

УДК 539.172.3 : 539.2 : 548.7

М. А. АНДРЕЕВА, Р. Н. КУЗЬМИН

РАСЧЕТ МЁССБАУЭРОВСКОЙ ДИФРАКЦИИ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

В этой статье на примере антиферромагнетика FeSn изложена методика расчета параметров сверхтонкой структуры дифракционных мёссбауэровских спектров для случая поликристаллов. Приведены явные выражения угловых и энергетических зависимостей амплитуд рассеяния на одном мёссбауэровском ядре при наличии комбинированного сверхтонкого взаимодействия, соответствующих различным переходам между резонансными уровнями со спинами $I_0 = 1/2$ и $I_1 = 3/2$ ($L=1$).

Мёссбауэровские спектры поглощения содержат лишь косвенную информацию относительно ориентаций эффективных магнитных полей или осей ГЭП на ядрах в кристалле. Исследование монокристаллических образцов не всегда бывает возможным. Мёссбауэрография позволяет не только определить период магнитного упорядочения [1—4], но и предоставляет возможность прямого определения ориентаций осей сверхтонкого взаимодействия, используя только поликристаллические образцы. Такая возможность обусловлена тем, что в создании определенного дифракционного отражения принимают участие только определенным образом ориентированные монокристаллики, и происходит только частичное усреднение интенсивностей компонентов дифракционного мёссбауэровского спектра.

В данной работе на основе общего подхода к расчету мёссбауэровской дифракции были проанализированы относительные интенсивности восьми компонентов мёссбауэровского дифракционного спектра поликристалла FeSn в нескольких отражениях для двух предполагаемых направлений упорядочения магнитных моментов μ_{Fe} в базисной плоскости [5, 6]: [100] и [210].

Амплитуда рассеяния на одном мёссбауэровском ядре Fe⁵⁷

Амплитуда когерентного резонансного рассеяния гамма-квантов на одном ядре в самом общем случае имеет вид [7]

$$f_{\text{ког}}^{\sigma_0, \sigma_f}(E_{k_0}, \vec{k}_0, \vec{k}_f, \xi) = \frac{\Gamma_\gamma}{2k_0} \frac{\exp(-k_0^2 \langle x^2 \rangle)}{2I_0 + 1} \sum_{n, k} \frac{1}{E_{k_0} - E_R(n, k) + i\Gamma/2} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{m_i, m_g, m_b, m_a} \langle k | m_i \rangle^* \langle k | m_g \rangle \langle n | m_b \rangle^* \langle n | m_a \rangle \times \\
& \times \sum_{L, \mu, \pi, M} \langle 0 \sigma_0 | LM \pi \rangle D_{\mu M}^L(\xi \rightarrow \vec{k}_0) \langle I_0 m_i L \mu | I_1 m_1 \rangle \langle I_1 \| L \pi \| I_0 \rangle \times \\
& \times \sum_{L', \mu', \pi', M'} \langle 0 \sigma_f | L' M' \pi' \rangle D_{\mu' M'}^{L'}(\xi \rightarrow \vec{k}_f) \langle I_0 m_g L' \mu' | I_1 m_b \rangle \langle I_0 \| L' \pi' \| I_1 \rangle, \quad (1)
\end{aligned}$$

где E_{k_0} — энергия падающей волны, $E_R(n, k)$ — энергия перехода между определенными энергетическими подуровнями основного и возбужденного состояний: $E_R = E_{R_0} + E_n - E_k$, E_{R_0} — резонансная энергия в отсутствие сверхтонких взаимодействий, E_k и E_n — собственные значения гамильтонианов сверхтонких взаимодействий в основном (\hat{H}_0) и возбужденном (\hat{H}_1) состояниях ядра, Γ — ширина мессбауэровского уровня, I_0 и m_i , m_g — спин и магнитные квантовые числа основного состояния ядра, I_1 и m_a , m_b — возбужденного; $\langle k | m_i \rangle$, $\langle k | m_g \rangle$, $\langle n | m_a \rangle$ и $\langle n | m_b \rangle$ — элементы унитарных матриц, диагонализующих гамильтонианы сверхтонких взаимодействий в основном и возбужденном состояниях ядра; $\langle 0 \sigma_0 | LM \pi \rangle$ и $\langle 0 \sigma_f | L' M' \pi' \rangle$ — коэффициенты разложения плоской волны по сферическим в системе отсчета, связанной с направлением распространения гамма кванта (\vec{k}_0 — падающего, \vec{k}_f — рассеянного); $D_{\mu M}^L$ и $D_{\mu' M'}^{L'}$ — элементы матриц вращения, описывающей преобразование собственных функций углового момента из произвольной системы ξ , которую мы связываем с осями сверхтонких взаимодействий, в систему, связанную с \vec{k}_0 и \vec{k}_f ; $\langle I_0 m_i L \mu | I_1 m_a \rangle$ и $\langle I_0 m_g L' \mu' | I_1 m_b \rangle$ — коэффициенты векторного сложения Клебша-Гордона; $\langle I_1 \| L \pi \| I_0 \rangle$ и $\langle I_0 \| L' \pi' \| I_1 \rangle$ — приведенные матричные элементы скалярного оператора, характеризующие вероятность ядерного перехода определенной мультипольности [8, 9].

