第20卷 第8期 物 理 学 报 Vol. 20, No. 8
1964 年 8 月 ACTA PHYSICA SINICA August, 1964

Mössbauer 譜綫的热致寬*

陸 埮

提 要

本文研究了晶体点陣热运动涨落对于 Mössbauer 譜綫寬度的影响——加寬譜綫（称热致寬）. 定量地討論了完整晶体和杂質原子 Mössbauer 譜綫的这种致寬，并以各向同性三維諧振子为例，对退化情形作了特别討論. 最后还討論了一个具体例子——单原子立方晶体結点上杂質原子 Mössbauer 譜綫的热致寬.

一、引 言

Mössbauer 效应[1]以其特别高的灵敏性，得到了极为广泛的应用[2]，其中对于相对論（引力紅移和运动时鈡变慢[3]）的驗証工作最受人注意. Mössbauer 譜綫的温度能移（二級 Doppler 能移）不仅是引力紅移实驗驗証工作中必須考虑的問題之一[4]，而且它本身又是运动时鈡变慢效应的直接結果[5].

如所周知，Mössbauer 輻射的这种二級 Doppler 能移 δE 可以表示为[6]

$$\delta E = E_0\langle v^2\rangle/2c^2, \tag{1}$$

式中 E_0 为所輻射的 γ 光子能量，$\langle v^2\rangle$ 为輻射核速度的均方值[1)]，c 为眞空中的光速. 因为 $\langle v^2\rangle$ 和各种振动方式中的声子占有数分布有关，当声子数分布不同时，相应能移也不同. 然而，一块处于热平衡状态下的輻射源晶体，它的各种振动方式中的声子占有数并不确定，而是滿足一定的統計分布. 因此，輻射出来的 γ 光子就会有各种不同的能移. 簡言之，輻射源晶体的热振动，不仅造成了 Mössbauer 譜綫的移动，而且也引起了它的加寬（称之为热致寬或温度致寬）.

Snyder 等人曾討論过 Mössbauer 譜綫的热致寬問題[7][2)]. 他們指出，对于一般完整晶体，譜綫的热致寬实际上等于 0，只有杂質原子的 Mössbauer 譜綫才会有这种致寬. 但是，他們在計算时却沒有考虑声子数涨落对 Mössbauer 无反冲跃迁几率的影响. 事实上，这个影响（特别在杂質原子情形）不能忽略. 因此，我們将在同时考虑 Boltzmann 分布和 Mössbauer 几率双重权重的前提下較严格地重新論証这些結論，并且求得了 Mössbauer 譜綫热致寬和点陣频譜結构的定量关系.

完整晶体 Mössbauer 譜綫热致寬等于零的物理原因是明显的，那是在于其频譜是連續（或准連續）的，正則振动方式很多（$\sim N$, N 为晶体內原子数），每种振动方式对 $\langle v^2\rangle$ 都有独立的、微小的（$\sim 1/N$）貢献. 尽管这些微小的貢献对所有振动方式求和时給出了有

* 1963 年 2 月 21 日收到; 1963 年 12 月 7 日收到修改稿.

1) 本文中均以〈…〉表示量子态平均值，而上加横綫表示热平衡統計平均值.

2) Кривоглаз 还討論了固体溶液中的这种致寬[8].

限的总效果(温度能移),但取决于声子分布統計涨落的热致寬却微乎其微 ($\sim 1/\sqrt{N}$).

但是,当只存在很少振动方式时,情况就十分不同. 这时,致寬和能移往往具有同一数量級,或前者略小一些. 杂質原子的 Mössbauer 效应就是一个实际例子.

本文将分别討論完整晶体、杂質原子 Mössbauer 譜綫的热致寬,并且以各向同性三維諧振子为例,对退化情形作了特别討論.

二、完整晶体 Mössbauer 譜綫的热致寬

定量地說,我們可以用一定温度 (T) 下輻射出来的 Mössbauer 光子能移 δE 的均方偏差值 Δ_T^2 来描述譜綫的热致寬. 显然,輻射出来具有各种能移的 Mössbauer 光子数,不仅决定于晶体处在各种声子数分布态的几率(Boltzmann 分布),而且还决定于处在这些态时进行无反冲輻射的几率 (Mössbauer 几率).

