

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

A γ -energia:

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

\Downarrow
 $\lesssim 10^{-2} \text{ eV}$

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

$$R(^{57}\text{Fe}) = 2 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$$

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

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

\Downarrow
Mössbauer-vonal

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

Klasszikus magyarázat:



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

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

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

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

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

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

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

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

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

\downarrow
 $\langle x^2 \rangle$

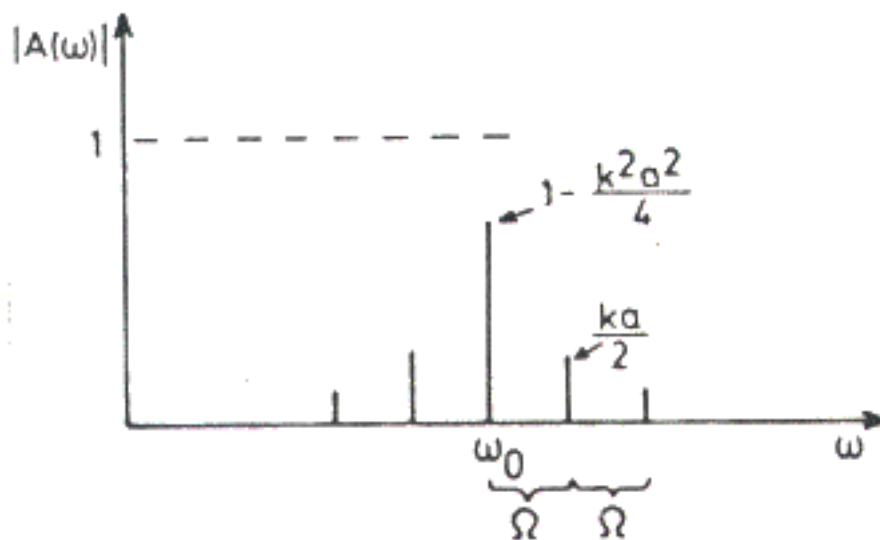


Abb. 4.4:

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

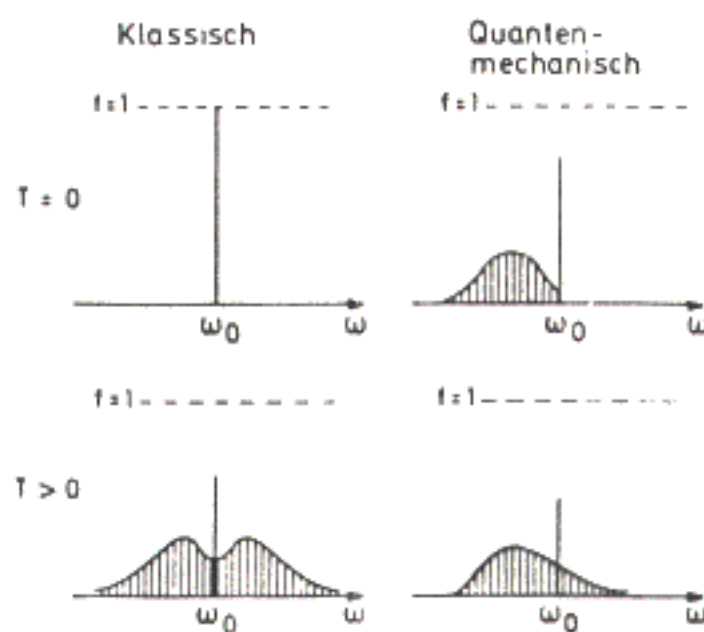
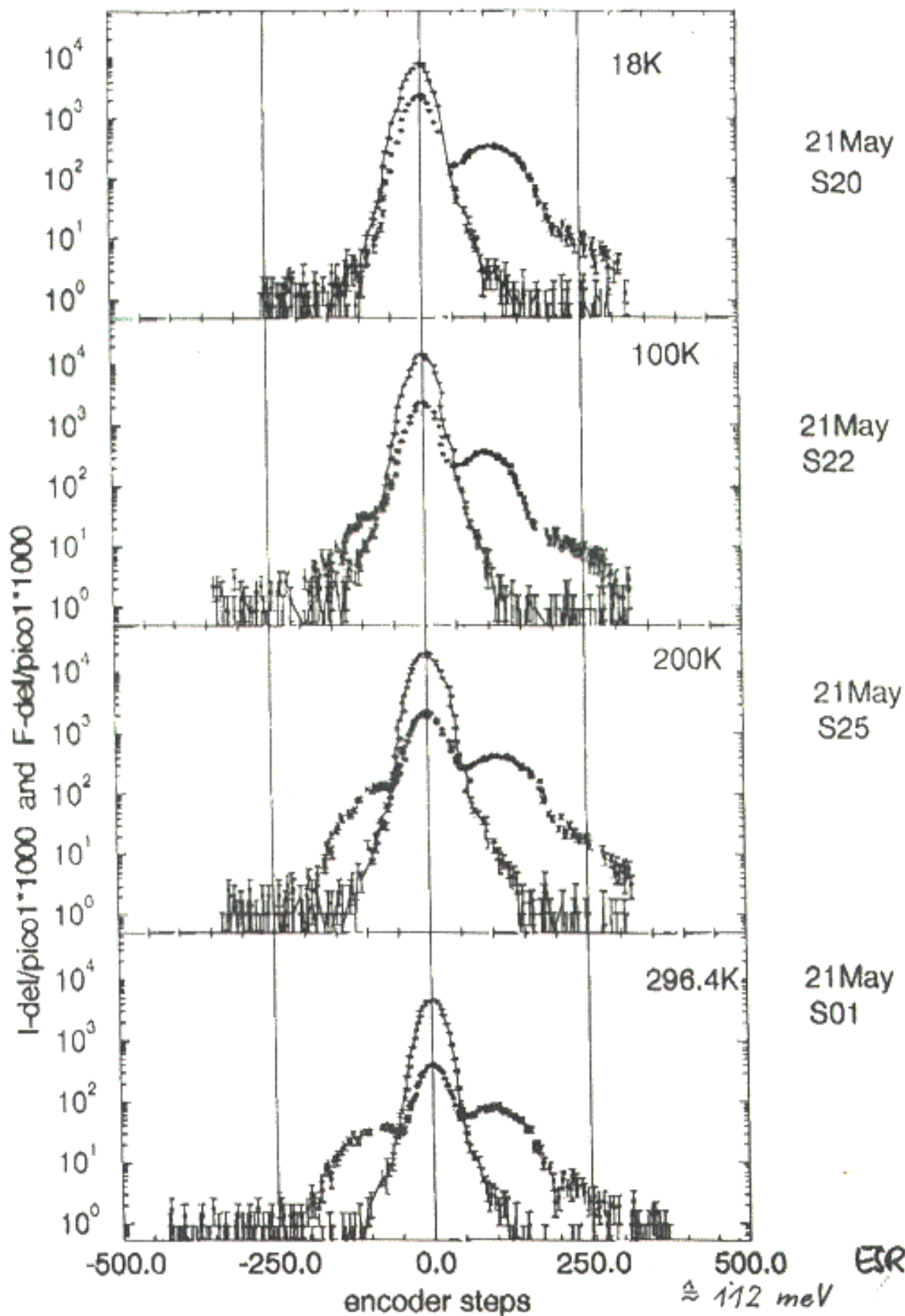


Abb. 4.5: Vergleich von klassischer und quantenmechanischer Theorie des Mößbauer-Effekts. Nach (WEG 66)

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:

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

Az összes kvantumállapotra átlagolva:

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

→ Reális modellek:

A fonon-módusok száma Ω 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:

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

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

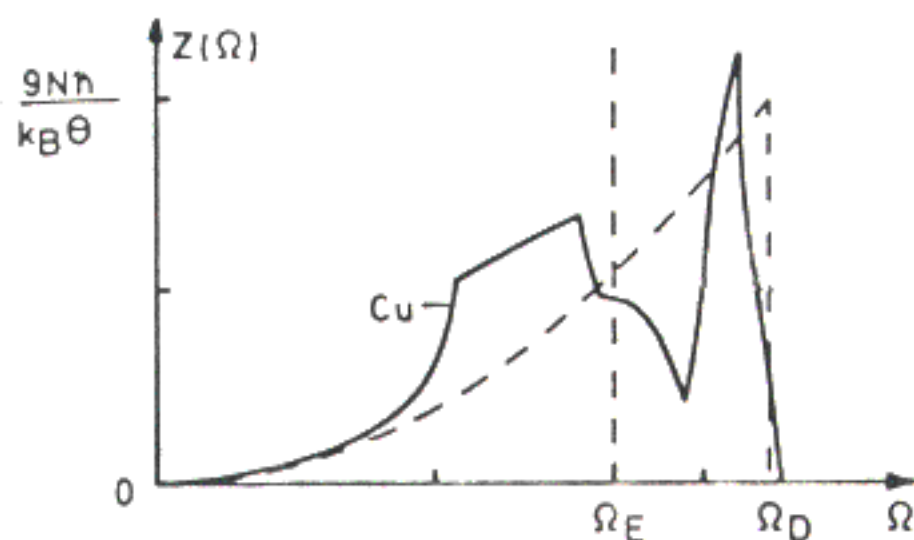


Abb. 4.6:

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

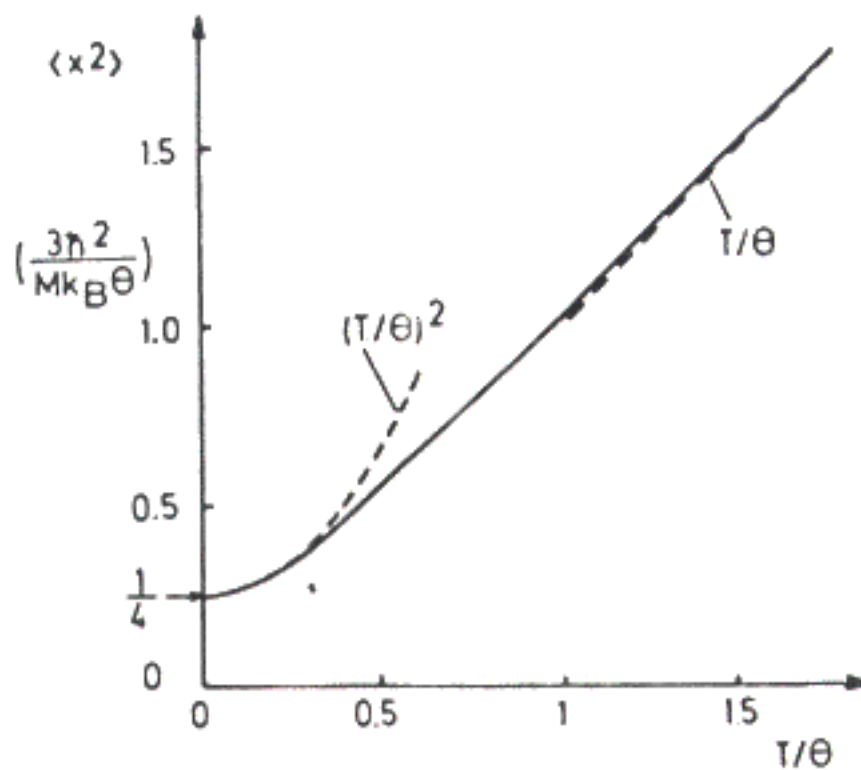


Abb. 4.7:

Mittleres Auslenkungsquadrat $\langle x^2 \rangle$ der Atome im Debye-Modell als Funktion der Temperatur

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

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

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

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

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

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

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

$$T \ll \frac{\theta_D}{2} :$$

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

$$T = 0 :$$

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

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

E_F kicsi, M nagy és legtöbb vegyületére θ_D nagy. Nyenek pl.:

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

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

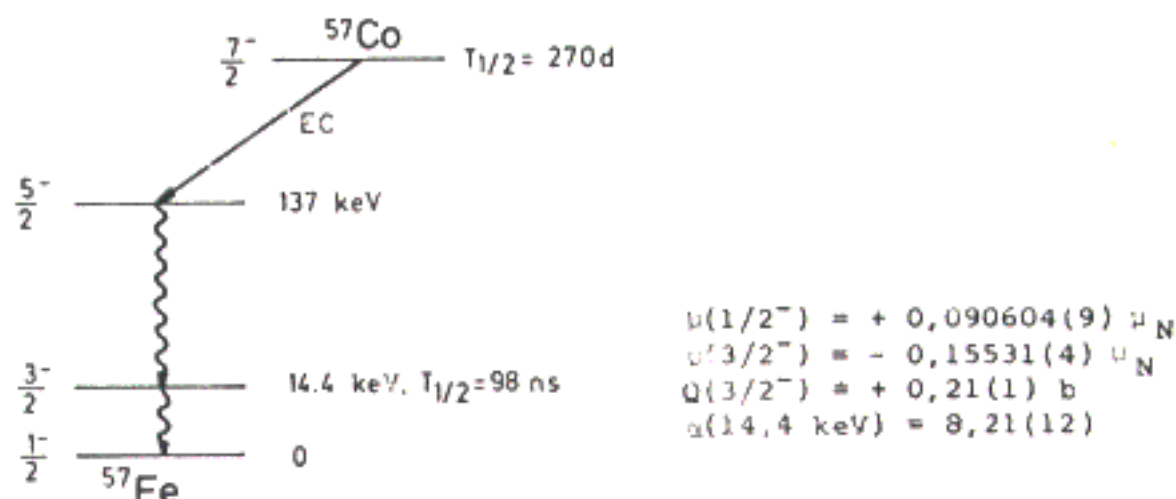


Abb. 4.8: Zerfallsschema von ^{57}Co . Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ($I = 1/2$) und des Mößbauer-Niveaus ($I = 3/2$) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten α für den 14,4 keV Übergang angegeben. Werte aus (STE 77)

