den können. Diese ist der elektromagnetischen Wechselwirkung elektrischer Ladungen sehr ähnlich.

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof. H. HÖNL, danke ich sehr herzlich für alle Anregungen und Ratschläge zu dieser Arbeit und für die Möglichkeit, sie an seinem Institut mit Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft durchzuführen. Für klärende Diskussionen bin ich auch Herrn Dr. K. WESTPFAHL sehr dankbar.

Zur Theorie des Mößbauer-Effektes

Von F. SAUTER und D. WAGNER

Aus dem Institut für Theoretische Physik der Universität Köln

(Z. Naturforschg. **17 a**, 30—36 [1962]; eingegangen am 30. Oktober 1961)

Es wird gezeigt, daß sich der MÖSSBAUER-Effekt, nämlich das Auftreten einer scharfen, praktisch unverschobenen Linie neben einem breiteren Kontinuum bei der Emission von γ-Strahlung durch einen im Kristallgitter eingebauten Kern, korrespondenzmäßig auch vom Standpunkt der klassischen Physik aus verstehen läßt, sofern man dabei der Quantentheorie in der bei optischen Problemen üblichen Weise durch zwei naheliegende, aus der Quantenmechanik deduzierbare Zusatzvorstellungen Rechnung trägt.

Der Kernpunkt bei dieser halbklassischen Deutung der unverschobenen MÖSSBAUER-Linie besteht in der Vorstellung, daß der während der Emissionszeit τ der γ-Strahlung auf den emittierenden Kern übertragene Rückstoßimpuls während dieser Zeit vermittels der dabei angeregten Schallwellen sofort in das Kristallgitter dissipiert, so daß die durch den Rückstoß bedingte zusätzliche Geschwindigkeit des Leuchtkerns und damit auch die Dopplerverschiebung der γ-Linie praktisch unmerklich klein bleibt.

Die Deutung des zusätzlichen Kontinuums kann in Analogie zur Deutung des Temperatureinflusses auf RÖNTGEN-Interferenzen am schwingenden Kristallgitter nach v. LAUE u. a. erfolgen.

I. Die Problemstellung

Die Gestalt des Emissions- (und Absorptions-) Spektrums eines γ-Strahlers hängt nach MÖSSBAUER [1] wesentlich davon ab, ob sich der γ-Strahler frei im Gasraum bewegen kann oder ob er in ein Kristallgitter eingebaut ist. Bei der Emission durch ein freies Atom mit der Masse m und der Anregungsenergie $\hbar\,\omega_0$ wird eine scharfe γ-Linie ausgestrahlt, deren Frequenz ω nach der Beziehung

$$\hbar\,\omega = \hbar\,\omega_0 - R \quad \text{mit} \quad R = (\hbar\,\omega_0)^2/(2\,m\,c^2) \qquad (1)$$

verschoben ist; denn das strahlende Atom muß bei der Emission den Rückstoßimpuls $\hbar\,\omega_0/c$ übernehmen und daher dem γ-Quant die angegebene Energie R entziehen. Ist das emittierende Atom jedoch Bestandteil eines Kristallgitters, so ist nach MÖSSBAUER eine scharfe γ-Linie bei $\omega = \omega_0$ zu beobachten („MÖSSBAUER-Linie“), an die sich, im besonderen gegen kleinere Frequenzen hin, nach Aussage der Theorie ein (bisher noch nicht beobachtetes) Kontinuum anschließt.

Die bereits von MÖSSBAUER gegebene Deutung dieses γ-Spektrums im Rahmen der Quantenmechanik liegt auf der Hand. Infolge der Wechselwirkung zwischen dem emittierenden Atom und dem Gitter kann sich durch den Emissionsprozeß der Schwingungszustand des Kristalls ändern, indem Phononen erzeugt (oder bei höheren Temperaturen auch absorbiert) werden, so daß die emittierte Frequenz ω durch die Beziehung

$$\hbar\,\omega = \hbar\,\omega_0 - \sum_{\mathfrak{q},\,j} \Delta n_{\mathfrak{q},\,j}\,\hbar\,\omega_{\mathfrak{q},\,j} \qquad (2)$$

gegeben ist; dabei bedeutet $\omega_{\mathfrak{q},\,j}$ die Frequenz der Gitterwelle mit dem Ausbreitungsvektor $\mathfrak{q}$ und dem Polarisationszustand j (mit $j = 1, 2, 3$), und $\Delta n_{\mathfrak{q},\,j}$ gibt die Änderung der entsprechenden Phononenzahl während der γ-Emission. Die scharfe MÖSSBAUER-Linie entsteht für den Fall, daß der Quantenzustand des schwingenden Gitters beim Prozeß nicht geändert wird ($\Delta n_{\mathfrak{q},\,j} = 0$). Bei der quantenmechanischen Behandlung des MÖSSBAUER-Effektes [1, 2] hat man somit die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines γ-Quants entsprechend (2) für jeden Satz der $\Delta n_{\mathfrak{q},\,j}$ zu berechnen und daraus die Intensitätsverteilung $J(\omega)$ der γ-Linie zu ermitteln. Man kommt so zu einer Intensitätsformel in Gestalt eines recht ver-

[1] R. L. MÖSSBAUER, Z. Phys. **151**, 124 [1958]; Z. Naturforschg. **14 a**, 211 [1959].

