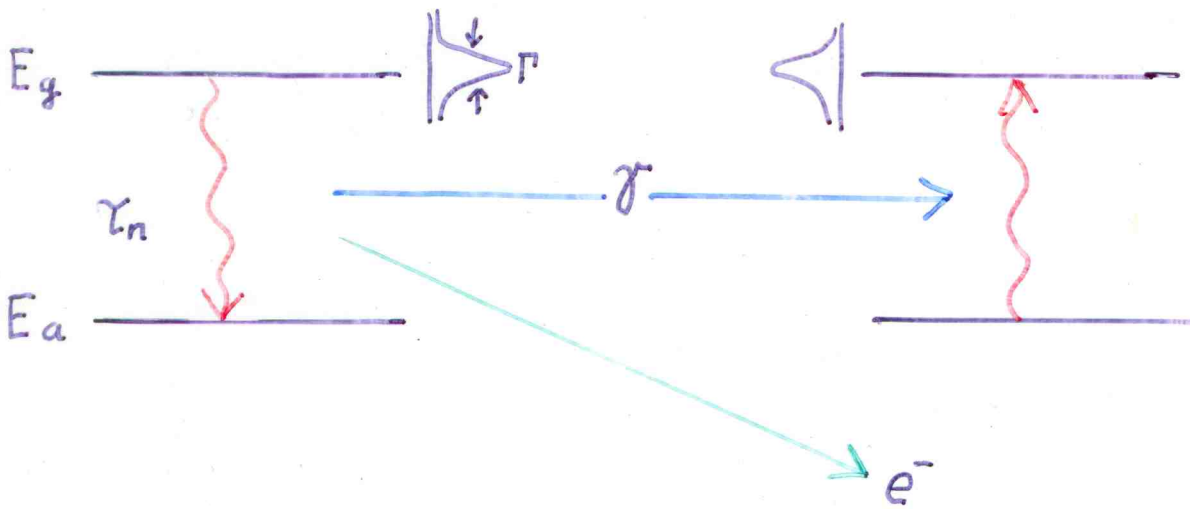


# Mössbauer-effektus



közepes élettartam:  $\tau_n$   
 energia bizonytalanság:  $\Gamma$

$$\Gamma \tau_n = \hbar$$

$$I(\omega) = \frac{I_0}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2}$$

$^{57}\text{Fe}$ :  $\hbar\omega_0 = 14.4 \text{ keV}$   
 $\tau_n = 1.41 \cdot 10^{-7} \text{ s}$   
 $\Gamma = 4.7 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$   
 $\Gamma/\hbar\omega_0 = 3.3 \cdot 10^{-13}$

## Visszalökődés és Doppler-eltolódás

A mag energiája az emisszió előtt:

$$E_{\text{előtte}} = E_g + \frac{p^2}{2M}$$

$$\gamma \rightarrow \hbar \underline{k}$$

Emisszió után:

$$E_{\text{utána}} = E_a + \frac{(p - \hbar \underline{k})^2}{2M}$$

A  $\gamma$ -energia:

$$\hbar\omega = E_{\text{előtte}} - E_{\text{utána}} = \underbrace{E_g - E_a}_{\omega_0} + \hbar k v - \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2M}}_{R \text{ (visszalökési energia)}}$$

↓  
Doppler-eltolódás  
 $\lesssim 10^{-2} \text{ eV}$

$$R = \frac{E_r^2}{2Mc^2}$$

$$R (^{52}\text{Fe}) = 2 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

A Debye-Waller-faktor (Lamb-Mössbauer-faktor)

szilárdtestben lévő mag:  $R$  → atomok elmozdulása (lehetetlen)  
→ rácsrezgések gerjesztése  
→ az egész szilárdtest visszalökése

↓  
Mössbauer-vonal

$$f = \frac{\text{visszalökés-mentes } \gamma\text{-emissziók száma}}{\text{összes } \gamma\text{-emissziók száma}}$$

