

研究论文

穆斯堡尔二次多普勒能移的计算

金慧娟 常汝勤 许桂琴
(上海钢铁研究所)

穆斯堡尔二次多普勒能移(SODS)是原子热运动的一种相对论效应,它是穆斯堡尔参数之一。研究吸收体的 SODS 随温度的变化,可得到其同质异能移 δ_I^a 和德拜温度 θ_D 。本文描述了在德拜模型近似下,计算 SODS 的原理和方法;并用该方法计算了 α -Fe 样品的德拜温度 θ_D 及在每一测温点下的 SODS;还把计算结果与文献值及 ^{57}Fe 二次多普勒能移的理论值作了比较,进行了分析和讨论。

关键词:穆斯堡尔效应 二次多普勒能移

一、前 言

穆斯堡尔二次多普勒能移(SODS)是原子热运动的一种相对论效应。它是穆斯堡尔参数之一。Pound 等^[1]和 Josephson^[2]几乎同时指出了在穆斯堡尔谱中存在着 SODS,可表示如下:

$$\delta_{\text{SODS}} = -\langle V^2 \rangle / 2C \quad (1)$$

式中, $\langle V^2 \rangle$ 为晶格热运动引起的共振核的均方速度,其值依赖于晶格温度; C 为光速。由(1)式可见,共振谱线的温度位移(二次多普勒效应)可直接而方便地给出原子振动速度的均方值 $\langle V^2 \rangle$ 以及它随温度的变化。我们研究 SODS 随温度的变化,还可由总的中心位移测定吸收体的同质异能移 δ_{IS}^a 和德拜温度 θ_D 。从而可得到关于核外电子密度以及电子状态的信息,得到关于固体中原子间结合力大小的信息。

本文描述了在德拜模型近似下,计算 SODS 的原理和方法。为验证方法的可行性,使用了在 Austin-C 型穆斯堡尔谱仪上测量的 α -Fe 谱的中心移位的数据,温度范围在 77.5~291K。计算了在每一测温温度下的 α -Fe 的 SODS 值及其德拜温度 θ_D ,其值在实验误差范围内与文献[3,4]报道值基本相符。并进而与 ^{57}Fe 的二次多普勒能移的理论值作了比较,进行了分析讨论。

二、原理和方法

选择 α -Fe 为标样,则吸收体的穆斯堡尔谱线的中心移位可表示如下:

$$\delta E_D = -\delta_{\text{SODS},\text{RT}}^{\alpha\text{-Fe}} + \delta E_{IS}^a + \delta_{\text{SODS}}^a \quad (2)$$

式中, δE_D 是实测的穆斯堡尔谱线的中心移位,是标样 α -Fe 谱的重心和实测谱线中心位置的速度间隔; $\delta_{\text{SODS},\text{RT}}^{\alpha\text{-Fe}}$ 为室温下 α -Fe 的 SODS, δE_{IS}^a 为与温度无关的吸收体的同质异能移;

δ_{SODS}^a 是随温度而变的吸收体的 SODS。

在固体研究中, 通常采用德拜模型^[4,5]来描述共振原子的均方速度 $\langle V^2 \rangle$ 与温度之间的关系。在德拜近似下(1)式可表示为

$$\delta_{\text{SODS}}^a = -\frac{9K\theta_D}{2MC} \left[\frac{1}{8} + \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^4 \cdot f(X, \theta_D/T) \right] \quad (3)$$

式中, $f(X, \theta_D/T) = \int_0^{\theta_D/T} \frac{X^3}{e^X - 1} dX$; K 为玻尔兹曼常数; T 为绝对温度; θ_D 是德拜温度;

M 为原子的质量。把(3)式代入(2)式, 则穆斯堡尔谱线的中心移位

$$\delta E_D = C_0 - C_1\theta_D - C_2\theta_D^{-3}f(X, \theta_D/T) \cdot T^4 \quad (4)$$

式中, C_0, C_1, C_2 分别定义如下:

$$C_0 = \delta E_{\text{IS}}^a - \delta_{\text{SODS,RT}}^a; C_1 = 9K/16MC; C_2 = 9K/2MC \quad (5)$$

