

# اصول طیف‌سنجی موزبائر

## (Introduction to Mossbauer Spectroscopy)

نویسندگان:

الهام بازاریار<sup>۱</sup>، دکتر حبیبی<sup>۲</sup>

۱- فوق لیسانس فیزیک، آزمایشگاه موزبائر نانوفناوری کفا

Kefa.bazyar@gmail.com

۲- دکترای فیزیک، عضو هیئت علمی دانشگاه بوعلی سینا همدان

شکل ۱: دستگاه طیف‌سنجی موزبائر

### چکیده:

طیف‌سنجی موزبائر اطلاعات ساختاری، مغناطیسی و الکترونیکی درون ماده را ارائه می‌دهد. در این روش هسته اولیه (چشمه)، پرتو گاما را گسیل کرده و هسته ثانویه (نمونه مورد مطالعه)، آن را با بازدهی خوبی جذب می‌کند. در طیف‌سنجی موزبائر هر دو هسته باید در یک بستر جامد محصور شوند که به این پدیده، اثر موزبائر گفته می‌شود. طیف موزبائر، شدت جذب پرتو گاما بر حسب انرژی هسته خاص رزونانسی  $^{57}\text{Fe}$  و یا  $^{119}\text{Sn}$  است.

طیف موزبائر اطلاعات ساختاری را در مورد برهم‌کنش‌های فوق‌ریزساختار<sup>۱</sup> نشان می‌دهد و شامل انرژی‌های کوچکی از برهم‌کنش‌های بین هسته و الکترون‌های همسایه‌اش است. سه برهم‌کنش فوق‌ریز شامل دانسیته الکترونی هسته‌ها (ایزومر شیف)، تغییرات میدان الکتریکی (چهارقطبی الکتریکی) و دانسیته الکترون‌های جفت نشده (میدان مغناطیسی فوق‌ریز) است.

---

<sup>1</sup> Hyperfine interaction

یکی از پرکاربردترین موارد استفاده موزبائر در دنیا، در مطالعه مواد آمورف است که تقریباً کشف موزبائر با کشف مواد آمورف هم‌زمان بوده است. مواد آمورف در حوزه‌های مختلف صنایع از جمله مواد مغناطیسی، پلیمر، فولاد، خوردگی و غیره کاربرد دارند. در این مقاله سعی شده است تا اصول و چگونگی کار دستگاه طیف‌سنجی موزبائر مورد بررسی قرار گرفته و به طور گسترده در مورد مواد آمورف و تحلیل طیف‌های موزبائر در حوزه خواص مغناطیسی و ساختارهای فازی آنها بحث شود.

## مقدمه

در سال ۱۹۵۸ رادولوف موزبائر پدیده‌ای را کشف کرد که امروزه از آن به عنوان «اثر موزبائر» یاد می‌شود. او برای انجام تز دکترای خود با عنوان «اندازه‌گیری پراکندگی رزونانس هسته‌ای در عنصر  $^{191}\text{Ir}$ » توانست به این کشف بسیار بزرگ که از دقت فوق‌العاده بالایی برخوردار است، دست یابد. داده‌های به دست آمده از این آنالیز دارای دقتی معادل ۱ بر  $10^{12}$  است؛ یعنی مقیاس یک ورق کاغذ در فاصله بین زمین و خورشید. به همین دلیل این روش قادر به شناسایی برهم‌کنش‌های فوق‌ریز ساختار در ابعاد هسته‌ای است. این روش به چگونگی آرایش اتم‌های احاطه شده و ساختار بلوری محلی و محیط‌های شیمیایی و ساختاری، بسیار حساس است و اطلاعات ارزشمندی را در مورد ساختار و خصوصیات مغناطیسی و الکترونیکی مواد (مثل الکترووالانس، حالت اسپینی و اندازه حرکت) ارائه می‌دهد. همچنین طیف‌سنجی موزبائر برای آنالیزهای فازی کمی با توجه به میزان تمرکز عناصر رزونانسی در فازهای مختلف نانو ساختار و یا آمورف، کاربرد دارد. با وجود اینکه برهم‌کنش‌های فوق‌ریز به راحتی قابل تحلیل نیستند، اما به مثابه «اثر انگشت» در تشخیص اختلافات محیطی از نظر شیمیایی در اتم رزونانس، معتبراند و با توجه به درصد فراوانی فازها، با اطمینان بالایی قابل تحلیل و بررسی هستند.

