) reikia sustabdyti duomenų kaupimą (mygtukas ).



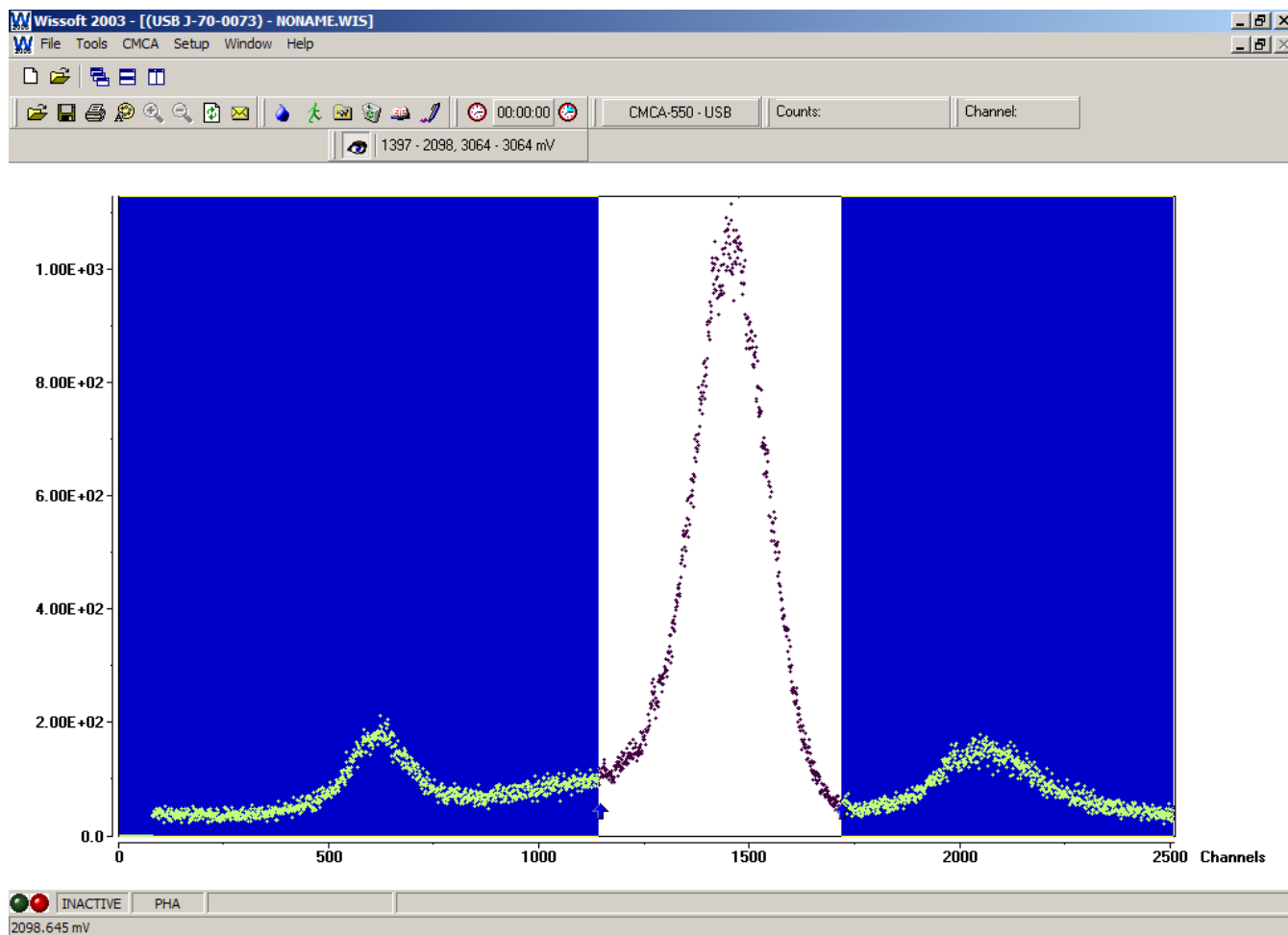
4.4 pav. Duomenų kaupimo nustatymų langas, prieš išpjauant 14.4 keV smailę.






4.5 pav. Programos pagrindinis langas, registruojant detektoriaus impulsų amplitudžių spektrą.






4.6 pav. Programos pagrindinis langas, prieš išpjaunant 14.4 keV liniją. Patamsintoji sritis kairėje parodo iš anksto "nupjautąją" spektro dalį (impulsų amplitudės – nuo 0 iki "Lower Level").

