

APPENDICES

Appendix A

Simulation program

On the next five pages, a copy of the program is given to simulate the TISRS spectra with time slicing for two stainless-steel absorbers. This program is written in Mathcad [131, 132]. A single synchrotron pulse is assumed with a period of 100 ns. This is not essential, though, since the inter-pulse period can easily be altered.

The program first calculates the resonant medium response function for both samples in frequency domain. Next, this function is Fourier transformed to time domain, where time slicing is performed. The nuclear response is considered during 300 ns ($\approx 2\tau$). After this time, the nuclear resonant scattering signal is so weak that it can be neglected.

If one wants to simulate the nuclear response for two synchrotron pulses every 100 ns, as was the case in the experiment described in chapter 4, one has to proceed as follows. Let Δ be the time between the two pulses of the doublet. One first simulates the spectrum for a time window running from t_b to t_e , corresponding to the first pulse in the doublet. Then, one has to do the same for the second pulse, but now the time window runs from $t_b - \Delta$ to $t_e - \Delta$. Summing both results gives the TISRS spectrum for the doublet.

time_slicing.mcd

1

TISRS with time-slicing: two single-line absorbers of stainless steel

These calculations are based on the semi-classical optical model for radiation

NUCLEAR RESONANCE PARAMETERS $\sigma_0 = 2.569 \cdot 10^{-18}$ σ_0 is the nuclear resonant scattering cross section (in cm^2) $\chi = 0.42$ χ is the isotopic enrichment in ^{57}Fe $n = 4.70 \cdot 10^{22}$ n is the concentration of nuclei (in cm^{-3}) $N_0 = n \cdot \chi$ N_0 is the concentration of resonant nuclei $f_{\text{sam}} = 0.72$ f_{sam} is the recoil free fraction for the sample $f_{\text{ref}} = 0.72$ f_{ref} is the recoil free fraction for the reference $d_{\text{sam}} = 0.0002465$ d_{sam} is the sample thickness (in cm) $d_{\text{ref}} = 0.0002465$ d_{ref} is the reference thickness (in cm) $T_{\text{sam}} = \sigma_0 \cdot f_{\text{sam}} \cdot N_0 \cdot d_{\text{sam}}$ T_{sam} is the effective thickness of the sample $T_{\text{ref}} = \sigma_0 \cdot f_{\text{ref}} \cdot N_0 \cdot d_{\text{ref}}$ T_{ref} is the effective thickness of the reference

$$T_{\text{sam}} = 9$$

$$T_{\text{ref}} = 9$$

 $hb = 6.582173 \cdot 10^{-16}$ hb is Planck's constant divided by 2π (in eV·s) $E_0 = 14.4125 \cdot 10^3$ E_0 is the nuclear resonance energy (in eV) $\omega_0 = \frac{E_0}{hb}$ ω_0 is the nuclear resonance frequency (in radians/s) $\Gamma = 4.651 \cdot 10^{-9}$ Γ is the natural linewidth of the excited state (in eV) $\tau = \frac{hb}{\Gamma}$ τ is the natural lifetime of the excited state (in s)

$$\tau = 1.415 \cdot 10^{-7}$$

$$\omega_0 = 2.19 \cdot 10^{19}$$

time_slicing.mcd

2

FREQUENCY PARAMETERS $N = 2048$ N determines the number of frequency steps in the calculation $i = 0, 1..N$ N must be a power of 2, larger than 4 ($2048 = 2^{11}$)

$$\Delta\omega = \frac{1}{3} \frac{1}{\tau}$$

 $\Delta\omega$ is the frequency step size (in radians/s)

$$\Delta\omega = 2.355 \cdot 10^6$$

$$\omega_i = \omega_0 + \left(i - \frac{N}{2}\right) \cdot \Delta\omega$$

calculate the frequency values used to evaluate the medium response

Range of frequencies (in mm/s):

$$c = 3 \cdot 10^{11}$$

 c is the velocity of light (in mm/s)

$$v_i = \frac{\omega_i - \omega_0}{\omega_0} \cdot c$$

velocities corresponding to the frequency values (in mm/s)

$$v_0 = -33.045$$

$$v_N = 33.045$$

DOPPLER SHIFT PARAMETERS $M = 400$ M determines the number of velocity steps M must be a multiple of 2 $j = 0, 1..M$

$$\Delta\omega_D = \frac{1}{5} \frac{1}{\tau}$$

 $\Delta\omega_D$ is the step size in Doppler shifts

$$\omega_{D_j} = \left(j - \frac{M}{2}\right) \cdot \Delta\omega_D$$

calculate the Doppler shift values used to evaluate the reference-medium response

Range of Doppler velocities (in mm/s):

$$v_{D_j} = \frac{\omega_{D_j}}{\omega_0} \cdot c$$

Doppler velocities (in mm/s)

$$v_{D_0} = -3.872$$

$$v_{D_M} = 3.872$$

time_slicing.mcd

3

TIME WINDOW PARAMETERS

$$dt = \frac{2}{N}$$

dt is the step size on the time axis (in s)

$$dt = 1.303 \cdot 10^{-9}$$

$$t_i = (N - i) \cdot dt$$

calculate the time values used in the calculation
the time starts at t_N and runs until t_0

$$P = 1 \cdot 10^{-7}$$

P is the period between synchrotron pulses

$$t_b = 58 \cdot 10^{-9}$$

 t_b is the beginning of the time window (after each pulse)

$$t_e = 85 \cdot 10^{-9}$$

 t_e is the end of the time window (after each pulse)

In this calculation, the nuclear response is considered during 2 natural lifetimes (300ns). This corresponds to three full periods, containing three synchrotron pulses. After each pulse, a time window is set. As a result, one has to sum the forward scattered intensity over three time windows.

Calculate the indices corresponding to the three time windows:

$$b1 := \text{floor}\left(N - \frac{t_b}{dt} + \frac{1}{2}\right)$$

indices corresponding to the first time window
(after the first pulse)

$$e1 := \text{floor}\left(N - \frac{t_e}{dt} + \frac{1}{2}\right)$$

$$b2 := \text{floor}\left(N - \frac{P + t_b}{dt} + \frac{1}{2}\right)$$

indices corresponding to the second time window
(after the second pulse)

$$e2 := \text{floor}\left(N - \frac{P + t_e}{dt} + \frac{1}{2}\right)$$

$$b3 := \text{floor}\left(N - \frac{2 \cdot P + t_b}{dt} + \frac{1}{2}\right)$$

indices corresponding to the third time window
(after the third pulse)

$$e3 := \text{floor}\left(N - \frac{2 \cdot P + t_e}{dt} + \frac{1}{2}\right)$$

time_slicing.mcd

4

MEDIUM RESPONSE FUNCTION

The resonant medium response function R_{tot} is calculated for two single-line absorbers, one of which is Doppler modulated.

$$R_{sam_i} = e^{i \cdot \frac{T_{sam}}{4} \left[\frac{1}{(\omega_i - \omega_0) \tau + \frac{\Gamma}{2}} \right]}$$

Response function for the sample

$$R_{ref_{i,j}} = e^{i \cdot \frac{T_{ref}}{4} \left[\frac{1}{(\omega_i - \omega_0 - \omega_{Dj}) \tau + \frac{\Gamma}{2}} \right]}$$

Response function for the reference absorber (Doppler modulated)

$$R_{tot_{i,j}} = (R_{ref_{i,j}} \cdot R_{sam_i})$$

Total response function for sample and reference

SCATTERED INTENSITY

Calculation of the nuclear forward scattered intensity as a function of the Doppler shift after time slicing has been performed.

