7296

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

7296

Р4 - 7296

В.К.Игнатович, Ю.М.Останевич, Л.Чер

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ И НЕЙТРОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ

1973

ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7296

В.К.Игнатович, Ю.М.Останевич, Л.Чер

ИЗОМЕРНЫЙ СДВИГ
И НЕЙТРОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ

Памяти Ф.Л.Шапиро посвящается

Изомерным сдвигом называется изменение энергии уровней ядра вследствие сверхтонкого контактного взаимодействия атомных электронов с зарядом ядра. Это изменение энергии пропорционально $|\Psi(0)|^2$-плотиости электронов на месте ядра - и $\langle r^2 \rangle$– среднеквадратичному радиусу распределения ядерного заряда. Экспериментально наблюдаемой величиной является изменение энергии ядерного перехода /положение резонанса/ при помещении изучаемого ядра в химические соединения, имеющие разные значения $|\Psi(0)|^2$. Изомерный сдвиг широко изучается в ЯГР спектроскопии /1/ и в исследованиях с μ -мезоатомами /2/.

Предложение использовать сверхтонкие магнитные взаимодействия для определения магнитных моментов компаунд-ядер, возбуждаемых при захвате нейтрона, принадлежит Ф.Л.Шапиро /3,4/. Недавно это предложение было реализовано экспериментально /5/. В связи с этим мы предприняли попытку рассмотреть возможности экспериментального изучения сверхтонкого контактного взаимодействия, позволяющего определить изменения $\langle r^2 \rangle$ при возбуждении ядра.

Выражение, описывающее сдвиг резонанса, имеет вид:

$$\Delta E_{IS} = 0{,}26\, A^{2/3} Z \Delta |\Psi(0)|^2 \, \Delta\langle r^2\rangle / \langle r^2 \rangle , \qquad /1/$$

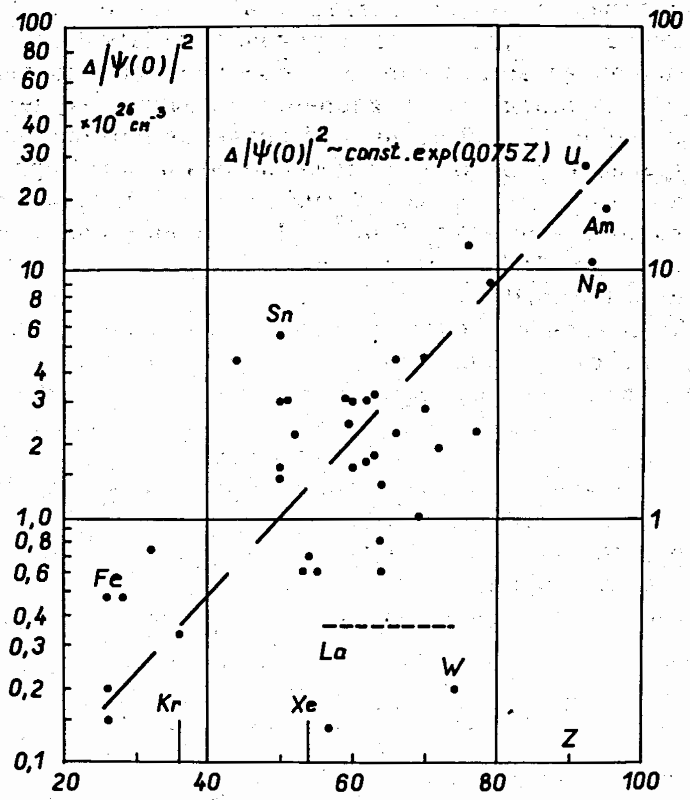
где ΔE_{IS} выражено в микроэлектрон-вольтах, если $\Delta|\Psi(0)|^2$ выражать в единицах 10^{26} $см^{-3}$. Здесь $\Delta\langle r^2\rangle$ обозначает изменение $\langle r^2\rangle$ при переходе ядра из начального состояния в конечное, $\Delta|\Psi(0)|^2$ - разность электронной плотности в двух соединениях.