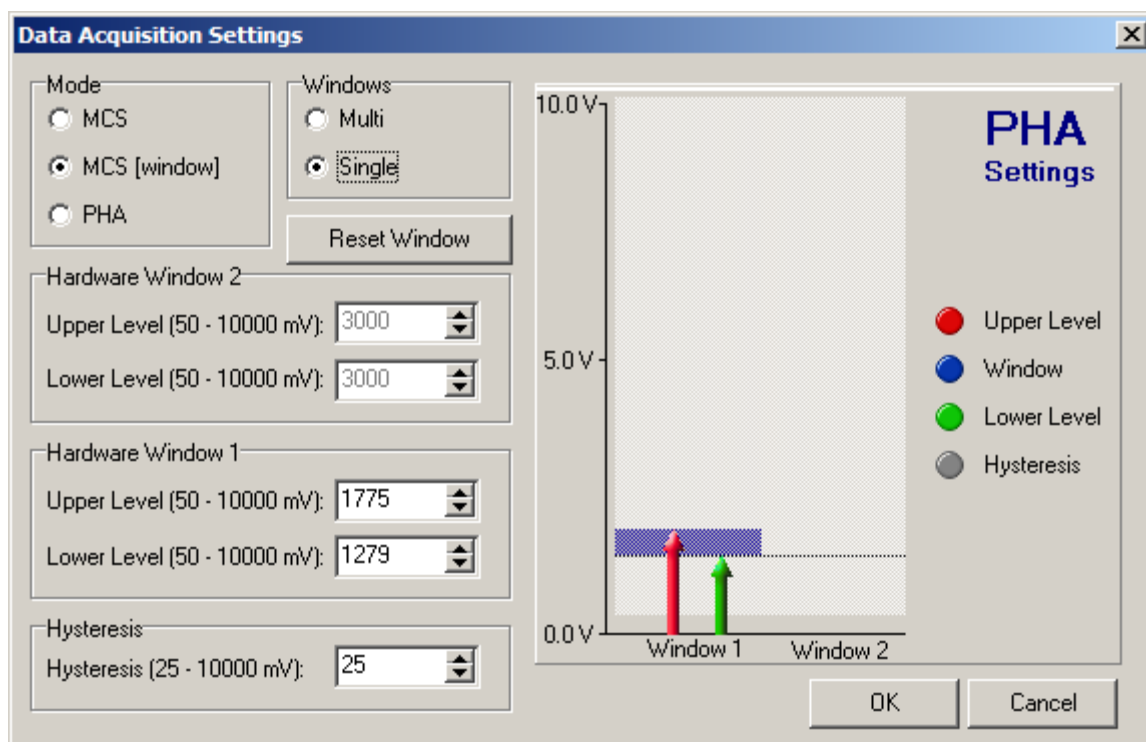


4.7 pav. Programos pagrindinis langas, išpjovus 14.4 keV liniją.

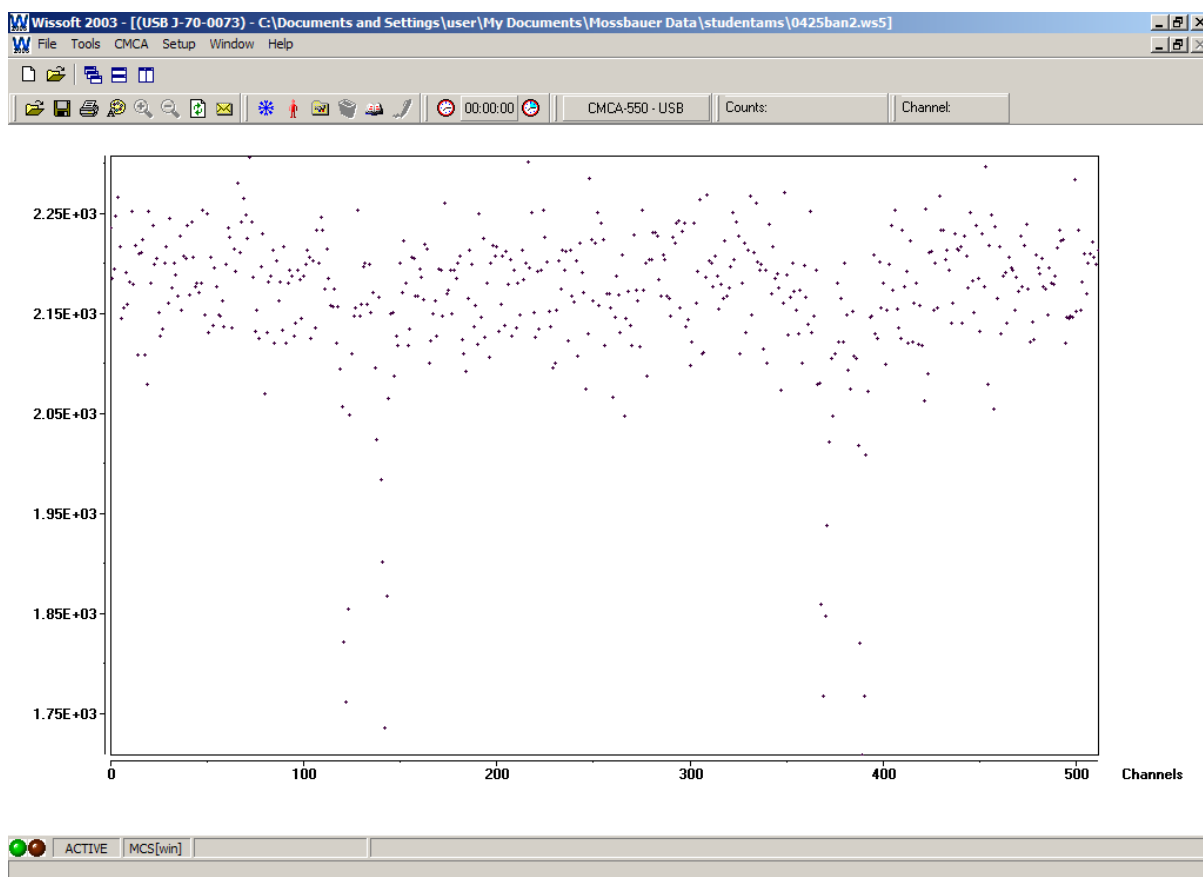
Norint išpjauti reikalingą spektro sritį (t.y., patikslinti anksčiau įvestuosius parametrus "Upper Level" ir "Lower Level"), reikią spragtelėti mygtuką, ant kurio pavaizduota akis  (žr. 4.5 pav.). Tuomet spektro kraštuose atsiranda dvi mėlynos rodyklės (žr. 4.6 pav.). Tas rodykles reikia kompiuterio pele nustatyti į tokią padėtį, kad tarp jų būtų tik 14.4 keV smailė (žr. 4.7 pav.). Tai atlikus, spektrometras registruos tik tuos impulsus, kurių amplitudės priklauso išpjautajai spektro sričiai. Tuo galima įsitikinti, ištrynus duomenis (mygtukas ) ir spragtelėjus duomenų kaupimo pradžios mygtuką : kanaluose, kurie atitinka patamsintąsias sritis 4.7 pav., impulsų skaičius turi likti lygus nuliui.