Klasszikus magyarázat:



$$\rightarrow E(t) = E_0 e^{-i[\omega_0 t + \underbrace{kx(t)}_{a \sin \Omega t}]}$$

$$E(t) = E_0 e^{-i[\omega_0 t + ka \sin \Omega t]} =$$

$$= E_0 e^{-i\omega_0 t} \left( 1 - ika \sin \Omega t - \frac{k^2 a^2}{2} \sin^2 \Omega t + \dots \right) =$$

$$\sin^n \Omega t = \frac{1}{(2i)^n} (e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t})^n$$

$$= E_0 e^{-i\omega_0 t} \left[ 1 - \frac{ka}{2} (e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}) + \right. \\ \left. + \frac{k^2 a^2}{8} (e^{i2\Omega t} - 2 + e^{-i2\Omega t}) + \dots \right] =$$

$$= \underbrace{\left( 1 - \frac{k^2 a^2}{4} + \dots \right)}_{A(\omega_0)} e^{-i\omega_0 t} +$$

$$+ \underbrace{\left( -\frac{ka}{2} + \dots \right)}_{A(\omega_0 \pm \Omega)} \left[ e^{-i(\omega_0 - \Omega)t} - e^{-i(\omega_0 + \Omega)t} \right] +$$

$$+ \underbrace{\left( \frac{k^2 a^2}{8} + \dots \right)}_{A(\omega_0 \pm 2\Omega)} \left[ e^{-i(\omega_0 - 2\Omega)t} - e^{-i(\omega_0 + 2\Omega)t} \right] + \dots$$

$$\boxed{f = |A(\omega_0)|^2 = \left( 1 - \frac{k^2 a^2}{4} + \dots \right)^2 = e^{-\frac{k^2 a^2}{2}} = e^{-k^2 \langle x^2 \rangle}}$$

$\downarrow$   
 $\langle x^2 \rangle$

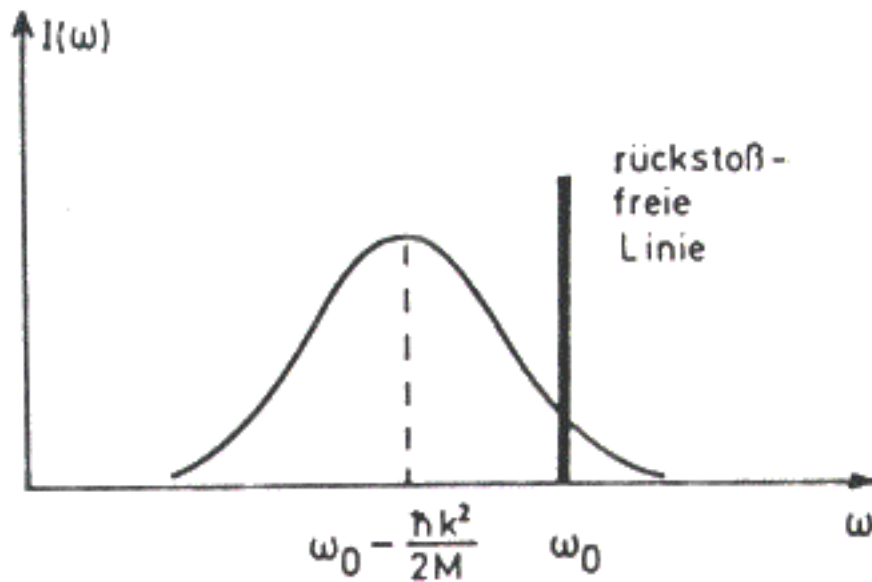


Abb. 4.3:

Emissionsspektrum eines einatomigen Gases im thermischen Gleichgewicht. Das Emissionsspektrum ist gegenüber der sehr schmalen rückstoßfreien Linie verschoben und auf Grund der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung der Gasatome verbreitert

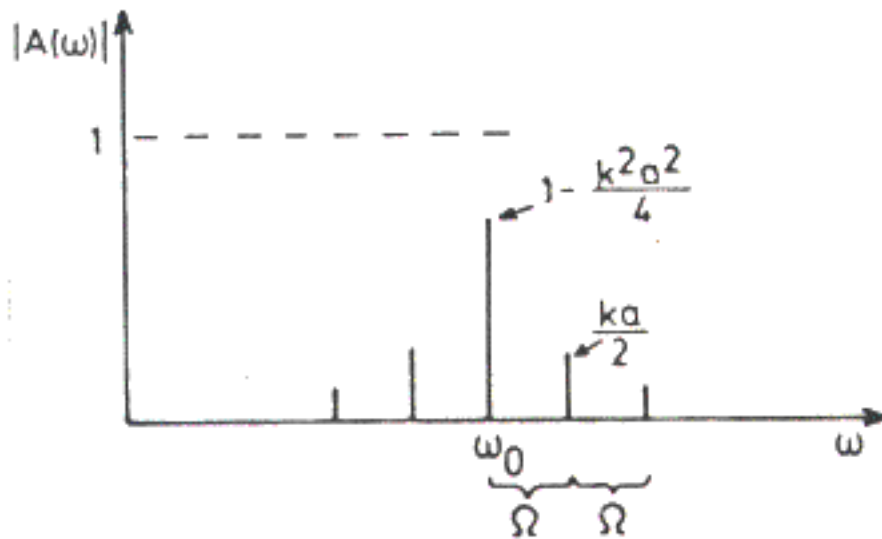


Abb. 4.4:

Haupt- und Nebenlinien  
eines klassischen Mo-  
dells für den Debye-  
Waller-Faktor beim  
Möbbaueffekt

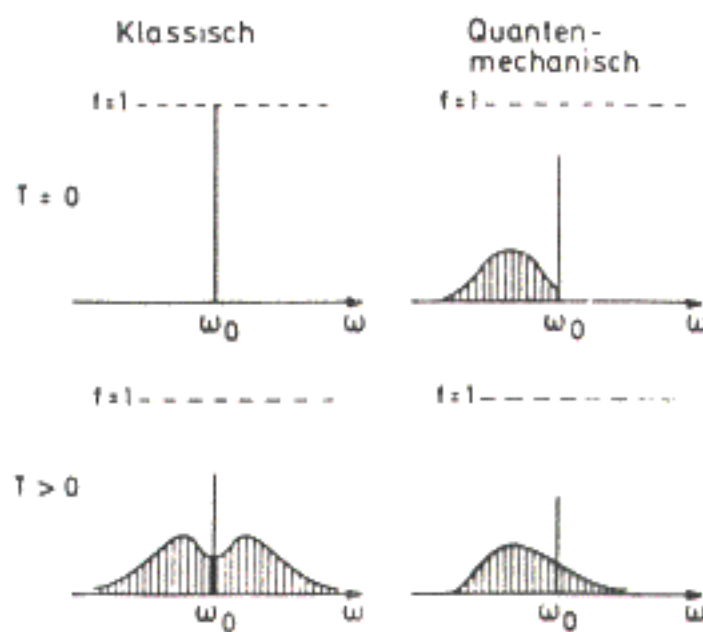
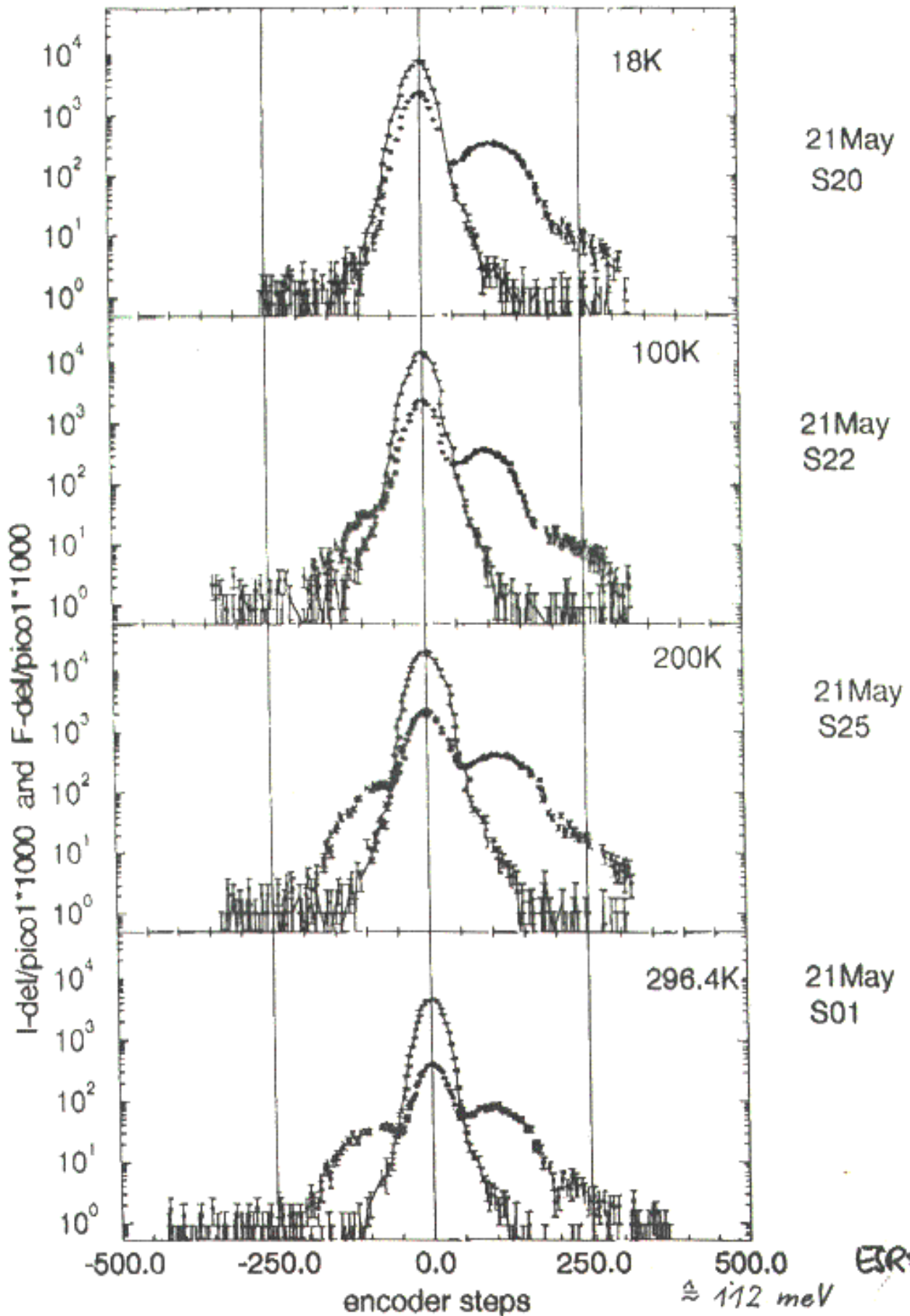