[2] Vgl. hierzu auch die ausführliche Untersuchung von J. PETZOLD, Sitzungsber. der Heidelberger Akad. 1960/61, 5. Abh.; Z. Phys. **163**, 71 [1961].

wickelten Integrals, dessen maschinelle Auswertung durch VISSHER [3] tatsächlich zu einer scharfen, unverschobenen Linie mit anschließendem begrenzten Kontinuum führt.

Es liegt nun die Frage nahe, ob man den MÖSSBAUER-Effekt und im besonderen das Auftreten der praktisch unverschobenen MÖSSBAUER-Linie nicht auch im Sinne des Korrespondenzprinzips aus einer klassischen Betrachtung heraus verständlich machen kann, sofern man diese um einige, durch die Quantenmechanik nahegelegte Zusatzvorstellungen ergänzt. Daß eine solche halbklassische Behandlung möglich ist und zu einer anschaulichen Interpretation des Effektes führt, soll im folgenden gezeigt werden.

Von dieser halbklassischen Behandlung sind vor allem die beiden folgenden Fragen zu beantworten:

1. Warum tritt bei der γ-Emission aus Kristall-Atomen eine unverschobene Linie, eben die MÖSSBAUER-Linie auf, während die von freien Atomen emittierte γ-Linie um den Energiebetrag R der Rückstoßenergie verschoben ist?

2. Warum besitzt das Emissionsspektrum beim MÖSSBAUER-Effekt neben der scharfen Linie noch ein relativ breites Kontinuum?

II. Die unverschobene Mößbauer-Linie

Zur Deutung des Auftretens der (praktisch) unverschobenen MÖSSBAUER-Linie benötigt man zwei durch die Quantenmechanik nahegelegte Zusatzvorstellungen, die sich auf den Prozeß der γ-Emission beziehen und sich folgendermaßen zusammenfassen und begründen lassen:

1. Die Emission von γ-Strahlung durch einen Leuchtkern erfolgt insofern quantenhaft, als mit der Aussendung der Quantenenergie $\hbar\,\omega$ die Abgabe eines Impulses $\hbar\,\omega/c$ an den Leuchtkern und über diesen an das Gitter verbunden ist; und zwar wird dieser Rückstoßimpuls in der Richtung $-\mathfrak{e}$ (mit $\mathfrak{e}^2=1$) übertragen, wenn das γ-Quant in der Richtung $\mathfrak{e}$ beobachtet wird.

Zur Begründung dieser Zusatzannahme sei erstens darauf hingewiesen, daß in jeder Theorie für ein abgeschlossenes System der Impulssatz gelten muß, im vorliegenden Fall also für das (endliche!) Gitter zusammen mit dem Strahlungsfeld. Ferner ist zwar, wie auch PETZOLD [2] betont, die Wahrscheinlichkeit für die γ-Emission zentralsymmetrisch, wenn nicht überhaupt isotrop verteilt, so daß der Leuchtkern im Mittel überhaupt keinen Rückstoß erhält. Bei der MÖSSBAUERschen Versuchsanordnung werden aber nur die γ-Quanten registriert, die in einer bestimmten Richtung emittiert werden; diese Quanten bewirken dann den erwähnten Rückstoßimpuls.

2. Die Intensität der vom Leuchtkern ausgesandten Strahlung nehme, wie die Ausstrahlung eines klassischen Oszillators, vom Beginn der Emission ($t=0$) exponentiell ab nach dem Gesetz:

$$\text{Sekundliche Energieabgabe} = \frac{\hbar\,\omega}{\tau}\,e^{-t/\tau}. \qquad (3)$$

Dabei bedeutet τ die aus der natürlichen Linienbreite folgende, quantenmechanisch berechenbare Zerfallszeit des angeregten Kerns. Entsprechend gelte für den auf den Kern übertragenen Rüßstoßimpuls:

$$\text{Sekundliche Impulsübertragung} = -\,\mathfrak{e}\,\frac{\hbar\,\omega}{c\,\tau}\,e^{-t/\tau}. \qquad (4)$$

Die beiden Annahmen (3) und (4) lassen sich ebenfalls aus der Quantenmechanik gewinnen: Bei Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen dem Leuchtkern und dem Strahlungsfeld lassen sich die reinen Zustände des betrachteten Gesamtsystems durch Angabe des Anregungszustandes des Leuchtkerns, sowie der Zahlen der vorhandenen Photonen der verschiedenen Sorten (hinsichtlich Frequenz, Richtung und Polarisation) und der entsprechenden Zahlen für die Phononen charakterisieren. Bei Berücksichtigung der Wechselwirkung erfolgen Übergänge zwischen diesen reinen Zuständen, so daß sich die Zustandsfunktion des Gesamtsystems als Linearkombination aus den Funktionen der Eigenzustände darstellt, mit zeitabhängigen Koeffizienten, für die sich bestimmte gekoppelte Diff.-Gln. angeben lassen. Ihre Lösung kann man nach dem Vorgang von WEISSKOPF und WIGNER [4] durch den Ansatz finden, daß der Koeffizient des Ausgangszustandes (angeregter Kern und kein Quant im Strahlungsfeld) zeitlich exponentiell abklingt, daß also für die Wahrscheinlichkeit, den Leuchtkern zur Zeit t noch im angeregten Zustand zu finden, wenn er zur Zeit $t=0$ mit Sicherheit angeregt war, die Beziehung

$$w(t) = e^{-t/\tau} \qquad (5)$$

gilt. Die Diff.-Gln. liefern dann eine Bestimmungsgleichung für τ. Diese Beziehung und der Wert von τ gelten naturgemäß auch dann, wenn man nur solche

[3] V. VISSHER, Ann. Physics **9**, 194 [1960].