2. Mesbauerio spektro registravimas

Iki šiol spektrometro kanalo numeris buvo susietas su detektoriaus impulso amplitude (tokia yra daugumos γ spinduliuotės spektrometrų normalioji veika). Išpjovus reikalingą spektro sritį, reikia pakeisti spektrometro veiką: kanalo numeris turi būti susietas su šaltinio greičiu atžvilgiu sugėriklio. Tai atliekama, vėl atidarius langą "Data Acquisition Settings" (mygtukas ) ir parametrų grupėje "Mode" pažymėjus laukelį "MCS [window]" (žr. 4.8 pav.). Po to reikia spragtelėti mygtuką "OK". Jeigu tarp šaltinio ir detektoriaus dar nėra sugėriklio, tai dabar ten reikia patalpinti sugėriklį. Po to reikia ištrinti duomenis (mygtukas ) ir spragtelėti duomenų kaupimo pradžios mygtuką . Spektrometras pradės registruoti Mesbauerio spektrą (žr. 4.9 pav.).






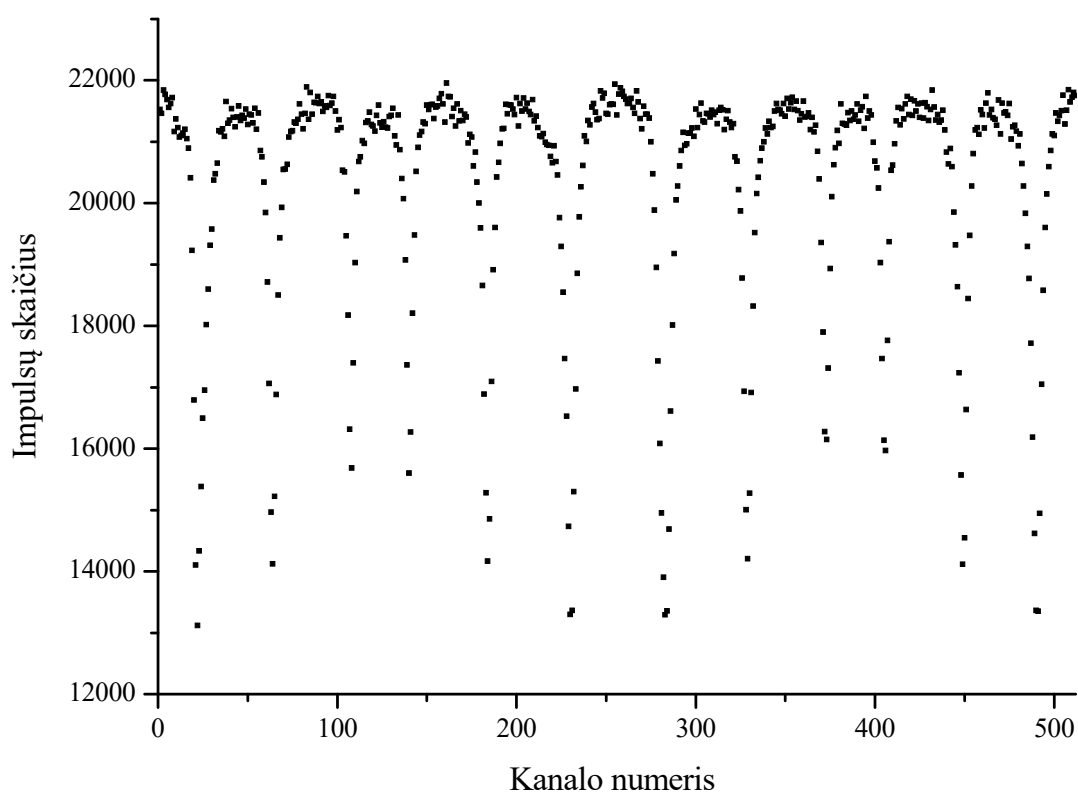
4.8 pav. Duomenų kaupimo nustatymų langas, prieš registruojant Mesbauerio spektrą.



4.9 pav. Mesbauerio spektras programos **Wissoft 2003** lange matavimų pradžioje. Šiame pavyzdyje buvo naudotas sugėriklis, kuriame nėra magnetinio dipolinio skilimo, tačiau yra elektrinis kvadrupolinis skilimas, todėl matomi du "veidrodiniai" dubletai. Šis vaizdas gautas pačioje matavimų pradžioje, todėl spektras dar nėra pakankamai aukštos kokybės.

Šioje veikoje kanalų skaičius yra kitoks, negu impulsų amplitudžių spektro registravimo veikoje. Registruojant Mesbauerio spektrą, kanalų skaičius yra fiksuotas ir lygus 512. Matuojami du veidrodiniai spektrai: kanalai 1 ÷ 256 atitinka greičio mažėjimą, o kanalai 257 ÷ 512 atitinka greičio augimą. Kanalai Nr.1 ir Nr.512 atitinka šaltinio artėjimą link sugėriklio didžiausiu greičiu (t.y., didžiausią teigiamą greitį), o kanalai Nr.256 ir Nr.257 atitinka šaltinio tolimą nuo sugėriklio didžiausiu greičiu (t.y., didžiausią neigiamą greitį).

Matavimų trukmė turi būti tokia, kad visos smailės būtų pakankamai ryškios ir kad aiškiai matytųsi jų forma. Praktiškai, tai reiškia, kad smailių vidutinis gylis turėtų būti artimas 10000 arba didesnis (kaip 4.10 pav.). Tuomet galima sustabdyti duomenų kaupimą (mygtukas ) ir įrašyti išmatuotąjį Mesbauerio spektrą į failą (mygtukas ). Spektras išsaugomas teksto pavidalu (512 skaičių stulpelis). Tokiu būdu reikia gauti du spektrus – tiriamąjį (sugėriklis – Fe_2O_3) ir kalibravimo (sugėriklis – Fe). Prieš matuojant spektrą su kitu sugėrikliu, reikia išvalyti atmintį (mygtukas ).

