

Положение центра инерции может быть найдено по формуле

$$y_c = \frac{\sum_i \Gamma_i y_i}{\sum_i \Gamma_i}, \quad z_c = \frac{\sum_i \Gamma_i z_i}{\sum_i \Gamma_i} \quad (9)$$

Вблизи центра инерции, как следует из (8), вихревые движения, порожденные различными вихревыми штирями, компенсируют друг друга. Наиболее интенсивное вращение происходит на границах этой области.

Направление вращения определяется знаком разности $\overline{\omega'^2} - \overline{v'^2}$ в уравнении (6). Из эксперимента следует, что эта разность везде положительна, убывает по y и растет по z . Следовательно, правая часть (6) положительна и вращение происходит по часовой стрелке (см. рисунок) у левого берега и против часовой стрелки у правого. Внутри прибрежной области вихри компенсируют друг друга, что приводит к интенсивному вращению жидкости лишь на границе рассматриваемой области.

Таким образом, в результате проведенного натурального эксперимента и качественного анализа можно сделать следующие выводы.

1. Основной особенностью поля скорости вблизи берега является его анизотропия.

2. Существенным отличием поля скорости в этой области является изменение разности величин $\overline{\omega'^2} - \overline{v'^2}$ по осям y и z .

3. Изменение величины $\overline{\omega'^2} - \overline{v'^2}$ в прибрежной области поперечного сечения потока, определенное на основе анализа уравнений Рейнольдса, приводит к тому, что $\text{rot } v \neq 0$.

4. В прибрежной области потока, где $\text{rot } v \neq 0$, возникает циркуляция жидкости в поперечном сечении потока вокруг общего центра инерции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Бай Ши И. Турбулентное течение жидкости и газов. М.: ИЛ, 1962, с. 66.
[2] Жуковский Н. Е. Тр. ЦАГИ, 1931, 95, с. 54—84. [3] Лосиевский А. И. Тр. МОЦНИВТ, 1934, 86, с. 14. [4] Великевич П. А. В кн.: Водное хозяйство Белоруссии. Минск, Изд-во АН СССР, 1963, с. 155. [5] Мельникова О. Н. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1981, 22, № 2, с. 84. [6] Колесников А. Г. и др. Изв. АН СССР, сер. геофиз., 1958, № 3, с. 405. [7] Кочин Н. Е. Теоретическая гидромеханика. Т. 1. М., 1955, с. 193—197.

Поступила в редакцию
06.12.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 6

УДК 519.95

ЗАДАЧИ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ МЕССБАУЭРОВСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Е. Н. Терентьев

(кафедры математики)

В настоящее время решение задач автоматизации экспериментальных исследований с эффективным использованием средств вычислительной техники связывается с созданием и исследованием математических моделей работы экспериментальных установок, схем расчетов на ЭВМ и применением этих моделей в задачах анализа и интерпретации экспериментальных данных.

Автоматизированная обработка экспериментальных данных представляет собой поэтапные планируемые решения ряда задач интерпретации экспериментальных данных с оценкой надежности получаемых результатов.

Уравнение, описывающее мёсбауэровские спектры, записывают в виде [1]

$$\bar{N}_{V_j} = (\mathcal{F} * f)_j = \int_{-\infty}^{+\infty} K(V_j - v; \Gamma_s) \cdot f(v - v_{ik}, \dots) dv, \quad j \in J, \quad (1)$$

где
 $f(v - v_{ik}, \dots) = N_\infty (1 - \kappa f_s + \kappa f_s \exp(-\psi(v - v_{ik}, \dots)))$, $-\infty < v < +\infty$,
 — спектр поглощения,

$$\psi(v - v_{ik}, \dots) = c \sum_{k=1}^n c_k \sum_{i=1}^{m_k} \frac{a_{ik}/\Gamma_{ik}}{1 + \left(\frac{V_j - v_{ik}}{\Gamma_{ik}/2}\right)^2}, \quad -\infty < v < +\infty,$$

— спектр поглотителя, \bar{N}_{V_j} — среднее количество импульсов, зарегистрированных счетчиком детектора при фиксированной скорости движения источника фотонов $V_j = \text{const}_j$, $j \in J$.