Abb. 4.5: Vergleich von klassischer und quantenmechanischer Theorie des Mössbauer-Effekts. Nach (WEG 66)

### Fe foil



Einstein-modellben (3-dimenziós harmonikus oszcillátor):

$$\langle u^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = 3 \langle x^2 \rangle$$

$$f = e^{-k^2 \langle u^2 \rangle / 3}$$

$\langle x^2 \rangle$  meghatározása

Einstein-modell:

Egy harmonikus oszcillátor energiája az  $n$  kvantumszámú állapotban:

$$E_n = \hbar \Omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Annak a valószínűsége, hogy  $T$  hőmérsékleten ezt az oszcillátort az  $n$  kvantumszámú állapotban találjuk:

$$P_n = \frac{e^{-\frac{(n+1/2)\hbar\Omega}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{(n+1/2)\hbar\Omega}{k_B T}}}$$

Időben átlagolva:

$$\underbrace{\frac{1}{2} M \Omega^2 \overline{x_n^2}}_{\text{átlagos potenciális energia}} = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \Omega \left( n + \frac{1}{2} \right)}_{\text{teljes energia}}$$

átlagos potenciális energia

teljes energia

Az összes kvantumállapotra átlagolva:

$$\begin{aligned} \overline{\langle x^2 \rangle}_E &::= \langle x^2 \rangle_E = \frac{\hbar}{M \Omega} \left( \frac{1}{2} + \sum_n n P_n \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2M \Omega} \left( 1 + \frac{2}{e^{\frac{\hbar \Omega}{k_B T}} - 1} \right) \end{aligned}$$



## Reális modellek:

A fonon-módusok száma  $\Omega$  és  $\Omega + d\Omega$  között:  $Z(\Omega) d\Omega$ .

$$\int_0^{\infty} Z(\Omega) d\Omega = 3N$$

$\uparrow$   
a rács atomjainak száma

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{1}{3N} \int_0^{\infty} Z(\Omega) \langle x^2 \rangle_E d\Omega = \\ &= \frac{\hbar}{6MN} \int_0^{\infty} \frac{Z(\Omega)}{\Omega} \left( 1 + \frac{2}{e^{\frac{\hbar\Omega}{k_B T}} - 1} \right) d\Omega \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f(T) &= e^{-k^2 \langle x^2 \rangle} \\ &= e^{-\frac{\hbar k^2}{6MN} \int_0^{\infty} \frac{Z(\Omega)}{\Omega} \left( 1 + \frac{2}{e^{\frac{\hbar\Omega}{k_B T}} - 1} \right) d\Omega} \end{aligned}$$

## Debye-modell:

$$Z(\Omega) = \begin{cases} \frac{9N\hbar^3}{k_B^3} \frac{\Omega^2}{\Theta_D^3}, & \text{ha } \Omega < \Omega_D \\ 0 & \text{ha } \Omega > \underbrace{\frac{k_B \Theta_D}{\hbar}}_{\Omega_D} \end{cases}$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4Mk_B\Theta_D} \left[ 1 + 4 \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^2 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{y}{e^y - 1} dy \right]$$