В случае FeSn на ядре Fe^{57} имеет место комбинированное взаимодействие [10], причем главная ось аксиально симметричного ГЭП перпендикулярна направлению эффективного магнитного поля. Для $I_0 = 1/2$ гамильтониан взаимодействия диагонален, и, следовательно, основное состояние ядра Fe^{57} расщепляется на два подуровня, соответствующих двум значениям магнитного квантового числа m_i . Для $I_1 = 3/2$ необходимо решить задачу на собственные значения и собственные функции. Воспользовавшись формулами для гамильтониана комбинированного взаимодействия из [10], получим собственные значения энергии для возбужденного уровня в виде (для удобства будем нумеровать их двумя индексами $n, k = 1, 2$):

$$E[1, 1] = \frac{y}{2} + \sqrt{y^2 - 3y + 9}, \quad E[1, 2] = y - E[1, 1], \quad (2)$$

$$E[2, 1] = -\frac{y}{2} + \sqrt{y^2 + 3y + 9}, \quad E[2, 2] = -y - E[2, 1],$$

где $y = \omega_H / \omega_Q$ — отношение величины магнитного расщепления к квадратурному, и собственные функции гамильтониана взаимодействия

m n	$3/2$	$1/2$	$-1/2$	$-3/2$	
$[1, 1]$	0	$\frac{3\sqrt{3}}{2B(1)}$	0	$\frac{P(1)}{B(1)}$	(3)
$[2, 1]$	$\frac{3\sqrt{3}}{2C(1)}$	0	$\frac{N(1)}{C(1)}$	0	
$\langle n m \rangle = [1, 2]$	0	$\frac{3\sqrt{3}}{2B(2)}$	0	$\frac{P(2)}{B(2)}$	
$[2, 2]$	$\frac{3\sqrt{3}}{2C(2)}$	0	$\frac{N(2)}{C(2)}$	0	

где

$$P(k) = \frac{1}{2}(y-3) + E[1, k],$$

$$N(k) = \frac{3}{2}(y+1) + E[2, k],$$
(4)

$$B(k) = \left(\frac{27}{4} + \frac{1}{4}(y-3)^2 + E[1, k](y-3) + E[1, k]^2 \right)^{1/2},$$

$$C(k) = \left(\frac{27}{4} + \frac{9}{4}(y+1)^2 + 3(y+1)E[2, k] + E[2, k]^2 \right)^{1/2}.$$

Таким образом, для восьми резонансных энергий мессбауэровского спектра $E_R(m_i, [n, k]) = E_{R_0} - E_{m_i} + E[n, k]$ ($n, k=1, 2$) получаем угловые зависимости амплитуд рассеяния в виде¹:

$$f\left(+\frac{1}{2} \rightarrow [1, k] \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{E_{k_0} - E_R\left(\frac{1}{2}, [1, k]\right) + i\Gamma/2} \frac{9}{4B^2(k)} \times$$

$$\times (\sin \beta \sin \beta' e^{-(M\gamma-\gamma')} \vec{\eta}_+ + \sin \beta \sin \beta' e^{-i(M\gamma+\gamma')} \vec{\eta}_-);$$

$$f\left(-\frac{1}{2} \rightarrow [2, k] \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{E_{k_0} - E_R\left(-\frac{1}{2}, [2, k]\right) + i\Gamma/2} \frac{N^2(k)}{3C^2(k)} \times$$

