

О КОМПЕНСАЦИИ НЕОДНОРОДНОГО ХИМИЧЕСКОГО СДВИГА  
МЕССБАУЭРОВСКОЙ ЛИНИИ

В.И.Гольданский, С.В.Карягин, В.А.Намиот

Пропорциональность полной  $S$ -электронной плотности и спиновой плотности в области расположения ядра при контактном взаимодействии Ферми позволяет предположить метод компенсации специально подобранным радиочастотным полем наиболее существенной причины уширения мессбауэровских линий долгоживущих изомеров – неоднородного химического (монопольного) сдвига.

Одним из наиболее опасных механизмов, вызывающих уширение мессбауэровских линий долгоживущих изомеров в реальных кристаллах является неоднородный химический (монопольный) сдвиг, который связан с вариациями (вызванными дефектами, дислокациями и проч.) полной электронной плотности на возбужденных ядрах [1]. Эти уширения не могут быть подавлены радиочастотными методами [2, 3], поскольку монопольный сдвиг одинаков для всех компонент СТС.

В принципе, возможно, однако, подобрать такие соединения, в которых вариация величины СТС, связанная с изменением спиновой электронной плотности на возбужденном ядре оказалась бы пропорциональной изменению полной электронной плотности на этом же ядре по крайней мере для малых вариаций плотности. Так как радиочастотные методы [2, 3] дают, в какой-то мере, возможность управлять коэффициентом пропорциональности между величиной СТС  $m$ -й компоненты и изменением электронной спиновой плотности  $C_m$  то, в принципе, существует возможность подобрать  $C_m$  таким образом, чтобы скомпенсировать величину неоднородного химического сдвига противоположно направленной и равной по величине вариацией СТС.

В качестве иллюстрации осуществимости этой идеи рассмотрим случай, когда механизм, связывающим вариацию СТС с вариацией электронной спиновой плотности, является контактное фермиевское взаимодействие [4]. Переменное поле  $H$ , действующее на ядро, складывается из внешнего поля  $H_e$  и эффективного поля  $H_p$ , обусловленного фермиевским взаимодействием.

Переменное магнитное поле накладывается для того, чтобы коэффициент пропорциональности между вариациями монопольного сдвига и сверхтонкого расщепления достиг компенсирующего значения.

Важно отметить, что в переменном поле СТС определяется для квазиэнергии ядра (см. [3]).

Теоретически наиболее прост случай, когда спин основного состояния равен нулю, а однородное магнитное поле  $H$ , постоянное по величине, описывает конус с углом  $2\theta$  при вершине вокруг оси  $z$  с частотой  $\omega$ .

Применяя теорему Майорана [5] и пользуясь решением задачи для псевдочастицы Майораны [5, 6] со спином  $1/2$ , легко получить СТС

для квазиэнергии  $\Lambda$  ядра со спином  $l$ , магнитным моментом  $\mu$  и моно-  
польным сдвигом  $\hbar \delta$ .

$$\Lambda_m = l\omega + m\Omega + \delta, \quad (1)$$

$$\Omega = \sqrt{\omega^2 + 4\omega_M^2 + 4\omega\omega_M \cos \theta}, \quad (2)$$

где  $m = -l; -l+1; \dots l$ , суть собственные значения проекции спина  $l$   
на направление вращающегося поля,  $\omega_M = \mu H / 2I\hbar$  – ларморова частота  
прецессии псевдочастицы Майораны в поле.

При этом

$$H = H_e + H_\rho, \quad (3)$$

если

$$\left| \frac{H_e \mu_0}{kT} \right| \ll 1; \quad \left| \frac{H_e \mu_0}{\hbar \omega} \right| \gg 1, \quad (4)$$

где  $\mu_0$  – магнитный момент электрона;  $T$  – температура,  $k$  – фактор  
Больцмана. При выполнении условий [3] эффективное поле  $H_\rho$  без суще-  
ственных флуктуаций непрерывно следует по направлению за полем  
 $H_e$  [6].

