Экспериментально исследовались сейсмические колебания макета гравитационной антенны и их влияние на собственную частоту резонатора, бесконтактно сопряженного с антенной. Смещения антенны измерялись с помощью микроскопа. Резонаторы, рассчитанные на собственную частоту 3 ГГц, имели следующие параметры: $l_1=0{,}5$ см, $l_2=1{,}5$ см, $d=0{,}5$ см, $D=1{,}2$ *см* для резонатора коаксиального типа; $l_1=0{,}5$ см, $l_2=0{,}8$ см, $D=2$ см, $d=1$ см, $C_0=0{,}7$ пФ, $C_{бл}=3$ пФ для резонатора полоскового типа.

Результаты расчетов и экспериментальных исследований влияния угловых смещений антенны на частоту резонаторов даны в таблице.

Резонатор	φ_0, рад	$\Delta\varphi$, рад	$\Delta\omega/\omega$ (расчет)	$\Delta\omega/\omega$ (эксперимент)
№ 1	$5\cdot10^{-2}$	$2\cdot10^{-4}$	$3\cdot10^{-4}$	$2\cdot10^{-4}$
№ 2	$1{,}5\cdot10^{-1}$	$2\cdot10^{-3}$	$4\cdot10^{-5}$	$5\cdot10^{-5}$

Влияние продольных сейсмических колебаний антенны на частоту резонаторов не обнаруживалось на уровне измерения относительных изменений частоты $\Delta\omega/\omega\simeq10^{-6}$. Резонатор полоскового типа, хотя и более сложен в изготовлении, дает лучшие результаты. Он обеспечивает необходимое ослабление влияния низкочастотных сейсмических колебаний гравитационной антенны на работу емкостного датчика малых колебаний. При добротности резонатора $Q\simeq10^5$ угловые сейсмические колебания антенны с амплитудой 10^{-4} рад не выводят датчик за пределы линейного участка характеристики.

Авторы признательны В. Б. Брагинскому за постоянное внимание и помощь в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Braginsky V. B., Rudenko V. N. Phys. Rep., 1978, **46**, p. 165. [2] Брагинский В. Б., Ланин Ю. Б., Панов В. И. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1979, **20**, № 5, с. 87. [3] Брагинский В. Б., Панов В. И., Попельнюк В. Д. Письма в ЖЭТФ, 1981, **33**, с. 423. [4] Орлов С. И. Расчет и конструирование коаксиальных резонаторов. М.: Сов. радио, 1970.

Поступила в редакцию
25.01.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, т. 24, № 1

УДК 538:537.611.46

СВОБОДНЫЙ ПАРАМЕТР ШПИНЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И СДВИГ МЕССБАУЭРОВСКОЙ ЛИНИИ

В. И. Николаев, В. С. Русаков, Н. И. Чистякова

(кафедра общей физики для физического факультета)

При наличии сильных ковалентных связей сдвиг мёссбауэровской линии оказывается весьма чувствительным к расстояниям между атомами в кристалле [1]. Именно такая ситуация имеет место в случае ферритов-шпинелей, в которых катионы металла, занимающие тетраэдрические и октаэдрические пустоты, окружены анионами. Эффекты ковалентности проявляются, в частности, в том, что изменение параметра решетки приводит к заметному изменению сдвигов мёссбауэровской линии ядер в катионных подрешетках δ^A и δ^B [2]. Эта зависимость, однако, не является однозначной, поскольку расстояния r^A и r^B

от катионов до ближайших к ним анионов определяются также и значением свободного параметра шпинельной структуры u [3].