$$\times (\sin \beta \sin \beta' e^{-i(M\gamma-\gamma')} \vec{\eta}_+ + \sin \beta \sin \beta' e^{-i(M\gamma+\gamma')} \vec{\eta}_-);$$

$$f\left(+\frac{1}{2} \rightarrow [2, k] \rightarrow \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{E_{k_0} - E_R\left(\frac{1}{2}, [2, k]\right) + i\Gamma/2} \frac{M}{4C^2(k)} \times$$

$$\times \left[e^{-(M\gamma-\gamma')} \left\{ \frac{N^2(k)}{3} (1 - M \cos \beta)(1 - \cos \beta') e^{-i(\alpha'-\alpha)} + \right. \right.$$

$$\left. + \frac{27}{4} (1 + M \cos \beta)(1 + \cos \beta') e^{i(\alpha'-\alpha)} + \right.$$

$$\left. + \frac{3}{2} N(k) [(1 + M \cos \beta)(1 - \cos \beta') e^{-i(\alpha'+\alpha)} + \right.$$

$$\left. + (1 - M \cos \beta)(1 + \cos \beta') e^{i(\alpha'+\alpha)} \right\} \vec{\eta}_+ -$$

¹ $M = \pm 1$ соответствует правой и левой круговым поляризациям падающего излучения.

$$\begin{aligned}
& - e^{-i(M\gamma+\gamma')} \left\{ \frac{N^2(k)}{3} (1 - M \cos \beta) (1 + \cos \beta') e^{-i(\alpha'-\alpha)} + \right. \\
& \quad + \frac{27}{4} (1 + M \cos \beta) (1 - \cos \beta') e^{i(\alpha'-\alpha)} + \\
& \quad + \frac{3}{2} N(k) [(1 + M \cos \beta) (1 + \cos \beta') e^{-i(\alpha'+\alpha)} + \\
& \quad \left. + (1 - \cos \beta) (1 - \cos \beta') e^{i(\alpha'+\alpha)}] \right\} \vec{\eta}_-]; \\
f\left(-\frac{1}{2} \rightarrow [1, k] \rightarrow -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{E_{k_0} - E_R\left(-\frac{1}{2}, [1, k]\right) + i\Gamma/2} \frac{M}{4B^2(k)} \times \\
& \times \left[e^{-i(M\gamma-\gamma')} \left\{ P^2(k) (1 - M \cos \beta) (1 - \cos \beta') e^{-i(\alpha'-\alpha)} + \right. \right. \\
& \quad + \frac{9}{4} (1 + M \cos \beta) (1 + \cos \beta') e^{i(\alpha'-\alpha)} + \\
& \quad + \frac{3}{8} p(k) [(1 + M \cos \beta) (1 - \cos \beta') e^{-i(\alpha'+\alpha)} + \\
& \quad \left. \left. + (1 - M \cos \beta) (1 + \cos \beta') e^{i(\alpha'+\alpha)}] \right\} \vec{\eta}_+ - \right. \\
& - e^{-i(M\gamma+\gamma')} \left\{ P^2(k) (1 - M \cos \beta) (1 + \cos \beta') e^{-i(\alpha'-\alpha)} + \right. \\
& \quad + \frac{9}{4} (1 + M \cos \beta) (1 - \cos \beta') e^{i(\alpha'-\alpha)} + \\
& \quad + \frac{3}{8} p(k) [(1 + M \cos \beta) (1 + \cos \beta') e^{-i(\alpha'+\alpha)} + \\
& \quad \left. \left. + (1 - M \cos \beta) (1 - \cos \beta') e^{i(\alpha'+\alpha)} J \right\} \vec{\eta}_- \right].
\end{aligned}$$

Углы α , β и α' , β' определяют ориентации падающего и рассеянного векторов k_0 и k_f относительно осей сверхтонкого взаимодействия (x , y , z) в соответствии с рис. 1.

