

1.4 Streuung an Kristallen

1.4.1 Elastische Streuung

Wir betrachten etwa die folgende Situation.

Zunächst spezifizieren wir den Anfangszustand des Kristalls durch

$$|\{n^i\}\rangle := |n_{\vec{k}_1, s_1}^i, n_{\vec{k}_2, s_2}^i \dots\rangle.$$

Der Zustand nach der Kollision sei durch

$$|\{n^f\}\rangle := |n_{\vec{k}_1, s_1}^f, n_{\vec{k}_2, s_2}^f \dots\rangle$$

bezeichnet. Wir machen nun die Annahme:

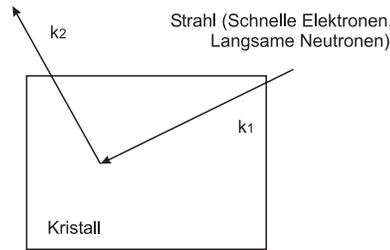


Abbildung 1.17: Streuung des Strahls durch Kristall

Die einzigen Anregungen, die durch den Strahl im Kristall erzeugt werden, sind Phononen.

Der Zustand für den Strahl (ohne Spin) vor und nach der Streuung wird durch

$$|\vec{k}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}_1 \vec{r}} = b_{\vec{k}_1}^{\pm} |0\rangle$$

$$|\vec{k}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}_2 \vec{r}} = b_{\vec{k}_2}^{\pm} |0\rangle$$

bezeichnet.

Die Hamilton-Funktion sei die, die aus der harmonischen Approximation genommen ist (ohne Wechselwirkung: Mean Field)

$$\mathcal{H}_{\text{Kristall}} = \sum_{\vec{k}s} \left(a_{\vec{k}s}^{\dagger} a_{\vec{k}s} \right) \hbar \omega_{\vec{k}s}.$$

Die Hamilton-Funktion für den Strahl ist

$$\mathcal{H}_{\text{Strahl}} = \sum_{\vec{q}, \sigma} \epsilon_{\vec{q}\sigma} b_{\vec{q}\sigma}^{\dagger} b_{\vec{q}\sigma},$$

wobei σ der Index für Spin ist.

Wir müssen nun noch die Wechselwirkung zwischen Strahl und Kristall betrachten. Dazu benutzen wir die *Goldene Regel* von Fermi, um die Streuung

zu beschreiben. Die Übergangsrate vom Zustand $|\vec{k}_1, \{n^i\}\rangle$ nach $|\vec{k}_2, \{n^f\}\rangle$ ist gleich

$$\frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}_2, \{n^f\} | \mathcal{H}' | \vec{k}_1, \{n^i\} \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}_1} + E_{\{n^i\}} - \epsilon_{\vec{k}_2} - E_{\{n^f\}}).$$

Um \mathcal{H}' zu erhalten, müssen wir Approximation vornehmen.

Starre Atome-Approximation:

Kristall besteht aus Atomen, deren Index bzgl. der Positionen in der Elementarzelle gewonnen werden kann. Das Potential bzgl. des Atoms j , das dieses durch die Streuung eines Teilchens erfährt, ist: $U_j(\vec{r})$.

Wir schreiben

$$U_j(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{V} e^{i\vec{k}\vec{r}} \lambda_j(\vec{k})$$

$$\int_V U_j(\vec{r}) e^{-i\vec{k}'\vec{r}} d^3r = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{V} \lambda_j(\vec{k}) \int_V e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} d^3r = \lambda_j(\vec{k}').$$

Nehmen wir an, dass das Teilchen beim Durchgang durch den Kristall eine Superposition von den Potentialen $U_j(r)$ sieht.

$$\mathcal{H}' := \sum_{jn} U_j(\vec{r} - \vec{r}_{jn}),$$

wobei \vec{r}_{jn} die Position des Kerns des j -ten Atoms im Kristall ist

$$\vec{r}_{jn} := \vec{a}_n + \vec{d}_j + \vec{u}_{jn}.$$

Damit ist

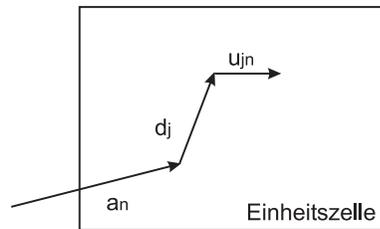


Abbildung 1.18:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \frac{1}{V} \sum_{veck} \sum_{jn} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}_{jn})} \lambda_j(\vec{k}) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{veck} \sum_{jn} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{a}_n-\vec{d}_j-\vec{u}_{jn})} \lambda_j(\vec{k}). \end{aligned}$$

