Доклады Академии наук СССР
1961. Том 140, № 4

ФИЗИКА

Ю. КАГАН

К АНИЗОТРОПИИ ЭФФЕКТА МЁССБАУЭРА

(Представлено академиком И. К. Кикоиным 19 V 1961)

Ранее было обращено внимание на то, что вероятность резонансного поглощения (испускания) γ-квантов в некубических кристаллах должна обладать четко выраженным эффектом анизотропии (см., например, ([1])). Физически это связано с тем, что вероятность возбуждения фононов зависит от направления импульса отдачи ядра по отношению к кристаллическим осям.

Для оценки величины этого эффекта рассмотрим простую решетку ромбической системы, в которой атомы взаимодействуют центральным и нецентральным образом с ближайшими соседями (по ребрам параллелепипеда). При определенном отношении между параметрами такая решетка будет переходить в простые решетки тетрагональной и кубической системы.

Из соображений симметрии легко заключить, что колебания в направлении осей параллелепипеда независимы. Поэтому секулярное уравнение распадается на три независимых уравнения вида

$$m\omega_\alpha^2 = 2\sum_{\beta=1}^{3}\gamma_{\alpha\beta}(1-\cos\varphi_\beta), \quad \alpha,\beta = 1,2,3, \tag{1}$$

где диагональные элементы матрицы $\gamma_{\alpha\beta}$ являются центральными силовыми константами, а недиагональные элементы — нецентральными силовыми константами, соответствующими смещениям вдоль α для ближайших по оси β соседей.

Функция распределения частот фононного спектра для каждой ветви может быть определена тем же методом, что и в случае простой кубической решетки (см. ([2],[3])). В соответствии с (1) имеем:

$$g_\alpha(\omega^2) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-i\rho\omega^2 + i\frac{2}{m}\sum_{\beta=1}^{3}\gamma_{\alpha\beta}\rho\right\}\prod_{\beta=1}^{3}J_0\left(\frac{2\gamma_{\alpha\beta}}{m}\rho\right)d\rho. \tag{2}$$

Вероятность эффекта Мёссбауэра при резонансном поглощении γ-квантов в кристалле определяется величиной $\exp\{-Z\}$, где

$$Z = R\frac{v_0}{(2\pi)^3}q^\xi q^\eta\sum_\alpha\int d^3f\,\frac{V_\alpha^\xi(\mathbf{f})V_\alpha^\eta(\mathbf{f})}{\hbar\omega_\alpha(\mathbf{f})}[2\bar{n}_\alpha(\mathbf{f})+1] \equiv q^\xi q^\eta T^{\xi\eta}. \tag{3}$$

(Обозначения такие же, как в ([1], [3]); по повторяющимся верхним индексам производится суммирование.)

Анизотропия эффекта определяется тензором $T^{\xi\eta}$, главные оси которого совпадают с кристаллическими осями. Если учесть, что вектор поляризации α-й ветви $\mathbf{V}_\alpha$ параллелен оси α, то для диагональных элементов тензора имеем

$$T^{\xi\xi} = \frac{2R}{\hbar}\int g_\xi(\omega^2)\,[2\bar{n}(\omega)+1]\,d\omega. \tag{4}$$

или при произвольной температуре (соответствующий вывод для кубического кристалла приведен в ([3]))

$$T^{\xi\xi} = \frac{R}{2kT}\int_0^\infty \exp\left\{-\frac{\hbar^2}{2m(kT)^2}\left(\sum_{\alpha=1}^{3}\gamma_{\xi\alpha}\right)t\right\}\theta(t)\prod_{\alpha=1}^{3} I_0\left(\frac{\hbar^2\gamma_{\xi\alpha}}{2m(kT)^2}t\right)dt, \tag{5}$$

где $\theta(t)$ совпадает с функцией Якоби третьего рода аргумента $i\pi t$.

Для оценки анизотропии эффекта Мёссбауэра необходимо сравнить значения $T^{\xi\xi}$ для различных осей, принимая во внимание реальные параметры кристалла.

Установим связь между элементами матрицы $\gamma_{\alpha\beta}$ и упругими постоянными кристалла. Можно показать, что в рамках рассматриваемой модели

$$\begin{aligned}
\gamma_{11} &= \frac{c_{11}a_2a_3}{a_1}, & \gamma_{22} &= \frac{c_{22}a_1a_3}{a_2}, & \gamma_{33} &= \frac{c_{33}a_1a_2}{a_3},\\
\gamma_{12} &= \frac{c_{66}a_1a_3}{a_2}, & \gamma_{13} &= \frac{c_{55}a_1a_2}{a_3}, & \gamma_{23} &= \frac{c_{44}a_1a_2}{a_3},\\
\gamma_{21} &= \frac{c_{66}a_2a_3}{a_1}, & \gamma_{31} &= \frac{c_{55}a_2a_3}{a_1}, & \gamma_{32} &= \frac{c_{44}a_1a_3}{a_2}.
\end{aligned} \tag{6}$$

В случае тетрагональной решетки (ось c совпадает с осью 3) $a_1 = a_2$, $c_{11} = c_{22}$, $c_{44} = c_{55}$, и число независимых элементов матрицы $\gamma_{\alpha\beta}$ сводится к пяти.