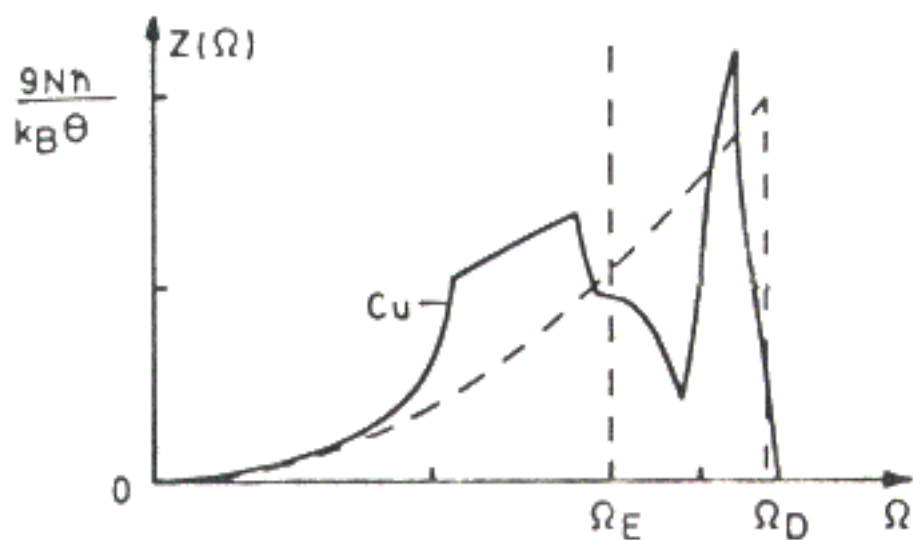
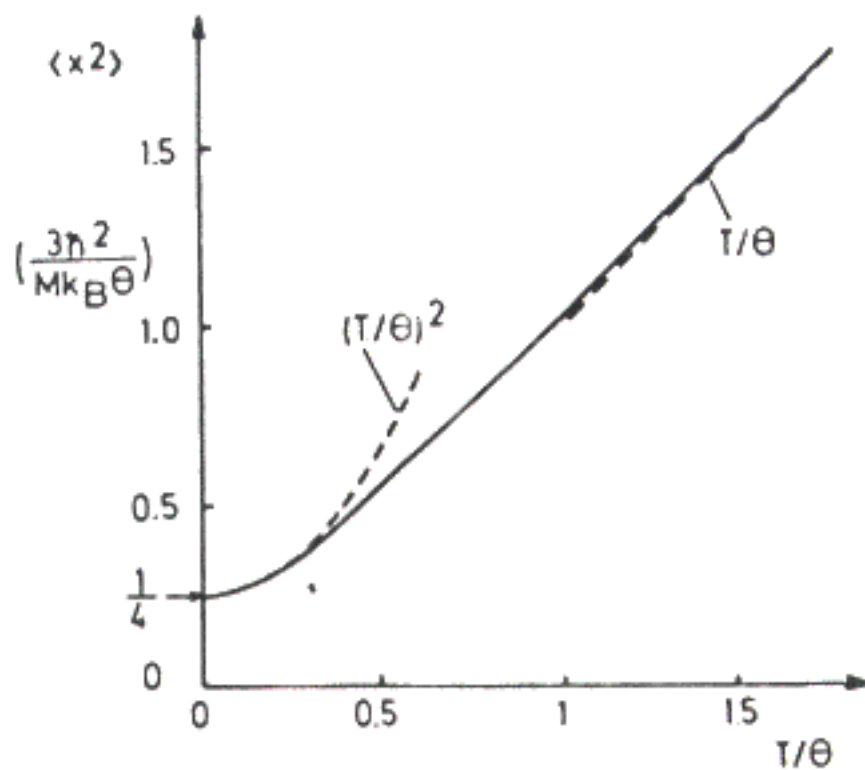


Abb. 4.6:

Zustandsdichten nach dem Einstein- und Debye-Modell (gestrichelte Linien) und für einen realistischen Fall (Cu, durchgezogene Linie, nach (NIC 67))



**Abb. 4.7:**  
 Mittleres Auslenkungsquad-  
 rat  $\langle x^2 \rangle$  der Atome im  
 Debye-Modell als Funktion  
 der Temperatur

$$T \gtrsim \frac{\theta_D}{2} : \quad \langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{Mk_B\theta_D} \frac{T}{\theta_D}$$

$$T \ll \frac{\theta_D}{2} : \quad \langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{Mk_B\theta_D} \left[ \frac{1}{4} + \frac{\pi^2}{6} \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^2 \right]$$

$$T = 0 : \quad \langle x^2 \rangle = \frac{3\hbar^2}{4Mk_B\theta_D}$$

$$R = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$$

$$f(T) = e^{-\frac{6R}{k_B\theta_D} \left[ \frac{1}{4} + \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{y}{e^y - 1} dy \right]}$$

