

УДК 539.1;519.6

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СЕЧЕНИЯ ПОГЛОЩЕНИЯ ГАММА-КВАНТОВ

Р. Г. ГАБРИЕЛЯН, А. А. МАРТИРОСЯН

Отдел прикладных проблем физики АН АрмССР

(Поступила в редакцию 9 ноября 1983 г.)

Рассмотрена возможность восстановления энергетического распределения сечения поглощения гамма-квантов из мёссбауэровского спектра поглощения с помощью метода регуляризации Тихонова. Это позволяет расшифровать сверхтонкую структуру спектра поглощения. С помощью этого метода обработан экспериментальный спектр ферредоксина.

В гамма-резонансной спектроскопии важной характеристикой является сечение поглощения  $\sigma(\omega)$ . Оно несет в себе информацию о динамическом поведении ядер, о квадрупольном и магнитном расщеплениях, о различных энергетических сдвигах и т. д. Так как в эксперименте  $\sigma(\omega)$  испытывает как влияние источника (уширение на ширину линии испускания  $\Gamma_s$ ), так и поглотителя (толщинное уширение из-за эффективной толщины поглотителя  $\beta$ ), то оно существенно отличается от измеряемой в эксперименте величины эффекта [1]

$$\eta(\nu) = \frac{N_{\infty} - N_{\nu}}{N_{\infty}} = \nu f_s \frac{\Gamma_s}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-\beta\omega(\omega)}}{(\omega - \nu)^2 + \frac{\Gamma_s^2}{4}} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\omega) K(\omega - \nu) d\omega, \quad (1)$$

где

$$\psi(\omega) = \nu f_s (1 - \exp(-\beta\omega(\omega))), \quad K(\omega - \nu) = \frac{\Gamma_s}{2\pi} \left[ (\omega - \nu)^2 + \frac{\Gamma_s^2}{4} \right]^{-1},$$

$\nu$  — доля резонансных  $\gamma$ -квантов, испускаемых источником,  $\nu$  — скорость источника,  $\beta = n \sigma_0 f_a$ ,  $\sigma_0$  — резонансное сечение поглощения,  $n$  — концентрация мёссбауэровских атомов на площади в  $1 \text{ см}^2$ ,  $f_s, f_a$  — факторы Дебая—Валлера соответственно источника и поглотителя,  $\omega(\omega) = \sigma(\omega)/\sigma_0$  — энергетическое распределение сечения поглощения,  $N_{\infty}, N_{\nu}$  — скорости счета вдали от резонанса и в резонансе.

Нашей целью является восстановление  $\psi(\omega)$  или  $\beta\omega(\omega) = -\ln(1 - \psi(\omega)/\nu f_s)$  с помощью экспериментального спектра поглощения  $\eta(\nu)$  для произвольного значения  $\beta$ . Так как в эксперименте величина  $\eta(\nu)$  измеряется с некоторой ошибкой  $\varepsilon$ , то задача определения  $\psi(\omega)$  из интегрального уравнения (1) является некорректно поставленной по определению Тихонова [2]. Для нахождения устойчивого приближен-

ного решения (1) мы воспользовались методом регуляризации [2], суть которого заключается в том, что решение ищется из другого, мало отличающегося от (1), уравнения, решение которого уже обладает условием устойчивости. Для этого строится неотрицательный стабилизирующий функционал

$$\Phi = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\alpha}(\omega) K(\omega - \nu) d\omega - \eta(\nu) \right)^2 d\nu + \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \psi_{\alpha}^2 + \frac{\Gamma_s^2}{4} \left( \frac{d\psi_{\alpha}}{d\omega} \right)^2 \right\} d\omega, \quad (2)$$

который обеспечивает гладкость приближенного решения (исключаются, например, быстро осциллирующие компоненты).

Согласно методу регуляризации регуляризованное решение минимизирует этот функционал ( $\delta\Phi = 0$ ). Из этого условия легко найти следующее интегро-дифференциальное уравнение

$$\alpha \frac{\Gamma_s^2}{4} \frac{d^2 \psi_{\alpha}}{d\omega^2} - \alpha \psi_{\alpha} - \int_{-\infty}^{\infty} \bar{K}(\omega - \omega') \psi_{\alpha}(\omega') d\omega' = g(\omega), \quad (3)$$

$$g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega - \nu) \eta(\nu) d\nu, \quad \bar{K}(\omega - \omega') = \int_{-\infty}^{\infty} K(\omega - \nu) K(\omega' - \nu) d\nu,$$

где  $\alpha$  — параметр регуляризации.