Имеющиеся в настоящее время сведения о величине $\Delta|\Psi(0)|^2$, реализуемой для разных химических элементов, представлены на рис. 1 /данные из обзора /1/ /. Обращает на себя внимание экспоненциальный рост с увеличением Z реализуемых $\Delta|\Psi(0)|^2$. Нам неизвестно какое-либо объяснение этого факта, поэтому пока можно назвать лишь несколько причин, приводящих с увеличением Z к такому росту:

а/ возрастающая степень релятивизма движения электронов,

б/ возрастание влияния эффектов экранировки,

в/ возрастание формальной валентности /для актинидов/.



Расчетные значения реализуемых разностей плотности электронов в области ядер в зависимости от порядкового номера элемента.

Для дальнейшего достаточно констатации того, что множитель $\Delta|\Psi(0)|^2$ благоприятствует исследованиям при больших Z, т.е. в области, где существуют ядра с низколежащими нейтронными резонансами.

Для обсуждения ядерного фактора $\Delta\langle r^2\rangle/\langle r^2\rangle$ мы воспользуемся простейшей моделью аксиально-симметричного деформированного ядра, поверхность которого описывается выражением

$$r(\theta) = R(1 + a\,P_2(\cos\theta)). \qquad /2/$$

При малом изменении параметра деформации a

$$(\Delta a^2 \lesssim 0{,}1) \qquad /3/$$

$$\frac{\Delta\langle r^2\rangle}{\langle r^2\rangle} \simeq 1{,}1(a_f^2 - a_i^2) = 1{,}1\Delta a^2.$$

Можно назвать по крайней мере две области, в которых следует ожидать больших изменений параметра a при захвате нейтрона: область делящихся ядер и область сильно деформированных ядер, начинающаяся с A = 152.

В первой из них, согласно модели Струтинского /6/, зависимость энергии ядра от параметра a имеет два минимума с a = 0,3 /основное состояние/ и a = 0,6 /изомерное состояние/. При захвате нейтрона в некоторых случаях могут реализоваться уровни, которые характеризуются смесью волновых функций, описывающих состояния с параметрами a = 0,3 и 0,6. Оптимистическая оценка a для такого смешанного состояния может достигать значений a = 0,45, что соответствует $\Delta\langle r^2\rangle/\langle r^2\rangle = 0{,}1$. Такого же порядка величина Δa^2 может реализоваться в области A = 152, где основные состояния ядер имеют $a = 0{,}3$ /7/, а для высоколежащих возбужденных состояний не исключена возможность, что $a = 0$.

Оценка величины изомерных сдвигов с $a = 10^{-1}$ по формуле /1/ с использованием данных из рис. 1 дает следующие величины: для ^{235}U $\Delta E_{IS} = 2300 \cdot 10^{-6}$ *эв*, для ^{152}Eu $\Delta E_{IS} = 140 \cdot 10^{-6}$ *эв*. Некоторое представление о современных экспериментальных возможностях дает работа [5], в которой были измерены сдвиги резонансов с точностью $\pm 10.10^{-6}$ *эв*. Сопоставление этих данных позволяет расценивать возможности измерения изомерных сдвигов в нейтронных резонансах довольно оптимистически, хотя реализация такого типа экспериментов сопряжена с дополнительными трудностями. Эти данные побудили нас подробно рассмотреть вопрос о кажущемся смешении резонанса, вызываемом потерями энергии на отдачу в различных соединениях.

При захвате нейтрона часть его кинетической энергии E_n теряется на отдачу. В первом приближении величина этой потери E_t совпадает с отдачей для случая свободного покоящегося ядра [8]

$$E_t = \frac{m}{m+M} E_n = R \qquad /4/$$

/ m и M - массы нейтрона и ядра-мишени/.