Структурная амплитуда ядерного рассеяния

Кристаллическая структура соединения FeSn соответствует пространственной группе $D_{6h}^1 - P6/mmm$, структурный тип В35 [11]. Параметры решетки: $a=5,28$ Å, $c=4,44$ Å. Атомы Fe в элементарной ячейке FeSn имеют координаты:

$$in 3 (f): \left(\frac{1}{2} 0 0\right); \left(0 \frac{1}{2} 0\right); \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right). \quad (6)$$

Магнитная ячейка FeSn вдвое больше кристаллической [6], причем удвоение происходит по оси c , магнитные моменты $\vec{\mu}_{Fe}$ связаны ферромагнитно в пределах c -плоскости и антиферромагнитно с соседними

с-плоскостями. В этом случае структурную амплитуду ядерного резонансного рассеяния можно представить в виде

$$F_N(hkl) = f_{+H}\Sigma' + f_{-H}\Sigma'', \quad (7)$$

где

$$\Sigma' = e^{i\pi h} + e^{i\pi k} + e^{i\pi(h+k)} \quad (8)$$

геометрический множитель ядер, поле на которых $+H_{эфф}$, и

$$\Sigma'' = e^{i\pi(h+2l)} + e^{i\pi(k+2l)} + e^{i\pi(h+k+2l)} \quad (9)$$

геометрический множитель ядер, поле на которых $-H_{эфф}$, а f_{+H} и f_{-H} — амплитуды рассеяния на ядрах с противоположным направлением эффективного магнитного поля. Если оси сверхтонких взаимодействий

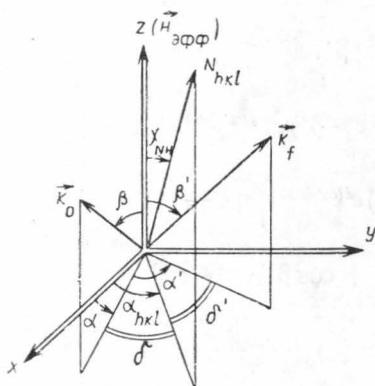


Рис. 1

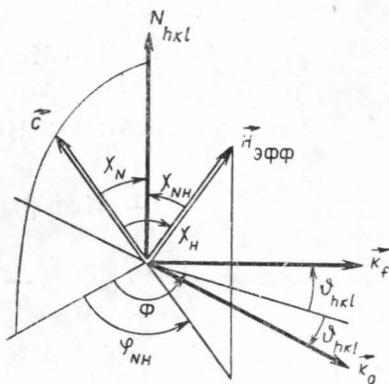


Рис. 2

выбрать так, что ось oz совпадает с направлением $+H_{эфф}$, то f_{+H} определяется формулами (5), а f_{-H} получается из (5) заменой $(\alpha, \beta, 0)$ и $(\alpha', \beta', 0)$ на $(-\alpha, \pi-\beta, \pi)$ и $(-\alpha', \pi-\beta', \pi)$.

Нетрудно убедиться, что $\Sigma' = \Sigma''$, если все hkl целые, и $\Sigma' = -\Sigma''$ для l полуцелых, т. е. для сверхструктурных максимумов.

Интенсивности компонентов мёссбауэровского дифракционного спектра в сверхструктурных и структурных максимумах ядерного рассеяния

Если амплитуда рассеянной волны представлена в виде

$$f = (a_{1+}e^{ix_{1+}} + a_{2+}e^{ix_{2+}} + \dots + a_{n+}e^{ix_{n+}}) \vec{\eta}_+ + (a_{1-}e^{ix_{1-}} + a_{2-}e^{ix_{2-}} + \dots + a_{n-}e^{ix_{n-}}) \vec{\eta}_- \quad (10)$$

($\vec{\eta}_\pm$ — единичные орты крутополяризованных волн), то ее интенсивность можно вычислить по формуле

$$I = R_+^2 + R_-^2 + M_+^2 + M_-^2, \quad (11)$$

где

$$R_+ = \sum_{i=1}^n a_{i+} \cos \chi_{i+}, \quad M_+ = \sum_{i=1}^n a_{i+} \sin \chi_{i+},$$

$$R_- = \sum_{i=1}^n a_{i-} \cos \chi_{i-}, \quad M_- = \sum_{i=1}^n a_{i-} \sin \chi_{i-}.$$
(12)