[4] V. WEISSKOPF u. E. WIGNER, Z. Phys. **63**, 54 [1930].

Fälle betrachtet, bei denen das γ-Quant in die Richtung $\mathfrak{e}$ emittiert wird. Daher wird die Wahrscheinlichkeit, daß in einem solchen Fall zur Zeit t ein beobachtbares Quant vorhanden ist, gleich $1-w(t)$. Dann erhält man aber aus der sekundlichen Zunahme dieser Wahrscheinlichkeit $e^{-t/\tau}\cdot 1/\tau$ wegen der Gültigkeit von Energie- und Impulssatz für die sekundlich dem Leuchtkern entzogene Energie beziehungsweise für den auf ihn sekundlich übertragenen Rückstoßimpuls genau die durch (3) und (4) gegebenen Ausdrücke. Entsprechend ändert sich der quantenmechanische Erwartungswert für den Impuls des Leuchtkerns während der γ-Emission in $\mathfrak{e}$-Richtung als Folge dieses Prozesses wirklich um den Wert (4), und zwar kontinuierlich [5]. Daher erscheint es nicht abwegig, auch in der hier vorgetragenen halbklassischen Behandlung ebenfalls mit einer kontinuierlichen Impulsübertragung zu rechnen.

Mit den beiden eben formulierten, durch die Quantenmechanik nahegelegten Zusatzannahmen läßt sich nun das Auftreten einer scharfen, praktisch unverschobenen Linie bei der γ-Emission durch Kristallatome leicht anschaulich verstehen: Während der Dauer der Ausstrahlung (von der Größenordnung τ) wird auf das emittierende Atom der aus (4) folgende Rückstoßimpuls übertragen. Durch die dadurch bedingte Bewegung des Leuchtatoms gehen von diesem Schallwellen aus, welche den Rückstoßimpuls in das umgebende Gitter verteilen. Auf diese Weise dissipiert der Impuls $\hbar\,\omega_0/c$ auf einen annähernd kugelförmigen Bereich um das Leuchtatom etwa vom Radius $c_s\,\tau$, wenn c_s die Schallgeschwindigkeit bedeutet. (Vgl. hierzu ähnliche Überlegungen bei V. F. WEISSKOPF, Lectures in Theoretical Physics, Interscience Publishers, New York, London 1961, im besonderen S. 79.)

Es kommt nun wesentlich darauf an, ob $c_s\,\tau$ kleiner oder größer als die Gitterkonstante a_0 ist. Im Fall $c_s\,\tau \ll a_0$ bleibt keine Zeit, den Rückstoßimpuls auf das Gitter zu verteilen; das Leuchtatom muß sich beim Emissionsakt wie ein freies Atom verhalten, und die γ-Energie wird sich entsprechend (1) durch DOPPLER-Effekt um den Betrag R der Rückstoßenergie bei freien Leuchtatomen ändern [6]. Im Fall $c_s\,\tau \gg a_0$ wird aber der Rückstoßimpuls von einem großen Gitterbereich übernommen; das Leuchtatom wird daher während der Emission nur eine geringfügige zusätzliche Geschwindigkeit erhalten und nur eine sehr kleine DOPPLER-Verschiebung der Linie bedingen. In diesem Fall ist das Auftreten der scharfen, praktisch unverschobenen MÖSSBAUER-Linie gewährleistet, sobald diese DOPPLER-Verschiebung kleiner wird als die durch $1/\tau$ gegebene natürliche Linienbreite der γ-Linie. Wie später gezeigt wird, erweist sich diese Bedingung als identisch mit der auch aus den quantenmechanischen Betrachtungen folgenden Beziehung

$$R \lesssim \hbar\,\omega_D\,, \tag{6 a}$$

wobei ω_D eine charakteristische Gitterfrequenz, also etwa die DEBYE-Frequenz, bedeutet. Zu dieser Bedingung (6 a) tritt nun aber nach dem eben Gesagten noch die Bedingung $c_s\,\tau \gg a_0$ hinzu, die wegen $c_s \approx a_0\,\omega_D$ auch in der Form

$$\omega_D\,\tau \gg 1 \tag{6 b}$$

geschrieben werden kann. Diese zweite Bedingung, die in den bisherigen quantenmechanischen Behandlungen nicht explizit in Erscheinung trat [7], da die Linienbreite $1/\tau$ im allgemeinen als vernachlässigbar klein gegenüber etwa der Frequenz $R/\hbar$ angenommen wurde, ist bei allen Substanzen, an denen bisher der MÖSSBAUER-Effekt festgestellt werden konnte, gut erfüllt. Beispielsweise gilt $\tau = 1{,}4\cdot 10^{-10}$ s für Ir^{191} und $\tau = 1{,}4\cdot 10^{-7}$ s für Fe^{57}. Da die Schallgeschwindigkeiten von der Größenordnung 10^5 cm/s sind und die Gitterkonstanten einige Å betragen, würde die Bedingung (6) noch für erheblich kürzere Abklingzeiten gut erfüllt sein.