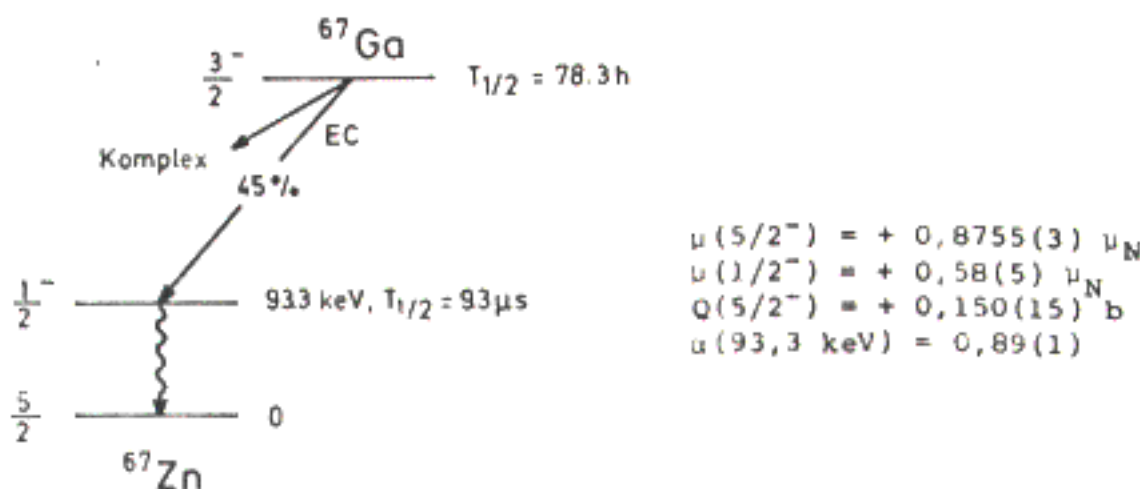


Abb. 4.9: Ausschnitt aus dem Zerfallsschema von ^{67}Ga . Der Übersichtlichkeit halber wurde nur der häufigste Zerfallszweig (45 %) eingezeichnet. Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ($I = 5/2$) und des Mößbauer-Niveaus ($I = 1/2$) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten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

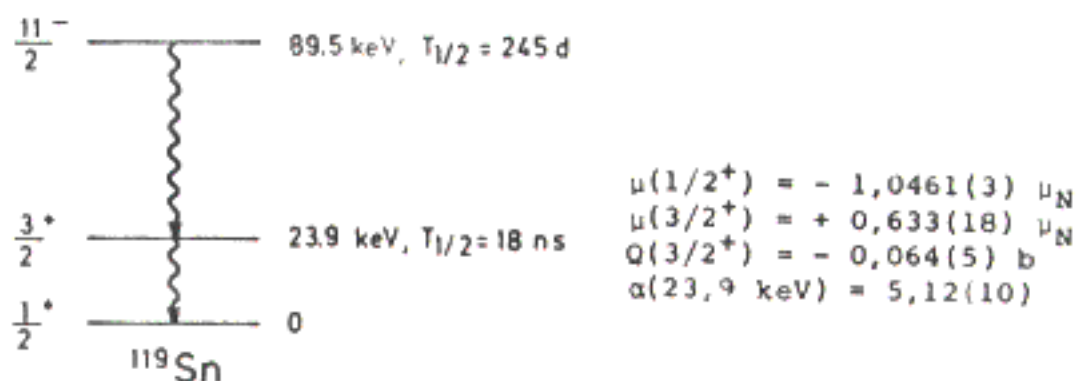


Abb. 4.10: Zerfallsschema des isomeren Niveaus in ^{119}Sn . Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ($I = 1/2$) und des Mößbauer-Niveaus ($I = 3/2$) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten α des 23,9 keV Übergangs angegeben. Werte aus (STE 77)