طیف‌سنجی موزبائر در بسیاری از حوزه‌های علمی و صنعتی دنیا کاربرد دارد و به دلیل قابلیت‌های منحصر به فرد، به روش متداول آنالیزی در دنیا تبدیل شده است؛ به طوری که تعداد مقالات چاپ شده در این حوزه از مرز ۶۰۰۰۰ گذشته است. نتایج چشمگیر و قابل توجه این آنالیز در حوزه‌های فیزیک، مغناطیس، مهندسی مواد و متالورژی، مطالعه ساختارهای الکترونی مواد، علم سطح، شیمی، کاتالیست‌ها، صنعت فولاد، مطالعات خوردگی، مکانیک سیالات، بیوتکنولوژی و

پزشکی، کشاورزی، محیط‌زیست، زمین‌شناسی و کانی‌شناسی، مطالعات اکتشافات فضایی و باستان‌شناسی گزارش شده‌است که نشان‌دهنده ارتباط تنگاتنگ این روش با تحقیقات علمی روز دنیا است.

## ۱- اصول طیف‌سنجی موزبائر

طیف‌سنجی موزبائر بر اصول مکانیک کوانتومی استوار است و ارتباط ناگسستگی بین فیزیک حالت جامد و هسته‌ای دارد. این روش، گذار بین حالات هسته‌ای را اندازه‌گیری و بررسی می‌کند. غالب ویژگی‌های هسته‌ای و مواد هسته‌ای معلوم شده‌است اما بیشتر این ویژگی‌ها و به تبع آن، کاربردهای آنها توسط متخصصین حوزه‌های مختلف به خوبی شناخته نشده‌است. از آنجا که طیف‌سنجی موزبائر گذار حالات هسته‌ای را اندازه‌گیری می‌کند، لازم است که ویژگی‌های هسته‌ای در ماده به خوبی درک و شناخته شود. به همین دلیل بحث را با مروری بر دانش کوانتومی و هسته‌ای آغاز می‌کنیم.

در هسته، گذارهایی بین حالات کوانتومی، مثل الکترون‌ها و اتم‌ها روی می‌دهد که باعث تغییرات بزرگی در انرژی می‌شود. هر هسته را با مشخصه‌های کوانتومی  $E, I, I_z$  توصیف می‌کنند که  $E$  انرژی،  $I$  اسپین هسته و  $I_z$  اسپین هسته در جهت  $z$  است. از طرفی باید بدانیم که مختصات فضایی  $X$ ، به عنوان مرکز جرم هسته برای فهمیدن ارتعاشات هسته‌ای در فضا و یا شبکه بلوری ضروری است. سیستم مختصات داخلی هسته به هم وابسته هستند. برای مثال، اولین حالت برانگیخته هسته  $^{57}\text{Fe}$ ،

دارای اسپین  $I = \frac{3}{2}$  است که به دلیل قواعد کوانتومی<sup>۲</sup> دارای چهار مقدار مجاز  $I_z$  است:  $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$

اسپین حالت پایه اتم  $^{57}\text{Fe}$ ،  $\frac{1}{2}$  است که دو مقدار مجاز  $\frac{1}{2}$  و  $-\frac{1}{2}$  دارد. در غیاب برهم‌کنش‌های فوق‌ریز، همه سطوح انرژی و کلیه گذارهای مجاز بین ترازهای اسپینی در یک سطح انرژی مشابه روی می‌دهد و سطح مقطع کل هسته جاذب  $\sigma$ ،  $\text{cm}^2 \times 10^{-18} \times 2/57$  است. توجه داشته باشید اگرچه سطح مقطع فوق، تقریباً ۱۰۰ برابر کوچکتر از یک سطح مورد هدف در مورد یک ابر الکترونی اتمی است، اما صدها برابر بزرگتر از سطح مقطع تفرق یک فوتون با انرژی  $14/4\text{KeV}$  از الکترون‌های اتمی  $^{57}\text{Fe}$  است.