For each Doppler shift m , the total medium response function R_{tot} which is expressed in frequency domain, is first transformed to an expression in time domain. Then, the corresponding intensity is summed over the three time windows. This yields a single value I_m giving the forward scattered intensity for that particular Doppler shift.

$$INT = \begin{cases} \text{for } m \in 0..M \\ A \leftarrow \text{icfft}(R_{tot}^{<m>}) \\ I_m \leftarrow \sum_{i=b1}^{e1} (|A_i|)^2 + \sum_{i=b2}^{e2} (|A_i|)^2 + \sum_{i=b3}^{e3} (|A_i|)^2 \\ I \end{cases}$$

time_slicing.mcd

5

RESULTS

effective thickness of the samples:

$$T_{\text{sam}} = 9$$

$$T_{\text{ref}} = 9$$

time window:

$$t_{b1} = 5.75 \cdot 10^{-8}$$

$$t_{e1} = 8.494 \cdot 10^{-8}$$

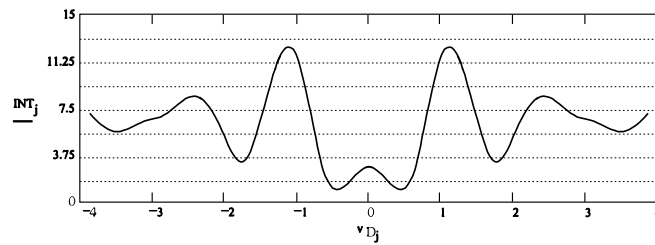
$$t_{b2} = 1.581 \cdot 10^{-7}$$

$$t_{e2} = 1.856 \cdot 10^{-7}$$

$$t_{b3} = 2.574 \cdot 10^{-7}$$

$$t_{e3} = 2.849 \cdot 10^{-7}$$

TISRS with time slicing as a function of the Doppler velocity of the reference sample:

**WRITING THE RESULTS TO AN OUTPUT FILE** $M^{<0>} = v_D$ x-axis values (Doppler velocities) $M^{<1>} = INT$ y-axis values (TISRS intensities)

WRITEPRN(out) = M write everything to output file "out.prn"

Appendix B

Calculations

B.1 Derivation of the Fundamental Equations

Starting from the set of equations (9.5) - (9.9) from chapter 9

$$(\omega - \omega_0 + i\epsilon) A(\omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}}{\hbar} C_{\vec{k}}(\omega) + \sum_{\vec{p}} \frac{V_{\vec{p}}}{\hbar} D_{\vec{p}}(\omega) + 1 \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} (\omega - \omega_0 + i\epsilon) B_m(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}}{\hbar} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} C_{\vec{k}}(\omega) \\ &+ \sum_{\vec{p}} \frac{V_{\vec{p}}}{\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_m/\hbar} D_{m,\vec{p}}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

$$(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon) C_{\vec{k}}(\omega) = \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} A(\omega) + \sum_m \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} B_m(\omega) \quad (\text{B.3})$$

$$(\omega - \omega_{\vec{p}} + i\epsilon) D_{\vec{p}}(\omega) = \frac{V_{\vec{p}}^*}{\hbar} A(\omega) \quad (\text{B.4})$$

$$(\omega - \omega_{\vec{p}} + i\epsilon) D_{m,\vec{p}}(\omega) = \frac{V_{\vec{p}}^*}{\hbar} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_m/\hbar} B_m(\omega) \quad (\text{B.5})$$

one can find an expression for $A(\omega)$, $B_m(\omega)$ and $C_{\vec{k}}(\omega)$.

Substituting Eq. (B.4) into Eq. (B.1) and Eq. (B.5) into Eq. (B.2) yields:

$$\begin{aligned}
 (\omega - \omega_0 + i\epsilon) A(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}}{\hbar} C_{\vec{k}}(\omega) + 1 \\
 &+ \sum_{\vec{p}} \frac{|V_{\vec{p}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{p}} + i\epsilon} A(\omega) \quad (\text{B.6})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\omega - \omega_0 + i\epsilon) B_m(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}}{\hbar} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_m} C_{\vec{k}}(\omega) \\
 &+ \sum_{\vec{p}} \frac{|V_{\vec{p}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{p}} + i\epsilon} B_m(\omega) \quad (\text{B.7})
 \end{aligned}$$

The sums over \vec{p} in the above expressions can be converted into an integral by the following substitution [116]:

$$\sum_{\vec{p}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \int \int d^3\vec{p}$$

In order to evaluate the integral, the factors $1/(\omega - \omega_{\vec{p}} + i\epsilon)$ should be expressed in terms of a principal part and a delta function, according to the relation [116]:

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) - i\pi\delta(x)$$

Then, one can write:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\vec{p}} \frac{|V_{\vec{p}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{p}} + i\epsilon} &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\hbar^2} \mathcal{P} \int \int \int d^3\vec{p} \frac{|V_{\vec{p}}|^2}{\omega - \omega_{\vec{p}}} \\
 &- \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{i\pi}{\hbar^2} \int \int \int d^3\vec{p} |V_{\vec{p}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{p}})
 \end{aligned}$$

The presence of the volume V in this expression and in others, resulting from the conversion of a sum into an integral in three dimensions, is only apparent because the matrix elements $|V_{\vec{p}}|^2$ and $|V_{\vec{k}}|^2$ are proportional to $1/V$ [133].

In the above equation, the principal value term on the right-hand side is real and will be denoted $\Delta\omega$. As will become clear, this term introduces a frequency shift which can be incorporated in ω_0 (see below). The second term on the right-hand side is imaginary. It can be assigned to the conversion electron width, defined by:

$$\gamma_C = \frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{\hbar} \int \int \int d^3\vec{p} |V_{\vec{p}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{p}})$$

As a result, Eq. (B.6) and Eq. (B.7) can be rewritten as

$$\left[\omega - (\omega_0 + \Delta\omega) + i\frac{\gamma_C}{2\hbar} \right] A(\omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}}{\hbar} C_{\vec{k}}(\omega) + 1 \quad (\text{B.8})$$

$$\left[\omega - (\omega_0 + \Delta\omega) + i\frac{\gamma_C}{2\hbar} \right] B_m(\omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{V_{\vec{k}}}{\hbar} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} C_{\vec{k}}(\omega) \quad (\text{B.9})$$

Here the limit $\epsilon \rightarrow 0$ has been taken already. From these equations it can be seen that $\Delta\omega$ introduces a frequency shift which can be incorporated into ω_0 . Therefore, in the following, this shift will not be written down explicitly.

Substituting now Eq. (B.3) into Eqs. (B.8) and (B.9):

$$\begin{aligned} (\omega - \omega_0 + i\frac{\gamma_C}{2\hbar}) A(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} A(\omega) \\ &+ \sum_{\vec{k}} \sum_m \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_m(\omega) + 1 \\ (\omega - \omega_0 + i\frac{\gamma_C}{2\hbar}) B_m(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} A(\omega) \\ &+ \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_m(\omega) \\ &+ \sum_{\vec{k}} \sum_{m' \neq m} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_m - \vec{r}_{m'})}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_{m'}(\omega) \end{aligned}$$

In the last expression the sum $\sum_{m'}$ has been split into a sum $\sum_{m' \neq m}$ and a term $m' = m$.

As before, one can convert the sum over \vec{k} into an integral and express $1/(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon)$ into a principal value and a delta function:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar^2} \mathcal{P} \int \int \int d^3\vec{k} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}}} \\ &- \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{i\pi}{\hbar^2} \int \int \int d^3\vec{k} |V_{\vec{k}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{k}}) \end{aligned}$$

The principal value term will again introduce a frequency shift which can be incorporated into ω_0 , while the second integral will give a width due to the interaction of the nuclei with the radiation field.

Using the definition for the radiative width:

$$\gamma_R = \frac{2\pi V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \int \int \int d^3\vec{k} |V_{\vec{k}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{k}})$$

the expressions for $A(\omega)$ and $B_m(\omega)$ become:

$$(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2\hbar}) A(\omega) = \sum_{\vec{k}} \sum_m \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_m(\omega) + 1 \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} (\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2\hbar}) B_m(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} A(\omega) \\ &+ \sum_{\vec{k}} \sum_{m' \neq m} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_m - \vec{r}_{m'})}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_{m'}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

where $\Gamma = \gamma_C + \gamma_R$ is the total line width of the excited state.

Eqs. (B.10) and (B.11) together with Eq. (B.3) are the fundamental equations describing nuclear emission holography. These equations correspond to Eqs. (9.10) - (9.12) from chapter 9.

B.2 Single Scattering Approximation

In the single scattering approximation, the set of fundamental equations becomes:

$$(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2\hbar}) A(\omega) = 1 \quad (\text{B.12})$$

$$(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2\hbar}) B_m(\omega) = \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} A(\omega) \quad (\text{B.13})$$

$$(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon) C_{\vec{k}}(\omega) = \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} A(\omega) + \sum_m \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} B_m(\omega) \quad (\text{B.14})$$

Eq. (B.12) yields an expression for $A(\omega)$:

$$A(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar} \quad (\text{B.15})$$

Substituting Eq. (B.15) into Eq. (B.13) gives:

$$(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2\hbar}) B_m(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \quad (\text{B.16})$$

The sum over \vec{k} on the right-hand side can be converted into an integral, as has been done before:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar^2} \int \int \int d^3\vec{k} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}$$

Choosing the z-axis parallel to \vec{r}_m :

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar^2} \int \int \int d^3\vec{k} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} e^{ikr_m \cos \theta} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{+\infty} dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} e^{ikr_m \cos \theta} \end{aligned}$$

Assuming that $|V_{\vec{k}}|^2$ does not depend on θ and φ (no polarization effects), one can write $|V_{\vec{k}}|^2 = |V(\omega_{\vec{k}})|^2$ and the integration over the spherical angles yields:

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |V_{\vec{k}}|^2 e^{ikr_m \cos \theta} = |V(\omega_{\vec{k}})|^2 \frac{e^{ikr_m} - e^{-ikr_m}}{ikr_m}$$

With $k = \omega_{\vec{k}}/c$, the full expression becomes:

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar^2 c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}^2 \frac{|V(\omega_{\vec{k}})|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \frac{e^{i\omega_{\vec{k}}r_m/c} - e^{-i\omega_{\vec{k}}r_m/c}}{i\omega_{\vec{k}}r_m/c} \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

The integral over $\omega_{\vec{k}}$ from 0 to $+\infty$ can be extended from $-\infty$ to $+\infty$ without changing the result, as can be understood from the following argument. The functions $e^{\pm i\omega_{\vec{k}}r_m/c}$ are oscillating functions of $\omega_{\vec{k}}$. For values of r_m in the order of a few Å, $\omega_{\vec{k}}r_m/c \gg 1$, except for small values of $\omega_{\vec{k}}$. But for small values of $\omega_{\vec{k}}$ the integrand goes to zero because:

$$\begin{aligned} \frac{e^{i\omega_{\vec{k}}r_m/c} - e^{-i\omega_{\vec{k}}r_m/c}}{i\omega_{\vec{k}}r_m/c} &= 2 \frac{\sin(\omega_{\vec{k}}r_m/c)}{\omega_{\vec{k}}r_m/c} \longrightarrow 0 \\ \frac{\omega_{\vec{k}}^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} &\longrightarrow 0 \end{aligned}$$

So, for small values of $\omega_{\vec{k}}$ the integrand does not contribute to the result. While for large values of $\omega_{\vec{k}}$, the functions $e^{\pm i\omega_{\vec{k}}r_m/c}$ oscillate rapidly, so that, again, there will be no contribution to the integral, unless the rapid oscillations are compensated by a very fast variation of the other factors. This occurs for $\omega_{\vec{k}} \approx \omega$. As a consequence, the range of $\omega_{\vec{k}}$ values that contribute to the integral is restricted to a small region $\Delta\omega_{\vec{k}}$ around ω . All values of $\omega_{\vec{k}}$ in the range $-\infty$ to 0 will not give any contribution to the integral. Therefore, extending the integral from $-\infty$ to $+\infty$ will not alter the result.

Then, Eq. (B.17) can be written as:

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \\ &= \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar^2 c^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \frac{|V(\omega_{\vec{k}})|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \frac{e^{i\omega_{\vec{k}}r_m/c}}{ir_m/c} \\ & - \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar^2 c^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \frac{|V(\omega_{\vec{k}})|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} \frac{e^{-i\omega_{\vec{k}}r_m/c}}{ir_m/c} \quad (\text{B.18}) \end{aligned}$$

These two integrals can be calculated using contour integration in the complex plane and applying the residue theorem.

For the first integral the contour has to be closed in the upper half plane and contains the pole $\omega_{\vec{k}} = \omega + i\epsilon$. One has:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \frac{|V(\omega_{\vec{k}})|^2}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} e^{i\omega_{\vec{k}}r_m/c} = -2\pi i |V(\omega)|^2 \omega e^{i\omega r_m/c}$$

The contour of the second integral has to be closed in the lower half plane and does not contain any pole, so that this integral is zero.

Eq. (B.18) becomes:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} = -\frac{V}{2\pi\hbar^2 c^3} |V(\omega)|^2 \omega \frac{e^{i\omega r_m/c}}{r_m/c}$$

Using the expression for γ_R :

$$\begin{aligned}
\gamma_R &= \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar} \int \int \int d^3 \vec{k} |V_{\vec{k}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{k}}) \\
&= \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar c^3} \int_0^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi |V_{\vec{k}}|^2 \delta(\omega - \omega_{\vec{k}}) \\
&= \frac{V}{\pi \hbar c^3} \omega^2 |V(\omega)|^2
\end{aligned}$$

Eq. (B.18) finally yields

$$\sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} = -\frac{\gamma_R}{2\hbar} \frac{e^{i\omega r_m/c}}{\omega r_m/c} \quad (\text{B.19})$$

Substituting this result into Eq. (B.16)

$$(\omega - \omega_0 + i\frac{\Gamma}{2\hbar}) B_m(\omega) = -\frac{\gamma_R}{2\hbar} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar} \frac{e^{i\omega r_m/c}}{\omega r_m/c}$$

and solving for $B_m(\omega)$ gives:

$$B_m(\omega) = -\frac{\gamma_R}{2\hbar} \frac{1}{(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)^2} \frac{e^{i\omega r_m/c}}{\omega r_m/c}$$

This expression can be substituted into Eq. (B.14) together with Eq. (B.15):

$$\begin{aligned}
(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon) C_{\vec{k}}(\omega) &= \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar} \\
&- \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{\gamma_R}{2\hbar} \frac{1}{(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)^2} \sum_m \frac{e^{i\omega r_m/c}}{\omega r_m/c} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}
\end{aligned}$$

Or, solving for $C_{\vec{k}}(\omega)$

$$\begin{aligned}
 C_{\vec{k}}(\omega) &= \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar} \frac{1}{(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon)} \\
 &- \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{\gamma_R}{2\hbar} \frac{1}{(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)^2} \frac{1}{(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon)} \sum_m \frac{e^{i\omega r_m/c}}{\omega r_m/c} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_m}
 \end{aligned} \tag{B.20}$$

which is exactly the same as Eq. (9.15) from chapter 9.

B.3 Solution in Time Domain

When Eq. (B.20) is Fourier transformed to time domain, it reads:

$$\begin{aligned}
c_{\vec{k}}(t) &= -\frac{1}{2\pi i} \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{i(\omega_{\vec{k}}-\omega)t}}{(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon)} \\
&\quad + \frac{1}{2\pi i} \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\gamma_R}{2\hbar} \sum_m e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} \frac{e^{i\omega r_m/c}}{\omega r_m/c} \\
&\quad \times \frac{e^{i(\omega_{\vec{k}}-\omega)t}}{(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)^2 (\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon)}
\end{aligned}$$

The first term on the right-hand side of this equation will be denoted $c_{\vec{k}}^{(0)}(t)$ and can be calculated via contour integration in the complex plane. The contour should be closed in the lower half plane and contains two poles $\omega = \omega_0 - i\Gamma/2\hbar$ and $\omega = \omega_{\vec{k}} - i\epsilon$, both of first order. As a result,

$$c_{\vec{k}}^{(0)}(t) = \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{1}{\omega_{\vec{k}} - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar} \left[1 - e^{i(\omega_{\vec{k}} - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)t} \right] \quad (\text{B.21})$$

The second term on the right-hand side will be denoted $c_{\vec{k}}^{(1)}(t)$ and can also be calculated via contour integration in the complex plane. It has to be noticed that $\omega = 0$ is not a pole because of the presence of $\gamma_R \sim \omega^2 |V(\omega)|^2$. E.g., for a dipole transition $\gamma_R \sim \omega^3$ [134]. Because $\omega_{\vec{k}}$ will always be close to the nuclear resonance frequency ω_0 , the factor $1/\omega$ can be written as $1/\omega_0$ in all residues. Therefore, the factor γ_R/ω can be put in front of the integral and replaced by γ_R/ω_0 :

$$\begin{aligned}
c_{\vec{k}}^{(1)}(t) &= \frac{1}{2\pi i} \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{\gamma_R}{2\hbar} \sum_m \frac{1}{\omega_0 r_m/c} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{e^{i\omega r_m/c} e^{i(\omega_{\vec{k}}-\omega)t}}{(\omega - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)^2 (\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon)}
\end{aligned}$$

In order to evaluate the integral, two cases should be considered.

First of all, for $t < r_m/c$, the contour has to be closed in the upper half plane where no poles are present. As a result, $c_{\vec{k}}^{(1)}(t < r_m/c) = 0$. This is nothing but the principle of causality which states that there cannot be any radiation coming from a scattering nucleus before this nucleus is excited by radiation coming from the source. This result gives an a posteriori justification for the fact that ϵ should be positive. If ϵ would be negative, the contour in the upper half plane would contain a pole and the principle of causality would be violated.

For $t > r_m/c$ the contour has to be closed in the lower half plane where there are two poles: a pole of first order $\omega = \omega_{\vec{k}} - i\epsilon$ and a pole of second order $\omega = \omega_0 - i\Gamma/2\hbar$. Using the residue theorem the expression for $c_{\vec{k}}^{(1)}(t)$ becomes:

$$\begin{aligned}
c_{\vec{k}}^{(1)}(t) &= -\frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} \frac{\gamma_R}{2\hbar} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)^2} \sum_m e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} \frac{e^{i\omega_{\vec{k}}r_m/c}}{\omega_0 r_m/c} \\
&\times \left\{ 1 + i(\omega_{\vec{k}} - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)(t - r_m/c) e^{i(\omega_{\vec{k}} - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)(t - r_m/c)} \right. \\
&\quad \left. - e^{i(\omega_{\vec{k}} - \omega_0 + i\Gamma/2\hbar)(t - r_m/c)} \right\} \tag{B.22}
\end{aligned}$$

Eqs. (B.21) and (B.22) correspond to the expressions (9.16) and (9.17) from chapter 9.