Таким образом, исходя из (5) и (7), получим интенсивности восьми компонентов мёсбауэровского дифракционного спектра в сверхструктурных максимумах ядерного рассеяния:

$$I\left(-\frac{1}{2} \rightarrow [1, k]\right) = A[1, k] \{\cos^2(\alpha' - \alpha)(\cos^2 \beta + \cos^2 \beta') + \sin^2(\alpha' - \alpha)(1 + \cos^2 \beta \cos^2 \beta')\},$$

$$I\left(+\frac{1}{2} \rightarrow [2, k]\right) = A[2, k] \{\cos^2(\alpha' - \alpha)(\cos^2 \beta + \cos^2 \beta') + \sin^2(\alpha' - \alpha)(1 + \cos^2 \beta \cos^2 \beta')\};$$

$$I\left(-\frac{1}{2} \rightarrow [2, k]\right) = I\left(+\frac{1}{2} \rightarrow [1, k]\right) = 0;$$
(13)

где

$$A[1, k] = \left[\left(\frac{1}{2}(y-3) + E[1, k] \right)^2 - \frac{9}{4} \right]^2 / B^4(k),$$

$$A[2, k] = \left[\left(\frac{3}{2}(y+1) + E[2, k] \right)^2 - \frac{27}{4} \right]^2 / C^4(k).$$
(14)

В (13) опущен постоянный множитель $|\Sigma'|^2$. Заметим, что $|\Sigma'|^2 = 9$, если h и k — четные, и $|\Sigma'|^2 = 1$ в остальных случаях.

Аналогично интенсивности компонентов спектра в структурных максимумах получаем в виде

$$I\left(-\frac{1}{2} \rightarrow [1, k]\right) = \mathcal{F}(C_1[1, k], C_2[1, k]),$$

$$I\left(+\frac{1}{2} \rightarrow [2, k]\right) = \mathcal{F}(C_1[2, k], C_2[2, k]),$$

$$I\left(-\frac{1}{2} \rightarrow [2, k]\right) = N[2, k] \sin^2 \beta \sin^2 \beta',$$

$$I\left(+\frac{1}{2} \rightarrow [1, k]\right) = N[1, k] \sin^2 \beta \sin^2 \beta',$$
(15)

где

$$\mathcal{F}(C_1, C_2) = C_1^2 [(1 + \cos^2 \beta)(1 + \cos^2 \beta') + \sin^2 \beta \sin^2 \beta' \cos 2(\alpha' - \alpha)] +$$

$$+ C_2^2 [(1 + \cos^2 \beta)(1 + \cos^2 \beta') + \sin^2 \beta \sin^2 \beta' \cos 2(\alpha' + \alpha)] +$$

$$+ 2C_1 C_2 [\sin^2 \beta (1 + \cos^2 \beta') \cos 2\alpha + \sin^2 \beta' (1 + \cos^2 \beta) \cos 2\alpha'];$$
(16)

$$C_1[1, k] = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{1}{2}(y-3) + E[1, k] \right)^2 + \frac{9}{4} \right] / B^2(k),$$

$$C_1[2, k] = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{3}{2}(y+1) + E[2, k] \right)^2 + \frac{27}{4} \right] / C^2(k),$$

$$\begin{aligned}
 C_2[1, k] &= \frac{3}{2} \left(\frac{1}{2} (y-3) + E[1, k] \right) / B^2(k), \\
 C_2[2, k] &= \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} (y+1) + E[2, k] \right) / C^2(k), \\
 N[1, k] &= [3\sqrt{3}/2B(k)]^4, \\
 N[2, k] &= \frac{2}{9} \left(\frac{3}{2} (y+1) + E[2, k] \right)^4 / C^4(k).
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

Из (13) следует, что в сверхструктурных максимумах ядерного рассеяния отличны от нуля четыре компонента мёссбауэровского спектра, причем соотношение их интенсивностей не зависит ни от угла рассеяния, ни от ориентации сверхтонкого магнитного поля и определяется только относительными величинами магнитного и квадрупольного взаимодействий. Будем рассматривать различие спектра для двух предполагаемых направлений магнитного упорядочения в структурных максимумах ядерной дифракции.