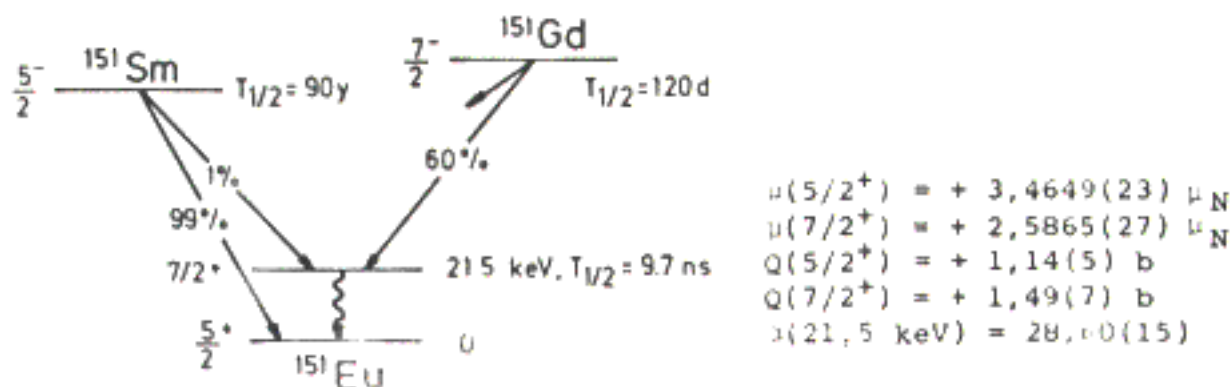


Abb. 4.11: Zerfallsschema von ^{151}Sm und ^{151}Gd . Auf der rechten Seite sind die Kernmomente des Grundzustandes ($I = 5/2$) und des Mößbauer-Niveaus ($I = 7/2$) zusammen mit dem totalen Konversionskoeffizienten α des 21,5 keV Übergangs angegeben. Werte aus (STE 77)

