

穆斯堡尔效应与晶格动力学

陈义龙 著

武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

穆斯堡尔效应与晶格动力学/陈义龙著. —武汉: 武汉大学出版社, 2000. 3
(武汉大学学术丛书)
ISBN 7-307-02724-0

I . 穆… II . 陈… III . ①穆斯堡尔效应 ②固体力学: 动力学
IV . 048

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 16831 号

责任编辑: 史新奎 责任校对: 张 欣 版式设计: 支 笛

出版: 武汉大学出版社 (430072 武昌 珞珈山)

(电子邮件: wdp4@whu.edu.cn 网址: www.wdp.whu.edu.cn)

发行: 新华书店湖北发行所

印刷: 武汉大学出版社印刷总厂

开本: 850×1168 1/32 印张: 14.50 字数: 372 千字 插页: 3

版次: 2000 年 3 月第 1 版 2000 年 3 月第 1 次印刷

ISBN 7-307-02724-0/O · 209 定价: 22.50 元

版权所有, 不得翻印; 凡购买我社的图书, 如有缺页、倒页、脱页等质量问题者, 请与当地图书销售部门联系调换。



陈义龙 男，出生于 1934 年 4 月，湖北长阳人。1961 年毕业于原苏联哈尔科夫大学物理系，现为武汉大学物理系教授。历任湖北省物理学会理事，武汉市物理学会理事，现任全国穆斯堡尔专业委员会委员。享受政府特殊津贴。

多年从事核物理及其方法的应用和核电子学方面的教学与科学的研究。20 世纪 80 年代开始穆斯堡尔效应的研究工作，对该效应的温度效应作过深入的探讨。在穆斯堡尔效应的理论方面与实验方法方面均作出了较好的成绩。在国内重要刊物上发表论文 30 余篇，其中多篇获湖北省自然科学优秀论文一等奖或二等奖。

序

穆斯堡尔效应具有极高的能量分辨率，达到激发态能级的自然宽度，即 10^{-9}eV 的量级，另外它的实验设备相对简单，这使它迅速形成一门交叉学科——穆斯堡尔谱学，广泛地应用于很多科学研究领域。20世纪80年代之前，每年的国际性学术会议平均不少于一次，就足以说明这门学科的生命力，时至今日，它仍稳步向纵深发展。

一开始，人们就想用穆斯堡尔效应来测量晶体中原子振动频率的分布（声子谱） $Z(\omega)$ ，这一愿望因实验技术上的困难，长期未能实现。要将调制 γ 光子能量的多普勒速度提高到能够覆盖声子能量的范围，且性能稳定可靠是颇不容易的；要测出强度比谱线约小三个数量级的声子峰，其难度之大，亦可想而知。穆斯堡尔效应只能通过测量无反冲分数 f 及二次多普勒能移 δ_{SOD} 来导出原子振动的均方位移 $\langle u^2 \rangle$ 、均方速度 $\langle v^2 \rangle$ 、德拜温度 θ_D 以及原子间力常数等动力学参数。这同比热法一样，均属于统计平均法，但由于 f 分数与 δ_{SOD} 的测量精度较高，穆斯堡尔谱学这一微观方法成了当今研究晶体中原子振动的重要手段。对于杂质晶体、混晶等体系，由于穆斯堡尔谱学具有同位素选择性，常是其他方法难以取代的。穆斯堡尔效应及其应用的书籍甚多，但在晶格动力学中应用的专著却少见，只有1983年科尔克(Kolk)在“Dynamical Properties of Solids”丛书第五卷中作过介绍。近十多年又取得了许多新成果，尤其是1995年用同步辐射源成功地测得了 $\alpha\text{-Fe}$ 的频率分布 $Z(\omega)$ ，促使作者撰写本书来深入地总结这一问题。

本书重视基础知识，叙述深入浅出，内容丰富新颖，例如对 Mannheim 模型作了最详细阐述，用相干态理论来分析无反冲分数及同步辐射的应用等等都是最新进展。作者在穆斯堡尔谱学领域从事多年研究和教学工作，有丰富的经验。此书颇有特色，是一本值得推荐的好书。本书可作为有关专业的研究生、教师的参考用书，对工作于各领域的穆斯堡尔谱学工作者都很有价值。