积分 $f(X, \theta_D/T)$ 用下列级数展开来计算, 其中 $B = \theta_D/T$ 。

$$f(X, \theta_D/T) = \sum_{n=1}^{\infty} [6/n^4 - \exp(-nB)(6/n^4 + 6B/n^3 + 3B^2/n^2 + B^3/n)] \quad (6)$$

在穆斯堡尔效应实验中, 保持穆斯堡尔源的温度不变而改变吸收体的温度。可以测出不同温度下的穆斯堡尔谱线的中心移位, 利用(4)式进行非线性最小二乘拟合, 其中 C_0 和 θ_D 作为拟合参数, 拟合结果则可得吸收体的同质异能移 δ_{IS}^a 、德拜温度 θ_D 以及在每一温度下的吸收体的二次多普勒位移 δ_{SODS}^a 。

本工作采用不求逆矩阵的最小二乘法计算 C_0 和 θ_D 。其中 $f(X, \theta_D/T)$ 的积分值可采用辛普生积分法求得。在使用(6)式求积分值时, 取第 M 项和第 $M+1$ 项的和作比较, 当 $S_M - S_{M+1}$ 小于某一精度时(一般取 10^{-11})就取 M 项之和作积分值。

三、计算实例

本工作使用了在 Austin-C 型穆斯堡尔谱仪上测量的 α -Fe 谱的中心移位值^[6], 温度在 77.5—291K 之间。计算 α -Fe 的德拜温度 θ_D 及 SODS 随温度变化的值。表 1 列出了 α -Fe 样品的 δE_D 随温度的变化。这里设定室温下 $\delta E_D = 0$ 。根据表 1 的值进行非线性最小二乘法拟合, 表 2 列出了拟合结果, 图 1 给出了实验数据的中心移位的拟合。

表1 α -Fe 样品的 δE_D 随温度的变化

Table 1 Dependence of δE_D on temperature for α -Fe sample

$T(\text{K})$	77.5	113	153	193	233	273	291
$\delta E_D(\text{mm/s})$	0.108	0.098	0.079	0.059	0.035	0.01 $\pm$ 0.003	0.00

表2 α -Fe 样品的 SODS 随温度的变化

Table 2 Dependence of SODS on temperature for α -Fe sample

$T(\text{K})$	77.5	113	153	193	233	273	291
SODS (mm/s)	-0.128	-0.139	-0.157	-0.187	-0.201	-0.225	-0.236 ± 0.0033

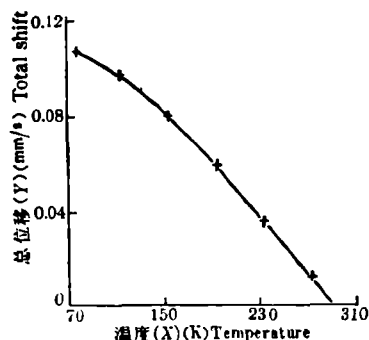


图1 α -Fe 样品穆斯堡尔谱线的中心移位的拟合

Fig. 1 Fitting of Mössbauer experimental data of total shift for α -Fe sample

由图1可见, 拟合的理论值和实验数据得到的中心移位符合良好, 拟合误差在实验误差范围内。由表2可见, 在室温291K(18°C)时, $\delta_{\text{SODS}, \text{RT}}^{\alpha\text{-Fe}} = -0.2364 \text{ mm/s}$, 拟合所得 $\alpha\text{-Fe}$ 的德拜温度 $\theta_D = 454 \text{ K} \pm 2 \text{ K}$, 较文献[3, 4]值(θ_D 分别为400K和420K)略高。