Учтем, что

$$\delta = \langle \delta \rangle + \Delta \delta; \quad H_\rho = \langle H_\rho \rangle + \Delta H_\rho, \quad (5)$$

где скобки  $\langle A \rangle$  означают усреднение некоей величины  $A$  по всем яд-  
рам, а значок  $\Delta A$  означает отклонение  $A$  от  $\langle A \rangle$ . Из предположения  
о пропорциональности между малыми вариациями плотности электронов  
и их спиновой плотности при переходе от ядра к ядру следует, что

$$\hbar \Delta \delta = \kappa \mu \Delta H_\rho, \quad (6)$$

где  $\kappa$  – безразмерная константа, которая по данным эксперимента [7, 8]  
может иметь порядок  $0,01 + 0,1$ . Отбрасывая в (2) малые величины по-

рядка  $\left| \frac{\Delta H_\rho}{H} \right|^2$  получаем, что

$$\Delta \Lambda_m = \Lambda_m - \langle \Lambda_m \rangle = \Delta \delta + \frac{\mu \Delta H_\rho}{\hbar} C_m, \quad (7)$$

где величина  $C_m$ , называемая нами коэффициентом компенсации для  
 $m$ -й компоненты СТС, есть :

$$C_m = \frac{2 \langle \omega_M \rangle + \omega \cos \theta}{\langle \Omega \rangle} \frac{m}{l}. \quad (8)$$

Подбирая величины  $\omega$ ,  $\theta$ ,  $H_e$  можно добиться того, чтобы  $m$ -я компонен-  
та в СТС квазиэнергии обратилась в ноль. Для этого требуется, чтобы

выполнялось условие компенсации

$$C_m = -\kappa. \quad (9)$$

При  $\omega = -2 < \omega_M >$  уравнение (9) принимает особенно простой вид

$$\frac{m}{I} \sin \frac{\theta}{2} = -\kappa. \quad (10)$$

Идея компенсации с помощью регулируемого радиочастотного поля, допускает обобщение рассмотренной модели на более сложный случай, когда оба состояния изомера имеют спины, не равные нулю, а СТС является одновременным наложением монополярного сдвига, магнитного и квадрупольного сверхтонких взаимодействий (СТВ).

Как и в модельном случае, необходимо иметь кристаллическое соединение, в котором вариации локальных СТВ при переходе от ядра к ядру были бы пропорциональны вариациям монополярного сдвига. Тогда аналогично тому, как это показано в настоящей работе, подбором соответствующего радиочастотного поля можно добиться того, что для одной из компонент СТС флуктуации суммарного магнитно-квадрупольного СТВ и флуктуации монополярного сдвига окажутся взаимно скомпенсированными<sup>1)</sup>. Кроме того, можно, усложнив вид компенсирующего поля, подавить другие вариации СТС, непропорциональные вариациям монополярного сдвига.

Институт химической физики  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
4 апреля 1974 г.

Институт ядерной физики  
Московского  
государственного университета  
им. М.В.Ломоносова

### Литература

- [1] В.И.Гольданский, Ю.М.Каган. УФН, 110, 445, 1973.
- [2] Ю.А.Ильинский, Р.В.Хохлов. УФН, 110, 449, 1973.
- [3] В.А.Намиот. Письма в ЖЭТФ, 18, 369, 1973.
- [4] E. Fermi. Zs. Phys., 60, 320, 1930.
- [5] Л.Л.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, №2, стр. 505.
- [6] И.И.Гольдман, В.Д.Кривченков. Сб. задач по квантовой механике М., ГИТТЛ, 1957, №19, § 6.
- [7] В.И.Гольданский. Эффект Мессбауэра и его применение в химии. М., изд. АН СССР, 1963.
- [8] O.C.Kistner, A.W.Suryar. Phys. Rev. Lett., 4, 412, 1960.

<sup>1)</sup> Можно компенсировать не только постоянные вариации, но и медленно меняющиеся во времени (в масштабе периода радиочастотного сигнала) флуктуации монополярного сдвига.