

## Оглавление

К определению вероятности эффекта Мессбауэра.....	1
Колебания атомов в кристалле.....	1
Основы дебаевской модели. Фононы.....	1
Подсчёт числа колебаний.....	2
Излучение электромагнитных волн колеблющимся атомом.....	3
Частотная модуляция излучения колеблющегося атома.....	3
Фактор Дебая-Воллера.....	4

## К определению вероятности эффекта Мессбауэра.

Вероятность эффекта Мессбауэра (излучения или поглощения гамма-кванта без отдачи) является одной из главных сложностей при описании эффекта Мессбауэра в курсе физики 5 семестра. Строгое описание этого процесса требует использования формализма фононной теории, изучаемой в 6 семестре.

Однако, основные концепции могут быть сформулированы «полустрого», что в принципе позволяет осмысленный вывод формулы для вероятности эффекта Мессбауэра на уровне знаний студентов 5 семестра.

### *Колебания атомов в кристалле.*

#### **Основы дебаевской модели. Фононы.**

Известно, что в твёрдых телах распространяются звуковые волны. Будем считать (и это составляет так называемое *дебаевское приближение*), что все возможные колебания атомов могут быть представлены в виде суперпозиции звуковых волн со спектром  $\Omega = sK$ , где  $\Omega$  – частота,  $s$  – скорость звука (которую мы считаем изотропной и одинаковой для всех поляризаций), а  $K$  — модуль волнового вектора. Длина волны упругих колебаний в кристалле не может быть меньше характерного масштаба межатомного расстояния: так как при упругих колебаниях колеблются атомы, расположенные в узлах решётки, то периодичность существенно меньшая межатомного расстояния для упругих волн просто физически бессмысленно, в межатомном пространстве нечему колебаться.

Это означает, что мы должны ограничить доступные волновые вектора распространяющихся звуковых волн интервалом от 0 (длинноволновые колебания) до некоторого  $K_D \sim \frac{1}{a}$ , называемого дебаевским волновым вектором<sup>1</sup>. Соответствующую частоту  $\omega_D = sK_D$  ( $s$  – скорость звука) называют дебаевской частотой, а температуру  $\Theta_D = \hbar\omega/k_B$  – температурой Дебая. Важно отметить, что типичный порядок температуры Дебая  $\Theta_D \sim \hbar s/(k_B a) \sim 100\text{ K}$ , а её максимальные значения в кристаллах почти никогда не превышают 1000 К, дебаевская же частота  $\omega_D \sim \frac{s}{a} \sim 10^{13}\text{ 1/сек}$  соответствует по частоте электромагнитным волнам инфракрасной части спектра.

В кристалле возможно три независимых типа колебаний: две моды поперечных колебаний,

<sup>1</sup> Более строгое определение модели Дебая можно найти, например в книге Киттеля «Введение в физику твёрдого тела».

когда смещения атомов перпендикулярны направлению распространения звуковой волны, и одна продольная мода, когда направления смещения атомов параллельны направлению распространения волны.

Наконец, заметим, что абсолютно аналогично связи между электромагнитными волнами и фотонами, можно «проквантовать» звуковые волны, поставив им в соответствие некоторые частицы, называемые *фононами*. Фононы могут распространяться только в кристалле, у них есть закон дисперсии  $\varepsilon(\vec{K})$ , в рамках дебаевской модели мы считаем его изотропным и линейным  $\varepsilon = \hbar \Omega = \hbar s K$ . Энергия фонона для звуковых волн с частотой  $\Omega$  есть  $\hbar \Omega$ . Тогда энергия, запасённая в упругих колебаниях на частоте  $\Omega$  и данном волновом векторе  $\vec{K}$  есть  $\hbar \Omega (n_{\vec{K}} + \frac{1}{2})$ , где  $n_{\vec{K}}$  — число фононов. Слагаемое  $\frac{1}{2}$ , как и в задаче о гармоническом осцилляторе, связано с нулевыми колебаниями. В то же время, эта энергия пропорциональна квадрату амплитуды смещения атомов от положения равновесия в упругой волне.