Die rechnerische Durchführung der vorstehend skizzierten Betrachtung hat davon auszugehen, daß die klassische Physik nur eine Ursache für die Frequenzänderung einer Spektrallinie kennt, nämlich die Bewegung der Lichtquelle. Letztere führt in unrelativistischer Näherung zu einer mittleren DOPPLER-Verschiebung

$$\overline{\Delta\omega} = \omega_0\,\mathfrak{e}\,\bar{\mathfrak{v}}/c\,,$$

wenn ω_0 die ausgestrahlte Grundfrequenz und $\mathfrak{v}$ die Geschwindigkeit der Lichtquelle bedeutet; $\mathfrak{e}$ gibt, wie oben, die Beobachtungsrichtung an. Zu mitteln ist dabei mit der durch die Strahlungsintensität be-

[5] Man kann dieses Resultat auch aus der feldquantentheoretischen Durchrechnung des MÖSSBAUER-Effektes ableiten; doch erübrigt sich wohl die ausführliche Wiedergabe dieser Rechnung.

[6] Vgl. hierzu die Ausführungen zur Beziehung (9).

[7] Vgl. dazu aber eine Bemerkung von W. E. LAMB, Phys. Rev. **55**, 190 [1939], im besonderen S. 195.

stimmten Gewichtsfunktion, also

$$\overline{\Delta\omega} = \omega_0 \int_0^\infty \frac{\mathfrak{e}\,\mathfrak{v}(t)}{c}\, e^{-t/\tau}\, \frac{dt}{\tau}. \tag{7}$$

Um die Verschiebung des Linienschwerpunktes zu erhalten, hat man noch über alle möglichen Anfangsgeschwindigkeiten zu mitteln. Da letztere nur additiv zu $\mathfrak{v}(t)$ hinzutreten, wird die Schwerpunktsverschiebung temperaturunabhängig. Die Temperatur bestimmt lediglich die Intensität und die DOPPLER-Verbreiterung der Linie.

Beispielsweise folgt für ein freies Leuchtatom aus der Bewegungsgleichung nach Voraussetzung (4)

$$m\,\dot{\mathfrak{v}} = -\,\mathfrak{e}\,\frac{\hbar\,\omega_0}{c\,\tau}\, e^{-t/\tau} \tag{8}$$

als DOPPLER-Verschiebung des Linienschwerpunktes nach (7)

$$\overline{\Delta\omega} = \omega_0 \int_0^\infty \frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c^2}\,(1-e^{-t/\tau})\, e^{-t/\tau}\, \frac{dt}{\tau} = \frac{R}{\hbar}, \tag{9}$$

also genau die Beziehung (1).

Für ein im Gitter gebundenes Leuchtatom läßt sich die Rechnung analog durchführen. Da es hier aber nur auf die Darlegung der grundsätzlichen Eigenschaften des oben angeführten halbklassischen Modells ankommt, genügt es, dieses Modell für den besonders einfach zu übersehenden Fall einer linearen Kette mit elastischer Federbindung durchzurechnen. Ihre Atome der Masse m mögen die Ruhelagen $x_n = a_0\,n$ und die momentanen Lagen $x_n + s_n(t)$ besitzen, mit $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Die Auslenkungen aus den Ruhelagen mögen nur in Richtung der Kette erfolgen.

Zur Zeit $t=0$ beginne das Atom mit der Nummer $n=0$ in der positiven x-Richtung γ-Strahlung auszusenden. Dann wird der weitere Bewegungsablauf im Gitter entsprechend der Annahme (4) durch das Gleichungssystem

$$m\,\ddot{s}_n = \beta\,(s_{n+1} + s_{n-1} - 2\,s_n) - \frac{\hbar\,\omega_0}{c\,\tau}\, e^{-t/\tau}\,\delta_{n,0} \tag{10}$$

bestimmt; dabei gibt $\beta = m\,\omega_g^2/4$ die Federstärke zwischen den einzelnen Atomen der Kette an und $\delta_{n,0}$ ist das KRONECKER-Symbol. Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt am einfachsten mit Hilfe einer erzeugenden Funktion

$$f(t,\lambda) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} s_n(t)\, e^{i\lambda n} \quad (\lambda \text{ reell}), \tag{11}$$

für die offenbar die Gleichung

$$\ddot{f} = -\,\omega_\lambda^2\, f - \frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c\,\tau}\, e^{-t/\tau} \tag{12}$$

gilt, mit der Abkürzung

$$\omega_\lambda^2 = \frac{4\,\beta}{m}\,\sin^2\frac{\lambda}{2} = \omega_g^2 \sin^2\frac{\lambda}{2}. \tag{13}$$