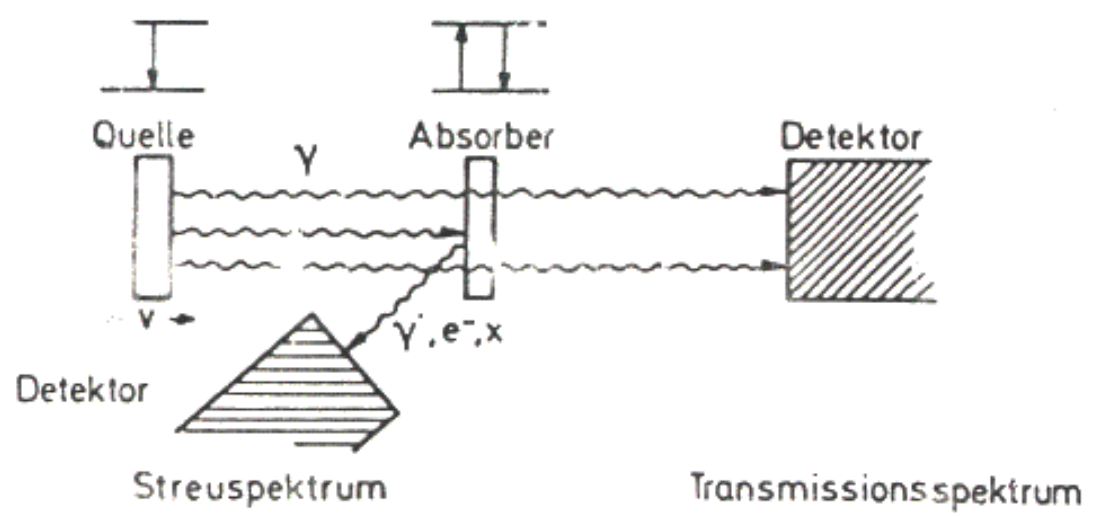


Abb. 4.12: Schematischer Aufbau einer Mößbauer-Apparatur

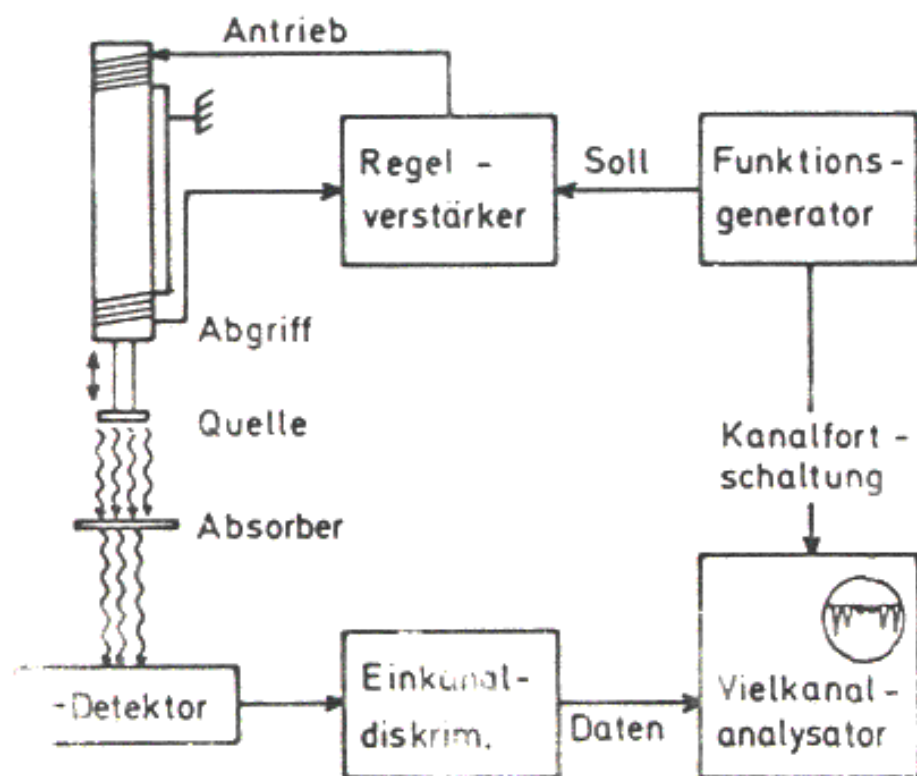


Abb. 4.13: Blockschaltbild einer Mößbauer-Apparatur

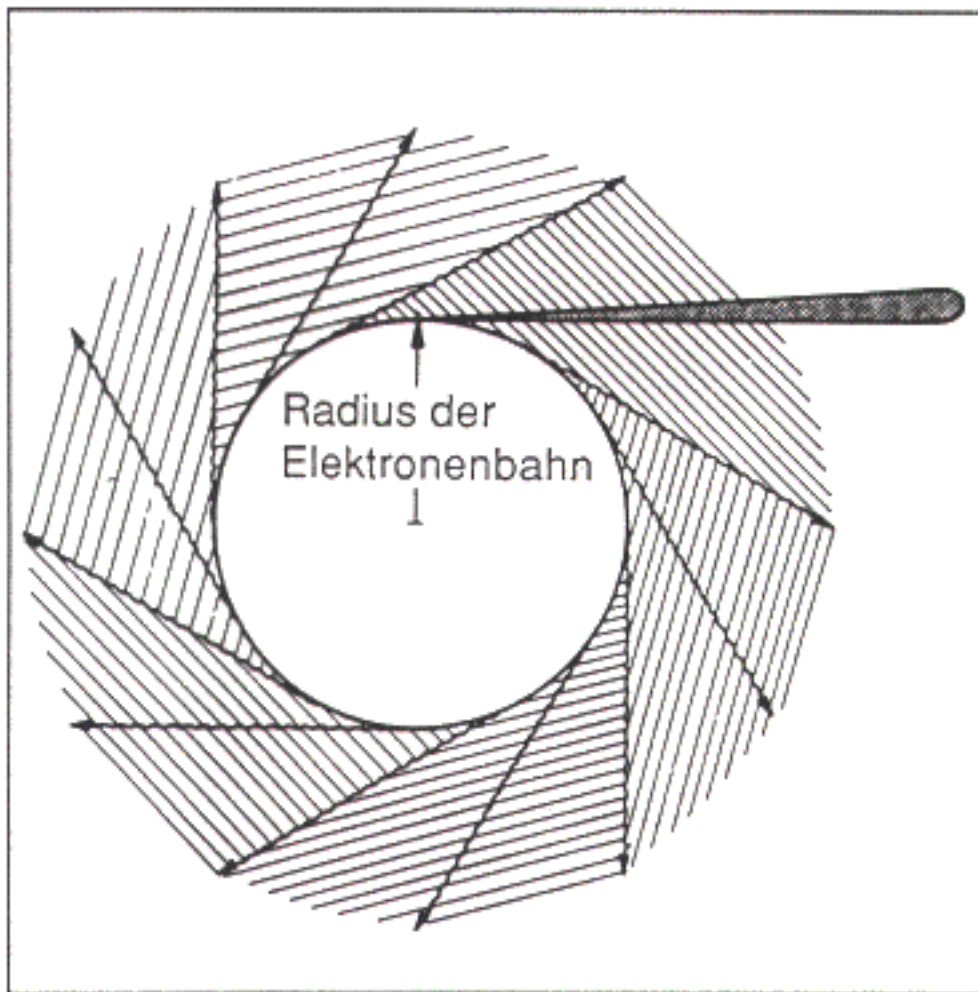


Abb. 4: Die Ebene eines Speicherringes ist im zeitlichen Mittel vollständig mit Strahlung gefüllt. Die momentane keulenförmige Abstrahlung eines einzelnen Elektrons ist angedeutet.

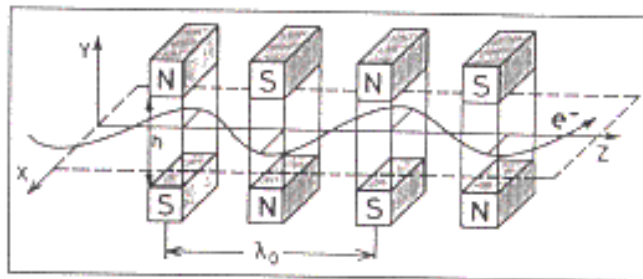


Abb. 17: Aufbau eines Wiggers. Wenn die Elektronen mit annähernd Lichtgeschwindigkeit durch das periodische Magnetfeld fliegen, beschreiben sie eine sinusförmige Bahn.

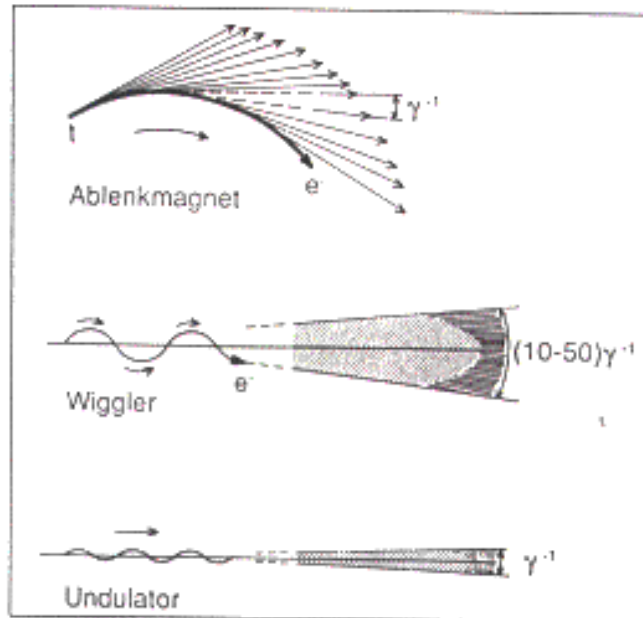