(Achtung: \vec{r} und \vec{u}_{jn} sind Operatoren, dagegen sind \vec{a}_n und \vec{d}_j nur normale Vektoren.)

\vec{k} wird mit dem Impulsübertrag zusammenhängen und wir sind an solchen \vec{k} interessiert, bei denen $\vec{k} \leq$ einige inverse Gitterkonstanten.

$$|\vec{k}\vec{u}_{jn}| \sim \frac{1}{a} u_{jn} \ll 1$$

Damit können wir $e^{-i\vec{k}\vec{u}_{jn}}$ entwickeln und zwar

$$e^{-i\vec{k}\vec{u}_{jn}} = \underbrace{1}_{\mathcal{H}_1} - \underbrace{i\vec{k}\vec{u}_{jn}}_{\mathcal{H}_2} - \underbrace{\frac{1}{2}(\vec{k}\vec{u}_{jn})^2}_{\mathcal{H}_3} + \dots$$

Weiter betrachten wir $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ (\vec{r} bezeichnet den Ort des zu streuenden Teilchens):

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} b_{\vec{k}_2}^+ b_{\vec{k}_1} \langle \vec{k}_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \vec{k}_1 \rangle$$

Nun ist

$$\langle \vec{k}_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \vec{k}_1 \rangle = \frac{1}{V} \int e^{i(\vec{k} + \vec{k}_1 - \vec{k}_2)\vec{r}} d\vec{r} = \delta_{\vec{k}_2, \vec{k} + \vec{k}_1}$$

\Rightarrow

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \vec{k}_1 \vec{k}_2 b_{\vec{k}_2}^+ b_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k} + \vec{k}_1}.$$

Also zusammen für \mathcal{H}_1 :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \sum_j \underbrace{\left(\sum_n e^{-i\vec{k}\vec{a}_n} \right)}_{N \sum_{\vec{g}} \delta_{\vec{g}, \vec{k}}} e^{-i\vec{k}\vec{d}_j} \lambda_j(\vec{k}) \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} b_{\vec{k}_2}^+ b_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2, \vec{k} + \vec{k}_1} \\ &= \frac{N}{V} \sum_{\vec{q}} \left[\underbrace{\sum_j e^{-i\vec{q}\vec{d}_j} \lambda_j(\vec{q})}_{\text{Amplitude}} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} b_{\vec{k}_2}^+ b_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2, \vec{q} + \vec{k}_1} \right], \end{aligned}$$

wobei \vec{g} der reziproke Gittervektor ist.

Der Anteil \mathcal{H}_1 ist *diagonal* in den Phononenvariablen

$$\langle \vec{k}_2, \{n^f\} | \mathcal{H}_1 | \vec{k}_1, \{n^i\} \rangle,$$

d.h. keine Phononen werden erzeugt oder vernichtet.

Es ist

$$\boxed{\vec{k}_2 = \vec{k}_1 + \vec{g}}$$

Angenommen, dass $|\vec{k}_1| = |\vec{k}_2| = |\vec{k}|$

\Rightarrow

$$|\vec{g}| = 2|\vec{k}| \sin(\theta)$$

$$|\vec{g}| = \frac{2\pi n}{d} \quad (\text{Bragg - Reflexe})$$

Bezeichnung: $\left| \sum_j e^{-i\vec{g}\vec{d}_j} \lambda_j(\vec{q}) \right|^2$ heißt *Form- oder Strukturfaktor*.

Die obige Relation bzgl. \vec{k} und \vec{g} sagt auch, dass eine minimale Energie notwendig ist, um Streuung zu erhalten.