四、结果与讨论

本文所提出的方法能有效地计算吸收体的二次多普勒能移SODS, 吸收体的同质异能移 δ_{IS} 以及德拜温度 θ_D 。只是要注意以下三个方面。

1) SODS的误差主要来源于实验数据的中心移位的误差, 因此要尽量提高每一温度下 δE_D 的测量精度以及测温的精度。

2) 拟合结果得到德拜温度 θ_D 和 C_0 , 由(5)式可计算得到 δE_{IS} , 它是吸收体相对于参照材料的同质异能移。

3) 在德拜近似下, 二次多普勒效应也是测量 θ_D 的一种方法, 只是要选择合理的温度区域, 因为当 $T \gg \theta_D$ 时, 位移SODS与晶格温度 T 成比例而与 θ_D 无关:

$$\delta_{\text{SODS}} = - (3K/2MC)T \quad (7)$$

表3 ^{57}Fe 二次多普勒能移理论值表

($\theta_D = 20 - 480 \text{ K}$, $T = 4.2 - 400 \text{ K}$)

Table 3 Theoretical values of second-order Doppler shift for ^{57}Fe

$\theta_D(\text{K})$	T(K)									
	4.2	20.0	30.0	40.0	50.0	60.0	70.0	77.0	90.0	100.0
20	-0.0059	-0.0153	-0.0224	-0.0296	-0.0368	-0.0440	-0.0513	-0.0564	-0.0658	-0.0731
40	-0.0110	-0.0174	-0.0238	-0.0306	-0.0377	-0.0448	-0.0519	-0.0570	-0.0663	-0.0736
60	-0.0164	-0.0206	-0.0261	-0.0324	-0.0391	-0.0460	-0.0529	-0.0579	-0.0671	-0.0743
80	-0.0219	-0.0245	-0.0291	-0.0348	-0.0410	-0.0476	-0.0544	-0.0592	-0.0683	-0.0753
100	-0.0274	-0.0291	-0.0327	-0.0377	-0.0435	-0.0497	-0.0562	-0.0608	-0.0697	-0.0766
120	-0.0328	-0.0340	-0.0368	-0.0411	-0.0463	-0.0522	-0.0583	-0.0628	-0.0714	-0.0782
140	-0.0383	-0.0391	-0.0413	-0.0449	-0.0496	-0.0550	-0.0609	-0.0651	-0.0734	-0.0800
160	-0.0438	-0.0443	-0.0460	-0.0491	-0.0533	-0.0582	-0.0637	-0.0678	-0.0757	-0.0821
180	-0.0493	-0.0496	-0.0510	-0.0535	-0.0572	-0.0617	-0.0668	-0.0706	-0.0782	-0.0844
200	-0.0547	-0.0550	-0.0560	-0.0582	-0.0614	-0.0654	-0.0702	-0.0738	-0.0810	-0.0869
220	-0.0602	-0.0604	-0.0612	-0.0630	-0.0658	-0.0694	-0.0738	-0.0772	-0.0841	-0.0897
240	-0.0657	-0.0658	-0.0665	-0.0679	-0.0704	-0.0736	-0.0777	-0.0808	-0.0873	-0.0927
260	-0.0712	-0.0713	-0.0718	-0.0730	-0.0751	-0.0780	-0.0817	-0.0846	-0.0907	-0.0959
280	-0.0766	-0.0767	-0.0771	-0.0782	-0.0800	-0.0826	-0.0859	-0.0886	-0.0944	-0.0993
300	-0.0821	-0.0822	-0.0825	-0.0834	-0.0849	-0.0873	-0.0903	-0.0928	-0.0982	-0.1028
320	-0.0876	-0.0876	-0.0879	-0.0886	-0.0900	-0.0921	-0.0948	-0.0971	-0.1021	-0.1065
340	-0.0931	-0.0931	-0.0933	-0.0940	-0.0951	-0.0969	-0.0994	-0.1016	-0.1062	-0.1104
360	-0.0985	-0.0986	-0.0988	-0.0993	-0.1003	-0.1019	-0.1042	-0.1061	-0.1105	-0.1144
380	-0.1040	-0.1040	-0.1042	-0.1047	-0.1055	-0.1070	-0.1090	-0.1108	-0.1148	-0.1185
400	-0.1095	-0.1095	-0.1097	-0.1100	-0.1108	-0.1121	-0.1139	-0.1156	-0.1193	-0.1227
420	-0.1149	-0.1150	-0.1151	-0.1154	-0.1161	-0.1172	-0.1189	-0.1204	-0.1239	-0.1271
440	-0.1204	-0.1204	-0.1206	-0.1208	-0.1214	-0.1225	-0.1240	-0.1253	-0.1285	-0.1315
460	-0.1259	-0.1259	-0.1260	-0.1263	-0.1268	-0.1277	-0.1291	-0.1303	-0.1333	-0.1361
480	-0.1314	-0.1314	-0.1315	-0.1317	-0.1322	-0.1330	-0.1342	-0.1353	-0.1381	-0.1407