<sup>2</sup> selection rule

طول عمر، مشخصه حالت برانگیخته هسته اتم  $^{57}\text{Fe}$ ،  $\tau = 141 \text{ ns}$  است که نسبت به عناصر دیگر، دارای بازه زمانی طولانی تری است. به طور کلی در تابش های سنکروترونی، هسته های مستقل اتم  $^{57}\text{Fe}$  در حالت برانگیخته، به طور هم زمان می توانند با طول عمرهای مختلف  $\tau$  واپاشی داشته باشند. احتمال واپاشی هسته اتم  $^{57}\text{Fe}$  در واحد زمان به شکل زیر است:

$$\frac{1}{\tau} e\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (1)$$

با توجه به اصل عدم قطعیت کوانتومی هایزنبرگ، مدت زمان حالت برانگیخته هسته ای  $\tau$ ، به عدم قطعیت انرژی حالت برانگیخته  $\Delta E$ ، با فرمول  $h \sim \Delta E \cdot \tau$  وابسته است. که برای  $\tau = 141 \text{ ns}$ ، عدم قطعیت در انرژی معادل  $\Delta E = 4.7 \times 10^{-9} \text{ eV}$  خواهد بود.

در یک گذار ساده درون هسته، وابستگی انرژی به سطح مقطع در تفرق موزبائر به شکل تابع لورنتسی است که پهنای آن با استفاده از پهن شدگی انرژی حالت برانگیخته هسته تعریف می شود که در مورد  $^{57}\text{Fe}$ ، این پهنای  $\Gamma = \Delta E = 4.7 \times 10^{-9} \text{ keV}$  است. اما هنگامی که ترازهای انرژی برانگیخته شده هسته های متفاوت موزبائر یکسان نباشند و تفرق ها در هسته مستقل از هم عمل کنند، سطح مقطع کل به شکل زیر خواهد بود:

$$\sigma(E) = \sum_j \sigma_j(E) \quad (2)$$

اصول کلی طراحی طیف سنجی موزبائر معمولاً بر اساس محاسبه وابستگی انرژی به سطح مقطع کل  $\sigma(E)$  انجام می شود که مجموع توابع لورنتسی از پهنای طبیعی خط  $\Gamma$  است.

بر این اساس، اکنون در نظر می گیریم که هسته های ثانویه با جذب انرژی پرتو گاما از هسته اولیه برانگیخته می شوند که دقت انرژی حالت برانگیخته هسته ای از درجه  $10^{-8}$  الکترون ولت است. در دمای اتاق، ارتعاشات مرکز جرم هسته دارای انرژی  $10^{-2} \text{ eV/atom} \times 2/5$  است. در صورتی که تغییرات انرژی ارتعاشی هسته در طول گسیل پرتو گاما روی دهد، این مقدار انرژی پرتو گاما برای وقوع پدیده جذب رزونانس قوی هسته ثانویه، بسیار نامناسب و غیر دقیق است.

**شکل ۲:** نمودار انرژی بر حسب شدت اشعه گاما

هر گسیل پرتو گاما از هسته با جرم  $m$  با ممتوم  $p_\gamma = \frac{E_\gamma}{c}$  با پس زنی<sup>۳</sup> از سوی سیستم گسیلنده با ممتومی در خلاف جهت خود همراه است. در این وضعیت، جرم اولیه  $m$  دارای انرژی پس زنی  $E_R$  است که همین مقدار از انرژی پرتو گاما اولیه کاسته شده و به سمت جرم دوم  $m'$  حرکت می کند. انرژی پس زنی با استفاده از فرمول زیر به دست می آید:

$$E_R = \frac{p_\gamma^2}{2m} = \frac{E_\gamma^2}{2mc^2} \quad (۳)$$

**شکل ۳:** جذب و گسیل اشعه گاما به همراه پس زنی

در مورد جرم  $^{57}\text{Fe}$  با گسیل پرتو گاما، دارای مقدار انرژی پس زنی  $10^{-3} \text{ eV} \times 1/86$  می شود که این مقدار انرژی، بسیار بزرگتر از دقت انرژی مورد نیاز برای جذب پرتو گاما توسط هسته ثانویه است.