設以附标 μ 标識相应于正則坐标,正則动量和实极化矢量分别为 Q_μ, P_μ 和 $\boldsymbol{\sigma}_\mu$ 的正則振动方式, n_μ 为其声子占有数,則晶体处在声子数分布 $\{n_\mu\}$ 状态的几率为 $C\exp\left(-\sum_\mu n_\mu x_\mu\right)$, 这里 $x_\mu = \hbar\omega_\mu/kT$, k 为 Boltzmann 常数, C 为某归一常数. 将輻射核位移(相对于平衡位置) $\mathbf{u}$ 和速度 $\mathbf{v}$ 展开为

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{u} &= \sum_\mu \mathbf{u}_\mu = \sum_\mu u_\mu \boldsymbol{\sigma}_\mu, \quad u_\mu = \xi_\mu Q_\mu; \\ \mathbf{v} &= \sum_\mu \mathbf{v}_\mu = \sum_\mu v_\mu \boldsymbol{\sigma}_\mu, \quad v_\mu = \xi_\mu P_\mu, \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

注意到各正則振动方式相互独立,且 $\omega_\mu^2\langle Q_\mu^2\rangle = \langle P_\mu^2\rangle = \left(n_\mu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_\mu$,我們有

$$\left.\begin{aligned} \langle u_\mu u_{\mu'}\rangle &= \delta_{\mu\mu'}\langle u_\mu^2\rangle_0(2n_\mu + 1), \ \langle u_\mu^2\rangle_0 = \xi_\mu^2\hbar/2\omega_\mu; \\ \langle v_\mu v_{\mu'}\rangle &= \delta_{\mu\mu'}\langle v_\mu^2\rangle_0(2n_\mu + 1), \ \langle v_\mu^2\rangle_0 = \xi_\mu^2\hbar\omega_\mu/2. \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

因此,处在声子数分布 $\{n_\mu\}$ 状态的晶体的 Mössbauer 几率[9] $f(\{n_\mu\})$ 和相应的 Mössbauer 譜綫能移 δE [見(1)式] 可分别写成

$$f(\{n_\mu\}) = \exp[-\langle(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u})^2\rangle] = \exp\left\{-\sum_\mu k^2\langle u_\mu^2\rangle_0(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mu)^2(2n_\mu + 1)\right\} \tag{4}$$

和

$$\delta_{\{n_\mu\}}E = \frac{E_0}{2c^2}\sum_\mu \langle v_\mu^2\rangle_0(2n_\mu + 1), \tag{5}$$

式中 $\mathbf{n} = -\mathbf{k}/k$ 为輻射方向[1], $-\hbar\mathbf{k}$ 为所輻射的 γ 光子的动量, $\langle\cdots\rangle_0$ 表示振子基态平均值. 引入

$$\left.\begin{aligned} A_\mu &= (E_0/c^2)\langle v_\mu^2\rangle_0, \\ y_\mu &= 2k^2\langle u_\mu^2\rangle_0(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mu)^2, \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

那么(4),(5)两式可簡写为

$$\left.\begin{aligned} f(\{n_\mu\}) &= \exp\left[-\sum_\mu y_\mu\left(n_\mu + \frac{1}{2}\right)\right], \\ \delta_{\{n_\mu\}}E &= \sum_\mu A_\mu\left(n_\mu + \frac{1}{2}\right). \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

1) 这里的 k 是 γ 光子的波数,不要和 Boltzmann 常数相混.