$T \gtrsim \frac{\theta_D}{2}$  esetén:

$$f(T) = e^{-\frac{6RT}{k_B\theta_D^2}} \Rightarrow \ln f(T) = -\frac{6R}{k_B\theta_D^2} T$$

$$T \ll \frac{\theta_D}{2} : \quad f(T) = e^{-\frac{R}{k_B\theta_D} \left( \frac{3}{2} + \frac{\pi^2 T^2}{\theta_D^2} \right)}$$

$$T = 0 : \quad f(0) = e^{-\frac{3R}{2k_B\theta_D}} = e^{-\frac{3E_T^2}{4Mc^2k_B\theta_D}}$$

Jo Mossbauer-izotóp (rükséges, de nem elégséges feltétel):

$E_T$  kicsi,  $M$  nagy és legtöbb vegyületére  $\theta_D$  nagy. Nyenek pl.:

$^{57}\text{Fe}$ ,  $^{61}\text{Ni}$ ,  $^{99}\text{Ru}$ ,  $^{119}\text{Sn}$ ,  $^{121}\text{Sb}$ ,  $^{125}\text{Te}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,

$^{151}\text{Eu}$ ,  $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{161}\text{Dy}$ ,  $^{169}\text{Tm}$ ,  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{237}\text{Np}$

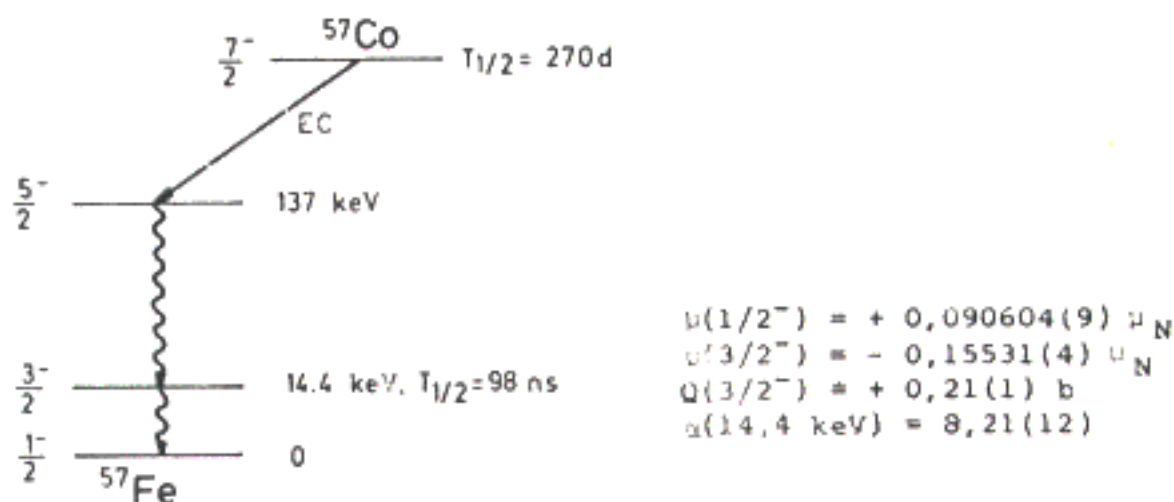


Abb. 4.8: Zerfallsschema von  $^{57}\text{Co}$ . Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ( $I = 1/2$ ) und des Mößbauer-Niveaus ( $I = 3/2$ ) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten  $\alpha$  für den 14,4 keV Übergang angegeben. Werte aus (STE 77)