تذکره دکترای رادولف موزبائر اندازه گیری رزونانس هسته ای در عنصر ایریدیوم ۱۱۹ بود. او برای این کار، از پهنای دوپلر حرارتی خطوط گسیلی برای جبران انرژی از دست رفته پس زنی استفاده کرد. او انتظار داشت با این روش، تعداد جذب هسته ای رزونانسی بسیار کم باشد اما برخلاف انتظار وی تعداد آنها زیاد بود و وقتی که چشمه و جاذب تحت دمای نیتروژن مایع سرد شدند، این آمار جذب بالاتر هم رفت. وی همچنین توانست روشی را برای ایجاد طیفی از پرتو گاما به دست آورد که بتواند در ایجاد رزونانس مفید و موثر باشد. او برای این کار، از خاصیت دوپلر استفاده کرد. رابطه بین انرژی گامای دریافتی و سرعت حرکت چشمه نسبت به نمونه به صورت  $E = E_\gamma \frac{v}{c}$  است. شکل (۴) نمایی از این تغییر را نشان می دهد.

**شکل ۴:** تغییرات شدت بر حسب سرعت دوپلر

<sup>3</sup> Recoil

برای حل مشکل، موزبائر کشف کرد که در شرایطی، جرم  $m$  را می‌توان مساوی جرم کل بلور دانست. با این فرض که جرم هسته محکم به جرم بلور متصل است. این موضوع درست مثل یک نوسانگر هارمونیک ساده با انرژی کوانتیزه است که هسته‌های  $^{57}\text{Fe}$  با استفاده از یک فنر به جرم کل بلور پیوند دارند. در این حالت، انرژی پس‌زنی به دست آمده از معادله شماره (۳)، بسیار کوچک شده، انرژی پرتو گامای خروجی دارای دقتی بسیار بیشتر از  $10^{-9}$  الکترون ولت خواهد شد که توسط هسته ثانویه جذب می‌شود.

با در نظر گرفتن کل شبکه به صورت جرم واحد، ارتعاشات شبکه به قدری کم است که تقریباً احتمال برانگیختگی فونون‌ها در حین گسیل پرتو گاما وجود ندارد. زیرا در صورت وجود ارتعاشات شبکه، انرژی برانگیختگی فونون‌ها از درجه  $10^{-2}$  است که وجود هرگونه رزونانس را از بین می‌برد.

## ۲- کسر بدون پس‌زنی<sup>۴</sup>

با استفاده از محاسبات کوانتومی، برای هر هسته‌ای می‌توان میزان پس‌زنی هسته را بررسی کرد. در مکانیک کوانتوم، کمیت  $f$  به عنوان کسر بدون پس‌زنی تعریف می‌شود و احتمال این را می‌دهد که بعد از گسیل پرتو گاما با ممنتوم  $p_\gamma$  از مرکز جرم هسته، تغییری در تابع حالت شبکه مرکز جرم هسته ایجاد نشود. به عبارت دیگر،  $f$  احتمال گسیل پرتو گاما را بدون افت انرژی به سمت فونون‌ها (ذرات حامل انرژی در شبکه بلوری) بررسی می‌کند و البته مشابه همین عامل برای جذب پرتو گاما توسط هسته ثانویه نیز به کار می‌رود. محاسبه  $f$  از طریق فرمول زیر انجام می‌شود:

$$f = e^{-\frac{E_R}{\hbar\omega}} = e^{-k_1^2 \langle X \rangle^2} \quad (4)$$

که در آن  $\langle X \rangle^2 < X \rangle^2$  متوسط مربع جابجایی هسته‌های محصور در نوسانگر است. شرط به دست آوردن تعداد معناداری از گسیل پرتو گاما بدون پس‌زنی این است که مشخصه انرژی پس‌زنی هسته‌های آزاد،  $E_R$  کوچکتر و یا هم مرتبه انرژی فونون‌ها با طول موج کوتاه در شبکه باشد. انرژی فونون‌ها از طریق دمای دمای و یا دمای اینشتین، چند ده میلی الکترون ولت و انرژی

<sup>4</sup> Recoil-free fraction

پس زنی  $E_R$  در  $^{57}\text{Fe}$ ،  $10^{-3} \text{eV} \times 1/86$  است که مشاهده می کنید این دو مقدار هم مرتبه یکدیگر هستند. ما وارد جزئیات بحث فوق نخواهیم شد چون محاسبه آن بسیار پیچیده است.