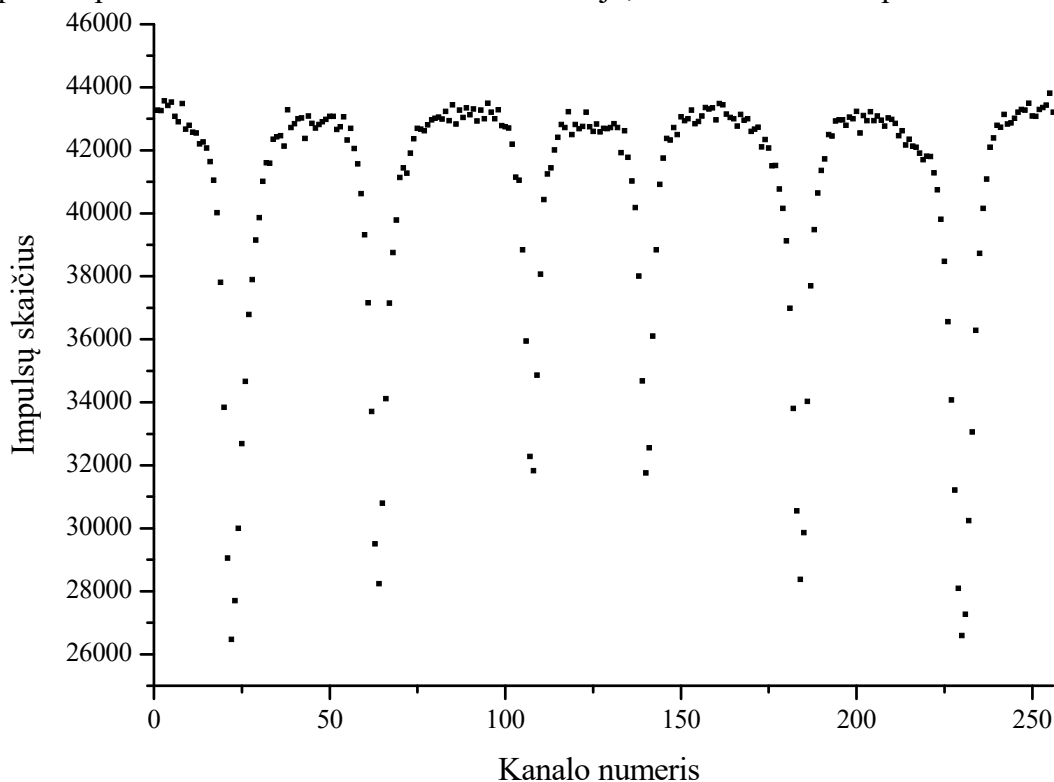


4.10 pav. Dviejų "veidrodinių" Mesbauerio spektrų pavyzdys. Sugėriklis – Fe_2O_3 .

4.4. Matavimo duomenų analizė

4.4.1. Galutinio Mesbauerio spektro sudarymas iš dviejų "veidrodinių" spektrų

Galutinis spektras gaunamas, sudėjus impulsų skaičius "veidrodiniuose" kanaluose, t.y., Nr.1 ir 512, Nr.2 ir 511 ir t.t. Tokiu būdu gaunamas spektras, kurio pavyzdys pateiktas 4.11 pav. Ši procedūra turi būti atlikta ir su tiriamuoju, ir su kalibravimo spektru.



4.11 pav. Mesbauerio spektras, kuris gautas iš 4.10 pav. pavaizduotojo spektro, sudėjus "veidrodinius" kanalus.

Po to nustatomi kalibravimo ir tiriamojo spektrų smailes (minimumus) atitinkančių kanalų numeriai (centroidės). Tai galima atlikti dviem būdais, kurie aprašyti žemiau. Skaičiuojant pirmuoju būdu, nėra reikalingas kompiuteris, tačiau toks skaičiavimo būdas yra ilgesnis ir mažiau tikslus (nes neatsižvelgia į gretimų spektro smaيليų dalinį persiklojimą). Skaičiuojant antruoju būdu, reikia atlikti netiesinį aproksimavimą.

4.4.2. Mesbauerio smaيليų parametų skaičiavimas

I. Mesbauerio smaيليų parametų skaičiavimas be netiesinio aproksimavimo

1) Apskaičiuojamas fonas. Tuo tikslu panaudojami keli pirmieji ir keli paskutiniai spektro kanalai, kurie yra palyginti toli nuo visų spektro smaيليų. Pvz., 4.11 pav. spektro atveju galima būtų naudoti pirmuosius du ir paskutinius du kanalus. Randamas vidutinis impulsų skaičius tuose kanaluose (4.11 pav. atveju jis lygus 43394). Tas vidurkis ir yra fonas (jį žymėsime f).

2) Spektre randami 6 kanalai, kurie atitinka 6 mažiausius impulsų skaičius (pvz., 4.11 pav. atveju tai yra kanalai 22, 64, 108, 140, 184, 230). Randami 6 nepersiklojantys intervalai, kuriems pilnai priklauso kiekviena smaile. Kiekvieno tokio intervalo centras turi atitikti vieną iš minėtųjų 6 kanalų. Pvz., 4.11 pav. atveju tie intervalai galėtų būti $1 \div 43$, $44 \div 84$, $93 \div 123$, $125 \div 155$, $163 \div 205$, $206 \div 254$. Kiekviename iš tų 6 intervalų randama visų impulsų skaičių suma (t.y., spektro integralas). Tas 6 sumas pažymėsime A_1, A_2, \dots, A_6 .