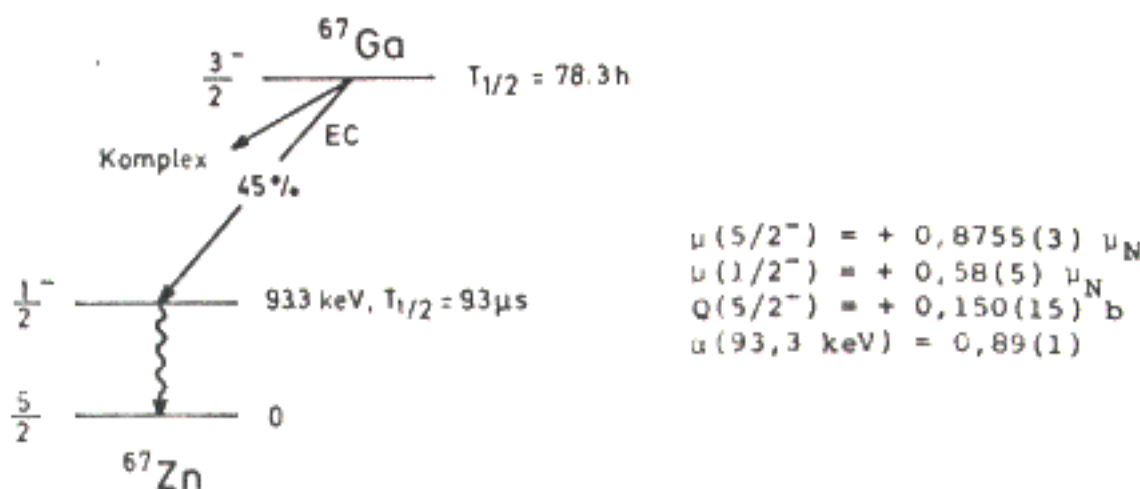


Abb. 4.9: Ausschnitt aus dem Zerfallsschema von  $^{67}\text{Ga}$ . Der Übersichtlichkeit halber wurde nur der häufigste Zerfallszweig (45 %) eingezeichnet. Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ( $I = 5/2$ ) und des Mößbauer-Niveaus ( $I = 1/2$ ) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten  $\alpha$  des 93,3 keV Übergangs angegeben. Werte aus (STE 77) und (LED 78)

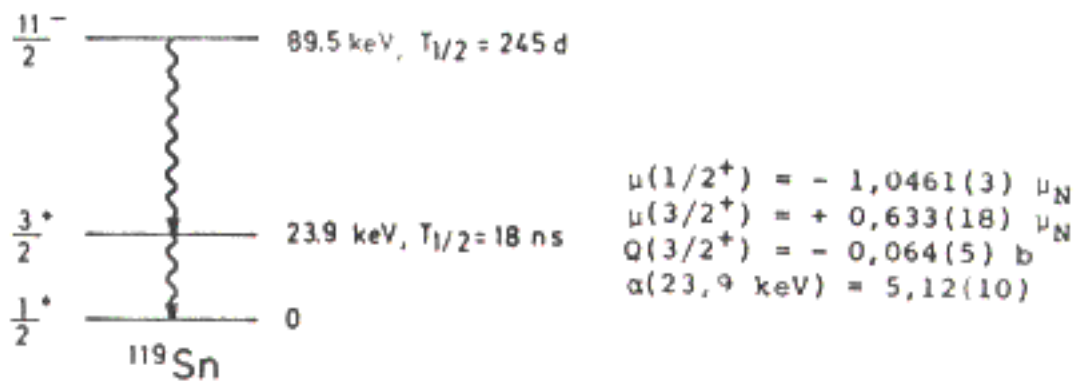


Abb. 4.10: Zerfallsschema des isomeren Niveaus in  $^{119}\text{Sn}$ . Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ( $I = 1/2$ ) und des Mößbauer-Niveaus ( $I = 3/2$ ) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten  $\alpha$  des 23,9 keV Übergangs angegeben. Werte aus (STE 77)

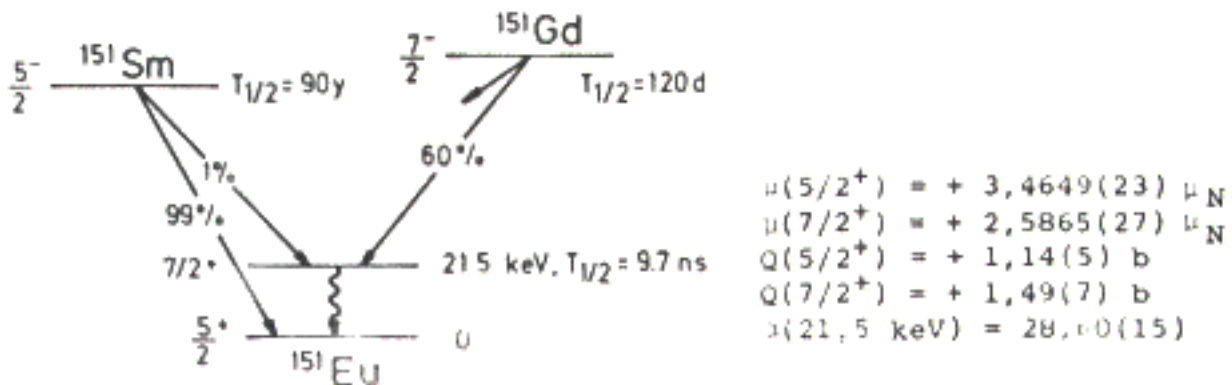


Abb. 4.11: Zerfallsschema von  $^{151}\text{Sm}$  und  $^{151}\text{Gd}$ . Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ( $I = 5/2$ ) und des Mößbauer-Niveaus ( $I = 7/2$ ) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten  $\alpha$  des 21,5 keV Übergangs angegeben. Werte aus (STE 77)