عامل قابل مشاهده در اثر موزبائر، شدت طیف است که در معادله (۴) قابل بررسی است. فاکتور بدون پس زنی به مثابه فاکتور دمای-والر در پراش پرتو  $X$  است. این فاکتور، زمانی که شبکه بلوری نرم است و  $\omega_E$  بزرگ شود، بیشتر می شود. همچنین این عامل، متوسط وزنی روی همه فونون های یک شبکه بلوری محاسبه می شود. در محاسبه همین عامل، نکات بسیار ظریفی وجود دارد که خارج از هدف این مبحث است.

راه معمول برای محاسبه فاکتور بدون پس زنی یک ماده تک فاز، محاسبه مساحت طیف موزبائر بر حسب دما است. همانطور که در معادله (۴) ملاحظه می کنید شدت اثر موزبائر با افزایش متوسط مربع جابجایی  $\langle X \rangle^2$  کاهش می یابد. کمیت  $\langle X \rangle^2$  با افزایش دما بیشتر شده و از این رو محاسبه شدت طیف بر حسب دما برای تعیین فاکتور بدون پس زنی  $f$  و همچنین دمای دمای و اینشتین لازم است. این عوامل لزوم اهمیت در آماده سازی و مدت زمان آنالیز یک مجموعه از نمونه ها را ضروری می کند. از طرفی لازم به ذکر است که در موزبائر به دلیل قابل اغماض بودن ارتعاشات شبکه و پهن شدگی دوپلر حرارتی، پهن شدگی خطوط جذب را می توان به دلیل برانگیخته شدن هسته اتم دانست. به همین دلیل، عوامل قابل حصول در موزبائر ناشی از تغییرات در هسته اتم است.

### ۳- مولفه های طیف موزبائر

طیف سنجی موزبائر، طیفی از انرژی های مرتبط با هسته جاذب گاما را اندازه می گیرد. در حال حاضر این روش با هسته های  $^{57}\text{Co}$ ،  $^{119}\text{Sn}$ ،  $^{151}\text{Eu}$ ،  $^{121}\text{Sb}$ ،  $^{162}\text{Dy}$  انجام می شود که البته  $^{57}\text{Co}$  در بین این عناصر، کاربردی ترین و معمول ترین آنها است. مهمترین کاربرد طیف سنجی موزبائر، استفاده از عوامل فوق ریز ساختار است که الکترون های اطراف هسته باعث ایجاد افت و خیز انرژی در ترازهای هسته می شوند. این برهم کنش های فوق ریز دارای انرژی بسیار کوچک و از مرتبه  $10^{-7}$  تا  $10^{-9}$  الکترون ولت است، در حالی که انرژی پرتو گاما دارای انرژی از مرتبه  $10^4$  تا  $10^5$  الکترون ولت است. با مقایسه انرژی برهم کنش های ریز با انرژی پرتو گاما می توان متوجه شد که دقت روش موزبائر از مرتبه  $10^{12}$  است. در موزبائر با رفع موانعی

که در بخش‌های قبلی توضیح داده شد، افت و خیزهای برهم‌کنش‌های فوق‌ریز به راحتی و با دقت بالا و هزینه کم، قابل اندازه‌گیری هستند.

برهم‌کنش‌های الکترون- هسته اولین بار در طیف‌های نوری به صورت شکافتگی‌های ضعیف‌تر از آنچه که در برهم‌کنش‌های ریز الکترون- الکترون مشاهده شده بود، دیده شد. برهم‌کنش‌های فوق‌ریز، برخاسته از دانسیته الکترون‌ها در هسته‌ها، تغییرات میدان الکتریکی و یا اسپین‌های الکترونی جفت نشده در هسته‌ها است که به ترتیب آنها را با ایزومر شیف، برهم‌کنش چهار قطبی الکتریکی و برهم‌کنش دوقطبی مغناطیسی فوق ریز ساختار<sup>۵</sup> می‌شناسند.