3) Apskaičiuojami smailių integralai (pvz., 1.9 pav. smailės integralą nurodo užštrichuotasis plotas). i -tosios smailės integralas lygus

$$S_i = f \cdot \Delta j_i - A_i \quad (i = 1, 2, \dots, 6); \quad (4.4.1)$$

čia Δj yra i -tojo intervalo plotis (pvz., 4.11 pav. atveju $\Delta j_1 = 43$, $\Delta j_2 = 41$ ir t.t.).

4) Apskaičiuojamos šešios kanalo numerio ir smailės gylio sandaugų sumos:

$$B_i = \sum_j j(f - N_j) \quad (i = 1, 2, \dots, 6); \quad (4.4.2)$$

čia j yra kanalo numeris, o N_j yra impulsų skaičius j -tajame kanale; sumuojama tik i -tajame intervale.

5) Apskaičiuojamos šešios centroidės (jeigu atliekamas darbas Nr. 19a, tuomet centroides reikia skaičiuoti tik kalibravimo spektrui):

$$c_i = \frac{B_i}{S_i} \quad (i = 1, 2, \dots, 6). \quad (4.4.3)$$

6) Jeigu atliekamas darbas Nr. 19a, tuomet *tiriamajam* spektrui reikia dar apskaičiuoti ir linijų pločius. Linijų pločiai skaičiuojami pagal (1.4.3) formulę, kuri šiuo atveju atrodo taip:

$$\Gamma_{ki} = \frac{2S_i}{\pi(f - N_{\min,i})}; \quad (4.4.4)$$

čia $N_{\min,i}$ yra mažiausias impulsų skaičius, kuris atitinka i -tąją smailę, o Γ_{ki} yra i -tosios linijos plotis (indeksas "k" nurodo, kad šis plotis yra išreikštas kanalų skaičiumi). Pvz., 4.11 pav. atveju $N_{\min 1} = 26469$, o $\Gamma_{k1} = 6.19$.

II. Mesbauerio smailių parametrų skaičiavimas netiesinio aproksimavimo būdu

Mesbauerio spektras turi būti aproksimuotas fono ir šešių Lorencio kreivės pavidalo smailių suma:

$$N_j = f - \sum_{i=1}^6 \frac{2\Gamma_{ki}}{\pi} \cdot \frac{S_i}{4(j - c_i)^2 + \Gamma_{ki}^2}; \quad (4.4.5)$$

čia j yra kanalo numeris (funkcijos argumentas), f yra fonas (pastovus dėmuo, kuris, pvz., 4.11 pav. atveju yra lygus maždaug 43600), S_i yra i -tosios smailės integralas (pvz., 1.9 pav. tas integralas yra pažymėtas užštrichuotu plotu), c_i yra i -tąją smailę atitinkantis kanalo numeris (centroidė), o Γ_{ki} yra i -tosios smailės plotis pusės minimumo gylyje (indeksas "k" nurodo, kad šis plotis išreikštas kanalų skaičiumi). Ploto S_i matavimo vienetai šiuo atveju yra kan.Nr.×imp.sk. Reiškiny (4.4.5) turi 19 nežinomųjų parametrų: fonas f ir po tris nežinomus parametrus kiekvienai iš 6 smailių (centroidė c_i , integralas S_i ir plotis Γ_{ki}). Visi šie parametrai randami netiesinio aproksimavimo būdu. Žemiau aprašyta aproksimavimo metodika, panaudojant programą **Origin**.

1) Tiriamasis arba kalibravimo spektras atvaizduojamas programos **Origin** lange. Šis spektras turi būti sudarytas iš atskirų taškų (pvz., žr. 4.11 pav.). Taško dydis turi būti parinktas taip, kad gretimi taškai nesusiliėtų vienas su kitu (pvz., 3 pt arba 4 pt).

2) Prieš aproksimuojant, reikia modifikuoti **Origin** aproksimavimo paprogramės parametrus taip, kad aproksimuojančioji („teorinė“) kreivė būtų kuo vaizdesnė. Tuo tikslu atidaromas aproksimavimo parametrų dialogo langas. Jeigu naudojamas **Origin 7**, tuomet tai atlieka meniu juostos komanda „*Analysis / Non-linear Curve Fit / Advanced Fitting Tool*“. Jeigu naudojamas **Origin 5**, tuomet, atlikus meniu juostos komandą „*Analysis / Non-linear Curve Fit*“, atsidaro dialogo langas, kuris gali būti dviejų variantų: supaprastinto ir išplėstinio. Jeigu atvaizduotas supaprastintas variantas, tuomet lange yra mygtukas „*More...*“, kurį reikia spragtelėti. Jeigu atvaizduotas išplėstinis variantas, tuomet dešiniajame apatiniame kampe yra mygtukas „*Basic mode*“; šiuo atveju galima iš karto pereiti prie kito punkto.

3) Pasirenkamas veiksmas **Function / Select**. Funkcijų rūšių sąrašė „*Categories*“ pasirenkama funkcijų rūšis „*Origin Basic Functions*“, o funkcijų sąrašė „*Functions*“ pasirenkama funkcija „*Lorentz*“.