B.4 Recorded Intensity

The intensity of detected radiation in the direction \vec{k} for long times ($t \rightarrow \infty$) is given by:

$$I_{\vec{k}}(\infty) = I_{\vec{k}}^{00}(\infty) + I_{\vec{k}}^{01}(\infty) + I_{\vec{k}}^{11}(\infty)$$

with

$$I_{\vec{k}}^{00}(\infty) = \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} \quad (\text{B.23})$$

$$I_{\vec{k}}^{01}(\infty) = -\text{Re} \left\{ \frac{|V_{\vec{k}}|^2 \gamma_R}{\hbar^3} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} \frac{1}{\omega_{\vec{k}} - \omega_0 - i\Gamma/2\hbar} \right. \\ \left. \times \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_m} \frac{e^{-i\omega_{\vec{k}} r_m/c}}{\omega_0 r_m/c} \right\} \quad (\text{B.24})$$

$$I_{\vec{k}}^{11}(\infty) = \frac{|V_{\vec{k}}|^2 \gamma_R^2}{4\hbar^4} \frac{1}{[(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2]^2} \\ \times \sum_m \sum_{m'} \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_{m'})}}{\omega_0 r_m/c} \frac{e^{-i\omega_{\vec{k}}(r_m - r_{m'})/c}}{\omega_0 r_{m'}/c} \quad (\text{B.25})$$

Since a detector, positioned in a certain direction, does not register a single energy, these expressions have to be summed over all magnitudes of \vec{k} . The sum over k can be converted into a one-dimensional integral according to:

$$\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_0^{+\infty} dk = \frac{L}{2\pi c} \int_0^{+\infty} d\omega_{\vec{k}}$$

where L is a normalizing length.

The summation of Eq. (B.23) yields:

$$I^{00}(\hat{k}) = \sum_k \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} \\ = \frac{L}{2\pi c} \int_0^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2}$$

The factor $1/[(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2]$ in the integral will only give a contribution in a very small region around ω_0 where $|V_{\vec{k}}|^2$ can be treated as a constant. Therefore, $|V_{\vec{k}}|^2$ can be replaced by $|V(\omega_0)|^2$ and put in front of the integral. As a result:

$$\begin{aligned} I^{00}(\hat{k}) &= \frac{|V(\omega_0)|^2}{\hbar^2} \frac{L}{2\pi c} \int_0^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} \\ &= \frac{|V(\omega_0)|^2 L}{\Gamma \hbar c} \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

The summation of Eq. (B.24) will now be calculated:

$$\begin{aligned} I^{01}(\hat{k}) &= -Re \sum_{\vec{k}} \left\{ \frac{|V_{\vec{k}}|^2 \gamma_R}{\hbar^3} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} \frac{1}{\omega_{\vec{k}} - \omega_0 - i\Gamma/2\hbar} \right. \\ &\quad \left. \times \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_m} \frac{e^{-i\omega_{\vec{k}} r_m/c}}{\omega_0 r_m/c} \right\} \\ &= -Re \left\{ \frac{L}{2\pi c} \frac{1}{\hbar^3 \omega_0/c} \sum_m \frac{1}{r_m} \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^{+\infty} d\omega_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2 \gamma_R e^{i\omega_{\vec{k}} r_m/c} (\hat{k} \cdot \hat{r}_m - 1)}{[(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2] (\omega_{\vec{k}} - \omega_0 - i\Gamma/2\hbar)} \right\} \end{aligned}$$

Since the integral will only contribute in the vicinity of ω_0 , the lower limit can be extended to $-\infty$ without changing the result. Then the integral can be calculated using contour integration in the complex plane. The contour should be closed in the lower half plane and contains the pole $\omega_{\vec{k}} = \omega_0 - i\Gamma/2\hbar$. $|V_{\vec{k}}|^2$ and γ_R can again be put in front of the integral and replaced by their value in ω_0 . The result is:

$$\begin{aligned} I^{01}(\hat{k}) &= -\frac{|V(\omega_0)|^2 L}{\Gamma \hbar c} \frac{\gamma_R}{\Gamma} \sum_m \frac{\sin[(1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_m) \omega_0 r_m/c]}{\omega_0 r_m/c} \\ &\quad \times e^{-\Gamma r_m (1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_m)/2\hbar c} \end{aligned}$$

The exponential factor appearing in this equation is equal to one for values of r_m in the order of Å. Taking Γ in the order of neV, $\Gamma r_m (1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_m)/2\hbar c \approx 10^{-12}$.

So, finally, the expression for $I^{01}(\hat{k})$ becomes:

$$I^{01}(\hat{k}) = -\frac{|V(\omega_0)|^2 L}{\Gamma \hbar c} \frac{\gamma_R}{\Gamma} \sum_m \frac{\sin[(1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_m) \omega_0 r_m / c]}{\omega_0 r_m / c} \quad (\text{B.27})$$

The summation of Eq. (B.25) can be calculated in a similar way, yielding:

$$I^{11}(\hat{k}) = \frac{1}{2} \frac{|V(\omega_0)|^2 L}{\Gamma \hbar c} \frac{\gamma_R^2}{\Gamma^2} \times \sum_m \sum_{m'} \frac{\cos \left[\left((1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_m) r_m - (1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_{m'}) r_{m'} \right) \omega_0 / c \right]}{\omega_0 r_m / c \quad \omega_0 r_{m'} / c} \quad (\text{B.28})$$

Eqs. (B.26), (B.27) and (B.28) correspond to Eqs (9.18) - (9.20) of chapter 9.

Appendix C

Nederlandse Samenvatting

Coherentie speelt een belangrijke rol in de interactie van γ -straling met kernen. De centrale idee is dat één enkel foton, wanneer het interageert met een ensemble van kernen, verschillende kwantummechanische wegen kan volgen. Dit betekent dat er zich verschillende scenarios kunnen voordoen. Het foton kan door het ensemble gaan zonder enige interactie, het kan verstrooid worden door een kern, of door een andere kern, of het kan ook meervoudig verstrooid worden, enz. Alle mogelijke kwantumpaden kunnen met elkaar interfereren.

Twee soorten coherentie kunnen onderscheiden worden. Enerzijds is er de ruimtelijke coherentie tussen verschillende kernen in een meetmonster: een foton kan interageren met elke kern in het ensemble, hetgeen aanleiding geeft tot interferenties tussen verschillende ruimtelijk gescheiden wegen. Anderzijds, indien de γ -straling een breed spectrum heeft, is er ook de energie-coherentie binnen één enkele kern. Dit is de interferentie tussen overgangsamplituden naar verschillende kernniveaus.

Beide vormen van coherentie spelen een grote rol in nucleair resonante voorwaartse verstrooiing van synchrotronstraling. In het eerste deel van deze thesis wordt een nieuwe meettechniek voor dergelijke experimenten uitgewerkt.

Een illustratie van ruimtelijke coherentie met γ -straling kan ook gevonden worden in nucleaire emissieholografie, wat het onderwerp is van het tweede deel van de thesis.

I. Tijdsgeïntegreerde Synchrotronstralings-spectroscopie

Synchrotronstraling heeft een aantal unieke eigenschappen die het gebruik ervan zeer aantrekkelijk maakt voor de studie van hyperfijninteracties. De belangrijkste kenmerken zijn een gepulste tijdstructuur, lineaire polarizatie van de fotonen, een breedband spectrum en een zeer intense, goed gefocuste bundel. Een groot voordeel van synchrotronstraling vergeleken met andere γ -bronnen is de mogelijkheid om een bepaalde energie te selecteren. Dit is belangrijk voor nucleair resonante verstrooiingsexperimenten omdat men niet meer beperkt is tot de studie van kernen waarvoor een γ -bron beschikbaar is.

TijdsDifferentiële SynchrotronStralingsSpectroscopie (TDSSS)

Nucleair resonante verstrooiingsexperimenten met synchrotronstraling worden meestal uitgevoerd in tijdsdomein waarbij het nucleair verval bestudeerd wordt als functie van de tijd na excitatie door de synchrotronpuls.

Een tijdsdifferentieel spectrum vertoont in het algemeen drie kenmerken. Het tijdsverloop van resonante verstrooiing door een nucleair ensemble is essentieel een exponentieel verval. Voor een dik meetmonster zal de verval-snelheid toenemen ten gevolge van meervoudige verstrooiing in het monster. Bovendien zal het spectrum gemoduleerd worden door traag-variërende dynamische zwevingen die eveneens het gevolg zijn van de meervoudige verstrooiing in het meetmonster. Tenslotte zullen bij een hyperfijnopgesplitst materiaal ook snelle kwantumzwevingen te zien zijn. Figuur C.1 toont een typisch TDSSS spectrum. De drie kenmerken zijn duidelijk herkenbaar. Merk op dat de ordinaatschaal logaritmisch is. De onderbroken lijn duidt het zuiver exponentieel verval aan van één enkele kern.