Nun zu \mathcal{H}_2 :

$$u_{jn} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}s} e^{i\vec{q}\vec{a}_n} \vec{v}_j(\vec{q}, s) \left(\frac{\hbar}{2Mc\omega_{\vec{q}s}} \right)^{1/2} (a_{\vec{q}s} + a_{-\vec{q}s}^+),$$

damit

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 &= -\frac{i}{V} \underbrace{\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} b_{\vec{k}_2}^+ b_{\vec{k}_1}^- \delta_{\vec{k}_2, \vec{k} + \vec{k}_1}} \overbrace{\sum_{\vec{q}} \sum_n e^{i(\vec{q} - \vec{k})\vec{a}_n}}^{N \sum_{\vec{g}} \delta_{\vec{q} - \vec{k}, \vec{g}}} \\ &\quad \sum_s (a_{\vec{q}s} + a_{-\vec{q}s}^+) \left(\frac{\hbar}{2Mc\omega_{\vec{q}s}N} \right)^{1/2} \sum_j e^{-i\vec{d}_j \vec{k}} \vec{v}_j \cdot \vec{k} \lambda_j(\vec{k}). \end{aligned}$$

Somit erhalten wir Terme der Form

$$b_{\vec{k}_2}^+ b_{\vec{k}_1}^- a_{\vec{q}s} \delta_{\vec{k}_2, \vec{q} - \vec{g} + \vec{k}_1}.$$

Die Abbildung 1.19 zeigt die Beziehung zwischen den Kristallimpulsen vor

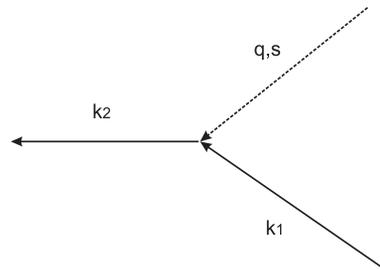


Abbildung 1.19: Beziehung zwischen den Kristallimpulsen vor und nach der Streuung

und nach der Streuung

$$\vec{k}_1 + \vec{q} = \vec{k}_2 + \vec{g},$$

d.h. der gesamte Kristallimpuls ist erhalten bis auf reziproke Gittervektoren. Wir betrachten nun den Fall, dass die Besetzungszahlen vor und nach der Streuung gleich sind:

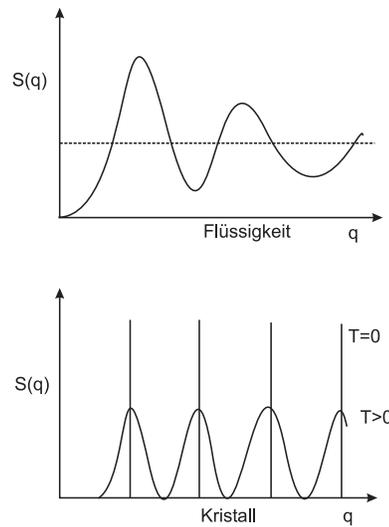


Abbildung 1.20: Strukturfaktor von Kristall und Flüssigkeit

$$\begin{aligned}
 R_{fi} &= \left| \langle \vec{k}_2, \{n^f\} | \mathcal{H}' | \vec{k}_1, \{n^i\} \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \\
 &= \left| \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \sum_{jn} \langle \vec{k}_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \vec{k}_1 \rangle e^{-i\vec{k}\vec{a}_n} \lambda_j(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{d}_j} \right. \\
 &\quad \left. \left(1 - i\vec{k}\vec{u}_{jn} - \frac{1}{2} \langle \vec{k}_2, \{n^f\} | (\vec{k}\vec{u}_{jn})^2 | \vec{k}_1, \{n^i\} \rangle \right) \right|^2 \delta(E_f - E_i) \\
 &= |A|^2 \underbrace{\left(1 - \langle \vec{k}_2, \{n^f\} | (\vec{k}\vec{u}_{jn})^2 | \vec{k}_1, \{n^i\} \rangle + \dots \right)}_D \delta(E_f - E_i),
 \end{aligned}$$

wobei $|i\vec{k}\vec{u}_{jn}| = 0$ und A *Matrixelemente der Bragg-Streuung* sind.