Abb. 18: Vergleich der Abstrahlung von einem Ablenkmagneten, von einem Wiggler und einem Undulator. γ^{-1} ist ein relativistischer Faktor, der von der Energie der Elektronen abhängt. Für DORIS beträgt er nur etwa 0,0001. Dies entspricht einer Divergenz des Strahlungskegels von nur etwa 0,1 mrad. Die scharfe Bündelung der Strahlung beim Undulator hat starke Interferenzeffekte zur Folge.

$$\gamma = \frac{E_e}{m_0 c^2}$$

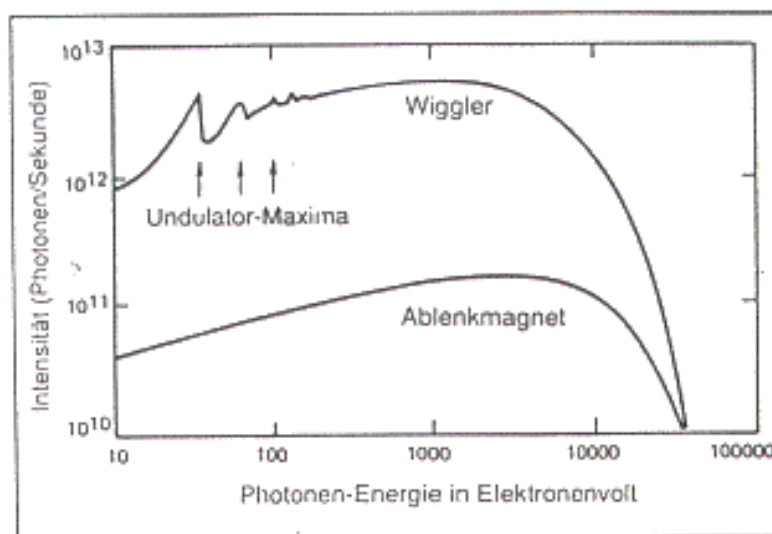


Abb. 19: Die Intensität der Strahlung von dem 32-Pol-Wiggler bei HASYLAB ist um vieles höher als die eines Ablenkmagneten. Bei niedrigen Energien arbeitet der Wiggler als Undulator und erzeugt bei bestimmten Photonenenergien sogar noch höhere Intensitäten.