Фононы являются бозе-частицами (это следует из их определения: в одном квантовом состоянии может находиться сколько угодно частиц, что соответствует тому, что амплитуда звуковой волны может быть произвольна). Поэтому в состоянии теплового равновесия среднее число фононов определяется распределением Бозе-Эйнштейна  $n_{\vec{K}} = \frac{1}{e^{\varepsilon(\vec{K})/(k_B T)} - 1}$ .

## Подсчёт числа колебаний.

Возьмём кристалл конечных размеров в форме куба  $L \times L \times L$ . Наложим на него граничные условия, требующие, чтобы при колебаниях атомов в кристалле атомы на поверхности оставались неподвижны (закреплённые граничные условия). В таком случае, все возможные колебания атомов — это стоячие волны<sup>2</sup>. В трёхмерном случае условие формирования такой стоячей волны (см. например задачу электродинамики о резонансных частотах объёмного резонатора)  $\frac{\Omega^2}{s^2} = n_x^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + n_y^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 + n_z^2 \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$ , где  $n_{x,y,z}$  — положительные целые числа.

Интерес представляет вопрос о том, какое число возможных стоячих волн  $dN$  будет иметь частоты в интервале  $d\Omega$  вблизи данного  $\Omega$ . Для ответа на этот вопрос заметим, что уравнение  $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \left(\frac{L}{\pi s}\right)^2 \Omega^2$  есть уравнение сферы радиуса  $\left(\frac{L}{\pi s}\right) \Omega$  в некоторой системе координат. В этом базисе на одно колебание приходится объём равный 1 (каждое колебание характеризуется тройкой чисел  $n_{x,y,z}$ , их отображение в этой системе координат даст кубическую сетку с шагом 1). Тогда при не слишком малых частотах (на практике — всегда) искомое число состояний есть просто объём  $\frac{1}{8}$  (так как  $n_{x,y,z} > 0$ ) сферического слоя  $dN = \frac{1}{8} 4\pi \left(\frac{L}{\pi s}\right)^2 \Omega^2 d\left(\frac{L}{\pi s}\right) \Omega$ . Откуда  $\frac{dN}{d\Omega} = \frac{V \Omega^2}{2\pi^2 s^3}$ .

<sup>2</sup> В физике твёрдого тела при рассмотрении объёмных свойств системы используется тот факт, что окончательный ответ не зависит от выбора граничных условий. Поэтому обычно используются наиболее математически удобные для данной задачи закрепленные либо периодические граничные условия. Периодические условия используются чаще, однако, ориентируясь на студентов 5 семестра, кажется более наглядным использовать закрепленные граничные условия и использовать представление о собственных колебаниях кристалла как о системе стоячих волн. Из-за этого отличия в промежуточных вычислениях, включающих в себя суммирование по волновым векторам, могут отличаться множители от аналогичных вычислений в других источниках, однако эти отличия скомпенсируются к окончательному (не зависящему от волнового вектора фонона) ответу.

## Излучение электромагнитных волн колеблющимся атомом.

### Частотная модуляция излучения колеблющегося атома.

В мессбауэровской спектроскопии используются очень узкие линии гамма-переходов с большими (для ядерной физики) временами жизни (например для  $^{119}\text{Sn}$ , используемого в лабораторной работе, время жизни «рабочего» возбуждённого уровня с энергией возбуждения 23.8 кэВ составляет порядка  $10^{-8}$  сек). Время жизни уровня есть то время, в течение которого возбуждённый атом излучает электромагнитную волну.

Это время оказывается много больше обратной дебаевской частоты то есть за время излучения атом много раз совершит колебания вокруг своего положения равновесия. Но тогда в силу эффекта Доплера частота излучаемой волны окажется промодулирована на частоте колебаний.