Усреднение интенсивности мёссбауэровского спектра для поликристалла

Для вычисления функций (15) в определенных дифракционных максимумах в случае поликристалла необходимо определить их относительно углов, задающих геометрию рассеяния: брэгговского угла θ_{hkl} ($\vec{k}_0 \sim \vec{k}_f = 2\theta_{hkl}$) и угла Φ , определяющего ориентацию падающего луча в кристалле (рис. 2). Поскольку в создании определенного отражения (hkl) принимают участие монокристаллики с одинаковым на-

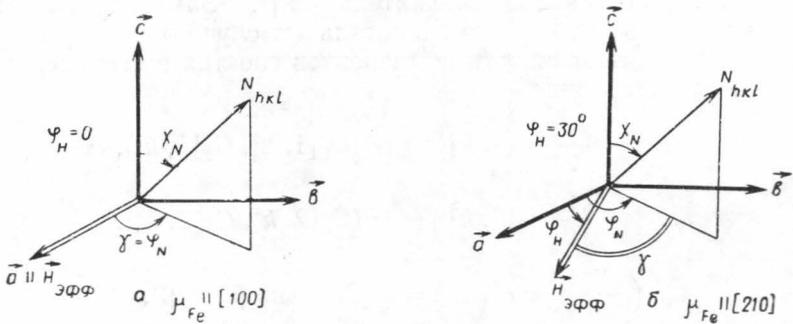


Рис. 3

правлением нормали к отражающей плоскости N_{hkl} , то усреднение функции (15) при рассмотрении дифракции на поликристалле необходимо проводить именно по углу Φ .

Для перехода от (α, β) , (α', β') к θ_{hkl} и Φ определим сначала ориентацию нормали к отражающей плоскости углами χ_N и φ_N (рис. 3) и выразим их через индексы hkl в гексагональной установке. Как известно, отражающая плоскость отсекает на осях a, b, c отрезки $a/h, b/k$ и c/l . Из рис. 3 легко вычислить:

$$\cos \varphi_N = \frac{n}{a/h} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{h}{\sqrt{h^2 + hk + k^2}};
 \tag{18}$$

$$\begin{aligned} \text{sign}(\sin \varphi_N) &= \frac{1}{2} (\text{sign}(hk) + 1) \text{sign}(k) + \\ &+ \frac{1}{2} (\text{sign}(hk) - 1) \text{sign}(k) \text{sign}(|h| - |2k|), \\ \cos \chi_N &= \text{sign}(l) [1 + (c/a)^2 4/3 (h^2 + hk + k^2)/l^2]^{-1/2}; \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \sin \theta_{hkl} &= \lambda/2d_{hkl}; \\ d_{hkl} &= n \sin \chi_N = a \left[4/3 (h^2 + hk + k^2) + \frac{l^2}{(c/a)^2} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (20)$$

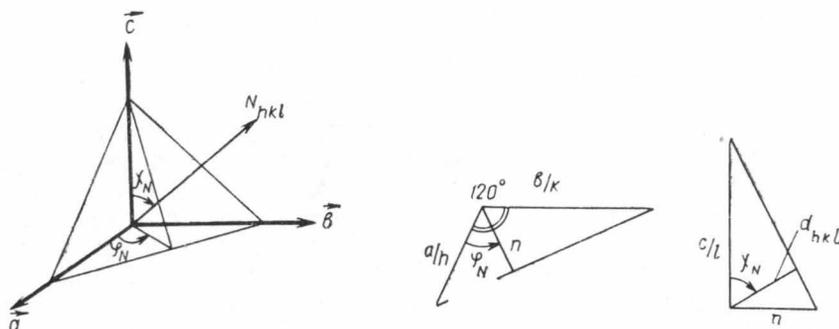


Рис. 4

Из рис. 4 вычислена взаимная ориентация нормали к отражающей плоскости и направления эффективного магнитного поля $H_{\text{эфф}}$ (рис. 2):

$$\begin{aligned} \cos \chi_{NH} &= \sin \chi_N \cos \gamma; \\ \text{sign}(\sin \chi_{NH}) &= +1; \end{aligned} \quad (21)$$

$$\varphi_{NH} = \text{sign}(\sin \gamma) \arccos \left(\frac{-\cos \chi_{NH} \cos \chi_N}{\sin \chi_{NH} \sin \chi_N} \right) \quad (22)$$

(для $\sin \chi_N = 0$, $\varphi_{NH} = 0$),

где

$$\gamma = \varphi_N - \alpha\pi/6, \quad (23)$$

так что $\alpha=0$ соответствует направлению магнитного упорядочения [100], а $\alpha=1$ — [210].