Verscheidene experimenten hebben aangetoond dat TDSSS een zeer precieze bepaling van de hyperfijninteractieparameters toelaat en bijgevolg een zeer geschikte hyperfijninteractietechniek is [17]. Niettemin heeft TDSSS ook één belangrijke tekortkoming. Wanneer men de tijdsrespons van een nucleair ensemble wil volgen, moet het nucleair verval kunnen opgemeten worden gedurende één of twee levensduren van het aangeslagen niveau. Dit impliceert dat het tijdsinterval tussen opeenvolgende synchrotronpulsen van dezelfde grootteorde moeten zijn. In het geval van de 14.413 keV overgang in ^{57}Fe is de levensduur 141 ns. De pulsen moeten dus gespreid zijn met 100-200 ns tussentijd. Gegeven dat derde generatie synchrotrons de mogelijkheid hebben om een puls te genereren elke 2.8 ns, betekent deze

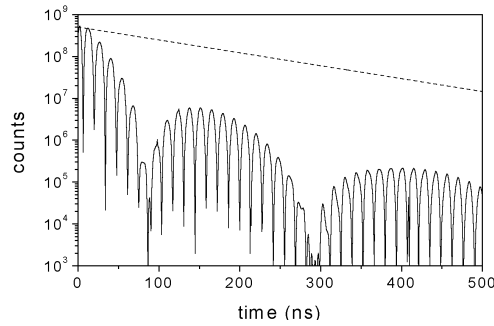


Figure C.1: Simulatie van een TDSSS spectrum voor een ^{57}Fe absorber met effectieve dikte $T_{\text{eff}} = 24$, onderhevig aan een magnetisch hyperfijnveld $B = 33$ T.

speciale vulling voor TDSSS-metingen een zeer sterk gereduceerde intensiteit, wat nadelig is voor gebruikers aan andere bundellijnen. Bovendien is de methode beperkt tot de studie van kernniveaus met een relatief korte levensduur. Isomere toestanden met een levensduur in de orde van enkele μs (e.g. ^{181}Ta : $\tau = 8.7 \mu\text{s}$) kunnen niet behoorlijk bestudeerd worden omwille van de eindige omtrek van de opslagring (periode $< 4 \mu\text{s}$).

Om dit probleem op te lossen, werd een nieuwe tijdsgeïntegreerde meetmethode ontwikkeld voor nucleair resonante verstrooiingsexperimenten met synchrotronstraling. Deze techniek geeft dezelfde informatie over de hyperfijninteractieparameters in het meetmonster, maar heft de beperking op met betrekking tot de levensduur van de aangeslagen kernniveaus.

Tijdsgeïntegreerde SynchrotronstralingsSpectroscopie (TISSS)

De bedoeling van TISSS is om de beperkingen die samengaan met de tijdsdifferentiële methode op te heffen door metingen uit te voeren in energiedomein. Aangezien de inkomende synchrotronstraling een breed spectrum heeft, is meten in functie van de energie van de invallende straling uitgesloten. Bij TISSS worden tijdsgeïntegreerde metingen uitgevoerd waarbij een tweede monster als referentiemonster gebruikt wordt. Dit meetmonster wordt Doppler gemoduleerd. Hierdoor zullen er kruisingen optreden tussen de overgangsfrekventies in het meetmonster en die in het referentiemonster. Wanneer de voorwaarts verstrooide intensiteit opgemeten wordt in functie van de Doppler snelheid van het referentiemonster, bekomt men een spectrum in energiedomein waarbij de frekwentiekruisingen te zien zijn

als resonanties. Het spectrum vertoont veel gelijkenis met een klassiek Mössbauer spectrum. Figuur C.2 geeft een voorbeeld van een TISSS spectrum. Uit de posities, de breedte en de amplitude van de resonantielijnen kan hyperfijn- en vaste-stofinformatie afgeleid worden.

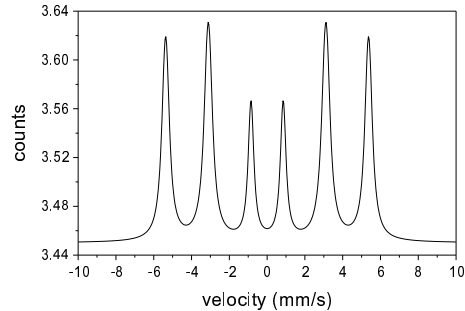


Figure C.2: Simulatie van een TISSS spectrum voor een ^{57}Fe absorber met effectieve dikte $T_{\text{eff}} = 20$ in combinatie met een referentieabsorber met effectieve dikte $T_{\text{eff}} = 4$. Het ^{57}Fe monster is onderhevig aan een magnetisch hyperfijnveld $B = 33$ T.

Aangezien de metingen nu kunnen uitgevoerd worden in energiedomein, vereist de methode geen speciale tijdsvulling van de synchrotron-opslagring.

Experimentele resultaten

Er werden twee TISSS metingen uitgevoerd aan de 'Advanced Photon Source' (APS) in Chicago, U.S.A. In een eerste experiment kon geen volledige tijdsintegratie doorgevoerd worden omdat de invallende synchrotronbundel, zelfs na monochromatizatie, te intens was en de detector saturerde gedurende tientallen ns. Bijgevolg moest de detector afgeschermd worden gedurende een aanzienlijke tijd (20-50 ns). De bekomen spectra vertonen hierdoor een sterk oscillerend gedrag dat voorkomt uit de onvolledige tijdsintegratie.

In een tweede experiment kon dit vermeden worden door een andere meetopstelling te gebruiken: een polarizator- en analizatorkristal werden opgenomen in de meetopstelling om de niet-resonante straling weg te filteren. In figuur C.3 wordt de opstelling schematisch weergegeven.

De undulator is afgesteld op de 14.413 keV kernovergang in ^{57}Fe . Met behulp van een Si(1 1 1) dubbel-kristal monochromator wordt een energieband van 3.5 eV geselecteerd rond resonantie. Een gekruiste polarizator

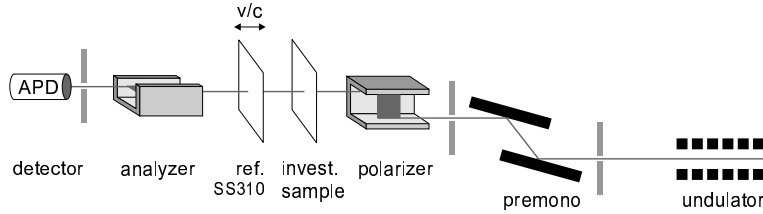


Figure C.3: Experimentele opstelling voor TISSS met gekruiste polarizator en analyzer. De voortplantingsrichting van de bundel is van rechts naar links.

en analyzer voor 14.413 keV worden gebruikt om de intensiteit van niet-resonante straling te reduceren. Ze bestaan uit twee Si(8 4 0) kristallen die 90° gedraaid zijn ten opzicht van elkaar. Het eerste kristal, de polarizator, zal enkel lineair σ -gepolariseerd licht doorlaten. Het tweede kristal, de analyzer is gedraaid over 90° en laat enkel π -gepolariseerd licht door. Dus enkel straling waarvoor de polarizatioestand gewijzigd is van σ naar π kan de detector bereiken. Dit kan gebeuren door nucleair resonante verstrooiing op een hyperfijnopgesplitst meetmonster. De niet-resonante straling interageert niet met het meetmonster en blijft σ -gepolariseerd. Deze straling wordt gereduceerd door de analyzer met een factor 6×10^{-7} .

Tussen de polarizator en de analyzer worden twee monsters geplaatst op kamertemperatuur. Het eerste, het meetmonster, is een magnetisch opgesplitste Fe folie met een effectieve dikte $T_{\text{eff}} = 21$, onderworpen aan een uitwendig magnetisch veld van 0.27 T gericht loodrecht op de voortplantingsrichting van de bundel en onder een hoek van 45° ten opzichte van de lineaire polarizatie-richting van de fotonen. Deze oriëntatie van het magneetveld geeft maximale transmissie door de polarizator/analyzer-opstelling. Het tweede monster is een absorber van roestvrij staal met een effectieve dikte $T_{\text{eff}} = 18$. Dit monster doet dienst als referentiemonster en is gemonteerd op een Mössbauer-aandrijving.

Het opgemeten TISSS spectrum is weergegeven in figuur C.4. Het spectrum vertoont zes resonantielijnen overeenkomstig de overgangen met een verandering van angulair moment $\Delta = 0, \pm 1$. De afstand tussen de resonantielijnen en hun relatieve intensiteit geeft informatie over de hyperfijn-interactie, terwijl de breedte van de lijnen verbonden is met de effectieve dikte van de monsters.