Betrachten wir nun ein thermisches Mittel und behalten alle Terme höherer Ordnung, dann ist

$$D \simeq e^{-\langle (\vec{k}\vec{u})^2 \rangle}.$$

D ist der *Debye-Waller-Faktor*. Dies bedeutet, dass Bragg-Peak und -Intensität mit wachsender Temperatur verloren gehen und zwar exponentiell, da elastische Streuung nun dominiert.

Nachdem wir die Streuung an geordneten Medien untersucht haben, wollen wir nun die Streuung an ungeordneten Medien, etwa wie die Flüssigkeiten, beobachten.

Die Hamilton-Funktion der Wechselwirkung sei durch

$$\mathcal{H}'(\vec{r}, \{\vec{r}_n\}) = \sum_n U(\vec{r} - \vec{r}_n)$$

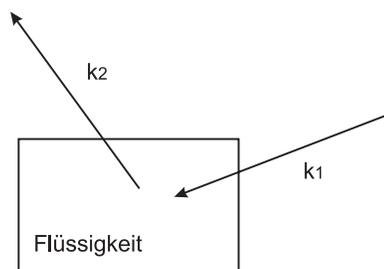


Abbildung 1.21: Streuung des Strahls durch Flüssigkeit

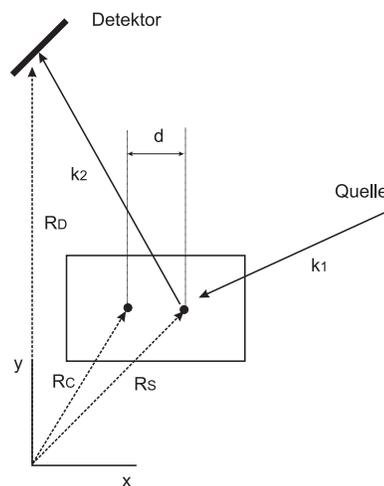


Abbildung 1.22:

beschrieben, wobei \vec{r}_n den Ort aller Teilchen im System bezeichnet. Wir schreiben wieder

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \lambda(\vec{k})$$

und

$$\mathcal{H}'(\vec{r}, \{\vec{r}_n\}) = \frac{1}{V} \sum_n \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}_n)} \lambda(\vec{k}).$$

Nun ist

$$\left| \langle \vec{k}_2 | \mathcal{H}' | \vec{k}_1 \rangle \right|^2 = \left| \langle \vec{k}_2 \left| \sum_n U(\vec{r} - \vec{r}_n) \right| \vec{k}_1 \rangle \right|^2.$$

Annahme: Detektor ist weit von der Probe entfernt (Abb 1.22),

$$\text{d.h. } |\vec{R}_D - \vec{R}_S| \approx |\vec{R}_D - \vec{R}_C|$$

\implies

$$\vec{k}_2 = \vec{k}_1 + \vec{k}.$$

Betrachten wir jetzt $\langle \vec{k}_1 + \vec{k} | U(\vec{r} - \vec{r}_n) | \vec{k}_1 \rangle$:

$$\frac{1}{V} \int e^{-i(\vec{k}_1 + \vec{k})\vec{r}} U(\vec{r} - \vec{r}_n) e^{i\vec{k}_1\vec{r}} d^3r = \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}'} \int e^{-i(\vec{k}_1 + \vec{k})\vec{r}} e^{i\vec{k}'(\vec{r} - \vec{r}_n)} \lambda(\vec{k}') e^{i\vec{k}_1\vec{r}} d^3r$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{V^2} \sum_{\vec{k}'} \int e^{i(\vec{k}' - \text{veck})\vec{r}} e^{-i\vec{k}'\vec{r}_n} \lambda(\vec{k}') d^3r \\
&= \frac{V}{V^2} \lambda(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}_n}
\end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned}
\left| \langle \vec{k}_1 + \vec{k} | \mathcal{H}' | \vec{k}_1 \rangle \right|^2 &= \frac{1}{V} \left| \sum_n \lambda(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{r}_n} \right|^2 \\
&= \frac{1}{V^2} \sum_{nm} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)} \lambda^*(\vec{k}) \lambda(\vec{k})
\end{aligned}$$

Wenn wir ein *vollständig geordnetes System* hätten, dann ist

$$\sum_n e^{-i\vec{k}(\vec{a}_n - \vec{a}_m)} = N \sum_{\vec{g}} \delta_{\vec{g}, \vec{k}},$$

d.h. Streuung nur bei $\vec{g} = \vec{k}$.