于是，Mössbauer 譜綫热致寬 Δ_T^2 可以写成

$$\Delta_T^2 = C\sum_{\{n_\mu\}}(\delta_{\{n_\mu\}}E - \delta_{\{\bar{n}_\mu\}}E)^2 f(\{n_\mu\})e^{-\sum_\mu n_\mu x_\mu}, \tag{8}$$

归一常数 C 取为 $1\Big/\left[\sum_{\{n_\mu\}} f(\{n_\mu\})e^{-\sum_\mu n_\mu x_\mu}\right]$. 展开 $(\delta_{\{n_\mu\}}E - \delta_{\{\bar{n}_\mu\}}E)^2$，經逐項运算，并进行归并后，不难簡化为

$$\Delta_T^2 = \sum_\mu A_\mu^2(\bar{n}'_\mu + \bar{n}'^2_\mu) + \left[\sum_\mu A_\mu(\bar{n}'_\mu - \bar{n}_\mu)\right]^2, \tag{9}$$

式中带"′"的平均是指包括热平衡分布(Boltzmann 分布)和无反冲跃迁几率双重权重在內所取的平均，即

$$\bar{n}'_\mu = \sum_{n_\mu=0}^{\infty} n_\mu e^{-n_\mu(x_\mu+y_\mu)}\Big/\sum_{n_\mu=0}^{\infty} e^{-n_\mu(x_\mu+y_\mu)} = 1/(e^{x_\mu+y_\mu} - 1), \tag{10}$$

在运算过程中，也用到了关系式

$$\bar{n}'^2_\mu = \sum_{n_\mu=0}^{\infty} n_\mu^2 e^{-n_\mu(x_\mu+y_\mu)}\Big/\sum_{n_\mu=0}^{\infty} e^{-n_\mu(x_\mu+y_\mu)} = \bar{n}'_\mu + 2\bar{n}'^2_\mu. \tag{11}$$

对于完整晶体，ξ_μ（因而 u_μ 和 v_μ）是 $1/\sqrt{N}$ 級小量[見(2)式][10]，所以 $\langle u_\mu^2\rangle_0$, $\langle v_\mu^2\rangle_0$, A_μ, y_μ 都是 $1/N$ 級小量. 显然

$$\bar{n}'_\mu - \bar{n}_\mu = \frac{1}{e^{x_\mu+y_\mu} - 1} - \frac{1}{e^{x_\mu} - 1} \approx -\frac{y_\mu e^{x_\mu}}{(e^{x_\mu} - 1)^2}$$

也是 $1/N$ 級小量. 注意到(9)式求和号下的項数 $\sim N$，而每項都是 $1/N^2$ 級小量，因此，当 $N\to\infty$ 时，热致寬 $\Delta_T \sim 1/\sqrt{N} \to 0$. 这就証明了完整晶体 Mössbauer 譜綫不存在热致寬. 由于来自 Mössbauer 几率权重因子的 y_μ 是小量，較之 x_μ 可以忽略，因此在完整晶体情形下，Snyder 等[7]只考虑 Boltzmann 分布权重因子的做法是允許的.

三、杂質原子 Mössbauer 譜綫的热致寬

如果有一个杂質原子处在完整晶体中，由于它的質量不同于晶体原子質量，它和晶体原子之間的力常数不同于晶体原子之間的力常数，从而改变了点陣頻譜[11]. 一般地說，杂質原子振动方式常兼有連續頻譜和分立頻譜(如当杂質原子質量小或力常数大时). 相应于連續頻譜的振动方式是传播于整块晶体的格波，这种振动的每一声子能量是整块晶体各原子共有的，因此，杂質原子連續頻譜中每种振动方式的振幅平方 $\langle u_\mu^2\rangle$（或速度平方 $\langle v_\mu^2\rangle$）都很小（$\sim 1/N$）. 但是，分立頻譜却是局部振动方式，相应声子的能量局限于杂質原子附近的少数几个原子，这种振动的振幅平方(或速度平方)将是和 N 无关的有限量.