Рассмотрим в этой связи вопрос о зависимости сдвига δ в кислородных ферритах-шпинелях от свободного параметра u. Помимо вкладов, обусловленных эффектами ковалентности, сдвиг δ содержит аддитивную часть δ_{free}, одинаковую для данного иона в A- и B-позициях и соответствующую электронной конфигурации свободного иона, а также релятивистскую поправку δ_T (температурный сдвиг):

$$\delta^{A,B} = \delta_{\text{free}} + \delta_{\text{cov}}^{A,B} + \delta_{\text{red}}^{A,B} + \delta_T^{A,B}. \quad (1)$$

В формуле (1) $\delta_{\text{cov}}^{A,B}$ — вклад, соответствующий переносу $2p$-электронов в незаполненную $4s$-оболочку и перекрытию волновых функций внутренних s-электронов катиона и $2p$-электронов аниона; $\delta_{\text{red}}^{A,B}$ — вклад, обусловленный переносом $2p$-электронов аниона в незаполненную $3d$-оболочку катиона и перекрытием волновых функций $3d$- и $2p$-электронов с одинаковым направлением спина. Согласно [2, 4], ковалентные вклады в случае ионов Fe^{3+} в подрешетках могут быть вычислены по формулам

$$\delta_{\text{cov}}^{A,B} = -0{,}14 z^{A,B}[(N_{\text{cov}}^{\uparrow A,B}\alpha^{\uparrow A,B})^2 + (N_{\text{cov}}^{\downarrow A,B}\alpha^{\downarrow A,B})^2], \quad (2)$$

$$\delta_{\text{red}}^{A,B} = 0{,}25 z^{A,B}[(N_{\text{red}}^{\uparrow A,B}S)^2 + (N_{\text{red}}^{\downarrow A,B}B)^2], \quad (3)$$

где α, B и S — величины, характеризующие степень переноса и перекрытия, N_{cov} и N_{red} — нормировочные коэффициенты волновых функций лигандов, рассчитываемые в рамках метода молекулярных орбиталей, z — координационное число. В формулах (2) и (3) учтено различие направлений спинов электронов, дающих ковалентные вклады в сдвиг δ.

Для сравнения расчетных зависимостей $\delta^{A,B}(u)$ с экспериментальными данными удобна разность сдвигов

$$\Delta\delta^{BA}(a, u) \equiv \delta^B - \delta^A = \Delta\delta_{\text{cov}}^{BA} + \Delta\delta_{\text{red}}^{BA} + \Delta\delta_T^{BA}: \quad (4)$$

1) эта разность не зависит от δ_{free} и от выбора источника излучения;

2) поправка на тепловое расширение будет несущественной ввиду одинакового характера зависимостей ковалентных вкладов для A- и B-мест от параметра решетки a;

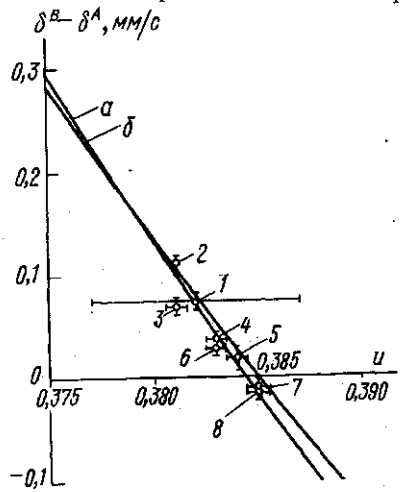
3) при достаточно высоких температурах (классический предел) температурные сдвиги для A- и B-позиций практически совпадают, так что $\Delta\delta_T^{BA} \approx 0$;

4) поскольку приращения расстояний Δr^A и Δr^B противоположны по знаку, эффекты ковалентности, обусловленные изменением u, в пересчете на разность сдвигов $\Delta\delta^{BA}$ «усиливают» друг друга.