Элементарные выкладки для ядер, образующих идеальный газ, дают следующий, более точный результат:

$$E_t = \frac{m}{m+M} (E_n - \bar{K}), \qquad /5/$$

где $\bar{K}$ - средняя кинетическая энергия ядра-мишени.

Квантовомеханическое рассмотрение захвата в твердом теле снова в первом приближении дает $E_t = R$[9], а в следующем, учитывающем изменение массы ядра при захвате нейтрона, - выражение /5/. $\bar{K}$ для одноатомного кубического кристалла имеет вид

$$\bar{K} = \frac{3}{4} \int \hbar\omega \, cth(\hbar\omega/2kT) g(\omega) d\omega, \qquad /6/$$

где $g(\omega)$ - спектр частот кристалла /см. Приложение/. Для случая высоких температур $(T > \theta_D)$ в модели Дебая

$$\bar{K} \simeq \frac{3}{2} kT + O\left(\left(\frac{\theta_D}{T}\right)^2\right), \qquad /7/$$

где θ_D - температура Дебая.

Из последней формулы следуют два обстоятельства: а/ должен существовать температурный сдвиг нейтронного резонанса, достигающий для $A=200$ $\Delta E = 63.10^{-6}$*эв*/$100°C$ *; б/ различие дебаевских температур также должно приводить к дополнительному смещению резонансной линии, которое, однако, исчезает при высоких температурах.

Учет этих обстоятельств может стать дополнительным усложнением при интерпретации экспериментально измеренных значений сдвига резонансной линии. К счастью, нейтронный эксперимент дает еще одну дополнительную характеристику - так называемое допплеровское уширение резонансной линии. Квадрат этого уширения в обеих обсуждаемых моделях равен

$$\Delta\Gamma^2 = \frac{4}{3} R \bar{K}. \qquad /8/$$

Очевидно, разность экспериментальных ширин для одного и того же резонанса в двух соединениях позволяет оценить изменение $\bar{K}$ и учесть связанное с этим различие в положениях резонанса.

Эти результаты получены для простых моделей идеального газа и одноатомного кристалла. Представляло бы определенный интерес рассмотреть применимость формул /5/ и /8/ в общем случае многоатомной решетки.

В заключение авторы выражают благодарность В.В.Пашкевичу, Н.П.Плакиде и Л.Б.Пикельнеру за полезные и стимулирующие обсуждения.

---

* Аналогичный сдвиг в ЯГР спектроскопии известен с 1960 года и носит название "температурного красного смещения".

Приложение

Как следует из теории Лэмба [10], резонансная линия поглощения описывается выражением

$$W_п(E)=\frac{\Gamma}{2\pi}\sum_{i\lambda}\rho_i\frac{|\langle i|e^{j\bar p\bar r}|\lambda\rangle|^2\,2\pi}{(E-E_0-E_\lambda+E_i)^2+\Gamma^2/2}, \qquad /9/$$

где E_0 и Γ - положение и ширина резонанса у жестко закрепленного ядра, E_i и E_λ - энергии начального и конечного состояния системы, в которую помещено поглощающее ядро, $\vec p$ - импульс нейтрона, $\vec r$ - координата местонахождения поглощающего ядра, $\rho_i=\exp(-E_i/kT)\times\times[\sum_j\exp(-E_j/kT)]^{-1}$.
Резонансная линия испускания описывается аналогичным выражением:

$$W_и(E)=\frac{\Gamma}{2\cdot\pi}\sum_{i\lambda}\rho_i\frac{|\langle i|e^{j\bar p\bar r}|\lambda\rangle|^2}{(E-E_0-E_i+E_\lambda)^2+\Gamma^2/4}. \qquad /10/$$

После простых преобразований [11] выражение /9/ приводится к виду

$$W_п=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt\int_{-\infty}^{\infty}dE_t\,e^{jtE_t}\,\frac{\Gamma}{2\cdot\pi}\sum_i\rho_i\frac{\langle i|e^{jtH}e^{j\bar p\bar r}e^{-jtH'}e^{-j\bar p\bar r}|i\rangle}{(E-E_0-E_t)^2+\frac{\Gamma^2}{4}}, \qquad /11/$$

в /11/ входят гамильтонианы H и H' системы, содержащей поглощающее ядро, соответственно до и после поглощения. Эти два гамильтониана различаются, поскольку масса ядра после поглощения возрастает. В дальнейшем массу нейтрона будем обозначать m, а массу ядра до поглощения или после испускания нейтрона - M.