設以 s 和 μ 分别表示分立頻譜和連續頻譜振动方式各量的附标，而附标 i 包括两者在內，則杂質原子 Mössbauer 輻射的几率 $f(\{n_i\})$ 为[12]

$$f(\{n_i\}) = f_1(\{n_\mu\})f_2(\{n_s\}), \tag{12}$$

这里，$f_1(\{n_\mu\})$ 是連續頻譜部分对无反冲跃迁几率的貢献，它取通常的指数形式

$$f_1(\{n_\mu\}) = \exp\left[-\sum_\mu k^2\langle u_\mu^2\rangle_0(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_\mu)^2(2n_\mu + 1)\right], \tag{13}$$

而 $f_2(\{n_\mu\})$ 是分立頻譜局部振动方式的貢献，它取如下形式[12]：

$$f_2(\{n_s\}) = \prod_s W_s(n_s), \tag{14}$$

$$W_s(n_s) = |\langle n_s|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}_s}|n_s\rangle|^2 = \\ = e^{-k^2\langle u_s^2\rangle_0(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_s)^2}\left\{\sum_{\nu=0}^{n_s}\frac{n_s!}{(\nu!)^2(n_s-\nu)!}[-k^2\langle u_s^2\rangle_0(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_s)^2]^\nu\right\}^2, \tag{15}$$

式中 $|n_s\rangle$ 为第 n_s 諧振激发态态矢. 能移值 $\delta_{\{n_i\}}E$ 也可以按各振动方式展开：

$$\delta_{\{n_i\}}E = \frac{E_0}{2c^2}\left\{\sum_\mu\langle v_\mu^2\rangle_0(2n_\mu+1) + \sum_s\langle v_s^2\rangle_0(2n_s+1)\right\}. \tag{16}$$

重要的是，$\langle u_\mu^2\rangle_0$ 和 $\langle v_\mu^2\rangle_0$ 都是小量（$\sim 1/N$），而 $\langle u_r^2\rangle_0$ 和 $\langle v_s^2\rangle_0$ 却是和N无关的有限量.

显然，如果也取(6)式的簡写，那么，杂質原子 Mössbauer 譜綫热致寬 Δ_T^2 可以表达为

$$\Delta_T^2 = Ce^{-\sum_\mu y_\mu/2}\sum_{\{n_i\}}\left[\sum_i A_i(n_i-\bar{n}_i)\right]^2 e^{-\sum_\mu[n_\mu(x_\mu+y_\mu)]-\sum_s n_s x_s}\prod_s W_s(n_s), \tag{17}$$

归一常数 C 取 $1\Big/\sum_{\{n_i\}}e^{-\sum_\mu[n_\mu(x_\mu+y_\mu)+y_\mu/2]-\sum_s n_s x_s}\prod_s W_s(n_s)$. 展开（17）式中的 $\left[\sum_i A_i(n_i-\bar{n}_i)\right]^2$，分别运算，并进行归并，可得

$$\Delta_T^2 = \sum_\mu A_\mu^2(\bar{n}_\mu' + \bar{n}_\mu'^2) + \sum_s A_s^2(\overline{n_s^2}' - \bar{n}_s'^2) + \left[\sum_i A_i(\bar{n}_i' - \bar{n}_i)\right]^2.$$

当 $N\to\infty$ 时，并考虑到(6)式，有

$$\Delta_T^2 = \frac{E_0^2}{c^4}\left\{\sum_s\langle v_s^2\rangle_0^2(\overline{n_s^2}' - \bar{n}_s'^2) + \left[\sum_s\langle v_s^2\rangle_0(\bar{n}_s' - \bar{n}_s)\right]^2\right\}, \tag{18}$$

这里，包括热平衡分布和无反冲跃迁几率双重权重在內所取的带“′”的平均为

$$\left.\begin{aligned}\bar{n}_s' &= \sum_{n_s=0}^\infty n_s W_s(n_s)e^{-n_s\hbar\omega_s/kT}\Big/\sum_{n_s=0}^\infty W_s(n_s)e^{-n_s\hbar\omega_s/kT},\\ \overline{n_s^2}' &= \sum_{n_s=0}^\infty n_s^2 W_s(n_s)e^{-n_s\hbar\omega_s/kT}\Big/\sum_{n_s=0}^\infty W_s(n_s)e^{-n_s\hbar\omega_s/kT}.\end{aligned}\right\} \tag{19}$$