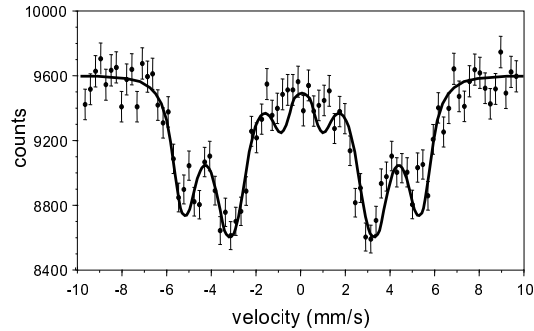


Figure C.4: TISSS spectrum van een magnetisch opgesplitst Fe monster ($T_{\text{eff}} = 21$) en een roestvrijstalen referentiemonster ($T_{\text{eff}} = 18$) in aanwezigheid van een gekruiste polarizator en analyzer. De volle lijn is het berekend theoretisch spectrum.

Bespreking

TISSS en TDSSS geven dezelfde hyperfijn- en vaste-stofinformatie. De tijdsdifferentiële methode is meer geschikt voor de studie van tijdsafhankelijke fenomenen of wanneer de interesse vooral uitgaat naar de dynamika van het systeem. Anderzijds, als men hyperfijninteracties wil bestuderen, is TISSS een interessante techniek. Het heeft als voordeel ten opzichte van TDSSS dat de bekomen spectra veel eenvoudiger zijn en makkelijker te interpreteren. Dit is een belangrijk voordeel, zeker als meetmonsters met veel hyperfijncomponenten bestudeerd worden. Het TISSS spectrum is een superpositie van spectra horende bij één enkele component. Terwijl in het TDSSS spectrum alle componenten interfereren. Elk paar overgangsfrequenties genereert een quantumzweving. Het aantal quantumzwevingen kan zeer groot worden wat resulteert in een zeer ingewikkeld spectrum. Uitgebreide computeranalyses zijn dan nodig om de hyperfijninformatie te bekomen.

Door een gekruiste polarizator en analyzer op te nemen in de meetopstelling kan men de intense directe bundel wegfilteren. Maar, een nadeel van deze opstelling is dat enkel meetmonsters kunnen bestudeerd worden met een eenduidig bepaalde oriëntatie voor het hyperfijnveld. Dit is een kleine beperking voor magnetische systemen, maar in het geval van een elektrische quadrupoolinteractie kunnen enkel één-kristallijne meetmonsters onderzocht worden. Bovendien is de studie van een niet-opgesplitst monster uitgesloten, daar verstrooiing op een dergelijk monster geen polarizatie-wijziging kan teweeg brengen.

Een ander nadeel van de polarizator/analyzator opstelling voor TISSS is de lage telsnelheid. De resonante telsnelheid was slechts 40 fotonen/s. Dit is twee grootteordes kleiner dan in een opstelling waar de energieband van de inkomende straling beperkt wordt door een hoge-resolutie-monochromator. Deze factor is belangrijk wanneer de resonante intensiteit eerder laag is. Meettijden van enkele minuten (zonder polarizator/analyzator) worden al snel enkele uren (met polarizator/analyzator). Wanneer echter de intensiteit van de synchrotron kan verhoogd worden met een factor 100 of 1000 zal het verschil in meettijden herleid worden tot seconden versus minuten. Beide leveren een spectrum met voldoende statistiek in een zeer korte tijd. Hoewel het relatief verschil in meettijd nog steeds twee tot drie grootteordes bedraagt, is dit verschil niet meer relevant. De polarizator/analyzator opstelling wordt dan zeer interessant voor TISSS metingen.

Besluit

In dit deel van de thesis werd een nieuwe tijdsgeïntegreerde meettechniek ontwikkeld voor nucleair resonante voorwaartse verstrooiing van synchrotronstraling. Twee TISSS-experimenten werden uitgevoerd en tonen de haalbaarheid en het nut van dergelijke metingen aan. Wanneer een gekruiste polarizator en analyzator opgenomen worden in de meetopstelling kan de intensiteit van de rechtstreekse bundel voldoende gereduceerd worden zodat TISSS-experimenten kunnen uitgevoerd worden zonder tijdsvenster. Het belangrijkste voordeel van TISSS is dat deze methode minder afhankelijk is van de tijdsinstelling van de synchrotronmachine. TISSS kan een nuttige techniek zijn om hyperfijninteracties te bestuderen, vooral in gevallen waar noch TDSSS, noch Mössbauer spectroscopie mogelijk zijn. Typische voorbeelden zijn ^{181}Ta en ^{63}Ge .

De studie van ^{181}Ta met TDSSS is uitermate moeilijk omwille van de lange levensduur van de aangeslagen toestand ($\tau = 8.73 \mu\text{s}$). Om een tijdspectrum op te meten, zoals gedaan werd in Ref. [22], moet de synchrotronopslagring werken in "single-bunch" mode. Maar zelfs dan is het interval tussen opeenvolgende pulsen slechts 780 ns [22], wat niet eens één tiende is van de natuurlijke levensduur van het aangeslagen kernniveau. Bijgevolg moet men meetmonsters gebruiken met een grote effectieve dikte zodanig dat de effectieve levensduur sterk verkort is ten gevolge van meervoudige verstrooiing in het monster. Dan kan het nucleair verval opgemeten worden binnen het beschikbare tijdsvenster. Voor dit isotoop is TISSS een goed alternatief. De synchrotronmachine kan dan werken in een efficiëntere mode (een interval tussen pulsen van ± 20 ns). Bovendien geeft de methode betrouwbare hyperfijninformatie.

Een ander voorbeeld is ^{73}Ge . Dit isotoop heeft ook een lange levensduur van het aangeslagen niveau ($\tau = 4.26 \mu\text{s}$) hetgeen TDSSS-metingen sterk bemoeilijkt. Anderzijds zijn gewone Mössbauer metingen niet mogelijk omdat er geen bron beschikbaar is. Opnieuw kan TISSS een oplossing bieden.

De meest interessante toepassing van TISSS kan echter gevonden worden in de studie van zeer kleine hyperfijnopsplitsingen van kernniveaus met een lange levensduur. Wanneer de hyperfijnopsplitsing kleiner is dan 0.1 neV, wordt de periode van de overeenkomstige quantumzweving langer dan 2 μ s. De tijdsvensters beschikbaar aan huidige synchrotron-opslagringen zijn te kort om een dergelijke trage quantumzweving te volgen. Bijgevolg is de meeste hyperfijninformatie niet toegankelijk voor TDSSS. Met de tijdsgeïntegreerde methode kunnen deze hyperfijnopsplitsingen wel opgemeten worden, op voorwaarde dat de lijnbreedte klein is zodat de resonatielijnen in het spectrum geresolveerd zijn.

TISSS is ook een zeer nuttige techniek om complementaire informatie te geven bij een TDSSS experiment. Bijvoorbeeld, wanneer tijdsafhankelijke fenomenen bestudeerd worden, is het voordelig om over een energiespectrum te beschikken daar dit de analyse van ingewikkelde tijdspectra aanzienlijk kan vergemakkelijken.

Tenslotte, aangezien TISSS geen specifieke instelling van de synchrotron-opslagring vereist, is het in principe mogelijk om metingen uit te voeren in parasitaire bundel. Dit zou het aantal nucleair resonante verstrooiingsexperimenten per jaar aanzienlijk kunnen verhogen.

De nieuwe tijdsgeïntegreerde methode voor nucleair resonante voorwaartse verstrooiing van synchrotronstraling vormt een belangrijke bijdrage tot het domein van de hyperfijninteractietechnieken en zal vooral in de toekomst meer een meer competitief worden wanneer de intensiteit aan synchrotronstralingsmachines verhoogd wordt.

II. Nucleaire Emissieholografie

Het idee om γ -straling te gebruiken voor holografie met atomaire resolutie werd voor het eerst aangebracht door Tegze en Faigel [110, 111]. Het schema is zeer eenvoudig: straling, uitgezonden door een radioactieve kern, kan rechtstreeks naar een detector gaan, of het kan eerst resonant verstrooid worden door de buurkernen alvorens de detector te bereiken. De interferentie tussen deze twee processen geeft aanleiding tot het holografisch beeld. Wanneer de intensiteit opgemeten wordt als functie van de uitzendrichting kan men informatie bekomen over de relatieve posities van de buurkernen. Deze techniek noemt men nucleaire emissieholografie.

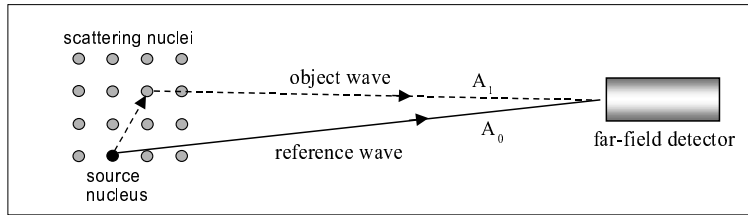


Figure C.5: Schema voor nucleaire emissieholografie.