Выражение /10/ для резонансной линии испускания может быть приведено к виду

$$W_и=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt\int_{-\infty}^{\infty}dE_t\,e^{jE_t t}\,\frac{\Gamma}{2\pi}\sum_i\rho_i\frac{\langle i|e^{-jtH'}e^{j\bar p\bar r}e^{jtH}e^{-j\bar p\bar r}|i\rangle}{(E-E_0-E_t)^2+\Gamma^2/4}. \qquad /12/$$

Введем обозначения: $x=E-E_0$, $y=E_t$; $\mathcal{L}(x-y)=\frac{\Gamma}{2\cdot\pi}\frac{1}{(x-y)^2+\Gamma^2/4}$;

$$S(y)=\frac{1}{2\pi}\int e^{ity}\phi(t)\,dt;\quad W(x)=W(E);$$

$$\phi_п(t)=\sum_i\rho_i\langle i|e^{jtH}e^{j\bar p\bar r}e^{-jtH'}e^{-j\bar p\bar r}|i\rangle;$$

$$\phi_и(t)=\sum_i\rho_i\langle i|e^{-jtH'}e^{j\bar p\bar r}e^{jtH}e^{-j\bar p\bar r}|i\rangle.$$

В этих обозначениях выражения /11/ и /12/ имеют вид

$$W(x)=\int_{-\infty}^{\infty}S(y)\,\mathcal{L}(x-y)\,dy. \qquad /13/$$

Смещение ΔE и уширение $\Delta\Gamma^2$ резонансной линии определим как первые два момента функции $W(x)$ [9,12]:

$$\Delta E=\bar x=\int_{-\infty}^{\infty}x\,W(x)\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}S(y)\,y\,dy,$$

$$\Delta\Gamma^2=\overline{x^2}-\bar x^2=\int S(y)\,y^2dy+\int\mathcal{L}(x)\,x^2dx-(\Delta E)^2, \qquad /14/$$

где учтено, что $\mathcal{L}(x)$ - симметричная функция, т.е. $\int\mathcal{L}(x)x\,dx$ можно положить равным нулю. Поскольку нас интересуют не столько сами величины ΔE и $\Delta\Gamma^2$, сколько их изменение при переходе от одного химического окружения к другому, то член $\int\mathcal{L}(x)x^2dx$ в выражениях /14/ тоже можно положить равным нулю, ибо при любом обрезании лоренцевой кривой он имеет одну и ту же величину вне зависимости от химического окружения. Таким образом, искомое смещение и уширение резонансной кривой можно представить как первые моменты функции $S(y)$. Вспоминая, чему соответствует обозначение $S(y)$, находим:

$$\Delta E=i\phi'(0),$$

$$\Delta\Gamma^2=-\phi''(0)+[\phi'(0)]^2, \qquad /15/$$

где штрих над ϕ означает дифференцирование по переменной t. Воспользовавшись выражением $\phi(t)$, находим для поглощения:

$$\Delta E_n = -\sum_i \rho_i \langle i|\{H - H' + [H' e^{j\bar{p}\bar{r}}]_- e^{j\bar{p}\bar{r}}\}|i\rangle, \qquad /16/$$

$$\Delta \Gamma_n^2 = \sum_i \rho_i \langle i|[H'[H' e^{j\bar{p}\bar{r}}]_-]_- e^{-j\bar{p}\bar{r}}|i\rangle - (\Delta E_n)^2. \qquad /17/$$

Последнее равенство справедливо с точностью до $1/N$, где N - число ядер в системе.