Für das *ungeordnete System* haben wir

$$i(\vec{k}) = \left| \langle \vec{k}_1 + \vec{k} | \mathcal{H}' | \vec{k}_1 \rangle \right|^2 = \frac{1}{V} \underbrace{\sum_{nm} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)}}_{\text{Strukturfaktor } S(\mathbf{q})} \underbrace{|\lambda(\vec{k})|}_{\text{Formfaktor}}.$$

Im unkorrelierten Fall ist

$$\sum_{nm} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)} = \sum_n \delta_{nm} = N.$$

Damit ist

$$i_0(\vec{k}) = \left| \langle \vec{k}_1 + \vec{k} | \mathcal{H}' | \vec{k}_1 \rangle \right|^2 = \frac{N}{V^2} |\lambda(\vec{k})|^2$$

\Rightarrow

$$\frac{i(\vec{k})}{i_0(\vec{k})} = \frac{1}{N} \sum_{nm} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)}.$$

Wir müssen hierbei selbstverständlich noch eine thermische Mittelung vornehmen:

$$\frac{i(\vec{k})}{i_0(\vec{k})} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{nm} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_n - \vec{r}_m)} \right\rangle$$

Wir wollen nun die Streuintensität und die Paarkorrelationsfunktion in Verbindung bringen:

$$\begin{aligned}
\frac{i(\vec{k})}{i_0(\vec{k})} &= \frac{1}{N} \int \int \left\langle \sum_{nm} \delta(\vec{r} - \vec{r}_n) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_m) e^{-i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} \right\rangle d^3r d^3r' \\
&= \frac{1}{N} \int \int \left\langle \sum_{nm} \delta(\vec{r} - \vec{r}_n) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_m) \right\rangle e^{-i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} d^3r d^3r'
\end{aligned}$$

Definieren wir nun $n(\vec{r}) := \sum_{n=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$ mit $\langle n(\vec{r}) \rangle = \langle \frac{N}{V} \rangle =: \rho$, dann ist

$$\frac{i(\vec{k})}{i_0(\vec{k})} = \frac{1}{N} \int \int \langle n(\vec{r}) n(\vec{r}') \rangle e^{-i\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}')} d^3r d^3r'.$$

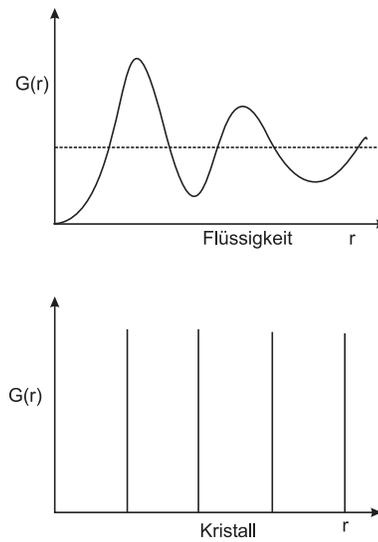


Abbildung 1.23: Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion von Flüssigkeit und Kristall

Definieren wir weiter die *Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion*

$$G(\vec{r}, \text{vecr}') := \langle [n(\vec{r}) - \langle n(\vec{r}) \rangle][n(\vec{r}') - \langle n(\vec{r}') \rangle] \rangle.$$

Für translationsinvariante Systeme ist:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r} - \vec{r}')$$

Weiter ist

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \langle n(\vec{r})n(\vec{r}') \rangle - \rho^2.$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} \frac{i(\vec{k})}{i_0(\vec{k})} &= \frac{1}{N} \int \int (G(\vec{r} - \vec{r}') + \rho^2) e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} d^3r d^3r' \\ &= \frac{V^2}{N} \rho^2 \delta(\vec{k}) + \frac{V}{N} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} G(\vec{r}) d^3r \end{aligned}$$