夏元清

1999 年 10 月于南京

前　　言

本书全面介绍了穆斯堡尔效应在晶格动力学中的应用。晶格动力学主要研究晶体中原子的相互作用，当温度高于绝对零度时，这种作用引起原子绕平衡位置的微小振动（热运动）。晶格动力学发展得很早，1954年玻恩和黄昆的巨著问世，标志着理想晶体的动力学理论已十分成熟。近四十多年晶格动力学又取得了很大进展，主要表现在非理想晶体（包括含杂质、缺陷的晶体，非晶体以及低维固体等）的动力学方面。在穆斯堡尔谱学中，目前只用理想晶体及孤立杂质晶体的动力学理论来表示无反冲分数 f 和二次多普勒能移 δ_{SD} 。当杂质浓度增高时，数学处理变得复杂，另外， f 分数和 δ_{SD} 与原子振动的频率分布 $Z(\omega)$ 是通过一个积分关联着的，对后者的细节不甚敏感，故常用德拜模型来近似地分析 f 分数和 δ_{SD} 。

全书包括十章及一个附录。前三章为穆斯堡尔谱学基础。在第一章的量子理论中，与以前的有关著作不同，采用相干态的理论方法，使 f 分数的推导颇为简单而严格。第四章为经典晶格动力学简介。第五章为无反冲分数与二次多普勒效应。第六章为穆斯堡尔散射法，重点是穆斯堡尔瑞利散射在动力学中的应用。瑞利散射的一个重要特点是样品可以不含穆斯堡尔核，这大大拓宽了应用范围。用同步辐射源，不仅测得了 $Z(\omega)$ ，同时也提高了 f 分数的测量精度，这在第七章中介绍。立方晶体中孤立杂质原子的动力学理论有多种，以曼黑姆（Mannheim）模型最为适用，但其某些数学推导一直无详细介绍，本书一一作了补充，用第八

章及附录 F 的相当篇幅对这一模型作了全面阐述。第九章介绍几类固体材料的动力学参数的实验结果。1960 年在晶格动力学基础上提出的软模，是常常与相变一起发生的现象，也一直是穆斯堡尔效应研究的对象，这便是最后一章的内容。

南京大学夏元复教授给予作者许多热情的帮助，提供了很多资料，审阅了本书的原稿，并写了序；兰州大学李发伸教授审阅了本书的原稿，并提出很多宝贵的修改意见；在本书的出版过程中得到了我校出版社编辑史新奎副教授的大力支持；物理系穆斯堡尔实验室的全体同志也给予了很多具体帮助，作者在此一并表示衷心感谢！

鉴于作者学识有限，本书的缺点错误在所难免，尚望读者予以批评指正。

作 者

1999 年 5 月于武昌珞珈山

武汉大学学术丛书

编委会

主任委员

侯杰昌

副主任委员

卓仁禧 张清明

委员

(以姓氏笔画为序)

丁俊萍	王吉玉	王维克
田德诚	朱英国	刘花元
江 春	李文鑫	余劲松
冻国栋	张清明	陈恕祥
杨弘远	卓仁禧	周茂荣
郑传寅	胡树祥	胡德坤
查全性	侯杰昌	郭齐勇
陶德麟	彭斐章	熊玉莲

武汉大学学术丛书

书目

- 中国当代哲学问题探索
- 中国辩证法史稿(第一卷)
- 德国古典哲学逻辑进程
- 毛泽东哲学分支学科研究
- 哲学研究方法论
- 改革开放的社会学研究
- 邓小平哲学研究
- 社会认识方法论
- 中国共产党解放和发展生产力思想研究
- 国际经济法概论
- 国际私法
- 国际组织法
- 国际条约法
- 国际强行法与国际公共政策
- 比较外资法
- 比较民法学
- 犯罪通论
- 刑罚通论
- 中国刑事政策学
- 中国冲突法研究
- 中国与国际私法统一化进程(修订版)
- 比较宪法学
- 人民代表大会制度的理论与实践
- 国际民商新秩序的理论建构
- 中国涉外经济法律问题新探
- 当代西方经济学说(上、下)
- 唐代人口问题研究
- 非农化及城镇化理论与实践
- 马克思经济学手稿研究
- 西方利润理论研究
- 西方经济发展思想史
- 宏观市场营销研究
- 经济运行机制与宏观调控体系
- 三峡工程移民与库区发展研究
- 中国跨世纪的改革与发展
- 中国特色的社会保障道路探索
- 发展经济学的新发展
- 中日战争史
- 中苏外交关系研究(1931~1945)
- 汗简注释
- 国民军史
- 中国俸禄制度史
- 斯坦因所获吐鲁番文书研究
- 敦煌吐鲁番文书初探(二编)
- 十五六世纪东西方历史初学集(续编)
- 清代军费研究
- 魏晋南北朝隋唐史三论
- 湖北考古发现与研究
- 法国文明史
- 李鸿章思想体系研究
- 文言小说高峰的回归
- 文坛是非辩
- 评康殷文字学
- 中国戏曲文化概论(修订版)
- 法国小说论
- 宋代女性文学
- 《古宿语要》代词助词研究
- 中国印刷术的起源
- 现代情报学理论
- 信息经济学
- 中国古籍编撰史
- 随机分析学基础
- 流形的拓扑学
- 光纤孤子理论基础
- Banach 空间结构理论
- 电磁波传播原理
- 计算固体物理学
- 环论
- 近代鞅论
- 鞅与 banach 空间几何学
- 现代偏微分方程引论
- 算子函数论
- 随机分形引论
- 电磁理论中的并矢格林函数
- 穆斯堡尔效应与晶格动力学
- 植物进化生物学
- 广义遗传学的探索
- 水稻雄性不育生物学