Рассмотрим для этой решетки предел при $T = 0$:

$$T^{33} = \frac{R}{k\theta}\sqrt[6]{\frac{81\pi}{2}}\, f\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}}\sin\left[(2+\xi_1)t + \frac{\pi}{4}\right] J_0(\xi_1 t)\, J_0^2(t)\, dt; \tag{7}$$

$$T^{11} = \frac{R}{k\theta}\sqrt[6]{\frac{81\pi}{2}}\, f\sqrt{\xi_4}\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}}\sin\left[(1+\xi_1+\xi_2)t + \frac{\pi}{4}\right] J_0(t)\, J_0(\xi_2 t)\, J_0(\xi_3 t)\, dt,$$

где (8)

$$f = \left[\frac{1}{\sqrt{\xi_1}} + \frac{2}{\sqrt{\xi_2\xi_3}}\,\xi_4^{3/2}\right]^{-1/3}, \tag{9}$$

$$\xi_1 = \frac{\gamma_{33}}{\gamma_{31}}, \quad \xi_2 = \frac{\gamma_{11}}{\gamma_{13}}, \quad \xi_3 = \frac{\gamma_{12}}{\gamma_{13}}, \quad \xi_4 = \frac{\gamma_{31}}{\gamma_{13}};$$

θ — температура Дебая для рассматриваемого тетрагонального кристалла, которая находится из низкотемпературного предела для теплоемкости

$$\theta = \frac{\hbar}{k\sqrt{m}}\left[\frac{1}{18\pi^2}\left(\frac{1}{\gamma_{31}\sqrt{\gamma_{33}}} + \frac{2}{\sqrt{\gamma_{22}\gamma_{13}\gamma_{21}}}\right)\right]^{-1/3}. \tag{10}$$

Для определения эффекта в реальном случае и, главное, для оценки анизотропии распределение частот кристалла приближенно может быть аппроксимировано функциями, получающимися в рамках рассматриваемой модели при использовании экспериментально найденных значений c_{ik}. Поскольку функция (2) обладает всеми особенностями общего вида, характерными для распределения частот фононного спектра, а фиксирование параметров (6) фактически эквивалентно заданию моментов функции распределения, то для анализа интересующих нас интегральных по спектру величин такая аппроксимация, по-видимому, должна быть вполне удовлетворительной.

Среди одноатомных некубических кристаллов, для которых известен в настоящее время эффект Мёссбауэра, наибольший интерес представляет олово (белое), которое обладает тетрагональной симметрией ($a \simeq 5{,}8$ Å,

$c \cong 3{,}15$ Å). Для этого кристалла были недавно измерены значения c_{ik} ([4]) для двух температур: $T = 93°$ К и $T = 288°$ К (фактически измерялись константы s_{ik}; переход к c_{ik} проводится обычным образом). Используя значения c_{ik}, соответствующие $T = 93°$ К, были проведены расчеты T^{11} и T^{33}. Отношение этих величин, фактически характеризующее анизотропию, оказалось равным $T^{11}/T^{33} \approx 1{,}17$. Таким образом, интенсивность излучения без отдачи вдоль оси c больше, чем в перпендикулярном направлении. Для определения анизотропии непосредственно величины эффекта Мёссбауэра оценим абсолютное значение $T^{\xi\xi}$ (7) и (8), для чего воспользуемся значением $\theta \sim 200°$ К и величиной энергии отдачи $R = E_\gamma^2/2mc^2$ ($E_\gamma = 23{,}8$ кэв). В результате находим для отношения вероятностей при $T = 0$ (источник предполагается фиксированным) $w_3/w_1 \approx 1{,}04$. Если воспользоваться (5), то отношение w_3/w_1 может быть проанализировано для произвольных температур. Непосредственные расчеты показали, что с ростом температуры эффект анизотропии меняется мало.

Поступило
3 V 1961

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Ю. Каган, ЖЭТФ, 40, 312 (1961). [2] A. Maradudin, P. Mazur, E. Montroll, G. Weiss, Rev. Mod. Phys., 30, 175 (1958). [3] Ю. Каган, В. А. Маслов, ЖЭТФ, 41, № 10 (1961). [4] P. House, E. Vernon, Brit. J. Appl. Phys., 11, 254 (1960).