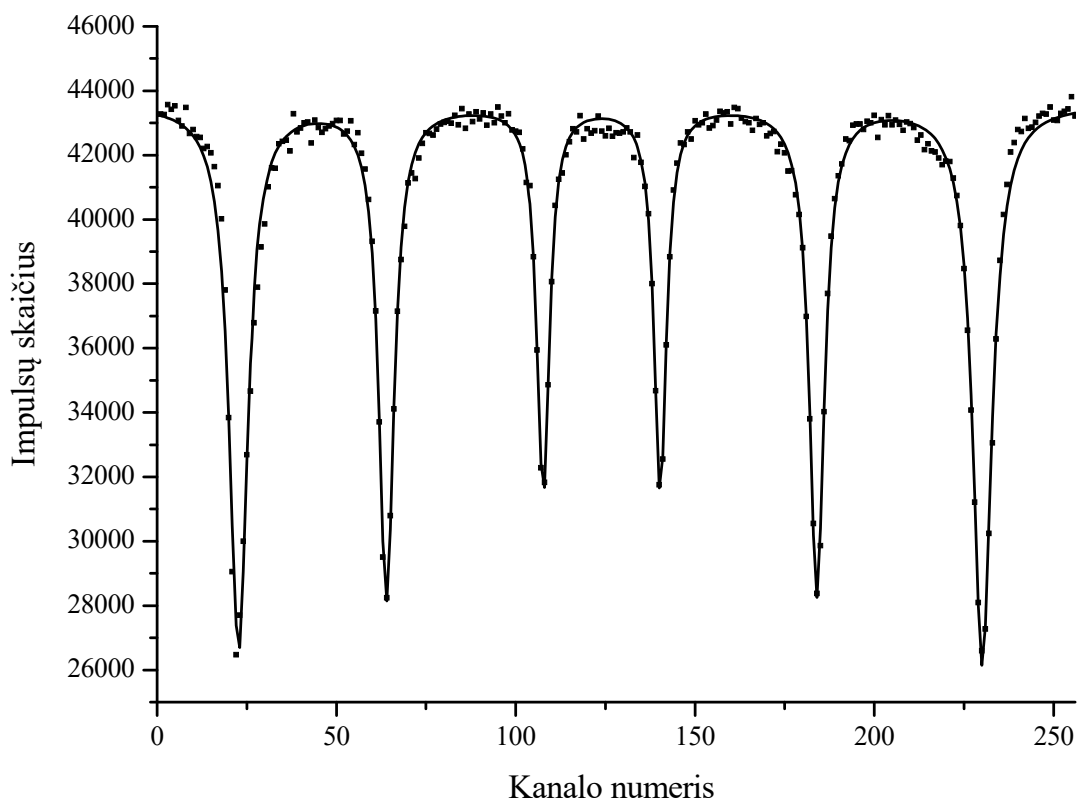
4) Pasirenkama meniu komanda **Scripts / After Fit**. Atsidariusiame dialoginiame lauke, parametrų grupėje „*Fit Curve*“, pažymimi laukeliai „*Generate Fit Curve*“ (t.y., **Origin** ne tik apskaičiuos nežinomuosius parametrus, bet ir pavaizduos „teorinę“ kreivę tame pačiame grafike, kuriame yra išmatuotasis spektras) ir „*Same X as Fitting Data*“ (t.y., „teorinė“ kreivė bus apskaičiuota visų eksperimentinių taškų abscisėms). Langelis „*Curves for Each Replica*“ neturi būti pažymėtas (priešingu atveju **Origin** atvaizduotų ne tik funkciją (4.4.5), bet ir atskirai kiekvieną sumos dėmenį, kas sumažintų grafiko vaizdumą). Laukelis „*Paste Parameters to Plot*“ taip pat neturi būti pažymėtas (priešingu atveju **Origin** visas 19 apskaičiuotųjų verčių įrašytų į grafiką, kas taip pat sumažintų vaizdumą). Jeigu naudojamas **Origin 7**, tuomet reikia pažymėti laukelį „*Write Parameters to Results Log*“ (tai reiškia, kad, baigus aproksimavimą, **Origin** įrašys apskaičiuotąsias parametrų vertes į langą „*Results Log*“, kurį galima atidaryti, pasirinkus meniu juostos komandą „*View / Results Log*“). Jeigu naudojamas **Origin 5**, tuomet parametrų grupėje „*Report*“ reikia pažymėti laukelį „*Append to*“ (tai reiškia, kad, baigus aproksimavimą, **Origin** sukurs teksto langą „*Results*“ ir įrašys į jį apskaičiuotąsias parametrų vertes, o jeigu toks langas jau egzistuoja, tuomet jis bus papildytas).

5) Jeigu visus padarytus pakeitimus ketinama panaudoti tik einamajam darbo su **Origin** seansui, tuomet aproksimavimo parametrų dialogo langas uždaromas ir pereinama prie kito punkto. Jeigu tuos pačius nustatymus ketinama naudoti ir ateityje, visi pakeitimai yra išsaugomi (tuomet, kitą kartą apdorojant Mesbauerio spektrą su **Origin**, bus galima praleisti $2 \div 5$ punktus). Tuo tikslu, jeigu naudojamas **Origin 7**, pasirenkamas veiksmas **Function / Save**. Jeigu naudojamas **Origin 5**, tuomet reikia pasirinkti veiksmą **Function / Edit** ir atsidariusiame dialogo lange spragtelėti mygtuką „*Save*“. Aproksimavimo parametrų dialogo langas uždaromas.

6) Pasirenkama **Origin** meniu juostos komanda **Analysis / Fit Multi-Peaks / Lorentzian**. Atsidariusiame teksto lauke „*Number of peaks*“ įvedamas smailių skaičius (6). Spragtelėjus mygtuką „*OK*“, atsidaro teksto laukas „*Initial half width estimate*“, kuriame reikia įvesti apytikslį smailės plotį (kadangi smailių pločiai vis tiek bus optimizuojami, tai tikslumas nėra reikalingas). Pvz., šiame teksto lauke galima įvesti skaičių 3. Spragtelėjus „*OK*“, grafike reikia pažymėti visas smailes. Tuo tikslu reikia dukart spragtelėti ant kiekvieno minimumo. Pažymėjus paskutiniąją smailę, **Origin** automatiškai atliks aproksimavimą.