Рассмотрим математическую модель работы спектроизмерительных установок типа ЯГРС-4. Эти установки фиксируют поток излучения фотонов в виде потока импульсов. В мёсбауэровском эксперименте поток импульсов $N_{V_j}(t)$ в пуассоновском приближении излучения контролируется распределением вероятностей:

$$P(N_{V_j}(t) = r) = \frac{(q_j t)^r}{r!} \exp(-q_j t), \quad 0 \leq r < \infty,$$

где $q_j = q^\Phi + q_j^p$, $q^\Phi = q(1 - \kappa f_s)$ — мощность потока импульсов фонового излучения,

$$q_j^p = q \kappa f_s \int_{-\infty}^{+\infty} K(V_j - v; \Gamma_s) \exp(-\psi(v - v_{ik}, \dots)) dv, \quad j \in J,$$

— мощность потока импульсов с лоренцевским распределением

$$K(V_j - v; \Gamma_s) = \frac{2}{\pi \Gamma_s} \left(1 + \left(\frac{V_j - v}{\Gamma_s/2}\right)^2\right)^{-1}, \quad -\infty < V_j - v < +\infty, \quad (2)$$

фотоны которого с вероятностью f_s являются резонансными, q — мощность потока импульсов от радиоактивного источника.

Счетчики детектора излучения в режиме разделения времени по каналам регистрируют фотоны независимых пуассоновских потоков, соответствующих доплеровским сдвигам $V_j = \text{const}_j \neq 0$, $j \neq 0$ и $V_0 = 0$. Счет импульсов в j -канале ($V_j = \text{const}_j$) прекращается по достижении заданного уровня L_0 — числа сосчитанных импульсов 0-каналом (доплеровский сдвиг $V_0 = 0$). Отсюда следует, что зарегистрированное количество импульсов ξ_j в j -канале контролируется отрицательно-биномиальным распределением

$$P(\xi_j = r) = C_{-L_0}^r \left(\frac{q_0}{q_0 + q_j}\right)^{L_0} \left(\frac{-q_j}{q_0 + q_j}\right)^r, \quad C_{-L_0}^r = (-1)^r \cdot C_{L_0+r-1}^r, \quad r \geq 0, \quad (3)$$

со средним $\bar{\xi}_j = L_0 \frac{q_j}{q_0}$ и дисперсией

$$D \xi_j = L_0 \frac{q_j}{q_0} \left(1 + \frac{q_j}{q_0} \right). \quad (4)$$

При $L_0 \rightarrow \infty$ распределение значений $(\xi_j - \bar{\xi}_j) / \sqrt{D \xi_j}$ сходится к стандартному нормальному $\mathcal{N}(0, 1)$, а это значит, что при больших L_0 распределение (3) аппроксимируется нормальным

$$\xi_j \sim \mathcal{N} \left(L_0 \frac{q_j}{q_0}, L_0 \frac{q_j}{q_0} \left(1 + \frac{q_j}{q_0} \right) \right), \quad (5)$$

при этом относительная точность значений отсчетов спектра оценивается из выражения $\frac{\sqrt{D \xi_j}}{\bar{\xi}_j} = \frac{1}{\sqrt{L_0}} \sqrt{1 + \frac{q_0}{q_j}}$, $j \in J$. Если излучение измеряется непосредственно, то количество импульсов $N_{V_j}(t)$, зарегистрированных за промежуток времени $t = L_0/q_0$ (время выражено в параметрах 0-канала), получается со средним и дисперсией $\bar{N}_{V_j}(L_0/q_0) = D N_{V_j}(L_0/q_0) = L_0 (q_j/q_0)$. Схема измерений, реализованная на установке типа ЯГРС-4, приводит к увеличению дисперсии измерений в $D \xi_j / D N_{V_j} = 1 + q_j/q_0$ раз по сравнению с дисперсией при непосредственном измерении, но эта схема, однако, обеспечивает устойчивость измерений к падению интенсивности потока излучения от радиоактивного источника.

Разрешение спектроизмерительных установок типа ЯГРС-4 ограничивается конечной полушириной лоренцевского распределения (2) по скоростям для частиц, излучаемых движущимся радиоактивным источником. Время жизни ядра в возбужденном состоянии определяет полуширину лоренцевского распределения и предел разрешения измеренных спектральных линий экспериментальными методами. Для спектроизмерительных установок математическая модель регистрируемых спектров является линейной:

$$\xi = \mathcal{K} * f + v = \bar{\xi} + v, \quad (6)$$

где ξ — зарегистрированный спектр, f — спектр на выходе «идеального неискажающего спектрометра», v — шум с известным распределением.