(续表3)

$Q_D(K)$	$T(K)$									
	110.0	120.0	130.0	140.0	150.0	160.0	170.0	180.0	190.0	200.0
20	-0.0804	-0.0877	-0.0950	-0.1023	-0.1096	-0.1169	-0.1241	-0.1316	-0.1387	-0.1460
40	-0.0808	-0.0881	-0.0953	-0.1026	-0.1099	-0.1171	-0.1244	-0.1317	-0.1390	-0.1462
60	-0.0815	-0.0887	-0.0959	-0.1031	-0.1103	-0.1176	-0.1248	-0.1321	-0.1394	-0.1466
80	-0.0824	-0.0895	-0.0967	-0.1038	-0.1110	-0.1182	-0.1254	-0.1327	-0.1399	-0.1471
100	-0.0836	-0.0906	-0.0977	-0.1048	-0.1119	-0.1190	-0.1262	-0.1334	-0.1406	-0.1478
120	-0.0850	-0.0919	-0.0989	-0.1059	-0.1130	-0.1200	-0.1271	-0.1343	-0.1414	-0.1486
140	-0.0867	-0.0934	-0.1003	-0.1072	-0.1142	-0.1212	-0.1282	-0.1353	-0.1424	-0.1495
160	-0.0886	-0.0952	-0.1019	-0.1087	-0.1156	-0.1225	-0.1295	-0.1365	-0.1435	-0.1506
180	-0.0907	-0.0972	-0.1038	-0.1105	-0.1172	-0.1241	-0.1309	-0.1379	-0.1448	-0.1518
200	-0.0931	-0.0994	-0.1058	-0.1124	-0.1190	-0.1257	-0.1325	-0.1394	-0.1463	-0.1532
220	-0.0956	-0.1017	-0.1080	-0.1144	-0.1210	-0.1276	-0.1343	-0.1410	-0.1478	-0.1547
240	-0.0984	-0.1043	-0.1104	-0.1167	-0.1231	-0.1296	-0.1362	-0.1428	-0.1495	-0.1563
260	-0.1014	-0.1071	-0.1130	-0.1191	-0.1254	-0.1317	-0.1382	-0.1447	-0.1514	-0.1581
280	-0.1045	-0.1100	-0.1158	-0.1217	-0.1278	-0.1340	-0.1404	-0.1468	-0.1534	-0.1599
300	-0.1078	-0.1131	-0.1187	-0.1245	-0.1304	-0.1365	-0.1427	-0.1490	-0.1555	-0.1620
320	-0.1113	-0.1164	-0.1218	-0.1274	-0.1331	-0.1391	-0.1452	-0.1514	-0.1577	-0.1641
340	-0.1149	-0.1198	-0.1250	-0.1304	-0.1360	-0.1418	-0.1478	-0.1539	-0.1601	-0.1664
360	-0.1187	-0.1234	-0.1283	-0.1336	-0.1390	-0.1447	-0.1505	-0.1565	-0.1626	-0.1688
380	-0.1226	-0.1271	-0.1318	-0.1369	-0.1422	-0.1477	-0.1534	-0.1592	-0.1652	-0.1713
400	-0.1266	-0.1309	-0.1355	-0.1404	-0.1455	-0.1508	-0.1564	-0.1621	-0.1679	-0.1739
420	-0.1308	-0.1348	-0.1392	-0.1439	-0.1489	-0.1541	-0.1595	-0.1650	-0.1707	-0.1766
440	-0.1350	-0.1389	-0.1431	-0.1476	-0.1524	-0.1574	-0.1627	-0.1681	-0.1737	-0.1794
460	-0.1394	-0.1430	-0.1471	-0.1514	-0.1560	-0.1609	-0.1660	-0.1713	-0.1767	-0.1824
480	-0.1438	-0.1473	-0.1511	-0.1553	-0.1598	-0.1645	-0.1694	-0.1746	-0.1799	-0.1854