Расчетная зависимость $\Delta\delta^{BA}$, полученная нами с помощью формул (2)—(4), дает основание ожидать существенного влияния свободного параметра u на взаимное расположение линий для A- и B-мест в мёссбауэровском спектре ферритов со шпинельной структурой (рисунок). При некотором значении $u_{\text{кр}}$ (по данным расчетов $u_{\text{кр}} = 0{,}3845$ для $a = 8{,}30$ Å) должна наблюдаться инверсия знака разности сдвигов $\Delta\delta^{BA}$. Как видно из рисунка, экспериментальные данные для исследованных нами ферритов-шпинелей (содержащих ионы Fe^{3+} в обеих подрешетках), для которых имеются достаточно точные данные о значениях свободного параметра u, вполне удовлетворительно согласуются с результатами расчетов. (Для точек *7* и *8* введена поправка на раз-

личие температурных сдвигов для A- и B-мест в дебаевском приближении при $\Theta_D^A=350$ К и $\Theta_D^B=450$ К). Подтверждается, в частности, тенденция разности $\Delta\delta^{BA}$ к инверсии знака по мере роста u. Наличие отчетливо проявляющейся корреляции между $\Delta\delta^{BA}$ и u дает основание критически отнестись к попыткам расшифровки спектров ферритов-шпинелей при непременном условии $\delta^B>\delta^A$ (см., например, [8]).

Поскольку расчетная зависимость $\Delta\delta^{BA}$ слабо меняется при вариации параметра решетки a (ср. кривые a и $б$ на рисунке), ее можно использовать для оценок свободного параметра структуры u по экспериментальным данным о сдвигах δ мёссбауэровской линии для A- и B-мест.



Зависимость разности сдвигов мёссбауэровской линии ядер трехвалентного железа $\Delta\delta^{BA}=\delta^B-\delta^A$ в ферритах-шпинелях от свободного параметра структуры u. Кривые — расчет по теории поля лигандов: a=8,30 (a) и 8,50 ($б$) А. Экспериментальные значения — $\Delta\delta^{BA}$ для $Li_{0,5}Fe_{2,5}O_4$ (*1*), $NiFe_2O_4$ (*2*), $NiFe_{1,6}Cr_{0,4}O_4$ (*3*), $NiFe_{1,2}Cr_{0,8}O_4$ (*4*), $NiFeCrO_4$ (*5*), $NiFe_{0,8}Cr_{1,2}O_4$ (*6*) (все — при T=293 К); $NiFe_{0,4}Cr_{1,6}O_4$ (*7*), $NiFe_{0,2}Cr_{1,8}O_4$ (*8*) (T=77 К). Значения u взяты из [5—7]

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Любутин И. С., Дмитриева Т. В. В кн.: Итоги науки и техники, сер. Кристаллохимия. М.: Изд-во АН СССР, 1977, с. 5. [2] Sawatzky G. A., Boekema C., Woude F. van der. Proc. of Mössbauer spectrometry conference. Dresden, 1971, p. 238. [3] Бляссе Ж. Кристаллохимия шпинелей. М.: Металлургия, 1968. [4] Woude F. van der, Sawatzky G. A. Proc. of Mössbauer spectrometry conference. Dresden, 1971, p. 335. [5] Brown P. B. Nature, 1952, **170**, p. 1123. [6] Hastings J. M., Corliss L. M. Rev. Mod. Phys., 1953, **25**, p. 114. [7] Белов В. Ф., Химич Т. А. и др. ФТТ, 1971, **13**, p. 900. [8] Loef J. J. van. Physica, 1966, **32**, p. 2102.

Поступила в редакцию
22.03.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, т. 24, № 1

УДК 539.1

ВЫЧИСЛЕНИЕ АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ ВРАЩАТЕЛЬНОГО И ПОСТУПАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ В ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЯХ

О. П. Ревокатов, Н. В. Бриллиантов

(кафедра молекулярной физики)

В настоящее время не существует прямых экспериментальных методов для определения автокорреляционных функций импульса $\Psi_P(t)$ и момента импульса $\Psi_J(t)$ молекул жидкости. В машинных экспериментах было установлено существование отрицательных участков у этих функций. Из всех предложенных ранее моделей аналитические выражения для $\Psi_P(t)$, $\Psi_J(t)$ были получены только в модели обобщенного