**شکل ۵:** پارامترهای فوق ریز در طیف‌سنجی موزبائر

**۳-۱- ایزومر شیف (IS):** برهم‌کنش کولنی توزیع بار- هسته در یک هسته با ابعاد مشخص R، منشا ایجاد ایزومر شیف  $\delta$  در حالت‌های پایه و برانگیخته و دانسیته بار- الکترون در هسته (الکترون s) است. در برهم‌کنش کولنی، فرض بر این است که الکترون‌ها حول هسته در یک فاصله زیاد از هسته در حال دوران هستند و می‌توان هسته را به عنوان یک بار نقطه‌ای در نظر گرفت. اما در واقع، هسته‌ها دارای یک اندازه مشخص و با شعاع تقریبی زیر هستند:

$$R = 1.2 \times 10^{-15} Z^{1/3} \text{m} \quad (5)$$

که در آن Z عدد اتمی هسته است. در حالی که قسمت اعظم دانسیته بار الکترونی در یک فاصله مشخص از هسته قرار دارد، موضوع نوع پیوندهای الکترونی در شیمی در دیگر تجهیزات طیف‌سنجی، قابل بحث و بررسی است. اما الکترون‌های s,p (1/2) با احتمال کوچک مشخصی می‌توانند در هسته حضور داشته باشند. این اثر در الکترون‌های s بیشتر دیده می‌شود که موجب تغییرات انرژی کل، در سطوح هسته‌ای می‌شود.

<sup>5</sup> 'Hyperfine magnetic field (HMF), Isomer Shift (IS), 'Electric Quadrupole Splitting (EQS)'

<sup>6</sup> Isomer Shift



اثر فوق به دلیل اینکه مقدارش از حد توانایی و قدرت تفکیک و پیش‌بینی‌های تئوری کوچکتر است، قابل مشاهده نیست. البته در بحث گسیل پرتو گاما، هسته‌ها، گذارهایی را از حالت برانگیخته به حالت پایین‌تر خواهند داشت که باعث تغییر شعاع هسته در دو حالت پایه و برانگیخته می‌شود. میزان برهم‌کنش‌ها، حاصل از انتگرال دانسیته بار الکترونی و بار هسته در فضای تداخلی آنها است. چون حجم ناحیه تداخلی در هر دو حالت با هم فرق دارند، پس ناحیه تداخلی در هسته نیز تغییر می‌کند. محاسبه اولین ایزومر شیفیت توسط کیستنر و سانیار<sup>۷</sup> در سال ۱۹۶۰ و اولین تحلیل سیستماتیک در مورد ایزومر شیفیت توسط والرات. آل<sup>۸</sup> در سال ۱۹۶۱ صورت گرفت. توصیف ریاضی ایزومر شیفیت  $\delta$ ، به شکل زیر است:

$$\delta = \frac{4\pi}{5} Ze^2 [|\Psi_a(\theta)|^2 - |\Psi_s(\theta)|^2] R \delta R \quad (6)$$

که در آن  $|\Psi_a(\theta)|^2$  دانسیته نسبی الکترون در هسته با شعاع صفر است؛ اندیس  $a$  مربوط به جاذب و اندیس  $s$  برای چشمه و همچنین  $\delta R$  ضخامت پوسته است. از آنجایی که تغییر دانسیته الکترونی در هسته تابعی از الکترون والانس و پیوندهای شیمیایی است؛ به ایزومر شیفیت، عنوان «شیفت شیمیایی» هم داده شده است. از روی جهت شیفیت خطوط رزونانس، با افزایش دانسیته الکترون‌های  $s$ ،  $\delta R$  دارای علامت منفی در  $^{57}\text{Fe}$  بوده و به این معناست که شعاع هسته‌ای در حالت برانگیخته، کوچکتر از شعاع در حالت پایه است که این نتیجه در مورد ایزوتوپ  $^{119}\text{Sn}$  برعکس است. ایزومر شیفیت فلزات با اثرات پوشش بسیار بیشتر تغییر می‌کنند. ایزومر شیفیت  $^{57}\text{Fe}$ ، متناسب با تغییر حالت بارهای آهن، گواهی از تاثیر این اثر پوششی است و تحلیل آن عمدتاً بر اساس دو سهم عمده الکترون‌های  $s$  و  $d$  با مشخصه‌های مناسب انجام می‌شود.