$Q_D(K)$	$T(K)$									
	210.0	220.0	230.0	240.0	250.0	260.0	270.0	280.0	290.0	300.0
20	-0.1533	-0.1605	-0.1683	-0.1749	-0.1825	-0.1897	-0.1965	-0.2045	-0.2115	-0.2192
40	-0.1535	-0.1608	-0.1681	-0.1754	-0.1827	-0.1900	-0.1972	-0.2046	-0.2118	-0.2191
60	-0.1539	-0.1611	-0.1684	-0.1757	-0.1830	-0.1903	-0.1975	-0.2048	-0.2122	-0.2194
80	-0.1544	-0.1616	-0.1689	-0.1761	-0.1834	-0.1907	-0.1979	-0.2052	-0.2124	-0.2197
100	-0.1550	-0.1622	-0.1694	-0.1767	-0.1839	-0.1912	-0.1984	-0.2056	-0.2129	-0.2202
120	-0.1558	-0.1629	-0.1701	-0.1773	-0.1846	-0.1918	-0.1990	-0.2062	-0.2135	-0.2207
140	-0.1567	-0.1638	-0.1710	-0.1781	-0.1853	-0.1925	-0.1997	-0.2069	-0.2141	-0.2213
160	-0.1577	-0.1648	-0.1719	-0.1790	-0.1862	-0.1933	-0.2005	-0.2077	-0.2149	-0.2221
180	-0.1588	-0.1659	-0.1730	-0.1801	-0.1872	-0.1943	-0.2014	-0.2086	-0.2157	-0.2229
200	-0.1601	-0.1671	-0.1742	-0.1812	-0.1883	-0.1953	-0.2024	-0.2095	-0.2167	-0.2238
220	-0.1616	-0.1685	-0.1755	-0.1824	-0.1895	-0.1965	-0.2035	-0.2106	-0.2177	-0.2248
240	-0.1631	-0.1700	-0.1769	-0.1838	-0.1908	-0.1978	-0.2048	-0.2118	-0.2188	-0.2259
260	-0.1648	-0.1716	-0.1784	-0.1853	-0.1922	-0.1991	-0.2061	-0.2131	-0.2201	-0.2271
280	-0.1666	-0.1733	-0.1801	-0.1869	-0.1937	-0.2006	-0.2075	-0.2145	-0.2214	-0.2284
300	-0.1685	-0.1752	-0.1819	-0.1886	-0.1954	-0.2022	-0.2090	-0.2159	-0.2228	-0.2298
320	-0.1706	-0.1771	-0.1837	-0.1904	-0.1971	-0.2039	-0.2107	-0.2175	-0.2244	-0.2312
340	-0.1728	-0.1792	-0.1857	-0.1923	-0.1990	-0.2057	-0.2124	-0.2192	-0.2260	-0.2328

(续表3)

$\alpha_D(K)$	$T(K)$									
	210.0	220.0	230.0	240.0	250.0	260.0	270.0	280.0	290.0	300.0
360	-0.1750	-0.1814	-0.1878	-0.1944	-0.2009	-0.2075	-0.2142	-0.2209	-0.2277	-0.2345
380	-0.1774	-0.1837	-0.1901	-0.1965	-0.2030	-0.2095	-0.2161	-0.2228	-0.2295	-0.2362
400	-0.1799	-0.1861	-0.1924	-0.1987	-0.2051	-0.2116	-0.2181	-0.2247	-0.2313	-0.2380
420	-0.1826	-0.1886	-0.1948	-0.2011	-0.2074	-0.2138	-0.2202	-0.2268	-0.2333	-0.2399
440	-0.1853	-0.1913	-0.1973	-0.2035	-0.2097	-0.2160	-0.2224	-0.2289	-0.2354	-0.2419
460	-0.1881	-0.1940	-0.1999	-0.2060	-0.2122	-0.2184	-0.2247	-0.2311	-0.2375	-0.2440
480	-0.1910	-0.1968	-0.2027	-0.2086	-0.2147	-0.2209	-0.2271	-0.2334	-0.2397	-0.2462