Тогда в соответствии с рис. 1 и 2 вычисляем искомые углы β и β' :

$$\begin{aligned} \cos \beta &= -\sin \theta_{hkl} \cos \chi_{NH} + \cos \theta_{hkl} \sin \chi_{NH} \cos(\varphi_{NH} - \Phi), \\ \cos \beta' &= \sin \theta_{hkl} \cos \chi_{NH} + \cos \theta_{hkl} \sin \chi_{NH} \cos(\varphi_{NH} - \Phi); \end{aligned} \quad (24)$$

а также δ , δ' и α_{hkl} :

$$\cos \delta = \frac{\sin \theta_{hkl} - \cos \beta \cos \chi_N}{\sin \beta \sin \chi_N}, \quad (25)$$

$$\cos \delta' = \frac{\sin \theta_{hkl} - \cos \beta' \cos \chi_N}{\sin \beta \sin \chi_N}, \quad (26)$$

— $\text{sign}(\sin \gamma) \pi/2$, для $l = 0$;

$$\alpha_{hkl} = -\arctg\left(c/a 2/\sqrt{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{l} \sin \gamma\right) + \frac{1 - \text{sign } l}{2} \text{sign}(\sin \gamma) \pi, \text{ для } l \neq 0. \quad (27)$$

Теперь можно определить α и α' в соответствии с рис. 1:

$$\begin{aligned} \alpha &= \alpha_{hkl} - \text{sign}(\sin(\Phi - \varphi_{NH})) |\delta|, \\ \alpha' &= \alpha_{hkl} - \text{sign}(\sin(\Phi - \varphi_{NH})) |\delta'|. \end{aligned} \quad (28)$$

Если $\sin \chi_N = 0$, то

$$\alpha = \Phi, \quad \alpha' = \Phi. \quad (28')$$

Для вычисления функций (15), усредненных по углу Φ , с использованием преобразований (18)—(28) нами была составлена программа вычисления для ЭВМ «Мир». Очевидно, что отражения типа (ool) нечувствительны к повороту ориентации магнитных моментов в базисной плоскости (в частности, это следует из того, что $\sin \chi_N$ в (21) равен нулю), тогда как максимальная чувствительность предполагается в отражениях типа (hko) . Далее, в случае поликристалла отражения типа (hko) и (kho) попадают в один дифракционный максимум. Таким образом происходит дополнительное усреднение соотношений между интенсивностями компонентов мёссбауэровского инфракционного спектра, кроме усреднения по углу Φ , что существенно сглаживает зависимость сверхтонкой структуры брэгговских максимумов от ориентации эффективного магнитного поля. Кроме того, учитывая, что с увеличением порядка отражения релеевский вклад существенно уменьшается, так что для больших порядков отражения им можно пренебречь, конкретные вычисления были нами проведены для отражений (220), (440) и (550) (см. табл.), а в отражении (440) для различных относительных величин магнитного и электрического квадрупольного взаимодействия $y=2, 6, 20$. Случай $y=2$ реализуется в FeSn при температуре $\sim 365^\circ \text{K}$, $y=6—T \sim 330^\circ \text{K}$ и $y=20—T \sim 250^\circ \text{K}$ [9]. Приведенные в таблицах интенсивности в каждом отдельном случае нормированы на суммарную интенсивность всех компонент спектра.

Расчитанное различие относительных интенсивностей компонент мёссбауэровского спектра дифракции на поликристалле FeSn для двух предполагаемых направлений магнитного упорядочения магнитных моментов $\vec{\mu}_{\text{Fe}} — [100]$ и $[210]$ в рассмотренных дифракционных максимумах достигает $\sim 40\%$, что, очевидно, представляет вполне измеримую величину. Таким образом, в данной работе показано, что в мёссбауэрографии возможно уточнить магнитную структуру антиферромагнетика FeSn, используя поликристаллические образцы. Чувствительность метода мёссбауэрографии в данном конкретном случае превосходит чувствительность нейтронографии [6]. Такой результат можно было ожидать, поскольку сверхтонкая структура брэгговских максимумов ядерного рассеяния представляет источник информации, не имеющий аналогии не только в рентгеноструктурном анализе, но и в нейтронографии.