Пусть класс операторов $\mathcal{A} = \{A\}$ моделирует искажения приборов, связанные с потерей разрешения. На \mathcal{A} зададим неотрицательную числовую функцию $Q = Q(A)$, $A \in \mathcal{A}$ ($Q(A)$ — разрешение прибора A), такую, что $Q(A_1) < Q(A_2)$, если A_1 соответствует прибору с более высоким разрешением, чем A_2 [2].

В методе редукции [2] исходный спектр ξ (6) преобразуется искомым оператором R к виду

$$R \xi = RKf + Rv = Af + (RK - A)f + Rv, \quad (7)$$

где $(RK - A)f$ — ложный сигнал, Rv — преобразованный шум. Задача редукции ставится как вариационная [2]:

$$\inf \{ \|RK - A\| \mid \|Rv\|^2 \leq \varepsilon, A \in \mathcal{A}, Q(A) \leq \delta \} = \|R_{\varepsilon, \delta} K - A_{\varepsilon, \delta}\| = \rho_{\varepsilon, \delta}. \quad (8)$$

Если $(R_{\varepsilon, \delta}, A_{\varepsilon, \delta})$ — решение вариационной задачи (8), то преобразованный спектр $R_{\varepsilon, \delta} \xi$ (7) можно считать полученным с помощью оператора

* Оператор A и прибор A в обозначениях не различаются.

$R_{\varepsilon, \delta} K$, с точностью до $\rho_{\varepsilon, \delta}$ совпадающим с $A_{\varepsilon, \delta}$, которому соответствует разрешение не хуже δ , и энергия преобразованного шума контролируется условием $\|R_{\varepsilon, \delta} v\|^2 \leq \varepsilon$. Зависимости $G_{\varepsilon, \delta} = \|R_{\varepsilon, \delta} K - A_{\varepsilon, \delta}\|^2$, $H_{\varepsilon, \delta} = \|R_{\varepsilon, \delta} v\|^2$ и $Q_{\varepsilon, \delta} = Q(A_{\varepsilon, \delta})$ задают оперативную характеристику задачи редукции [2].

Планирование повышения разрешения комплексов «спектроизмерительная установка + ЭВМ» реализуется по оперативной характеристике [3]. На рис. 1 для спектроизмерительных установок с лоренцевским распределением излучения (2) $K(\cdot, \Gamma_s)$, $\Gamma_s = 3,75$, приведена оперативная характеристика. По оси z откладываются значения $0,5 \lg(H/N)$, по оси x — значения $\lg G$ и по оси y — $Q(A^{(m)}) = m/m_0 \leq 1$, $A^{(m)} = K(\cdot, \Gamma_s m/m_0)$, $m_0 = 25$. На рис. 2 приведены результаты повышения разрешения в $Q^{-1} = 3$ и 5 раз по точкам, отмеченным на оперативной характеристике. Если среднеквадратичное отклонение шума в одной точке спектра оценить выражением $\sqrt{D\xi_j} \approx \sqrt{2L_0}$ (4) и пренебречь корреляцией отсчетов преобразованного спектра, то среднеквадратичное отклонение преобразованного спектра $R\xi$ (7) оценивается выражением $\sigma_R = \sqrt{2L_0} \cdot 10^{0,5 \lg(H/N)}$. На рис. 2 рядом с преобразованными спектрами представлены $2\sigma_R$ -коридоры для преобразованного шума Rv . Таким образом, экспериментатор по оперативной характеристике может

заранее спланировать требуемое повышение разрешения комплекса «спектроизмерительная установка + ЭВМ» с учетом объема L_0 накопления спектра. Приведенное повышение разрешения реализовано в

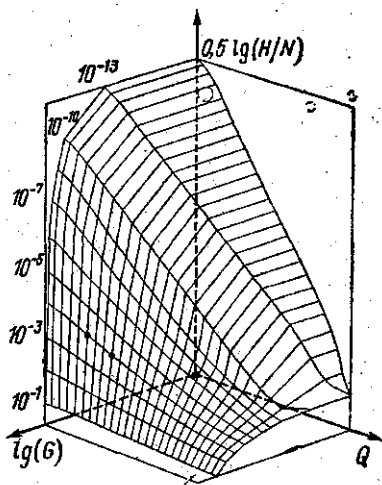


Рис. 1. Оперативная характеристика комплекса «ЯГРС-4+ЭВМ»