$Q_D(K)$	$T(K)$									
	310.0	320.0	330.0	340.0	350.0	360.0	370.0	380.0	390.0	400.0
20	-0.2268	-0.2341	-0.2398	-0.2482	-0.2549	-0.2612	-0.2693	-0.2750	-0.2831	-0.2880
40	-0.2266	-0.2338	-0.2411	-0.2482	-0.2557	-0.2631	-0.2700	-0.2774	-0.2846	-0.2919
60	-0.2267	-0.2340	-0.2413	-0.2485	-0.2557	-0.2631	-0.2704	-0.2777	-0.2850	-0.2922
80	-0.2270	-0.2343	-0.2416	-0.2488	-0.2561	-0.2634	-0.2707	-0.2780	-0.2853	-0.2925
100	-0.2274	-0.2347	-0.2419	-0.2492	-0.2565	-0.2637	-0.2710	-0.2783	-0.2856	-0.2928
120	-0.2279	-0.2352	-0.2424	-0.2497	-0.2569	-0.2642	-0.2715	-0.2787	-0.2860	-0.2932
140	-0.2285	-0.2358	-0.2430	-0.2502	-0.2575	-0.2647	-0.2720	-0.2792	-0.2865	-0.2937
160	-0.2293	-0.2365	-0.2437	-0.2509	-0.2581	-0.2653	-0.2726	-0.2798	-0.2870	-0.2943
180	-0.2300	-0.2372	-0.2444	-0.2516	-0.2588	-0.2660	-0.2732	-0.2804	-0.2877	-0.2949
200	-0.2309	-0.2381	-0.2452	-0.2524	-0.2596	-0.2668	-0.2740	-0.2812	-0.2884	-0.2956
220	-0.2319	-0.2390	-0.2462	-0.2533	-0.2605	-0.2676	-0.2748	-0.2820	-0.2891	-0.2963
240	-0.2330	-0.2401	-0.2472	-0.2543	-0.2614	-0.2685	-0.2757	-0.2828	-0.2900	-0.2972
260	-0.2341	-0.2412	-0.2483	-0.2553	-0.2624	-0.2695	-0.2767	-0.2838	-0.2909	-0.2981
280	-0.2354	-0.2424	-0.2494	-0.2565	-0.2636	-0.2706	-0.2777	-0.2848	-0.2919	-0.2990
300	-0.2367	-0.2437	-0.2507	-0.2577	-0.2647	-0.2718	-0.2788	-0.2859	-0.2930	-0.3001
320	-0.2382	-0.2451	-0.2520	-0.2590	-0.2660	-0.2730	-0.2800	-0.2871	-0.2941	-0.3012
340	-0.2397	-0.2466	-0.2535	-0.2604	-0.2674	-0.2743	-0.2813	-0.2883	-0.2954	-0.3024
360	-0.2413	-0.2481	-0.2550	-0.2619	-0.2688	-0.2757	-0.2827	-0.2897	-0.2966	-0.3036
380	-0.2430	-0.2497	-0.2566	-0.2634	-0.2703	-0.2772	-0.2841	-0.2910	-0.2980	-0.3050
400	-0.2447	-0.2515	-0.2582	-0.2650	-0.2719	-0.2787	-0.2856	-0.2925	-0.2994	-0.3064
420	-0.2466	-0.2533	-0.2600	-0.2667	-0.2735	-0.2803	-0.2872	-0.2940	-0.3009	-0.3078
440	-0.2485	-0.2551	-0.2618	-0.2685	-0.2753	-0.2820	-0.2888	-0.2956	-0.3025	-0.3093
460	-0.2505	-0.2571	-0.2637	-0.2704	-0.2771	-0.2838	-0.2905	-0.2973	-0.3041	-0.3109
480	-0.2526	-0.2591	-0.2657	-0.2723	-0.2789	-0.2856	-0.2923	-0.2991	-0.3058	-0.3126