Уравнение (3) решается аналитически с помощью фурье-формализма [2—4]

$$\psi_{\alpha}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\Gamma_s}{2}|p|} \bar{\eta}(p) e^{ip\omega}}{e^{-\Gamma_s|p|} + \frac{\alpha \Gamma_s^2}{4} p^2 + \alpha} dp = \nu f_s (1 - e^{-\beta \omega_a(\omega)}), \quad (4)$$

где

$$\bar{\eta}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta(\nu) e^{-ip\nu} d\nu.$$

Таким образом, восстановлено энергетическое распределение сечения поглощения. С помощью этого метода мы обработали экспериментальный спектр поглощения ферредоксина (см. рис. 1), содержащий два дублета с разными квадрупольными расщеплениями и химическими сдвигами. Площадь спектра составляла  $S_i = \int \eta(\nu) d\nu = 0,305$  мм/с. Подставляя экспериментальные значения  $\eta(\nu)$  в выражение (4), мы находим  $\psi_{\alpha}(\omega)$  ( $\int \psi_{\alpha}(\omega) d\omega = 0,318$  мм/с) и  $\omega_a(\omega)$  (см. рис. 2). Значение  $\alpha = 1,5 \cdot 10^{-4}$ , при котором проведены вычисления, получено из условия невязки [2]. Вычисление  $\psi_{\alpha}(\omega)$ , т. е. правильность выбора  $\alpha$ , проверяется также с помощью следующего соотношения

$$\int_{-\infty}^{\infty} \eta(v) dv = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_a(\omega) d\omega,$$

которое непосредственно следует из определения (1).

Как видно из приведенных рисунков, посчитанная величина  $\omega_a(\omega)$  сужается по сравнению с  $\eta(v)$ , тем самым увеличивается разрешающая способность мёссбауэровского спектра поглощения. На рис. 2 уже отчетли-

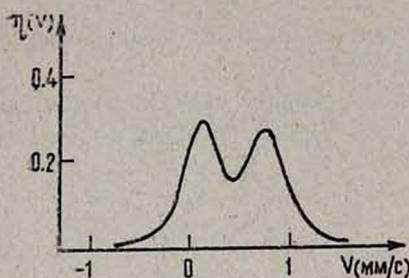


Рис. 1.

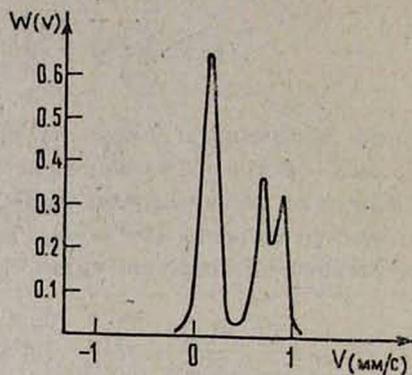


Рис. 2.

Рис. 1. Спектр поглощения ферродоксина.

Рис. 2. Энергетическое распределение сечения поглощения.

во видно, что спектр состоит из двух квадрупольных дублетов с квадрупольными расщеплениями  $\Delta_1 = 0,553$  мм/с,  $\Delta_2 = 0,780$  мм/с и химическими сдвигами  $\delta_1 = 0,363$  мм/с,  $\delta_2 = 0,476$  мм/с. Метод позволяет также определить эффективную толщину образца

$$\beta = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \beta \omega_a(\omega) d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} \omega_a(\omega) d\omega} = \frac{1,21}{\pi \Gamma_a/2} \approx 4,85.$$

Используя температурную зависимость  $\eta(v)$ , можно найти температурную зависимость  $\beta$  и, следовательно,  $f_a$ .

Следует отметить, что вышеуказанным методом можно определить не только сверхтонкую структуру спектра, но и найти временную зависимость среднеквадратичного смещения атомов  $\langle x^2(t) \rangle$  в вязких средах [4] (т. е. определить динамическое поведение атомов), небольшие энергетические сдвиги и т. д.

Авторы выражают глубокую признательность А. Р. Мкртчяну за постоянное внимание к работе и Г. Н. Наджаряну за любезное предоставление экспериментальных результатов.

1. Быков Г. А., *Докл. АН АрмССР*, 43, 909 (1962).
2. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. *Методы решения некорректных задач*. М., 1979.
3. Nadjaryan G. N. et al. *Phys. Stat. Sol.*, 109, 131 (1980).
4. Габриелян Р. Г. и др. *Изв. АН АрмССР, Физика*, 18, 3 (1983).

ԳԱՄՄԱ-ՔՎԱՆՏՆԵՐԻ ԿԼԱՆՄԱՆ ԿՏՐՎԱԾՔԻ ԷՆԵՐԳԵՏԻԿ  
ՐԱՇԽՄԱՆ ՎԵՐԱԿԱՆԳՆՈՒՄԸ

Ռ. Գ. ԳԱԲՐԻԵԼՅԱՆ, Ա. Ա. ՄԱՐՏԻՐՈՍՅԱՆ

*Դիտարկված է դամա-բվանդների կլանման կորվածքի էներգետիկ բաշխումը մոս-  
րաուէրյան կլանման սպեկտրից Տիխանովի ռեգուլյարիզացիոն մեթոդով վերականգնելու հնա-  
րավորությունը: Այդ մեթոդի միջոցով մշակված է ֆերրեդոքսինի փորձնական սպեկտրը:*

RECONSTRUCTION OF ENERGY DISTRIBUTION OF GAMMA  
QUANTUM ABSORPTION CROSS-SECTION

R. G. GABRIELIAN, A. H. MARTIROSYAN

The possibility of reconstruction of the energy distribution of gamma quantum absorption cross-section from Mössbauer absorption spectrum with the help of Tikhonov regularization method has been considered. This reconstruction procedure allows to obtain the hyperfine structure of the absorption spectrum. The experimental spectrum of ferredoxine was analyzed with the help of this method.