Dann wird $f(t,\lambda)$ gegeben durch

$$f(t,\lambda) = f(0,\lambda)\,\cos\omega_\lambda t + \dot{f}(0,\lambda)\,\frac{\sin\omega_\lambda t}{\omega_\lambda} - \frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c\,\tau\,\omega_\lambda}\int_0^t e^{-t'/\tau}\,\sin\omega_\lambda(t-t')\,dt'. \tag{14}$$

Nun interessiert nach (7) vorwiegend die Geschwindigkeit $\dot{s}_0 \equiv v$ des emittierenden Kerns. Hierfür ergibt sich aus (11) und (14), sofern noch über alle Anfangslagen und Anfangsgeschwindigkeiten der Gitteratome gemittelt wird $[\overline{f(0,\lambda)} = 0,\ \overline{\dot{f}(0,\lambda)} = 0]$, wegen (13)

$$v(t) = \frac{1}{2\,\pi}\int_0^{2\pi} \overline{\dot{f}(t,\lambda)}\, d\lambda = -\,\frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c\,\tau}\int_0^t e^{-t'/\tau}\, J_0[\omega_g(t-t')]\, dt'. \tag{15}$$

Dabei bedeutet J_0 die BESSEL-Funktion vom Index 0. Die numerische Auswertung ergibt, daß v zuerst mit wachsender Zeit zunimmt, den größten Wert vom Betrag $1{,}470\,\hbar\,\omega_0/m\,c\,\omega_g\,\tau$ bei $\omega_g\,t = 2{,}405$ erreicht und danach mit abnehmenden Oszillationen allmählich wieder nach Null abfällt [8].

Die durch (15) gegebene Bewegung des Leuchtatoms bedingt nun eine DOPPLER-Verschiebung der

[8] Für $t \ll \tau$ kann man in (15) die Exponentialfunktion im Integranden vernachlässigen und kommt so zur Beziehung

$$v \approx -\,\frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c\,\omega_g\,\tau}\int_0^{\omega_g t} J_0(x)\, dx.$$

Für $t \gg \tau$ erhält man bei Verwendung der asymptotischen Formel für die BESSEL-Funktion

$$v \approx -\,\frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c\,\omega_g\,\tau}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, e^{-t/\tau}\int_0^{\omega_g t} \frac{\exp\{x/\omega_g\,\tau\}}{\sqrt{x}}\,\cos(x-\tfrac{1}{4}\,\pi)\, dx$$

und daraus auf dem Weg über die GAUSSsche Fehlerfunktion für den hier allein interessierenden Grenzfall $\omega_g\,\tau \gg 1$

$$v \approx -\,\frac{\hbar\,\omega_0}{m\,c\,\omega_g\,\tau}\,\{e^{-t/\tau} - (\pi\,\omega_g\,t)^{-1/2}\,\cos(\omega_g\,t + \tfrac{1}{4}\,\pi)\}.$$

γ-Linie, deren Mittelwert für den Linienschwerpunkt durch (7) gegeben wird. Für diesen Wert erhält man nach kurzer Zwischenrechnung

$$\overline{\Delta\omega} = -\frac{\hbar\,\omega_0^2}{2\,m\,c^2}\,\frac{1}{\sqrt{1+\omega_g^2\,\tau^2}} = -\frac{R/\hbar}{\sqrt{1+\omega_g^2\,\tau^2}}, \tag{16}$$

mit dem durch (1) gegebenen Wert R für die Energieabgabe an ein freies strahlendes Atom. Da die Linie praktisch als nicht verschoben erscheinen wird, wenn ihre Verschiebung (16) kleiner ist als ihre natürliche, durch $1/\tau$ gegebene Linienbreite, lautet die Bedingung für das Auftreten einer unverschobenen MÖSSBAUER-Linie

$$R \ll \hbar\,\sqrt{\tau^{-2}+\omega_g^2}. \tag{17}$$

Bei den bisher allein beobachteten Fällen ist stets $\omega_g\,\tau \gg 1$. Damit geht die Bedingung (17) über in die auch aus der Quantenmechanik folgende, bisher stets allein angegebene Forderung (6 a). In der Quantenmechanik, wie übrigens auch in der entsprechenden, im III. Abschnitt skizzierten klassischen Betrachtung ergibt sich diese Bedingung allerdings aus einer ganz anderen Überlegung, nämlich aus der Forderung, daß die unverschobene MÖSSBAUER-Linie eine endliche Intensität besitzt; letztere nimmt, entsprechend dem DEBYE–WALLER-Faktor, exponentiell mit zunehmendem Verhältnis $R/\hbar\,\omega_D$ ab.

Die im hier behandelten halbklassischen Modell hinzukommende Bedingung (6 b), nämlich $\omega_g\,\tau \gg 1$ ermöglicht übrigens eine besonders anschauliche Interpretation der Beziehung (16). Wegen (11) und (13) wird die Schallgeschwindigkeit in der linearen Kette für lange Wellen

$$c_s = a_0\,\omega_\lambda/\lambda \approx a\,\omega_g/2\,.$$

Somit gibt $\quad \omega_g\,\tau \approx 2\,c_s\,\tau/a_0$

die Zahl der Atome der Kette, die von den nach beiden Seiten vom Leuchtatom weglaufenden Wellen in der Zeit τ erreicht werden. Daher tritt im Fall $\omega_g\,\tau \gg 1$ an die Stelle der im Nenner von (16) stehende Masse des Leuchtatoms die Gesamtmasse aller von den Schallwellen während der Zeit τ erreichten Atome der Kette, und diese wesentlich vergrößerte Masse ist der Grund dafür, daß die Rückstoßgeschwindigkeit des Leuchtatoms im Gitterverband so sehr viel kleiner wird als im Fall eines freien Leuchtatoms.