而在较低温度时, 即 $T \ll \theta_D$ 时, 位移 SODS 只依赖于 θ_D , 如下式:

$$\delta_{\text{SODS}} = -9K\theta_D/16MC \quad (8)$$

因此, 在求吸收体德拜温度 θ_D 时, 需增加低温区域的测量点以保证 θ_D 的精度。

表3给出了用德拜模型计算的 ^{57}Fe 二次多普勒能移的理论值。由表3, 我们可估计在某一德拜温度下 ^{57}Fe 的同质异能移随实验温度变化的值。表4给出了德拜温度 θ_D 从 400K~460K 时 ^{57}Fe 同质异能移随温度变化的理论值, 这里仍设定 290K(室温时) $\delta_{\text{FS}}^{57\text{Fe}}$ 为 0。由表4可见, 即使在低温 77K 时, θ_D 变化 60K, $\delta_{\text{FS}}^{57\text{Fe}}$ 仅相差 0.0085mm/s。本工作测定的 $\alpha\text{-Fe}$ 谱

表4 ^{57}Fe 的 δE_D 随温度变化的理论值Table 4 Theoretical values of dependence of δE_D on temperature for ^{57}Fe

$\theta_D(\text{K})$	$T(\text{K})$						
	77	110	150	190	230	270	290
400	0.1157	0.1047	0.0858	0.0634	0.0389	0.0132	0
420	0.1129	0.1025	0.0844	0.0626	0.0385	0.0131	0
440	0.1101	0.1004	0.0830	0.0617	0.0381	0.0130	0
460	0.1072	0.0981	0.0815	0.0608	0.0376	0.0128	0

速度为 $0.05481\text{mm}/(\text{s}\cdot\text{ch})$ 。因此当 θ_D 变化 60K 时仅相差 0.16 道左右, 在实验的测量误差范围之内。

比较表 1 和表 4, 可见表 1 的值恰落在 θ_D 为 $440\text{—}460\text{K}$ 之间的表 4 中, 同时发现, 表 2 中 SODS 的值与表 3 中 θ_D 在 $440\text{—}460\text{K}$ 之间的 SODS 值也相一致。可见, 我们的计算值 $\theta_D(454\text{K})$ 与理论值一致。而 θ_D 比文献值偏高主要是由于在每一温度下实验测量 δ_{57}^{Fe} 值略低于理论值。

综上所述, 在利用二次多普勒效应测定德拜温度和计算 SODS 值时, 要尽量选择低温区域的测量点, 并使用小速度, 以保证测量精度。特别是该方法更适合于测定样品的德拜温度 θ_D 的相对变化, 例如样品成分的变化而引起 θ_D 的变化。因为在计算 θ_D 的相对变化量时, 一定程度上消除了实验误差。

参 考 文 献

- [1] R. V Pound *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, 4 (1960), 274.
- [2] B. D Josephson, *Phys. Rev. Lett.*, 4 (1960), 341.
- [3] R. S Preston *et al.*, *Phys. Rev.*, 128 (1962), 2207.
- [4] 夏元复等, 穆斯堡尔效应及其应用, 原子能出版社, 北京 1984 年。
- [5] E. Galvão da Silva *et al.*, *Appl. Phys.*, A27 (1982), 89.
- [6] 常汝勤等, 核技术, (1986), 10:27.

Calculation of the Mössbauer second-order Doppler shift

Jin Huijuan Chang Ruqin Xu Guiqin

(Shanghai Institute of Iron and Steel Research)

Abstract

The Mössbauer second-order Doppler shift (SODS) is a relativistic effect of thermal motion of atoms. It is one of the Mössbauer parameters. The isomer shift δ_{is}^r and Debye temperature θ_D can be obtained by means of studying the dependence of the SODS on temperature of the absorber.

The principle and method of evaluating the SODS are described by using the Debye model in this paper. Debye temperature θ_D and the SODS at each measuring temperature for $\alpha\text{-Fe}$ sample have been calculated. The results are compared with the values reported in literatures and the theoretical values of the SODS for ^{57}Fe .

Keywords: Mössbauer effect Second-order Doppler shift

((1988年8月1日收到))