武汉大学
学术丛书

目 录

序	1
前言	1
第一章 穆斯堡尔效应	1
1. 1 γ 光子的共振散射	1
1. 2 穆斯堡尔效应	4
1. 2. 1 反冲能损失的补偿	4
1. 2. 2 穆斯堡尔效应的发现	5
1. 3 穆斯堡尔谱	8
1. 3. 1 谱的测量	8
1. 3. 2 谱线的形状与强度	9
1. 4 穆斯堡尔效应的经典理论	14
1. 5 穆斯堡尔效应的量子理论	16
1. 5. 1 谐振子相干态	17
1. 5. 2 束缚原子核的 γ 辐射	19
1. 5. 3 固体中的穆斯堡尔效应	21
1. 5. 4 平移转移能量	24
参考文献	25
第二章 超精细相互作用	27
2. 1 电单极相互作用	28
2. 1. 1 电相互作用的一般形式	28

2.1.2 同质异能移	29
2.1.3 同质异能移的标度	32
2.1.4 同质异能移与电子结构	33
2.2 电四极相互作用	39
2.2.1 电四极分裂	39
2.2.2 电场梯度 (EFG)	43
2.2.3 谱线强度	47
2.2.4 电场梯度的符号	48
2.3 磁偶极相互作用	50
2.3.1 磁分裂	51
2.3.2 磁分裂谱线的强度	51
2.3.3 有效磁场	53
2.3.4 在磁学与磁性材料研究中的应用	55
2.4 电四极和磁偶极混合相互作用	61
2.5 穆斯堡尔辐射的极化	65
2.5.1 极化穆斯堡尔源	66
2.5.2 极化穆斯堡尔谱	67
2.6 超精细谱线的饱和效应	73
2.7 穆斯堡尔谱学	74
参考文献	76
第三章 实验技术	79
3.1 穆斯堡尔谱仪	79
3.1.1 速度调节	79
3.1.2 等速与等加速谱仪	80
3.2 放射源	83
3.3 吸收体	85
3.3.1 样品最佳厚度的估算	85
3.3.2 厚度效应	92

3.3.3 样品制备	92
3.4 探测与记录系统.....	93
3.5 速度驱动系统.....	99
3.5.1 振动子	99
3.5.2 波形发生器	101
3.5.3 驱动电路及反馈电路	103
3.5.4 速度校准	104
3.6 数据处理	107
3.6.1 单峰拟合法	108
3.6.2 全谱拟合计算法	112
3.6.3 透射积分求解	113
3.6.4 计算结果优劣的判定	114
3.7 高低温装置	116
3.7.1 低温装置	116
3.7.2 高温装置	119
参考文献.....	120

第四章 晶格动力学基础.....	123
4.1 简谐振动	123
4.1.1 简谐近似	123
4.1.2 力常数及其性质	125
4.1.3 简正坐标	128
4.2 晶格振动	130
4.2.1 动力学矩阵	130
4.2.2 倒格子与布里渊区	132
4.2.3 玻恩-卡曼边界条件	135
4.2.4 声频支与光频支	137
4.2.5 纵波与横波	141
4.3 振动量子化：声子	147

4.4	振动频谱与热力学性质	149
4.4.1	晶体的比热容	149
4.4.2	频率分布函数	151
4.4.3	频率矩	156
4.4.4	德拜温度 θ_D	159
4.5	局域振动	162
4.6	晶格动力学的实验研究方法	166
4.6.1	中子散射	167
4.6.2	X 射线散射	176
	参考文献	177