Veronderstel dat op tijdstip $t = 0$ een kern op positie $\vec{r} = 0$ aangeslagen is. Deze zogenaamde bronkern is omgeven door resonante kernen, de verstrooiingskernen. Na enige tijd zal de bronkern deexciteren waarbij een γ -kwantum wordt uitgezonden. Het foton kan twee kwantumpaden volgen: het kan een verafgelegen detector rechtstreeks bereiken (dit is de holografische referentiegolf), of het kan eerst resonant verstrooid worden op de omliggende kernen (de objectgolf). Dit is geïllustreerd in Figuur C.5. Beide wegen hebben een zekere waarschijnlijkheidsamplitude, respectievelijk A_0 en A_1 . De intensiteit van uitgezonden straling in een welbepaalde richting \hat{k} wordt dan gegeven door

$$\begin{aligned} I_{\hat{k}} &= |A_0 + A_1|^2 \\ &= |A_0|^2 + A_0^* A_1 + A_0 A_1^* + |A_1|^2 \end{aligned}$$

De eerste term, $|A_0|^2$, geeft de waarschijnlijkheid dat een foton uitgezonden is in de richting \hat{k} , enkel ten gevolge van de bronkern. De laatste term, $|A_1|^2$, is de waarschijnlijkheid dat een foton is uitgezonden in de richting \hat{k} , ten gevolge van de aanwezigheid van de verstrooiingskernen die het foton, afkomstig van de bron, verstrooid hebben. Voor kleine meetmonsters met een beperkt aantal resonante kernen is deze term verwaarloosbaar. De twee interferentietermen, $A_0^* A_1 + A_0 A_1^*$, geven aanleiding tot fluctuaties in de

uitgezonden straling als functie van de detectierichting. Deze fluctuaties bevatten de holografische informatie.

Men definieert een contrastfunctie als

$$F(\hat{k}) = \frac{A_0^* A_1 + A_0 A_1^*}{|A_0|^2}$$

Deze functie werd analytisch berekend in Ref. [118], gebruikmakend van een kwantummechanische berekening in frekwentieruimte. Hierbij werd de benadering van enkelvoudige verstrooiing toegepast [76, 49]. In de volgende sectie zal de kwantummechanische berekening geschetst worden die leidt tot een formule voor de contrastfunctie wanneer geen hyperfijninteracties beschouwd worden. Later wordt deze contrastfunctie verder besproken.

Kwantummechanische Theorie

Voor de kwantummechanische beschrijving van nucleaire emissieholografie werd een algemene methode toegepast die beschreven staat in Refs. [116, 117, 63]. Deze methode gebruikt een kwantummechanische berekening in frekwentieruimte om zo een stelsel van gekoppelde lineaire vergelijkingen te bekomen.

Als beginvoorwaarde worden alle verstrooiingskernen in de grondtoestand verondersteld. Enkel een bronkern, op positie $\vec{r} = 0$, is aangeslagen. Om de analyse eenvoudig te houden, wordt ook enkel één aangeslagen niveau beschouwd (één resonantie-energie $\hbar\omega_0$). Indien nodig, kan dit veralgemeend worden naar meerdere resonantie-energieën. Men definiëert de volgende waarschijnlijkheidsamplituden:

- $A(\omega)$: de bronkern is aangeslagen,
alle verstrooiingskernen bevinden zich in de grondtoestand,
er zijn geen fotonen
en geen conversie-elektronen
- $B_m(\omega)$: de m^{de} verstrooiingskern op positie \vec{r}_m is aangeslagen,
alle anderen kernen zijn in de grondtoestand,
er zijn geen fotonen
en geen conversie-elektronen
- $C_{\vec{k}}(\omega)$: alle kernen zijn in de grondtoestand,
een foton met golfvector \vec{k} is aanwezig,
er zijn geen conversie-elektronen

Men kan aantonen [118] dat de gekoppelde vergelijkingen die deze amplituden verbinden, gegeven worden door:

$$\begin{aligned}
(\omega - \omega_0 + i \frac{\Gamma}{2\hbar}) A(\omega) &= 1 + \sum_m \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_m(\omega) \\
(\omega - \omega_0 + i \frac{\Gamma}{2\hbar}) B_m(\omega) &= \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_m}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} A(\omega) \\
&\quad + \sum_{m' \neq m} \sum_{\vec{k}} \frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_m - \vec{r}_{m'})}}{\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon} B_{m'}(\omega) \\
(\omega - \omega_{\vec{k}} + i\epsilon) C_{\vec{k}}(\omega) &= \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} A(\omega) + \sum_m \frac{V_{\vec{k}}^*}{\hbar} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_m} B_m(\omega)
\end{aligned}$$

met Γ de totale lijnbreedte van het aangeslagen niveau. $V_{\vec{k}}$ en $V_{\vec{k}}^*$ zijn de matrixelementen die respectievelijk de absorptie en emissie van een foton met golfvector \vec{k} beschrijven. De termen $+i\epsilon$ zijn ingevoerd om causaliteit te garanderen [116].

Dit stelsel van gekoppelde vergelijkingen kan enkel analytisch opgelost worden wanneer de volgende benadering wordt doorgevoerd:

1. De waarschijnlijkheid dat een bronkern opnieuw aangeslagen wordt door straling, afkomstig van een verstrooiingskern, is verwaarloosbaar. Daarom wordt dit proces uitgesloten. Dit is verantwoord voor interatomaire afstanden $> 1 \text{ \AA}$, hetgeen altijd het geval is.
2. Enkel enkelvoudige verstrooiing door de verstrooiingskernen wordt in rekening gebracht. Dit is een verantwoorde benadering voor dunne meetmonsters.

In appendix B wordt een oplossing berekend voor $C_{\vec{k}}(\omega)$ en voor $c_{\vec{k}}(t)$, hetgeen de Fourier getransformeerde is van $C_{\vec{k}}(\omega)$. $c_{\vec{k}}(t)$ is de waarschijnlijkheidsamplitude dat er een foton met golfvector \vec{k} aanwezig is op tijdstip t . De waarschijnlijkheid voor grote tijden ($t \rightarrow \infty$) dat een foton uitgezonden is in de richting \vec{k} wordt gegeven door

$$I_{\vec{k}}(\infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} |c_{\vec{k}}(t)|^2$$

Deze uitdrukking werd eveneens berekend in appendix B. Het resultaat is

$$\begin{aligned}
I_{\vec{k}}(\infty) &= \underbrace{\frac{|V_{\vec{k}}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2}}_{I_{\vec{k}}^{00}(\infty)} \\
&+ \underbrace{\frac{|V_{\vec{k}}|^2 \gamma_R}{4\hbar^4} \frac{1}{[(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2]^2} \sum_m \sum_{m'} \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_m - \vec{r}_{m'})} e^{-i\omega_{\vec{k}}(r_m - r_{m'})/c}}{\omega_0 r_m / c \omega_0 r_{m'} / c}}_{I_{\vec{k}}^{11}(\infty)} \\
&- \underbrace{Re \left\{ \frac{|V_{\vec{k}}|^2 \gamma_R}{\hbar^3} \frac{1}{(\omega_{\vec{k}} - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} \frac{1}{\omega_{\vec{k}} - \omega_0 - i\Gamma/2\hbar} \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_m} \frac{e^{-i\omega_{\vec{k}} r_m / c}}{\omega_0 r_m / c} \right\}}_{I_{\vec{k}}^{01}(\infty)}
\end{aligned}$$

waarbij γ_R de radiatieve lijnbreedte is. Bovenstaande uitdrukking kan opgedeeld worden in drie delen: de eerste term, $I_{\vec{k}}^{00}(\infty)$, beschrijft de waarschijnlijkheid dat een foton met golfvector \vec{k} uitgezonden is, enkel ten gevolge van de bronkern. De tweede term, $I_{\vec{k}}^{11}(\infty)$, is de waarschijnlijkheid dat zo'n foton is uitgezonden, ten gevolge van de aanwezigheid van de verstrooiingskernen die het foton van de bronkern verstrooid hebben. De laatste term, $I_{\vec{k}}^{01}(\infty)$, is een interferentieterm tussen de amplitude ten gevolge van de bronkern en alle amplituden ten gevolge van de verstrooiingskernen. De twee belangrijkste termen zijn de rechtstreekse term, $I_{\vec{k}}^{00}(\infty)$, en de interferentieterm, $I_{\vec{k}}^{01}(\infty)$. Voor een klein aantal verstrooiingskernen zal $I_{\vec{k}}^{11}(\infty)$ een factor 10^4 kleiner zijn dan $I_{\vec{k}}^{00}(\infty)$ en ongeveer 10^2 keer kleiner dan $I_{\vec{k}}^{01}(\infty)$. Bijgevolg kan deze term verwaarloosd worden. De uitdrukking voor $I_{\vec{k}}(\infty)$ toont duidelijk dat de telsnelheid afhankelijk is van de detectierichting, dit omwille van de factoren $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_m}$.