在很低温度时，可以略去 $e^{-\hbar\omega_s/kT}$ 的平方以上高次項，于是(19)式可以簡化为

$$\left.\begin{aligned}\bar{n}_s' &\approx \frac{W_s(1)}{W_s(0)}e^{-\hbar\omega_s/kT},\\ \overline{n_s^2}' &\approx \overline{n_s'},\end{aligned}\right\} \tag{20}$$

而(18)式将簡化为

$$\Delta_T^2 \approx \frac{E_0^2}{c^4}\sum_s\langle v_s^2\rangle_0^2\frac{W_s(1)}{W_s(0)}e^{-\hbar\omega_s/kT} \approx \\ \approx \frac{E_0^2}{c^4}\sum_s\langle v_s^2\rangle_0^2[1-k^2\langle u_s^2\rangle_0(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}_s)^2]^2 e^{-\hbar\omega_s/kT}. \tag{21}$$

由于杂質原子分立頻率为数不多，这个公式給出了 Mössbauer 譜綫热致寬和温度之間的簡单关系. 如果分立頻率只有一个，或各分立頻率十分接近，那么热致寬在低温下和温度的关系将遵循良好的指数律. 若以 $\ln\Delta_T$ 为縱坐标，而以 $1/T$ 为横坐标，那么将得到直

綫，由它的斜率可以确定分立頻率.

公式(18)表达了杂質原子 Mössbauer 譜綫热致寬 Δ_T 与分立頻率局部振动方式之間的定量关系，而公式(21)表达了它的低温行为，这里并不出現連續頻譜部分. 这一特点使得 Mössbauer 譜綫的热致寬可以用来分离地研究分立頻譜，不会因为連續頻譜部分的复杂性而带来額外的麻煩. (19)式中同时存在 Boltzmann 分布 ($e^{-n_s\hbar\omega_s/kT}$) 和 Mössbauer 几率 ($W_s(n_s)$) 双重权重，一般地說，两者都不能忽略. 应当注意，出現在公式中的 $\langle v_s^2\rangle_0$ 和 $\langle u_s^2\rangle_0$ 不是独立的，它們之間存在着关系式 $\langle v_s^2\rangle_0 = \omega_s^2\langle u_s^2\rangle_0$. 考虑到局部振动方式的能量，一般并不完全集中在一个原子上，因此 $\langle u_s^2\rangle_0$ 和 $\langle v_s^2\rangle_0$ 应該比諧振子的相应值 $\hbar/2M\omega_s$ 和 $\hbar\omega_s/2M$ 要小一些，即

$$\langle u_s^2\rangle_0 = \eta_s^2\hbar/2M\omega_s, \quad \langle v_s^2\rangle_0 = \eta_s^2\hbar\omega_s/2M, \qquad \eta_s^2 \leqslant 1. \tag{22}$$

只要求得了杂質原子分立頻譜結构和 η_s，就可以由(18)式求得热致寬.

四、存在退化时的情形

对于退化情形(对应于一个頻率存在若干种振动方式，如各向同性的三維諧振子，在杂質原子問題中会遇到这种情形)[13,14]，必須特别加以討論.

上面关于 Mössbauer 跃迁几率的公式中，我們只計及了旣无声子发射，也无声子吸收的零声子过程. 事实上，只要发射声子的总能量和吸收声子的总能量相等，多声子过程也会对 Mössbauer 輻射作出貢献. 一般地說，連續頻譜的多声子过程确可忽略，但分立頻率退化振动方式之間的声子交換过程却能对 Mössbauer 輻射作出显著貢献. Kaufman 和 Lipkin 指出[14]，在退化情形下，正則振动方式的选取不是唯一的，只要通过正則振动方式的适当选取，总可以使退化态間之声子交換跃迁过程不再存在. 作了这种选取后，Mössbauer 譜綫热致寬的計算也变得非常容易. 我們将以各向同性三維諧振子为例說明之.