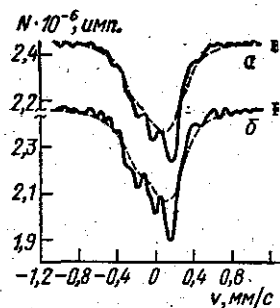


Рис. 2. Результат повышения разрешения в 3 (а) и 5 (б) раз. Сплошная линия — $R\xi$, штриховая — ξ

комплексе «спектроизмерительная установка + ЭВМ» и принципиально недостижимо в рамках только экспериментальных методов.

Повышение разрешения составляет первый этап расшифровки и интерпретации спектра, облегчает выбор модели спектра, дает возможность получить априорную информацию об объекте исследования, оценить значения параметров спектра и таким образом сократить число возможных гипотез о структуре спектра — объекта исследования. Частичное разрешение компонент сверхтонкой структуры спектра достигается при повышении разрешения в 3 раза (см. рис. 2). На втором этапе расшифровки спектра — интерпретации экспериментальных дан-

ных по выбранной модели спектра — решается задача статистической проверки гипотез о структуре объекта.

В рамках принятой гипотезы о структуре объекта $\mathcal{H} * f = ((\mathcal{H} * f)_j, j \in J)$ (1) и исходной реализации спектра $\xi = (\xi_j, j \in J) \in \mathcal{R}$ задача оценивания параметров $t = (v_{ik}, \dots, a_{ik}, \dots, \Gamma_{ik}, \dots) \in \mathcal{R}_2$ ставится как вариационная:

$$\inf (\|\xi - \mathcal{H} * f(t)\|_{\sigma}^2 | t \in \mathcal{R}_2) = \|\xi - \mathcal{H} * f(\hat{t})\|_{\sigma}^2 = \left(\sum_{j \in J} (\xi_j - (\mathcal{H} * f(\hat{t}))_j)^2 / \left(L_0 \frac{q_j}{q_0} \left(1 + \frac{q_j}{q_0} \right) \right) \right). \quad (9)$$

При высокоточных измерениях в силу аппроксимации (5) оценка параметров \hat{t} есть оценка максимального правдоподобия, статистика $\|\xi - \mathcal{H} * f(\hat{t})\|_{\sigma}^2$ (9) контролируется распределением Пирсона χ^2_{N-m} с $N-m = \dim \mathcal{R} - \dim \mathcal{R}_2$ степенями свободы. Для решения вариационной задачи (9) на ЭВМ спектр поглощения представляли в виде суммы $f = f_{\pi} + f_{\Delta}$, где $f_{\Delta} = \bar{N}_{\infty} \kappa f_s (\exp(-\psi) - 1 + \psi)$ — добавка к линейаризованной $f_{\pi} = \bar{N}_{\infty} (1 - \kappa f_s \psi)$ части спектра поглощения по спектру поглотителя ψ . Интегралы $\mathcal{H} * f_{\pi} = ((\mathcal{H} * f_{\pi})_j, j \in J)$ рассчитываются аналитически

$$(\mathcal{H} * f_{\pi})_j = \bar{N}_{\infty} (1 - \kappa f_s \psi (v_{ik} - V_j, \dots, a_{ik}, \dots, \Gamma_{ik} + \Gamma_s, \dots)), \quad j \in J.$$

Интегралы $\mathcal{H} * f_{\Delta}$ заменялись дискретным аналогом $K \cdot \Delta = ((K \cdot \Delta)_j, j \in J)$, для расчета которого применялись численные методы, основанные на технике БПФ. Замена $\mathcal{H} * f_{\Delta}$ в статистике $\inf \|\xi - \mathcal{H} * f_{\pi} - \mathcal{H} * f_{\Delta}\|_{\sigma}^2$ дискретным аналогом $K \cdot \Delta$ приводит к тому, что статистика $\inf \|\xi - \mathcal{H} * f_{\pi} - K \cdot \Delta\|_{\sigma}^2$ контролируется нецентральным пирсоновским распределением $\chi^2_{N-m, \delta}$ с параметром нецентральности $\delta = \|K \cdot \Delta - \mathcal{H} * f_{\Delta}\|_{\sigma}$, который характеризует искажения, вносимые дискретной схемой расчета.