Мёссбауэровская дифракция на FeSn так же, как и магнитное рассеяние нейтронов, обнаруживает сверхструктурные максимумы ядерного рассеяния, соответствующие полуцелым l , которые могли бы установить удвоение магнитной ячейки по сравнению с кристаллической по оси c . Непосредственные расчеты показали, что интенсивность сверхструктурных максимумов ядерного рассеяния имеет тот же порядок, что

Рассчитанные соотношения между интенсивностями компонентов мёссбауэровского спектра дифракции на поликристалле FeSn

	1	2	3	4	5	6	7	8
в отражении (220)								
$y=6$	0,41 0,35	0,06 0,10	0,07 0,07	0,000 0,000	0,000 0,001	0,07 0,05	0,06 0,09	0,33 0,34
в отражении (440)								
$y=6$	0,28 0,35	0,08 0,05	0,12 0,10	0,000 0,000	0,000 0,000	0,04 0,05	0,08 0,04	0,40 0,41
в отражении (550)								
$y=6$	0,19 0,35	0,09 0,02	0,15 0,12	0,000 0,000	0,000 0,000	0,02 0,05	0,08 0,02	0,46 0,44
в отражении (440)								
$y=2$	0,19 0,24	0,06 0,04	0,30 0,26	0,001 0,000	0,010 0,007	0,06 0,08	0,03 0,02	0,36 0,36
$y=6$	0,28 0,35	0,08 0,05	0,12 0,10	0,000 0,000	0,000 0,001	0,04 0,05	0,08 0,04	0,40 0,41
$y=20$	0,34 0,39	0,09 0,05	0,05 0,05	0,000 0,000	0,000 0,000	0,04 0,04	0,09 0,05	0,38 0,41

Возможные направления магнитного упорядочения $\bar{\mu}_{Fe} : [100]$ — верхняя строка, $[210]$ — нижняя строка. Нумерация компонент соответствует переходам: 1) $-1/2 \rightarrow [1,1]$, 2) $-1/2 \rightarrow [2,1]$, 3) $-1/2 \rightarrow [1,2]$, 4) $-1/2 \rightarrow [2,2]$, 5) $+1/2 \rightarrow [1,1]$, 6) $+1/2 \rightarrow [2,1]$, 7) $+1/2 \rightarrow [1,2]$, 8) $+1/2 \rightarrow [2,2]$.

и кристаллических. Таким образом, магнитная мёссбауэрография может конкурировать с магнитной нейтронографией.

Резонансный характер процесса мёссбауэровской дифракции определяет ряд особенностей метода мёссбауэрографии. В частности, в случае сложных магнитных структур, образованных магнитными моментами различных атомов, мёссбауэровская дифракция позволяет дифференциально исследовать подрешетку только из мёссбауэровских атомов, что может существенно упростить решение задачи. Нами, например, были рассчитаны мёссбауэровские дифракционные спектры ядерного рассеяния на поликристалле $DyCo_5$. Расчет показал, что для установления предполагаемой неколлинеарности магнитных моментов в подрешетках Dy и Co [12] достаточно исследования сверхтонкой структуры одного-двух брэгговских максимумов ядерного рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

1. Беляков В. А., Айвазян Ю. М. Письма ЖЭТФ, 7, 477, 1968.
2. Beluskov V. A., Ajvazian Y. M. Phys. Rev., B1, 1903, 1970.
3. Андреева М. А., Кузьмин Р. Н. ДАН СССР, 185, 1282, 1969.
4. Андреева М. А., Кузьмин Р. Н. «Кристаллография», 14, 708, 1969.
5. Yamamoto H. J. Phys. Japan, 21, 1058, 1966.
6. Yamaguchi K., Watanobe H. J. Phys. Soc. Japan, 22, 1210, 1967.

7. Андреева М. А., Кузьмин Р. Н. ВНИИТИ (в печати).
8. $\alpha\beta\gamma$ -Spectroscopy, v 1, 2, ed. by K. Siegban Amsterdam, 1968.
9. Rose M. E. Multipole Fields. N. Y., 1955.
10. Шпинель В. С. Резонанс гамма-лучей в кристаллах. М., «Наука», 1969.
11. Strukturbericht, b. VI. Leipzig, 1938.
12. Nowick I., Wernick J. H. Phys. Rev., **140A**, 131, 1965.

Поступила в редакцию
7.4 1972 г.

Кафедра
физики твердого тела