Формализуем теперь эти рассуждения. Пусть в нашем кристалле возбуждено какое-то из колебаний на частоте  $\Omega = s|\vec{k}|$  с некоторой поляризацией. В этой стоячей волне смещения атомов могут быть представлены в виде  $\vec{U}(\vec{r}, t) = U_{\vec{k}}^{(0)} \sin(\vec{K} \cdot \vec{R}) \cos(\Omega t) = \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r}) \cos(\Omega t)$ . Скорости движения атомов  $\vec{v}(\vec{r}, t) = -\Omega \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r}) \sin(\Omega t)$ . Если мы наблюдаем за электромагнитными волнами, излучёнными в некотором направлении — то есть за электромагнитными волнами с волновым вектором  $\vec{k}$ , то для вычисления доплеровского сдвига важна проекция скорости на направление  $\vec{k}$ , откуда для связанной с движением модуляции частоты имеем  $\delta\omega = \frac{1}{c} \frac{(\vec{k} \cdot \vec{v}_{\vec{k}})}{|\vec{k}|} \omega = -\Omega (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r})) \sin \Omega t$  (мы воспользовались тем, что  $ck = \omega$ ).

Таким образом, частота излучаемой волны будет гармонически модулирована с амплитудой  $\omega_m = \Omega (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}})$ . Эта задача хорошо известна в радиотехнике и спектр частотно-модулированного сигнала известен: возникают гармоники вблизи основной частоты, отстоящие вправо и влево на кратные от частоты модуляции  $\Omega$ . Амплитуды гармоник выражаются через функции Бесселя:

$$A(t) = A_0 \left\{ J_0(M) \cos \omega t + \sum_1^{\infty} J_n(M) [\cos(\omega + n\Omega)t - \cos(\omega - n\Omega)t] \right\}$$

где параметр  $M = \frac{\omega_m}{\Omega}$  называется глубиной модуляции (modulation index). Будем считать, что амплитуды колебаний малы (что во всяком случае можно делать при низких температурах), тогда можно считать  $M \ll 1$  и воспользоваться разложением для функции Бесселя. Нас интересует несмещённая компонента, тогда напряжённость электрического поля в излучаемой волне на несмещённой компоненте  $\propto J_0(M) \approx 1 - \left(\frac{M}{2}\right)^2$ , а интенсивность несмещённой компоненты с той же точностью  $\propto 1 - \frac{1}{2}M^2$ .

Отсюда легко получить квантовое описание процесса излучения. Возникновение гармоник означает, что в кристалле есть вероятность, что при излучении фотона часть энергии гамма-перехода передастся и фононам (колебаниям решётки) либо, наоборот, несколько квантов энергии колебаний решётки добавятся к энергии излучаемого фотона. Интенсивности спектральных компонент в классической трактовке излучения превратятся в вероятности процессов без излучения фонона (несмещённая компонента), с излучением или поглощением

одного, двух, трёх и так далее фононов (смещённые компоненты).

### Фактор Дебая-Воллера.

Интересующая нас в целях описания эффекта Мессбауэра вероятность излучения несмещённого гамма-кванта с волновым вектором  $\vec{k}$  при наличии в кристалле фонона с волновым вектором  $\vec{K}$  есть  $f_{\vec{k}} = 1 - \frac{1}{2} M^2 = 1 - \frac{1}{2} (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r}))^2$ .

Остаётся аккуратно просуммировать эти вклады по всем имеющимся фононам. По правилу вычисления сложной вероятности окончательная вероятность излучения несмещённого кванта  $f = \prod_{\vec{k}} f_{\vec{k}} = \prod_{\vec{k}} \left( 1 - \frac{1}{2} (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r}))^2 \right)$ , где перемножаются все допустимые в дебаевской модели вклады. Считая по-прежнему, что поправки малы (мы это уже использовали при разложении функции Бесселя), логарифмированием<sup>3</sup> можно получить более удобную форму записи  $f = e^{-2W}$ , где фактор Дебая-Воллера<sup>4</sup>  $W = \frac{1}{4} \sum_{\vec{k}} (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r}))^2$

Для вычисления этой суммы, во-первых, отметим что в силу изотропности задачи усреднение по углам между вектором поляризации колебаний и волновым вектором излучённого фотона можно выполнить независимо:  $\langle (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r}))^2 \rangle_{\phi} = \frac{1}{3} k^2 |\vec{U}_{\vec{k}}(\vec{r})|^2$ . Далее необходимо вспомнить, что у нас имеется три возможных поляризации, что скомпенсирует множитель  $\frac{1}{3}$ , и усреднить по координате квадрат локальной амплитуды стоячей волны, что даст суммарно  $\frac{1}{2} |\vec{U}_{\vec{k}}^{(0)}|^2 k^2$ .