III. Das vollständige Frequenzspektrum beim Mößbauer-Effekt

Zu der durch (7) gegebenen DOPPLER-Verschiebung der γ-Linie, welche letztere auf jeden Fall als scharfe (MÖSSBAUER-)Linie erhalten bleibt, tritt im Fall eines in das Gitter eingebauten Leuchtatoms auch nach der klassischen Physik noch ein breites Spektrum hinzu [9]. Führt nämlich dieses Atom im Gitter noch eine zusätzliche Bewegung in Form überlagerter harmonischer Schwingungen mit den Kristallgitterfrequenzen $\omega_{\mathfrak{q},j}$ aus, so müssen im Spektrum auch noch die Kombinationsschwingungen

$$\omega = \omega_0 - \sum_{\mathfrak{q},j} \nu_{\mathfrak{q},j}\,\omega_{\mathfrak{q},j} \tag{18}$$

auftreten, wobei die $\nu_{\mathfrak{q},j}$ positive oder negative ganze Zahlen bedeuten [10]. In der quantenmäßigen Umdeutung als SMEKAL–RAMAN-Linien (mit $\nu_{\mathfrak{q},j} \equiv \Delta n_{\mathfrak{q},j}$) entsprechen sie genau den durch (2) gegebenen Frequenzänderungen. Im besonderen ergibt sich die MÖSSBAUER-Linie für den Fall, daß entweder alle $\nu_{\mathfrak{q},j} = 0$ werden, oder daß die Summe auf der rechten Seite von (18) sonst irgendwie zufällig verschwindet.

Die Intensitätsverhältnisse im MÖSSBAUER-Spektrum folgen dann (für nicht zu tiefe Temperaturen) aus der FOURIER-Analyse von Ausdrücken der Form

$$F(t) = \exp\{i[\omega_0\,t + \sum_{\mathfrak{q},j} \mathfrak{k}\,\mathfrak{s}_{\mathfrak{q},j}\sin(\omega_{\mathfrak{q},j}\,t - \varphi_{\mathfrak{q},j})] - \gamma\,t\}\,. \tag{19}$$

Dabei bedeuten $\mathfrak{k}$ den Ausbreitungsvektor der γ-Strahlung in der Beobachtungsrichtung, $\gamma = 1/2\,\tau$ ihre Dämpfungskonstante und

$$\mathfrak{s} = \sum_{\mathfrak{q},j} \mathfrak{s}_{\mathfrak{q},j}\sin(\omega_{\mathfrak{q},j}\,t - \varphi_{\mathfrak{q},j})$$

den Verschiebungsvektor des Leuchtatoms als Funktion der Zeit. Mit der aus der Theorie der BESSEL-Funk-

[9] Vgl. F. L. ŠAPIRO, Fortschr. Phys. **9**, 229 [1961]. Die von ŠAPIRO und in etwas abgeänderter Form im folgenden gegebene Behandlung dieser Erscheinung schließt sich eng an die Durchrechnung des Temperatureinflusses auf die RÖNTGEN-Interferenzen bei Kristallen durch M. v. LAUE, Ann. Phys., Lpz. **81**, 877 [1926] an.

[10] Bei diesen Kombinationsschwingungen soll hier von der bei γ-Emissionen recht geringfügigen Rückstoßwirkung nach (4) abgesehen werden.

tionen bekannten Beziehung

$$\exp\{i z \sin \psi\} = \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} J_\nu(z) \exp\{i \nu \psi\} = \sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} J_\nu(z) (-1)^\nu \exp\{-i \nu \psi\}$$

kann man (19) in der Form

$$F(t) = \exp\{i \omega_0 t - \gamma t\} \prod_{\mathfrak{q}, j} \sum_{\nu_{\mathfrak{q}, j}} J_{\nu_{\mathfrak{q}, j}} (\mathfrak{k}\, \mathfrak{S}_{\mathfrak{q}, j}) (-1)^{\nu_{\mathfrak{q}, j}} \exp\{-i \nu_{\mathfrak{q}, j} (\omega_{\mathfrak{q}, j} t - \varphi_{\mathfrak{q}, j})\}$$

schreiben. Damit wird die spektrale Intensitätsverteilung [nach FOURIER-Zerlegung von $F(t)$ und Phasenmittelung in $|F_\omega|^2$] gegeben durch

$$|F_\omega|^2 = \frac{1}{4\pi^2} \prod_{\mathfrak{q}, j} \sum_{\nu_{\mathfrak{q}, j}} J^2_{\nu_{\mathfrak{q}, j}} (\mathfrak{k}\, \mathfrak{S}_{\mathfrak{q}, j}) \Big/ [(\omega - \omega_0 + \sum_{\mathfrak{q}, j} \nu_{\mathfrak{q}, j}\, \omega_{\mathfrak{q}, j})^2 + \gamma^2]. \tag{20}$$

Sie stellt sich also dar als eine Überlagerung von Dispersionsverteilungen um die durch (18) gegebenen Linien.