Baigus aproksimavimą, grafike atsiras „teorinė“ kreivė (žr. 4.12 pav.), o visų parametrų vertės bus įrašytos į langą „*ResultsLog*“ (jeigu naudojamas **Origin 7**) arba „*Results*“ (jeigu naudojamas **Origin 5**). Tie parametrai pateikiami 5 stulpelių lentelės pavidalu. Kiekviena tos lentelės eilutė atitinka vieną iš 6 smailių. Stulpelių prasmė yra tokia:

- "*Peak*" – smailės numeris ($1 \div 6$); smailės sunumeruotos ta pačia tvarka, kuria jos buvo pažymėtos 6 punkto pabaigoje;
- "*Area*" – smailės integralas su minuso ženklu (t.y., $-S_i$); minuso ženklas atsiranda todėl, kad aproksimavimo funkcijos apibrėžime (4.4.5) prieš sumą **Origin** naudoja ne minusą, o plusą;
- "*Center*" – smailės centroidė (c_i);
- "*Width*" – smailės plotis, išreikštas kanalų skaičiumi (Γ_{ki});
- "*Height*" – smailės aukštis (t.y., minimumo gylis su minuso ženklu); šis parametras nėra reikalingas analizei.



4.12 pav. Netiesinio aproksimavimo būdu gautosios kreivės pavyzdys (atskiri taškai – matavimų duomenys; ištisinė linija – aproksimuojančioji kreivė).

Kad grafikas būtų informatyvesnis, jį galima pageduoti (tačiau galima palikti ir be pakeitimų). Pvz., galima pataisyti koordinatinių ašių apibrėžimo intervalus, o grafiko kampe galima sukurti užrašą su svarbiausiųjų parametru vertėm – centroidėm (kalibravimo spektrui ir darbų Nr.19b ÷ 19d tiriamajam spektrui) arba smailių pločiais (darbo Nr.19a tiriamajam spektrui). Baigus redaguoti, grafikas atspausdinamas. Grafiko su "teorine" kreive pavyzdys pavaizduotas 4.12 pav.

4.4.3. Mesbauerio spektrometro kalibravimas

Naudojantis kalibravimo spektru, kanalų numeris (j) susiejamas su šaltinio greičiu atžvilgiu sugėriklio (v). Ši prieklausa (**kalibravimo kreivė**) yra tiesinė:

$$v = C + D \cdot j. \quad (4.4.6)$$

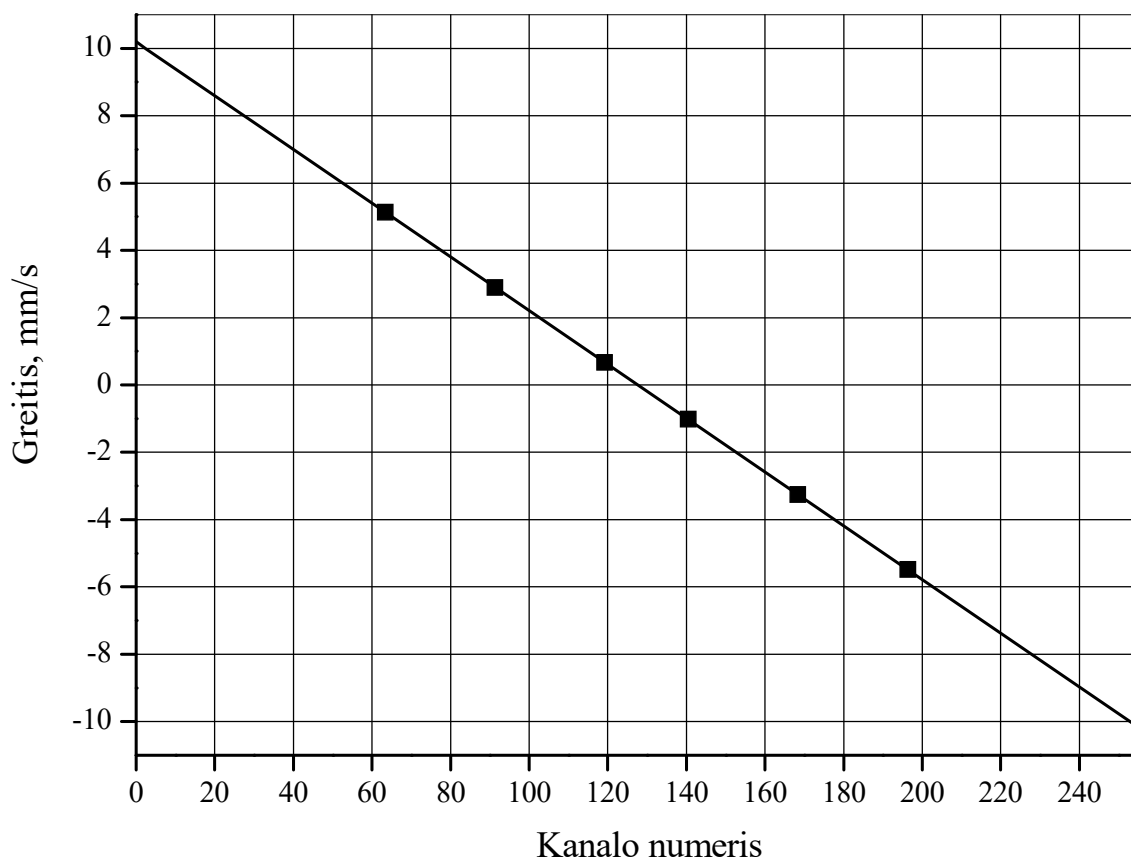
Taigi, reikia rasti du koeficientus C ir D . Tuo tikslu panaudojami žinomi Fe Mesbauerio spektro smailių greičiai: -5.487 , -3.252 , -1.018 , $+0.664$, $+2.900$, $+5.136$ mm/s. Šios vertės atidedamos ant grafiko. Jos atlieka ordinačių vaidmenį, o atitinkamų abscisų vaidmenį atlieka šešios anksčiau gautosios kalibravimo spektro centroidės. Koeficientus C ir D galima apskaičiuoti dviem būdais: pagal du kraštinius taškus ir tiesinio aproksimavimo būdu (pastarasis būdas yra tikslesnis).