Квадрат амплитуды стоячей волны можно связать с числом фононов. Если  $m$  — масса атома решётки, то запасённая в волне энергия (максимальная кинетическая<sup>5</sup> энергия) есть  $\frac{N}{4} m \Omega_{\vec{k}}^2 |\vec{U}_{\vec{k}}^{(0)}|^2 = \hbar \Omega_{\vec{k}} (n_{\vec{k}} + \frac{1}{2})$ , где  $N$  — число атомов в кристалле. То есть  $\frac{1}{2} |\vec{U}_{\vec{k}}^{(0)}|^2 = \frac{2\hbar}{N m \Omega_{\vec{k}}} (n_{\vec{k}} + \frac{1}{2})$

Сводя всё вместе и оставляя только суммирование по фононным модам одной поляризации, имеем:

$$W = \frac{k^2}{4} \sum_{\vec{k}} \frac{2\hbar}{N m \Omega_{\vec{k}}} (n_{\vec{k}} + \frac{1}{2})$$

Пользуясь изотропностью задачи удобно от суммирования по волновым векторам фононов  $\vec{K}$  перейти к интегрированию по частоте, пользуясь полученным ранее результатом для  $\frac{dN}{d\Omega}$ :

$$3 \quad \ln f = \sum_{\vec{k}} \ln \left( 1 - \frac{1}{2} (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}})^2 \right) \approx \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} (\vec{k} \cdot \vec{U}_{\vec{k}})^2$$

4 Точнее, полученный нами результат совпадает с фактором Дебая-Воллера, вводимым при рассмотрении дифракции рентгеновских волн на кристалле, в котором имеются колебания атомов.

5 Вычислить кинетическую энергию в данном случае проще, так как для вычисления потенциальной энергии нужно рассматривать разности смещений на соседних узлах, а для вычисления кинетической — просто амплитуды скорости.

$$\begin{aligned}
 W &= \frac{k^2}{4} \int_0^{\Omega_D} \frac{2\hbar}{Nm\Omega} \left(n_\Omega + \frac{1}{2}\right) \frac{V\Omega^2}{2\pi^2 s^3} d\Omega = \frac{\hbar k^2 V}{4mN} \frac{1}{\pi^2 s^3} \int_0^{\Omega_D} \left(n_\Omega + \frac{1}{2}\right) \Omega d\Omega = \\
 &= \frac{k^2}{4m\hbar N} \frac{V}{\pi^2 s^3} (k_B T)^2 \int_0^{\Theta_D/T} \left(\frac{1}{e^\xi - 1} + \frac{1}{2}\right) \xi d\xi
 \end{aligned}$$

Используя принятое определение температуры Дебая (включающее численный множитель по сравнению с нашей оценкой) для трёхмерного кристалла (см., например, книгу Киттеля)

$$\Theta_D = \frac{\hbar s}{k_B} \sqrt[3]{6\pi^2 \frac{N}{V}}, \text{ можно несколько упростить запись}$$

$$W = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{k_B} \frac{T^2}{\Theta_D^3} \int_0^{\Theta_D/T} \left(\frac{1}{e^\xi - 1} + \frac{1}{2}\right) \xi d\xi$$

Высокотемпературный предел полученного выражения

$$W(T \gg \Theta_D) = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 k^2 T}{m k_B \Theta_D^2},$$

низкотемпературный предел  $W(T \ll \Theta_D) = \frac{3}{8} \frac{\hbar^2 k^2}{m k_B \Theta_D}.$

Видно, что для увеличения вероятности эффекта Мессбауэра нужно использовать не слишком энергичные гамма-кванты и желательно помещать ядра излучателя или поглотителя в кристалл с возможно более высокой температурой Дебая.