Nun hat man noch über alle thermisch bedingten Anregungsstärken $\mathfrak{S}_{\mathfrak{q}, j}$ der einzelnen Schwingungen zu mitteln. Bei rein klassischer Rechnung gilt für jede spezielle Schwingung

$$\overline{J_\nu^2(\mathfrak{k}\, \mathfrak{S})} = \frac{N m \omega^2}{k T} \int_0^\infty \exp\left\{-\frac{N m \omega^2 s^2}{2 k T}\right\} s \, \mathrm{d}s \cdot J_\nu^2(k_s s),$$

wenn k_s die Komponente des Ausbreitungsvektors $\mathfrak{k}$ auf die Schwingungsrichtung von $\mathfrak{S}$ bedeutet und N gleich der Zahl der Gitteratome ist. Bei Anwendung der Formel [11]

$$\int_0^\infty J_\nu(a t)\, J_\nu(b t) \exp\{-p^2 t^2\}\, t \, \mathrm{d}t = \frac{1}{2 p^2} \exp\left\{\frac{a^2 + b^2}{4 p^2}\right\} I_\nu\left(\frac{a b}{2 p^2}\right)$$

mit

$$I_\nu(z) = I_{-\nu}(z) = \exp\{-i \pi \nu/2\}\, J_\nu(\exp\{i \pi/2\}\, z)$$

ergibt sich daraus

$$\overline{J_\nu^2(\mathfrak{k}\, \mathfrak{S})} = \exp\left\{-\frac{k_s^2\, k T}{N m \omega^2}\right\} I_\nu\left(\frac{k_s^2\, k T}{N m \omega^2}\right). \tag{21}$$

Es ist von Interesse, diesen Ausdruck mit der Formel zu vergleichen, welche sich aus der quantenmechanischen Durchrechnung des Prozesses der γ-Emission bei gleichzeitiger Änderung des Quantenzustandes der $(\mathfrak{q}, j)$-ten Gitterschwingungen um $\Delta n \equiv \nu$ ergibt. Wie hier nicht weiter ausgeführt werden soll [12], erweist sich die Wahrscheinlichkeit für diesen Prozeß nach thermischer Mittelung über den Ausgangszustand der betreffenden Gitterschwingung als proportional zur Größe

$$\exp\left\{\frac{\nu \hbar \omega}{2 k T}\right\} \exp\left\{-\frac{k_s^2 \hbar}{2 N m \omega} \operatorname{cotgh} \frac{\hbar \omega}{2 k T}\right\} I_\nu\left(\frac{k_s^2 \hbar}{2 N m \omega} \frac{1}{\sinh(\hbar\omega/2 k T)}\right). \tag{22}$$

Ersichtlich geht diese Quantenformel für hohe Temperaturen ($k T \gg \hbar \omega$) und für nicht zu große $|\nu|$-Werte in die klassische Formel (21) über [13]. Für Temperaturen, die klein gegen die DEBYE-Temperatur des Gitters sind, treten aber wesentliche Unterschiede zwischen den Formeln (21) und (22) auf. Im besonderen verschwinden nach letzterer im Limes $T \to 0$ die γ-Emissionswahrscheinlichkeiten bei gleichzeitiger Absorption von Phononen ($\Delta n \equiv \nu < 0$), während die Wahrscheinlichkeiten bei gleichzeitiger Emission von Phononen ($\Delta n \equiv \nu > 0$), wie auch die für den Prozeß ohne Änderung des Schwingungszustandes des Gitters ($\Delta n \equiv \nu = 0$, MÖSSBAUER-Linie) endlich bleiben.

Setzt man nun die Ausdrücke (21) bzw. (22) in die Intensitätsformel (20) ein und verwendet die Relation

$$\frac{1}{\Delta\omega^2 + \gamma^2} = \Re\mathrm{e}\left\{\frac{1}{\gamma} \int_0^\infty \exp\{-\gamma \mu + i \Delta\omega\, \mu\}\, \mathrm{d}\mu\right\},$$

[11] Vgl. z. B. W. MAGNUS u. F. OBERHETTINGER, Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik, 2. Aufl., S. 49.

[12] Vgl. etwa PETZOLD [2], im besonderen § 5.

[13] Man beachte jedoch, daß der Betrag des Ausbreitungsvektors in (21) und in den daraus abgeleiteten Formeln (23) und (25) durch $\hbar\, \omega_0/c$, in (22) sowie in den Formeln (24) und (26) durch $\hbar\, \omega/c$ gegeben ist. Doch fällt dieser Unterschied, außer bei der Berechnung des Linienschwerpunktes, bei kleinen $R/\hbar\omega_D$-Werten nicht ins Gewicht.