选择这样的三个相互正交的单位实矢量作为各向同性三維諧振子的极化矢量，使其中之一 ($\boldsymbol{\sigma}_1$) 平行于 $\mathbf{k}$ (这三种振动方式的声子占有数分别記为 n_1, n_2, n_3，而退化頻率記为 ω)，那么，包括零声子和声子交換过程在內的 Mössbauer 跃迁几率 $W(\{n_s\})$ $(s=1,2,3)$ 显然应該是

$$W(\{n_s\}) = \sum_{\{n_s'\}} \delta_{n_1'+n_2'+n_3',\ n_1+n_2+n_3} |\langle\{n_s'\}|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}}|\{n_s\}\rangle|^2 = |\langle n_1|e^{iku_1}|n_1\rangle|^2 =$$

$$= e^{-R/\hbar\omega}\left\{\sum_{\nu=0}^{n_1}\frac{n_1!}{(\nu!)^2(n_1-\nu)!}\left(-\frac{R}{\hbar\omega}\right)^{\nu}\right\}^2 \equiv W(n_1), \tag{23}$$

式中 $R = (\hbar k)^2/2M$ 为平均反冲能量損失[9,15]. 得到此式时曾用到 $\mathbf{u} = \sum_{s=1}^{3} u_s\boldsymbol{\sigma}_s$, $\mathbf{k}\cdot\mathbf{u} = ku_1$, $\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$ 和 $\langle u_1^2\rangle_0 = \hbar/2M\omega$ 等关系.

考虑到 $\langle v_1^2\rangle_0 = \langle v_2^2\rangle_0 = \langle v_3^2\rangle_0 = \langle v^2\rangle_0/3$, $\overline{n^2} = \bar{n} + 2\overline{n^2}$，不难把 Mössbauer 譜綫热致寬

$$\Delta_T^2 = \frac{E_0^2}{c^4}\sum_{\{n_s\}}\left[\sum_{s=1}^{3}\langle v_s^2\rangle_0(n_s-\bar{n}_s)\right]^2 e^{-\sum_s n_s\hbar\omega/kT} W(n_1)\Big/\sum_{\{n_s\}} e^{-\sum_s n_s\hbar\omega/kT} W(n_1)$$

化簡为

$$\Delta_T^2 = \left(\frac{E_0\langle v^2\rangle_0}{3c^2}\right)^2 \left\{(\overline{n_1^2}' - 2\bar{n}_1\bar{n}_1' - \bar{n}_1) + \sum_{s=1}^{3}(\bar{n}_s + \bar{n}_s^2)\right\} =$$

$$= \left(\frac{E_0\langle v^2\rangle_0}{3c^2}\right)^2 \left\{\overline{n_1^2}' - \frac{2\bar{n}_1' + 1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} + \frac{3e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)^2}\right\}, \tag{24}$$

这里带"′"的平均 ($\overline{n_1^2}'$ 和 $\bar{n}_1'$) 仍按(19)式确定,其中的 $W(n_1)$ 取(23)式形式.

五、一个具体例子

現在来討論杂質原子(質量为 M)位于单原子(質量为 M_0)立方晶体結点上的一个具体例子. 对于这种情形, Каган 和 Иосилевский 在討論 Mössbauer 几率时曾求得[12]

$$\langle u_s^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{2M\omega_s}\frac{M}{M_0}\left(\frac{\partial \ln \omega_s^2}{\varepsilon}\right)_\gamma,$$

它和諧振子相差

$$\eta_s^2 = \frac{M}{M_0}\left(\frac{\partial \ln \omega_s^2}{\partial \varepsilon}\right)_\gamma \tag{25}$$

倍. 这里 $\varepsilon = (M_0 - M)/M_0$, $(1-\gamma)$ 为晶体內各原子作用于杂質原子的力常数与作用于晶体原子的相应力常数之比(假定为常数).