1) Skaičiuojant pagal du kraštinius taškus, koeficientų C ir D išraiškos yra tokios:

$$D = \frac{v'_6 - v'_1}{c'_6 - c'_1}; \quad (4.4.7)$$

$$C = v'_1 - Dc'_1; \quad (4.4.8)$$

čia v'_1 ir v'_6 yra greičiai, kurie atitinka pirmąją ir šeštąją kalibravimo spektro smailes (štrichas nurodo, kad tai yra kalibravimo, o ne tiriamojo spektro smailės), o c'_1 ir c'_6 yra atitinkamos kalibravimo spektro centroidės. **Pastaba:** Gali būti, kad greičiai, kurie atitinka kanalus Nr.1 ir Nr.256, yra žinomi iš anksto. Tuomet kalibravimo spektras nėra būtinas: (4.4.7) ir (4.4.8) formulėse vietoj c'_1 ir c'_6 reikia naudoti 1 ir 256, o vietoj v'_1 ir v'_6 – atitinkamus greičius.



4.13 pav. Kalibravimo tiesės pavyzdys.

2) Skaičiuojant tiesinio aproksimavimo būdu, patogiausia panaudoti programą **Origin** arba kitą grafinio duomenų apdorojimo programą, kuri turi aproksimavimo funkciją. Jeigu naudojama programa **Origin**, tuomet reikia pasirinkti meniu juostos komandą "Analysis / Fit Linear". Skaičiavimo rezultatai bus įrašyti į teksto langą (programa **Origin** koeficientą C žymi "A", o koeficientą D žymi "B"). Tame lange šalia koeficiento žymens nurodyta jo optimalioji vertė ir paklaida.

Apskaičiavus koeficientus C ir D , atitinkamą kalibravimo tiesę (4.4.6) reikia nubrėžti tame pačiame grafike, kuriame atidėti šeši greičiai, kurie buvo naudojami kalibravimui. Grafiko su kalibravimo tiese pavyzdys yra pateiktas 4.13 pav.

4.4.4. Greičių, linijų pločių ir hipersmulkiųjų sąveikų parametrų skaičiavimas

Jeigu atliekamas darbas Nr. 19b ÷ 19d, tuomet tiriamojo spektro smailių centroidės c_1, c_2, \dots, c_6 įrašomos į (4.4.6) reiškinį vietoj j ir apskaičiuojami atitinkami greičiai v_1, v_2, \dots, v_6 .

Tolimesnė analizė yra skirtinga skirtingiems darbams:

Darbas Nr.19a

1. Apskaičiuojami Mesbauerio spektro smailių pločiai Γ_{vi} :

$$\Gamma_{vi} = |D| \cdot \Gamma_{ki} \quad (i = 1, 2, \dots, 6); \quad (4.4.9)$$

čia Γ_{ki} yra kanalų skaičiumi išreikštieji smailių pločiai, kurie skaičiuojami 4.4.2 poskyryje aprašytuju būdu, o D yra kalibravimo tiesės krypties koeficientas (žr. (4.4.6) formulę).

2. Naudojantis (1.4.4) formule, apskaičiuojamas kiekvienos spektro linijos natūralusis plotis Γ .
3. Naudojantis (1.1.3) formule, kiekvienai linijai apskaičiuojama vidutinė branduolio sužadintosios būsenos gyvavimo trukmė. Apskaičiuojamas visų trukmių vidurkis.

Darbas Nr.19b

1. Pagal (3.3.12) formulę apskaičiuojamas izomerinis poslinkis δ .
2. Pagal izomerinio poslinkio dydį nustatomas santykinis geležies atomo elektronų konfigūracijos pokytis $\delta / |\delta_s|$, kurį sąlygoja cheminio junginio susidarymas.
3. Nustatomas elektrono banginių funkcijų absoliutinių verčių branduolio centre kvadratų skirtumo ($|\psi_a(0)|^2 - |\psi_s(0)|^2$) ženklas.

Darbas Nr.19c

1. Naudojantis (3.2.13) formule, apskaičiuojamas sužadintojo ^{57}Fe branduolio magnetinis momentas. Tuo tikslu panaudojamas žinomas ^{57}Fe branduolio pagrindinės būsenos magnetinis momentas $\mu_{1/2} = (0.0903 \pm 0.0007) \mu_N$.
2. Naudojantis (3.2.15) formule, apskaičiuojama branduolį veikiančio efektinio magnetinio lauko magnetinė indukcija.

Darbas Nr.19d

Pagal (3.3.11) apskaičiuojamas kvadrupolinės sąveikos parametras, o po to, naudojantis (3.3.10) formule, apskaičiuojama branduolio energijos lygmenų kvadrupolinio skilimo energija.

Literatūra

1. Poškus A. Atomo fizika ir branduolio fizikos eksperimentiniai metodai. Vilnius: Vilniaus universiteto leidykla, 2008. 544 p. [*Ši vadovėlį numatoma išleisti 2008 m. spalio mėn.*].
2. Вертхейм Г. Эффект Мессбауэра. – М.: Мир, 1966.
3. Krane K. S. Introductory Nuclear Physics. – New York: John Wiley & Sons, 1988.
4. Remeikis V., Kalinauskas R. Taikomoji branduolio fizika ir radioekologija. – Vilnius: Fizikos institutas, 1999.
5. Blatt J. M., Weisskopf V. F. Theoretical Nuclear Physics. – New York: Dover Publications, Inc., 1991.