so lassen sich die $\nu_{\mathfrak{q},j}$-Summen vermittels der Beziehung

$$\sum_{\nu=-\infty}^{+\infty} I_\nu(z) \exp\{i\,\nu\,\vartheta\} = \exp\{z\cos\vartheta\}$$

ausführen und ergeben

$$|F_\omega|^2_{\text{klass}} = \frac{1}{4\,\pi^2\,\gamma}\,\Re\left\{\int_0^\infty \exp\left\{-\gamma\,\mu + i(\omega-\omega_0)\,\mu - \sum_{\mathfrak{q},j}\frac{k_s{}^2\,k\,T}{N\,m\,\omega^2_{\mathfrak{q},j}}\,(1-\cos\omega_{\mathfrak{q},j}\,\mu)\right\}\mathrm{d}\mu\right\}, \tag{23}$$

beziehungsweise

$$|F_\omega|^2_{\text{quant}} = \frac{1}{4\,\pi^2\,\gamma}\,\Re\left[\int_0^\infty \exp\{-\gamma\,\mu + i(\omega-\omega_0)\,\mu\}\right. \tag{24}$$

$$\left.\cdot\exp\left\{-\sum_{\mathfrak{q},j}\frac{k_s{}^2\,\hbar}{2\,N\,m\,\omega_{\mathfrak{q},j}}\left[\operatorname{cotgh}\frac{\hbar\,\omega_{\mathfrak{q},j}}{2\,k\,T}\,(1-\cos\omega_{\mathfrak{q},j}\,\mu) - i\sin\omega_{\mathfrak{q},j}\,\mu\right]\right\}\mathrm{d}\mu\right].$$

Die letztere Formel stimmt, abgesehen vom γ-Glied, mit der in den einschlägigen Arbeiten abgeleiteten Quantenformel für die spektrale Intensitätsverteilung bis auf einen frequenz- und temperaturunabhängigen Faktor überein [14].

Es ist bemerkenswert, daß trotz der Übereinstimmung der Beziehung (21) und (22) für den Grenzfall hoher Temperaturen und für nicht zu große $|\nu|$-Werte die Quantenformel (24) für diesen Grenzfall nicht in die entsprechende klassische Formel (23) übergeht. Der Grund hierfür liegt einerseits im ersten Faktor von (22), der bei der Summierung über ν auch für größere $|\nu|$-Werte benötigt wird. Andererseits wurde bei der Ableitung der klassischen Formel (23) der auf den Leuchtkern übertragene Rückstoß, im Gegensatz zur Behandlung im II. Abschnitt, nicht berücksichtigt, während bei der Ableitung der quantenmechanischen Formel (24) dem Rückstoß automatisch Rechnung getragen wird.

Dieser Unterschied wird besonders deutlich, wenn man in den beiden Formeln zum Grenzfall eines freien Leuchtkerns übergeht, d. h. alle $\omega_{\mathfrak{q},j}$ gegen Null gehen läßt und dabei $\Sigma\,k_s{}^2 f(\omega_{\mathfrak{q},j})$ durch $N\,k^2 f(0)$ ersetzt. Dann folgt aus (23) unter Berücksichtigung von $\hbar^2 k^2/2\,m = R$

$$|F_\omega|^2_{\text{klass}} = \frac{1}{4\,\pi^2\,\gamma}\,\Re\left[\int_0^\infty \exp\{-\gamma\,\mu + i(\omega-\omega_0)\,\mu - R\,k\,T\,\mu^2/\hbar^2\}\,\mathrm{d}\mu\right], \tag{25}$$

während (24) übergeht in

$$|F_\omega|^2_{\text{quant}} = \frac{1}{4\,\pi^2\,\gamma}\,\Re\left[\int_0^\infty \exp\{-\gamma\,\mu + i(\omega-\omega_0+R/\hbar)\,\mu - R\,k\,T\,\mu^2/\hbar^2\}\,\mathrm{d}\mu\right]. \tag{26}$$

Ersichtlich liegt der Linienschwerpunkt nach (26) bei dem erwarteten, durch den Rückstoß bedingten Wert $\omega=\omega_0 - R/\hbar$, während er nach der Formel (25), in der ja der Rückstoß nicht berücksichtigt wurde, bei $\omega=\omega_0$ liegen sollte.

[14] Vgl. hierzu LAMB [7] sowie PETZOLD [2]. In der PETZOLDschen Arbeit wird diese Formel in § 5 durch Aufsummieren über die Wahrscheinlichkeiten für die γ-Emission bei gleichzeitiger Absorption bzw. Emission von Phononen gefunden. Sie folgt, wie bei LAMB, auch, einschließlich des γ-Gliedes, aus der quantenmechanischen Formel für den Zustand des Gesamtsystems nach der γ-Emission, wenn man dort den Resonanznenner, der in der hier verwendeten Bezeichnungsweise die Form $\hbar\,\omega - \hbar\,\omega_0 + \Sigma\,\Delta n_{q,j}\,\hbar\,\omega_{qj} + i\,\hbar\,\gamma$ besitzt, vermittels einer Hilfsintegration in den Exponenten schafft und dann die Summen über die $\Delta n_{q,j}$ ausführt. Sie folgt allerdings nicht aus dieser Rechnung, wenn man, wie es im Anhang A der PETZOLDschen Arbeit geschieht, im Resonanznenner die Summe über die Gitterfrequenzen einfach vernachlässigt. Daher kann auch die mit dieser Vernachlässigung gefundene einfache Formel (3.3) der PETZOLDschen Arbeit für die Zustandsfunktion des Gitters nach dem Prozeß höchstens als eine Art Näherungsformel angesehen werden.