Дисперсии $D\xi_j$ (4) оценивались из выражения

$$\widehat{D\xi_j} = L_0 \frac{\xi_j}{\xi_0} \left(1 + \frac{\xi_j}{\xi_0} \right)$$

с относительной точностью порядка

$$\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{L_0}} \approx 2 \cdot 10^{-3}, \quad L_0 \approx 2,1 \cdot 10^6.$$

Параметр нецентральности δ оценивался в модели $\delta = \inf (\|K \cdot \Delta - \mathcal{H} * f_{\Delta}\|_{\sigma} | t \in \mathcal{R}_2)$. Нецентральное $\chi^2_{N-m, \delta}$ аппроксимировали центральным $c\chi^2_k$. Параметры c и k определяли из равенств средних и дисперсий [4]:

$$c\chi^2_k = \chi^2_{N-m, \delta}, \quad Dc\chi^2_k = D\chi^2_{N-m, \delta}.$$

При интерпретации данных эксперимента использовалась реализуемая в ЭВМ статистика:

$$\eta = \inf (\|\xi - \mathcal{H} * f_{\pi}(t) - K \cdot \Delta(t)\|_{\sigma}^2 | t \in \mathcal{R}_2) / c = \|\xi - \mathcal{H} * f_{\pi}(\hat{t}) - K \cdot \Delta(\hat{t})\|_{\sigma}^2 / c \sim \chi^2_k,$$

где

$$c = 1 + \frac{\widehat{\delta}^2}{N - m + \widehat{\delta}^2}, \quad k = \frac{N - m + \widehat{\delta}^2}{c}.$$

Обозначим вероятность события $(\chi^2_n < z) : P(\chi^2_n < z) = F_n(z)$. Вероятность

$$\beta(\xi) = 100 \% \begin{cases} F_k(\eta) + 1 - F_k(k + \eta), & \eta < 2k, \\ 1 - F_k(\eta), & \eta \geq 2k, \end{cases}$$

характеризует состоятельность (по данному спектру ξ) модели спектра (физической модели взаимодействия излучения с веществом) и модели мёсбауэровского эксперимента и схемы расчета на ЭВМ, или, другими словами, характеризует надежность полученных результатов.

На рис. 3 изображен исходный мёсбауэровский спектр, полученный накоплением, для которого $L_0 \approx 2,1 \cdot 10^6$ и относительная точность измеренных отсчетов спектра порядка $2 \cdot 10^{-3} \approx 0,15\%$, а также рассчитанный на ЭВМ «теоретический спектр» $\mathcal{H} * f_n(\hat{t}) + K \cdot \Delta(\hat{t})$. На рис. 4 приведен спектр поглотителя $\psi(\hat{t})$. Внешнее согласие между экспери-

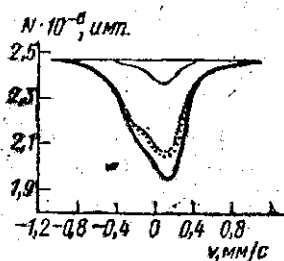


Рис. 3. Сравнение моделей спектров при $t = \hat{t}$. $\mathcal{H} * f_n + K \cdot \Delta$ — штриховая линия, $K \cdot f_n$ — точечная линия, $\mathcal{H} * f_n$ — сплошная линия. Отдельно выделена добавка $K \cdot \Delta$ — тонкая линия

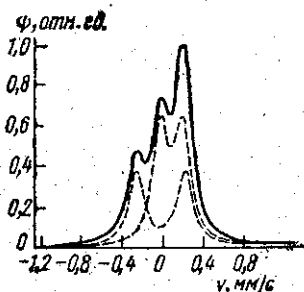


Рис. 4. Спектр поглотителя ψ для NiFe_2O_4 при $T = 973$ К; штриховыми линиями показаны квадрупольные дублеты, соответствующие ядрам ^{57}Fe в тетраэдрических и октаэдрических позициях

ментальным и «теоретическими» спектрами можно считать более чем удовлетворительным (на рис. 3 они изображаются одной линией), однако надежность $\beta(\xi)$ не превосходит 1%. Невысокая надежность полученных результатов говорит, по-видимому, о том, что если физическая модель верна, то модель эксперимента или сам эксперимент еще недостаточно совершенны. При высокоточных измерениях использование чисто линейаризованной модели $\mathcal{H} * f_n$ [5] и чисто дискретной модели $K \cdot f_n$ (дискретный аналог $\mathcal{H} * f$) [6] для оценивания параметров и интерпретации экспериментальных данных в разобранный пример накопительного эксперимента было недопустимо, так как при $t = \hat{t}$ имело место большое расхождение в моделях, в единицах хи-квадрат равное (см. рис. 3) $\|\xi - \mathcal{H} * f_n\|_0^2 \approx 41500$, $\|\xi - K \cdot f_n\|_0^2 \approx 700$. При этом разность исходного спектра $\dim \mathcal{R} = N = 128$.