对于研究杂質原子 Mössbauer 譜綫热致寬最感兴趣的是分立頻率 ω_s 足够高(远离連續頻譜)的情形. 在 $\varepsilon > \gamma$ 情况下, 利用特别輕的杂質原子, 可以实現这种情形. 根据 Каган 和 Иосилевский 的計算[12],这时可以得到如下的近似結果:

$$\omega_s^2 \approx \langle\langle\omega^2\rangle\rangle \frac{\varepsilon - \gamma}{1 - \varepsilon}\left\{1 + \frac{1-\varepsilon}{(\varepsilon-\gamma)^2}\left[(\varepsilon - 2\gamma + \gamma^2)\frac{\langle\langle\omega^4\rangle\rangle}{\langle\langle\omega^2\rangle\rangle^2} + \gamma(1-\gamma)\right]\right\} \tag{26}$$

和

$$\eta_s^2 \approx \frac{1-\gamma}{\varepsilon-\gamma}\left\{1 - \frac{1-\varepsilon}{(\varepsilon-\gamma)(1-\gamma)}\left[(\varepsilon - 2\gamma + \gamma^2)\frac{\langle\langle\omega^4\rangle\rangle}{\langle\langle\omega^2\rangle\rangle^2} + \gamma(1-\gamma)\right]\right\}, \tag{27}$$

式中 $\langle\langle\ \rangle\rangle$ 表示对完整晶体頻譜作出的平均. 对于极端輕的杂質原子情形 ($\varepsilon \to 1$), $\eta_s \approx 1$,和諧振子相同. 可以預期,这时将会观察到显著的 Mössbauer 譜綫热致寬.

在这个例子中, 分立頻率 ω_s 只有一个(因此附标 s 可以略去). 从例子的对称性(单原子立方晶体)容易看出,对应于这个頻率,存在着三个相互正交的极化方向,因此是三度退化的情形. 这时,应該根据第四节中的討論进行計算. 注意到除了 $\eta_s \neq 1$ (以后 η_s 的附标 s 也略去)外, 这个例子实际上就是三維退化諧振子, 因此可以直接应用第四节中的結果, 只是应該把 R 换成 $\eta^2 R$,把 $\langle v^2\rangle_0$ 换成 $\langle v_l^2\rangle_0$. 这里, $\langle v_l^2\rangle_0 = \sum_{s=1}^{3}\langle v_s^2\rangle_0 = \eta^2 3\hbar\omega/2M$ 仍不是輻射核的全部零点振动均方速度,因为它沒有包括連續頻譜的貢献,附标 l 在于表明它只包含了全部局部振动方式的貢献.

現在来討論两个极端情形:

(i) $\hbar\omega \gg kT$:

这时可以利用(20)式,因此

$$\Delta_T^2 \approx \left(\eta^2 R\frac{\hbar\omega}{E_0}\right)^2\left(3 - 2\eta^2\frac{R}{\hbar\omega} + \eta^4\frac{R^2}{\hbar^2\omega^2}\right)e^{-\hbar\omega/kT}. \tag{28}$$

由此可見，低温下这个退化情形的 Mössbauer 譜綫热致寬 Δ_T 和温度 T 的关系仍遵循簡单指数律．因此，測定了 Δ_T 和 T 的关系，就可确定 ω 和 η^2．

(ii) $\hbar\omega \gg \eta^2 R$：

这时 $W(n) \approx 1$ [見(23)式]，使 $\bar{n}' \approx \bar{n}$，$\overline{n^2}' \approx \overline{n^2} = \bar{n} + 2\bar{n}^2$，于是由(24)式可得

$$\Delta_T^2 \approx \left(\frac{E_0\langle v_l^2\rangle_0}{3c^2}\right)^2 \frac{3e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)^2} \approx 3\eta^4\left(\frac{E_0\hbar\omega}{2Mc^2}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)^2}. \tag{29}$$

而 Δ_T 和零点振动能移 $\delta_0 E$ [見(1)式]之比为

$$\frac{\Delta_T}{\delta_0 E} \approx \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{\langle v_l^2\rangle_0}{\langle v^2\rangle_0}\frac{e^{\hbar\omega/2kT}}{(e^{\hbar\omega/kT}-1)}. \tag{30}$$