Пусть рассматриваемая система есть кристалл. Выберем начало отсчета так, чтобы r соответствовало смещению рассматриваемого ядра из положения равновесия. Разложив r по нормальным смещениям, описываемым гамильтонианом H', с помощью обычного формализма /13/ в случае кубического кристалла находим

$$\sum_i \rho_i \langle i|[H' e^{j\bar{p}\bar{r}}]_- e^{-j\bar{p}\bar{r}}|i\rangle = -\frac{p^2}{2(M+m)} = -\frac{m}{M+m} E_n, \qquad /18/$$

где E_n - энергия налетающего нейтрона.

Величину $H - H'$ можно представить, как $\sum h\delta\omega_k (a_k^+ a_k + \frac{1}{2})$, где a_k^+ и a_k - операторы рождения и уничтожения фонона с квантовыми числами k. Поскольку для моноатомной решетки $\omega \sim 1/\sqrt{M}$, то $\delta\omega_k$ равно изменению частоты одного осциллятора $\frac{1}{2}\frac{m}{M+m}\omega_k$, усредненному по всем ядрам, т.е. $\frac{1}{2}\frac{1}{N}\frac{m}{M+m}\omega_k$. Эти простые, а также более строгие теоретические рассуждения /14/ позволяют представить выражение /16/ в виде /5/ и /6/, где спектральная плотность $g(\omega)$ нормирована на единицу. Подобным же образом получается и выраженне /8/ для $\Delta\Gamma_n^2$. В случае испускания с помощью совершенно аналогичной процедуры получаем:

$$\Delta E_и = \bar{x} = -\frac{m}{M}(E_n + \bar{K}),$$

$$\Delta \Gamma_и^2 = \frac{4}{3}\frac{m}{M} E_n \bar{K}.$$

Литература

1. G.M.Kalvius. In "Hyperfine Interactions in Excited Nuclei", Gordon and Breach, N.Y., London, Paris, vol. II, p. 523 (1971).
2. S.Devons, ibid., vol. II, p. 619.
3. F.L.Shapiro. Research Applications of Nuclear Pulsed Systems, p. 176, Vienna, IAEA, 1967.
4. F.L.Shapiro. Polarized Targets and Ion Sources, p. 339, Saclay CEA, 1967.
5. В.П.Алфименков, Г.П.Жуков, Г.Н.Зимин, Л.Ласонь, Ю.Д.Мареев, О.Н.Овчинников, Л.Б.Пикельнер, И.М.Саламатин, В.Г. Тишин, Ф.Л.Шапиро, Э.И.Шарапов. Препринт ОИЯИ, Р3-6611, Дубна, 1972.
6. V.M.Strutinsky. Nucl.Phys., A95, 420 (1967); Nucl.Phys., A122, 1 (1968).
7. В.В.Пашкевич. Препринт ОИЯИ, Р4-4383, Дубна, 1969.
8. А.Ахиезер, И.Померанчук. Некоторые вопросы теории ядра. ГИТТЛ, стр. 246 / 1950/.
9. H.E.Jackson, J.Lynn. Phys.Rev., 127, 461 (1962).
10. W.E.Lamb. Phys.Rev., 55, 190 (1939).
11. М.А.Кривоглаз. В сборнике "Итоги науки. Физика твердого тела", стр. 5, изд-во ИНИ, Москва, 1965; М.В.Казарновский, А.В.Степанов. ЖЭТФ, 39, 1039 /1960/; ЖЭТФ, 42, 489 /1962/; Труды ФИАН, XXXIII, 203 /1964/.
12. H.J.Lipkin. Ann. of Phys., 9, 332 (1960). /См. перевод в сборнике "Эффект Мессбауэра", ИЛ, стр. 183, 1962/.
13. И.И.Гуревич, А.В.Тарасов. Физика нейтронов низких энергий. Изд. "Наука", Москва, 1965.
14. Ю.М.Каган. В сб. "Физика кристаллов с дефектами." т. 2, стр. 93, Тбилиси, 1966.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 июля 1973 года.