De contrastfunctie $F(\vec{k})$ wordt gedefinieerd als de verhouding van de interferentieterm, $I_{\vec{k}}^{01}(\infty)$, tot de directe term, $I_{\vec{k}}^{00}(\infty)$. De detector die zich in een welbepaalde richting bevindt, zal echter niet één enkele energie registreren. Bijgevolg moeten de interferentieterm en de directe term geïntegreerd worden over alle energiewaarden. Wanneer men dit doet, zal de nieuwe contrastfunctie $F(\hat{k})$ enkel nog afhangen van de richting, weergegeven door de eenheidsvector $\hat{k} = \vec{k} / |\vec{k}|$. Het resultaat is

$$F(\hat{k}) = -\frac{\gamma_R}{\Gamma} \sum_m \frac{\sin \left[(1 - \hat{k} \cdot \hat{r}_m) \omega_0 r_m / c \right]}{\omega_0 r_m / c} \quad (\text{C.1})$$

Contrastfunctie

De contrastfunctie $F(\hat{k})$ in Vgl. (C.1) is duidelijk afhankelijk van de richting \hat{k} met betrekking tot de posities \vec{r}_m van de verstrooiingskernen. Meten in functie van de richting zal bijgevolg informatie geven over de posities van de kernen met betrekking tot de bronkern.

Elke resonante kern levert een bijdrage tot de contrastfunctie. Uit Vgl. (C.1) volgt dat hoe verder een verstrooiingskern van de bronkern zit, hoe kleiner de amplitude van de oscillaties en hoe groter de oscillatiefrequentie zullen zijn. Deze twee eigenschappen worden geïllustreerd in Figuur C.6

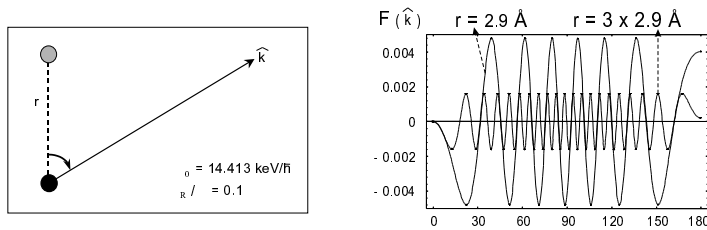


Figure C.6: Simulaties van de contrastfunctie voor twee ^{57}Fe kernen: De verstrooiingskern (grijs) bevindt zich op twee verschillende afstanden van de bronkern (zwart). Links: de geometrie. Rechts: de contrastfunctie voor twee internucleaire afstanden.

Figuur C.7 toont de gesimuleerde contrastfuncties voor een bcc rooster van ^{57}Fe . De bronkern (zwart) is een ^{57}Fe kern in de oorsprong van het coördinatensysteem. De intensiteit is weergegeven als functie van de bolcoördinaten θ en φ zoals gedefinieerd in Figuur C.7 (links). Rechts is de contrastfunctie weergegeven, die werd bekomen wanneer enkel verstrooiingskernen binnen een straal van twee keer de roosterparameter ($a_0 = 2.866 \text{ \AA}$) werden in rekening gebracht. Dit betekent dat enkel bijdragen van de 64 dichtste burens is beschouwd.

Het is vermeldenswaardig dat een experimenteel holografisch beeld er niet zo eenvoudig zal uitzien als dat van Figuur C.7. Wanneer de straal van verstrooiingskernen toeneemt tot $10 a_0$ (8392 buurkernen) wordt de contrastfunctie gegeven door Figuur C.8 (links). Dit beeld is veel gedetailleerder (snellere oscillaties), te wijten aan de bijdragen van kernen die verderaf liggen van de bronkern. De snelle oscillaties van verafgelegen kernen verhullen de informatie over de directe omgeving van de bron. Ze kunnen echter weggefilterd worden met behulp van een laag-doorlaatfilter, wat neerkomt op een convolutie van het holografisch beeld met een 2-dimensionale Gaussische functie. Het resultaat is weergegeven in Figuur C.8 (rechts).

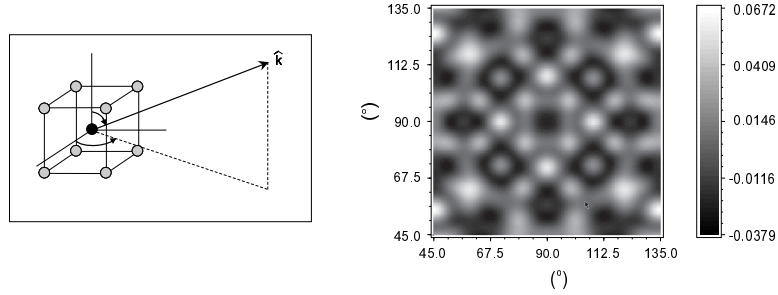


Figure C.7: Nucleaire emissieholografie voor een bcc rooster van ^{57}Fe . Links: de geometrie. θ en ϕ definiëren de positie van de detector. Rechts: Simulatie van de contrastfunctie voor de 14.413 keV straling, rekening houdend met de bijdragen van de 64 dichtste buurkernen.

Dit beeld bevat enkel nog informatie over de directe omgeving van de bronkern.

Bovenstaande voorbeelden tonen aan dat nucleaire emissieholografie met γ -straling experimenteel kan gerealiseerd worden. In het geval van ^{57}Fe kernen is het contrast (het verschil tussen de maximale en minimale waarde van $F(\hat{k})$) van de orde van 1%. Experimenten kunnen uitgevoerd worden met behulp van een positiegevoelige detector. De hoekresolutie moet minstens 1° zijn, hetgeen gemakkelijk haalbaar is. De preparatie van het meetmonster vraagt meer aandacht. Nucleaire emissieholografie kan enkel toegepast worden indien aangerijkte één-kristallijne monsters voorhanden zijn en indien de bronkernen in het monster kunnen geïntroduceerd worden zonder de kristallijne structuur te verbreken. Het isotoop dat zich het beste leent voor nucleaire emissieholografie is hoogstwaarschijnlijk ^{57}Fe . Ionenimplantatie van ^{57}Co in een dunne epitaxiale ^{57}Fe laag lijkt aangewezen.

De reconstructie, tenslotte, van het 3-dimensionale reële beeld kan numerisch gebeuren met behulp van gekende technieken, zoals beschreven in Ref. [100].

Besluit

De mogelijkheid om nucleaire emissieholografie uit te voeren, is met simulaties aangetoond. De methode maakt het mogelijk om kernen in een meetmonster te visualiseren. Op het eerste zicht lijkt het een beperking dat enkel resonante kernen kunnen gezien worden. Maar eigenlijk is dit net een groot voordeel wanneer men enkel geïnteresseerd is in deze deelgroep van kernen.

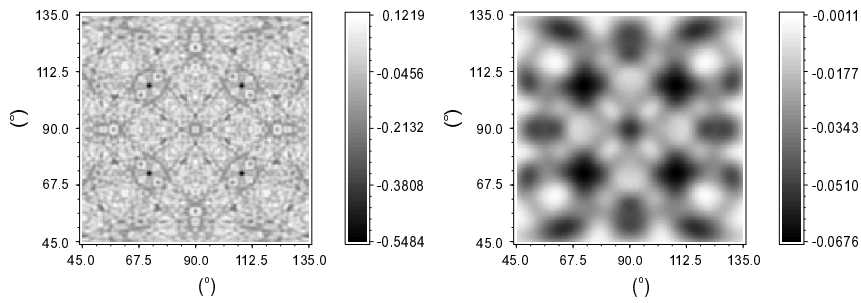


Figure C.8: Simulatie van de contrastfunctie voor een bcc rooster van ^{57}Fe , rekening houdend met de bijdragen van de 8392 dichtste burens van de bronkern. Links: voor filtering. Rechts: na filtering met een 2D-Gaussische functie.

In een recent experiment [125, 115] werd nucleaire holografie op een iets verschillende wijze benaderd: een foton van een uitwendige bron kan ofwel rechtstreeks resonant geabsorbeerd worden door een kern in een kristal, of indirect, nadat het resonant verstrooid is op naburige kernen. Dit schema wordt nucleaire absorptieholografie genoemd. Een nadeel van deze techniek is dat enkel vrij grote ensembles van resonante kernen kunnen bestudeerd worden, omwille van de kleine nucleaire absorptiedoorsnede. Met behulp van nucleaire emissieholografie zou het mogelijk zijn om ook kleine meetmonsters te bestuderen, zoals epitaxiale precipitaten, kleine clusters of heel dunne lagen.