شکل ۶: برهم‌کنش تک قطبی الکتریکی (ایزومر شیفیت)

۳-۲- برهم‌کنش چهار قطبی الکتریکی ( $\Delta=4$ ): در بخش قبل فرض بر این بود که هسته‌ها چه در حالت پایه و چه در حالت کروی دارای ساختار کروی هستند. اما باید به این نکته نیز توجه داشت که در واقعیت، هر هسته با داشتن ممنوم

<sup>7</sup> Kistner & Sunyar (1960)

<sup>8</sup> Waller et al (1961)

<sup>9</sup> Electric Quadrupole Hyperfine Interaction

زویه‌ای بزرگتر از  $\frac{1}{2}$  دارای شکل غیر کروی است. محاسبه میزان انحراف هسته از شکل کروی را ممنتوم چهارقطبی هسته‌ای الکتریکی گویند که با فرمول زیر تعریف می‌شود:

$$Q = 1/e \int \rho(r) (3z^2 - r^2) dV \quad (7)$$

توصیف مناسب از میدان بلوری بیضوی، از طریق محاسبه مشتق دوم پتانسیل الکتریکی، یا به عبارتی گرادیان میدان الکتریکی EFG، انجام می‌شود. هر شکل فیزیکی معنادار در مرتبه دوم، با یک مجموعه از محورهای مختصات اورتوگنال قابل تعریف است و می‌توان EFG را بر حسب آنها توصیف نمود:

$$V_i = \frac{\partial^2 V}{\partial^2 i} \quad (i = x, y, z) \quad (8)$$

از آنجا که پتانسیل الکتروستاتیکی با استفاده از معادله لاپلاس قابل محاسبه است و با توجه به آن فقط دو عامل از سه عامل مستقل هستند، فاکتور نامتقارنی  $\eta$  هسته با فرمول زیر تعریف می‌شود:

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \quad (0 \leq \eta \leq 1) \quad (9)$$

در این نوع برهم‌کنش که بین گرادیان میدان الکتریکی EFG و میدان الکتریکی چهارقطبی الکتریکی هسته اتفاق می‌افتد، ترازهای هسته شکافته می‌شوند و در آنها شکافتگی سطوح انرژی به صورت  $2I+1$  روی می‌دهد ( $I + m_I, I - m_I$ ). که در آن شکافتگی خطوط به شکل زیر خواهد بود:

$$\Delta = \frac{1}{2} eQV_{zz} \sqrt{\left(1 + \frac{\eta^2}{3}\right)} \quad (10)$$

**شکل ۲:** برهم‌کنش چهارقطبی الکتریکی هسته با میدان الکتریکی غیریکنواخت EFG

شکافتگی خطوط برای اولین بار توسط کیستنر و سانبار در سال ۱۹۶۰ مشاهده شد. عامل شکافتگی چهارقطبی به تعیین ساختار محلی کمک می‌کند و به تقارن نقطه‌ای محیط اتم‌های مورد بررسی بسیار حساس است.

شکل ۸: شکافتگی چهارقطبی الکتریکی

۱- ۳-۳- برهم‌کنش دوقطبی مغناطیسی فوق ریز ساختار<sup>۱۰</sup>: از آنجایی که پروتون و نوترون دارای دوقطبی مغناطیسی است، همه هسته‌ها نیز دارای ممنتوم دوقطبی مغناطیسی هستند، البته به جز آنهایی که دارای تعداد پروتون و نوترون زوج هستند؛ چون مقدار ممنتوم زاویه‌ای کل آنها در حالت پایه صفر است. هسته‌ها در حالت‌های برانگیخته دارای ممنتوم مغناطیسی غیر صفر هستند. ممنتوم مغناطیسی هسته‌ای با ممنتوم مغناطیسی الکترون‌ها برهم‌کنش داده و برهم‌کنش مغناطیسی فوق ریز ساختار را تشکیل می‌دهند. اولین مشاهده شکافتگی فوق ریز ساختار مغناطیسی با استفاده از طیف‌سنجی موزبائر <sup>57</sup>Fe، توسط پوند و ربکا<sup>۱۱</sup> در سال ۱۹۵۹ صورت گرفت.