Таким образом, при интерпретации результатов эксперимента учитывались случайный характер излучения, способ измерения излучения и искажения, вносимые ЭВМ в обрабатываемые данные. Подобный учет может быть использован в других экспериментах для совершенствования способов измерений, методов обработки, анализа и интерпретации на ЭВМ данных эксперимента.

Автор благодарит Ю. П. Пытьева и А. Г. Свешникова за обсуждение проблемы интерпретации экспериментальных данных, а также В. И. Николаева и В. С. Русакова за предоставленный экспериментальный материал и неоднократные обсуждения физического содержания математической модели мессбауэровского эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Николаев В. И. и др. ДАН СССР, 1981, 260, № 4, с. 848. [2] Пытьев Ю. П. ДАН СССР, 1979, 245, № 2, с. 315. [3] Коренчук А. Ф., Николаев В. И., Пытьев Ю. П., Русаков В. С., Свешников А. Г., Терентьев Е. Н. Новый метод повышения разрешения в эффекте Мессбауэра. Препринт № 7/1981, физ. фак. МГУ, М., 1981. [4] Шеффе Г. Дисперсионный анализ. М.: Наука, 1980. [5] Николаев В. И., Русаков В. С., Якимов С. С. Программа обработки мессбауэровских спектров. Препринт № 2541 ИАЭ им. Курчатова, М., 1975. [6] Василенко Г. И. Теория восстановления сигналов. М.: Сов. радио, 1979.

Поступила в редакцию
17.12.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 6

УДК 669.15.865 : 536.413.2

СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ ТЕРБИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ МАГНИТОУПОРЯДОЧИВАЮЩЕГОСЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА TbFe₂

А. С. Илюшин, Л. А. Кирилчева, А. П. Перов, Ю. В. Тебеньков

(кафедра физики твердого тела)

Из работы [1] известно, что интерметаллическое соединение TbFe₂ в парамагнитном состоянии изоструктурно фазе Лавеса MgCu₂ с пространственной группой $O_h^7 - Fd\bar{3}m$ (тип C15). В работах [2—5] показано, что в магнитоупорядоченном состоянии, характеризующемся появлением спонтанного магнитного момента M вдоль направления $\langle 111 \rangle$, структура интерметаллида TbFe₂ испытывает небольшие ромбоэдрические искажения из-за спонтанной магнитоупорядоченности. Однако в этих работах не было сделано полного определения кристаллической структуры интерметаллида TbFe₂. Теоретико-групповой и симметричный анализ, проведенный в работе [6], показал, что единственной возможной пространственной (Федоровской) группой, описывающей ромбоэдрическую структуру магнитоупорядоченного интерметаллида TbFe₂, является группа $R\bar{3}m - D_{3d}^5$. В этом случае элементарная ячейка содержит шесть атомов, располагающихся в трех структурно неэквивалентных положениях: (a), 2(c), и 3(d) [7]. Атомы железа занимают положения (a) и 3(d) с координатами 000, 1/2 00, 0 1/2 0 и 00 1/2, а атомы тербия — положения 2(c) с координатами 3/8 + x, 3/8 + x, 3/8 + x и 5/8 - x, 5/8 - x, 5/8 - x, т. е. для атомов тербия возможны смещения по направлениям $\langle 111 \rangle$. Отсюда видно, что для полного определения кристаллической структуры TbFe₂ в магнитоупорядоченной фазе необходимо найти не только тип и размеры элементарной ячейки, но также и значения координат атомов тербия.

В настоящей работе проведено определение атомно-кристаллической структуры магнитоупорядоченного интерметаллического соединения TbFe₂ и изучено влияние температуры на закономерности ее трансформации.

Исследование проводилось методом низкотемпературной рентгено-