Mössbauer-spektroszkópia szinkrotronsugárzással

Szinkrotronsugárzás: gyorsuló töltések által keltett intenzív elektromágneses sugárzás e^- - és e^+ -tárológyűrűk eltérítő mágneseinél és az ún. „insertion device”-oknál (wigglerek, undulátorok).

4-5 GeV-es részecskék esetén a sugárzás levágási energiája kb. 15 keV. Probléma: hogyan szűrjük ki a 13 nagyságrenddel keskenyebb (^{57}Fe) Mössbauer-rezonanciát a többi foton közül?

Si - egykristály-monokromátorok: előmonokromátor, nagyfelbontású (nested channel cut) monokromátorok. Ma a legjobb felbontás 4 meV körül van: ez már elég.

A szinkrotronsugárzás tulajdonságai:

- nagy intenzitásűrűség
- kis nyálábdivergencia
- polarizált
- pulzált

A pulzált sugárzás **egyidejűleg** képes az összes, hiperfinomfelhasad alnívó gerjesztésére, melyek ezután **koherensen** bomlanak \Rightarrow interferencia (quantum-beatek).

A szinkrotron-Mössbauer-spektroszkópia az energia-domén helyett az **idő-doménben** dolgozik. A hiperfinom kölcsönhatás a quantum-beat szerkezet alapján értékelhető ki.

A nagyfelbontású monokromátort kissé elhangolva a rezonanciától, letapogathatjuk a fónuspektrumot is. Ez az **inelasztikus foton-zórás** (Alp, 1994. október)

Néhány nagyobb szinkrotron adatai

ország	város	tárológyűrű	energia (GeV)	generáció
Japán	Kansai	Spring-B *	8.0	3
U.S.A.	Argonne	APS *	7.0	3
Franciaország	Grenoble	ESRF	6.0	3
U.S.A.	Ithaca	CHESS	5.0	1
Németország	Hamburg	DORIS III	4.5	1 \Rightarrow 2/3
Németország	Bonn	SYLI	0.5 – 3.5	2
U.S.A.	Stanford	SSRL	3.0	2 \Rightarrow 3
U.S.A.	Brookhaven	NSLS (x-ray)	2.5	2
Japán	Kansai	TRISTAN	2.5	2
Svájc	Villigen	SLS *	1.5 – 2.1	3
Anglia	Daresbury	SRS	2.0	3
Olaszország	Trieszt	ELETTRA	1.0 – 2.0	3
U.S.A.	Berkeley	ALS	1.0 – 1.9	3
Svédország	Lund	MAX II *	1.5	3
U.S.A.	Baton Rouge	CAMD	1.2 – 1.5	
Taiwan	Hsinchu	SRRC	1.3	3
U.S.A.	Brookhaven	NSLS (VUV)	0.8	2
U.S.A.	Stoughton	S.R.C.	0.8	2
U.S.A.	Gaithersburg	SURF II	0.3	2

* épülő szinkrotron

- 1. generáció: részecskefizikai gyorsító, parazita üzemmód**
- 2. generáció: szinkrotronsugárzásra tervezett gyorsító, sugárzás csak az eltérítő mágneseknél**
- 3. generáció: szinkrotronsugárzásra tervezett gyorsító, hosszú egyenes szakaszokkal (wigglerek, undulátorok)**

Néhány fontosabb, szinkrotronoknál művelhető vizsgálati módszer:

- röntgen-diffrakció, röntgen-szórás**
- felületi diffrakció**
- optikai spektroszkópia**
- makromolekula-szerkezetmeghatározás**
- nukleáris rezonanciaszórás**
- kvázielasztikus foton-szórás**
- inelasztikus foton-szórás**
- mágneses foton-szórás**
- röntgen-fluoreszcencia analízis**
- röntgen abszorpciós él analízis (XANES)**
- EXAFS**