برهم‌کنش ممنتوم دوقطبی مغناطیسی هسته‌ای  $\mu$  با میدان مغناطیسی  $H$ ، در محل هسته‌ها، باعث شکافتگی حالت هسته‌ای با اسپین ( $I > 0$ ) به  $2I+1$  زیر تراز می‌شود. انرژی دژنره با معادله زیر تعریف می‌شود:

$$E_m = -g_N \beta_N H m_I \quad (m_I = I, I-1, \dots, -I) \quad (11)$$

که در آن  $m_I$  عدد کوانتومی مغناطیسی است. ممنتوم مغناطیسی هسته با مگنتون هسته‌ای  $\beta_N$  و با فاکتور شکافتگی لانداو هسته‌ای مرتبط است:

$$\mu = g_N \mu_N I \quad (12)$$

شکل ۹: برهم‌کنش میدان مغناطیسی هسته با الکترون

<sup>10</sup> Magnetic Dipole Hyperfine Interaction

<sup>11</sup> Pound & Rebka

این شکافتگی‌ها باعث می‌شود که طیف اولیه به تعداد زیادی خطوط شکافته شود و تعداد این خطوط به مقدار  $\alpha$  در حالت‌های پایه و برانگیخته بستگی دارد. ایزوتوپ  $^{57}\text{Fe}$  در حالت پایه‌اش دارای مقدار ممنتوم زاویه‌ای  $\frac{1}{2}$  و مقدار آن در اولین حالت برانگیخته،  $\frac{3}{2}$  است. میزان شکافتگی مغناطیسی هسته‌ها، مستقیماً به میدان مغناطیسی هسته که عمدتاً به آن میدان موثر درونی  $H_{\text{eff}}$  گفته می‌شود، بستگی دارد. برهم‌کنش فوق‌ریز مغناطیسی به دست آمده از موزبائر، نقش مهمی را در فهمیدن خصوصیات مغناطیسی مواد دارد. مثلاً در ترکیبات فریتی و آلیاژها هر مکانی در شبکه، در الگوی فوق‌ریز دیده می‌شود که با این روش می‌توان رفتار زیرشبکه‌ها و ناخالصی‌ها را مطالعه کرد.

شکل ۱۰: شکافتگی دوقطبی مغناطیسی

منابع:

Reference:

1. Mossbauer Spectroscopy of Environmental Materials and their Industrial Utilization (Enver Muard & John Cashion)
2. Topics in Applied Physics (U.Gonser)
3. Mossbauer Spectrometry (Brent Fultz, Department of Applied physics and Material Science) Microscopic methods in metals (U.Gonser) Industrial Applications of the Mossbauer Effect (Desmond C.Cook and Gilbert R.Hoy)
4. Mossbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry (Philipp Gutlich Eckhard Bill, Alfred X.Trautwein)

### Introduction to Mossbauer Spectroscopy

1. E.Bazyar MSc Physics, Kefa Nanotechnology Laboratorial Complex

Kefa.bazyar@gmail.com

2. S.Habibi PHD Physics, Bu Ali Sina University

Abstract:

Mössbauer spectroscopy is a spectroscopic technique based on the Mössbauer effect. This effect, discovered by Rudolf Mössbauer in 1957, consists of the recoil-free, resonant absorption and emission of gamma rays in solids.

Mössbauer spectroscopy probes tiny changes in the energy levels of an atomic nucleus in response to its environment. Typically, three types of nuclear interactions may be observed: an isomer shift, also known as a chemical shift; quadrupole splitting; and magnetic or hyperfine splitting, also known as the Zeeman effect.

One of the significant applications of Mössbauer spectroscopy is studying the amorphous materials. Amorphous materials have been used in different fields as magnetic materials, polymer, steel industries and etc.

This article tries to discuss the basic of Mossbauer spectroscopy and amorphous materials and analysis their magnetic properties by Mossbauer spectra.