一般情况下，$\langle v_l^2\rangle_0$ 和 $\langle v^2\rangle_0$ 同数量級，因此，当温度不太低时，热致寬 Δ_T 与能移 $\delta_0 E$ 也同数量級．这一公式一方面明显地表达了热致寬和温度的簡单关系 $\left(\Delta_T \propto \frac{e^{\hbar\omega/2kT}}{e^{\hbar\omega/kT}-1}\right)$，另一方面也表明，如果測定了 Δ_T 和 $\delta_0 E$，就可以确定局部振动方式对杂質原子均方速度所作貢献的大小 $\left(\frac{\langle v_l^2\rangle_0}{\langle v^2\rangle_0}\right)$．因为从 Δ_T 和温度 T 的关系，可以明确地定出分立頻率 ω，从而由(29)式可以求出 η^2，这可用来驗証(27)式或借助(27)式确定晶体內各原子作用于杂質原子的力常数与作用于晶体原子的相应力常数之比．这些結論有助于研究杂質原子附近的局部振动方式．

六、几点說明

因为热致寬不仅存在于輻射过程，也存在于吸收过程中，而实际的 Mössbauer 实驗总是同时用到輻射和吸收，因此，实測的 Mössbauer 曲綫的加寬，将是两过程中致寬之迭加結果．实际上，杂質原子形式只适用于輻射核，共振吸收核总是吸收片的基本成分(非杂質)．然而，只有杂質原子才会有热致寬，因此，Mössbauer 曲綫的热致寬将完全在于輻射过程．

热运动也会影响到晶体內場．如果內場所造成的譜綫分裂的裂距小于譜綫自然寬度，观察到的将只是譜綫加寬而不是分裂．这种加寬也会和温度有关．将本文所討論的热致寬分离出来并不容易．为了減少这种复杂性，首先研究內場相当強的情形而观測每一分裂后的譜綫的热致寬是有好处的．

参　考　文　献

[1] Mössbauer, R. L., *Z. Phys.*, **151** (1958), 124; *Z. Naturforsch*, **14a** (1959), 211; *Science*, **137** (1962), 731.

[2] Любимов, В. А., Гамма-лучи, Издательство АН СССР (1961), 682.

[3] Einstein, A., *Ann. d. Phys.*, **17** (1905), 891; **35** (1911), 898.

[4] Pound, R. V., Rebka, G. A., *Phys. Rev. Letters*, **4** (1960), 337.

[5] Pound, R. V., Rebka, G. A., *Phys. Rev. Letters*, **4** (1960), 274.

[6] Josephson, B. D., *Phys. Rev. Letters*, **4** (1960), 341; Boyle, A. J. F. et al., *Proc. Phys. Soc.*, **76** (1960), 165.

[7] Snyder, H. S., Wick, G. C., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 128; Silsbee, R. H., *Phys. Rev.*, **128** (1962), 1726.

[8] Кривоглаз, М. А., *ЖЭТФ*, **41** (1961), 765.

[9] Lipkin, H. J., *Ann. of Phys.*, **9** (1960), 332.
[10] 程开甲，固体物理学，附注[10]，1959，高等教育出版社.
[11] Maradudin, A. A. et al., *Rev. Mod. Phys.*, **30** (1958), 175.
[12] Каган, Ю., Иосилевский, Я. А., *ЖЭТФ*, **42** (1962), 259.
[13] Казарновский, К. В., Степанов, А. В., *ЖЭТФ*, **43** (1962), 2299.
[14] Kaufman, B., Lipkin, H. J., *Ann. of Phys.*, **18** (1962), 294.
[15] 陆 埮，物理学报，**18** (1962)，483.

THE THERMAL BROADENING OF THE MÖSSBAUER LINE

LU TAN

ABSTRACT

The broadening of the Mössbauer line due to the fluctuation of lattice vibration (named thermal broadening) is discussed. The quantitative formula relating this broadening to the structure of localized vibrational modes (with discrete frequencies) round the impurity radiating atom in crystal is obtained, and the thermal broadening in the degenerate case is analysed in some detail.