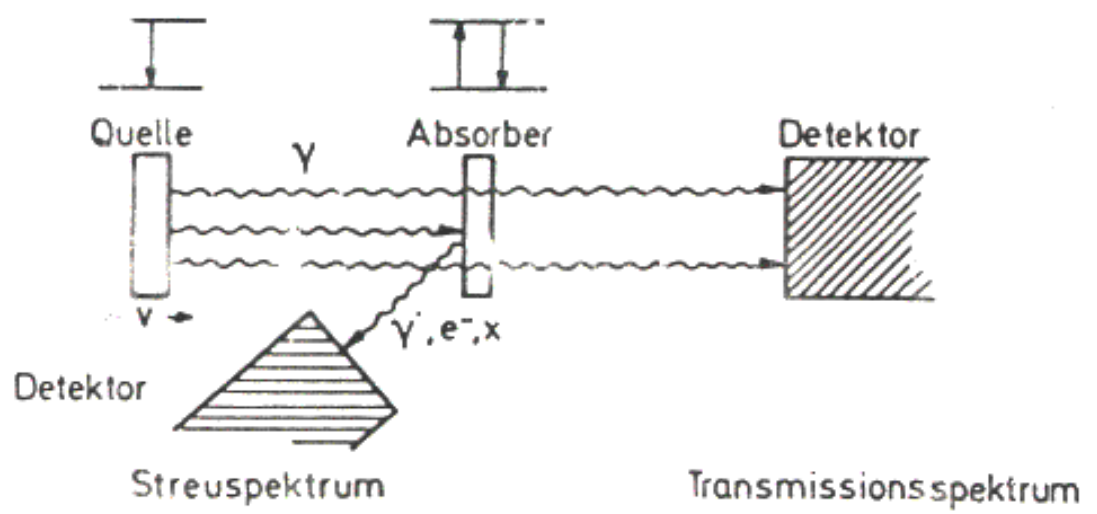


Abb. 4.12: Schematischer Aufbau einer Mössbauer-Apparatur

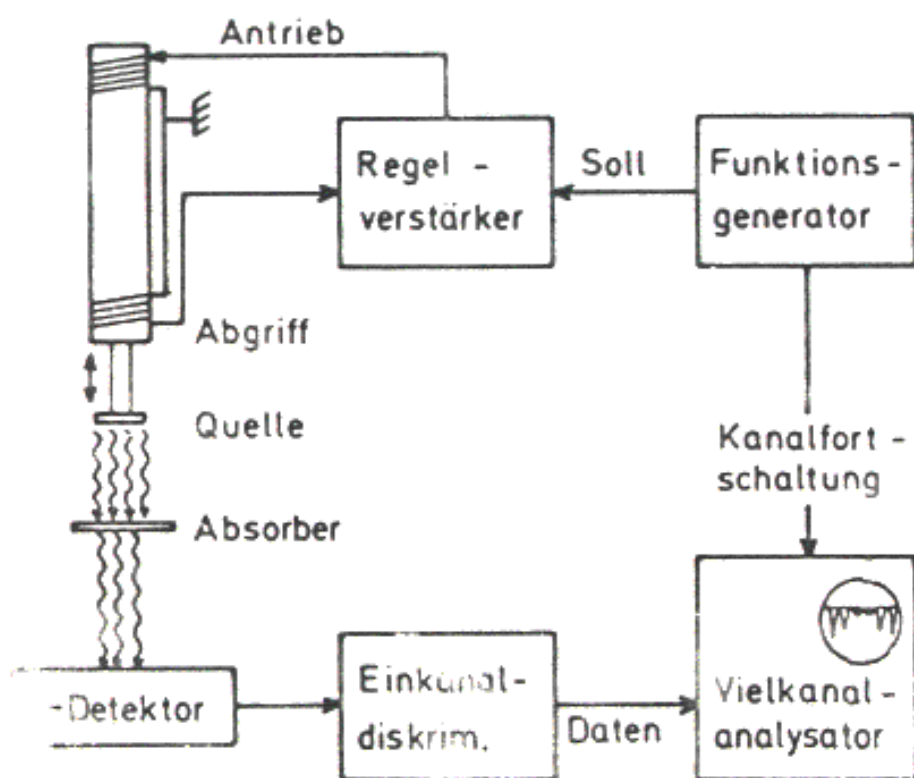


Abb. 4.13: Blockschaltbild einer Mößbauer-Apparatur