第五章	无反冲分数与二次多普勒效应	180
5.1	均方位移 $\langle u^2 \rangle$ 与均方速度 $\langle v^2 \rangle$	181
5.2	无反冲分数 f 与温度 T 的关系	183
5.3	非简谐效应	186
5.3.1	f 分数的一般形式	187
5.3.2	赝简谐近似求 f 分数	189
5.3.3	低温非简谐效应	191
5.4	压力对 f 分数的影响	195
5.5	戈尔丹斯基-卡里亚金效应	197
5.5.1	单晶	198
5.5.2	多晶	200
5.6	二次多普勒能移 (SOD shift)	201
5.6.1	横向多普勒效应	201
5.6.2	f 分数与 δ_{SOD} 的关系	204
5.7	f 分数的测量方法	208
5.7.1	绝对法	208
5.7.2	相对法	211
	参考文献	213

第六章 穆斯堡尔散射法	217
6.1 穆斯堡尔 γ 散射的特点及分类	217
6.2 干涉及衍射	224
6.2.1 核共振散射与瑞利散射的干涉	224
6.2.2 穆斯堡尔衍射	230
6.2.3 衍射应用一例	232
6.3 核弹性相干散射	234
6.3.1 核弹性散射幅度	236
6.3.2 核弹性相干散射	237
6.4 散射中的厚度效应及同位素效应	240
6.5 瑞利散射 (RSMR)	247
6.5.1 理论基础	247
6.5.2 瑞利散射截面的测量	251
6.5.3 弹性与非弹性散射的分离	253
6.5.4 用 RSMR 求晶格动力学参数	258
6.5.5 RSMR 与非谐效应	262
参考文献	267
第七章 用同步辐射的穆斯堡尔谱学	271
7.1 同步辐射 (SR) 及其性质	272
7.2 同步辐射穆斯堡尔源	277
7.3 时域穆斯堡尔谱学 (TDMS)	283
7.4 晶格动力学中的应用示例	295
7.4.1 无反冲分数 f 的精确测定	295
7.4.2 声子谱 $Z(\omega)$ 的测量	300
参考文献	303
第八章 穆斯堡尔杂质原子 (1)	306
8.1 替代杂质原子的振动理论	307
8.1.1 一般方法	307

8.1.2 同位素杂质	311
8.2 曼黑姆模型	314
8.3 频率矩的应用	322
8.4 ^{57}Fe 、 ^{119}Sn 、 ^{197}Au 杂质原子的研究示例	331
8.4.1 ^{57}Fe 杂质原子	332
8.4.2 ^{119}Sn 杂质原子	335
8.4.3 ^{197}Au 杂质原子	338
8.5 填隙杂质原子	339
8.5.1 $^{57}\text{Fe}-\text{Au}$	340
8.5.2 ^{57}Fe -金刚石	342
参考文献	343

第九章 穆斯堡尔杂质原子 (II)	347
9.1 金属与合金	347
9.1.1 金属	347
9.1.2 合金	352
9.2 非晶态固体	358
9.3 分子晶体	365
9.4 低维体系	373
9.4.1 插层化合物	373
9.4.2 表面原子的振动	376
参考文献	380

第十章 相变及软模动力学	384
10.1 相变概述	384
10.1.1 相变的分类	384
10.1.2 序参量	387
10.1.3 朗道 (Landau) 理论与软模	389
10.2 软模动力学	391

10.3 穆斯堡尔效应在相变研究中的应用	400
10.3.1 相的区分与相变分类	400
10.3.2 T_c 附近 f 分数的下陷	400
10.3.3 临界指数的测定	401
10.3.4 研究实例	403
参考文献	415
附录	419
A. 谱线形状 $\epsilon(v)$ 及面积 $A(t_a)$	419
B. 中心力近似	423
C. FCC 及 BCC 晶体结构的力常数矩: $-\Phi$	426
D. 晶体格林函数	427
D1 格林函数的定义	427
D2 实数与虚数部分	430
D3 格林函数矩阵的对称性质	432
D4 $\langle u^2(0) \rangle$ 及无反冲分数 f	433
D5 格林函数 $G_{\alpha\beta}(l, l')$ 间的关系	434
D6 格林函数与频率矩	435
E. 立方晶体中替代原子的近邻位置	437
F. 对称坐标	438
G. 质量吸收系数	444