Wir definieren den *Strukturfaktor* durch

$$S(\vec{k}) = \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} G(\vec{r}) d^3r$$

1.4.2 Mößbauer-Effekt

Bei der Erzeugung eines γ -Quants ergibt sich eine Rückstoßenergie

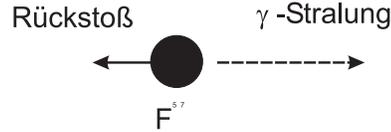


Abbildung 1.24:

$$R = \frac{\hbar^2 k^2}{2M} \stackrel{\omega=ck}{=} \frac{\hbar^2 \omega^2}{2M c^2} \stackrel{E_\gamma=\hbar\omega}{=} \frac{E_\gamma^2}{2M c^2}$$

\Rightarrow

$$\frac{R}{E_\gamma} = \frac{E_\gamma}{2M c^2} \ll 1$$

Andererseits hat die Gammastrahlung eine Linienbreite Γ mit $\Gamma \ll R$

$\Rightarrow \Gamma \ll R \ll E_\gamma$ (scharfe Linienbreite)

Angenommen, dass wir zwei freie Atome hätten, dann kann die von einem Atom emittierte γ -Strahlung nicht von dem anderen Atom absorbiert werden. Im Festkörper ist dies jedoch möglich, da kein Rückstoß vorkommt!

Sei also $\Gamma \ll R \ll E_\gamma$ und angenommen, dass das emittierende Atom vor

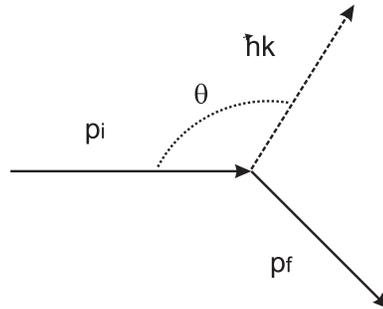


Abbildung 1.25:

der Emission in Bewegung gewesen sei. Nach der Impulserhaltung:

$$\vec{p}_i = \vec{p}_f + \hbar \vec{k}$$

\Rightarrow

$$\frac{p_f^2}{2M} = \frac{(p_i - \hbar k)^2}{2M} = \frac{p_i^2}{2M} - \frac{\hbar \vec{k} \vec{p}_i}{M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$$

\Rightarrow

$$R' = \frac{p_f^2}{2M} - \frac{p_i^2}{2M} = -\frac{\hbar \vec{k} \vec{p}_i}{M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$$

Nun ist $\omega = ck$

$$\frac{\hbar \vec{k} \vec{p}_i}{M} = \frac{\hbar \omega}{c} v \cos \theta = E_\gamma \frac{v}{c} \cos \theta,$$

also *Dopplershift* in der Energie.

Betrachten wir nun noch mal den freien Fall mit einer Hamilton-Funktion von der Wechselwirkung zwischen dem Kern und dem Strahlungsfeld:

$$\mathcal{H}' = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}} \alpha(\vec{k}) + c.c.$$

$c_{\vec{k}}^+$: Erzeugung eines Photons mit Wellenvektor \vec{k} ;

$\alpha(\vec{k})$: Matrixelement des Kerns.

Annahme:

- Wir haben ein Atom im freien Raum mit Wellenfunktion des Massenmittelpunktes der folgenden Form:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}\vec{r}}$$

- Der Anfangszustand des Kerns sei ϕ_i .
- Der Zustand des Kerns gehe von $\phi_i \rightarrow \phi_f$ mit der Wellenfunktion des Massenmittelpunktes:

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}'\vec{r}}$$

und einem emittierten Photon mit Wellenvektor \vec{Q} .

Die Übergangsrate ist (Modulo-Faktoren von 2π und \hbar)

$$\left| \langle \phi_f, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}'\vec{r}}, \vec{Q} | \mathcal{H}' | \phi_i, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \rangle \right|^2 \frac{\delta(E_f - E_i)}{\frac{1}{4\pi} \frac{\Gamma}{(E_f - E_i)^2 + \Gamma^2}}.$$

Betrachten wir das Matrixelement

$$\begin{aligned} & \langle \phi_f, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}'\vec{r}}, \vec{Q} | \mathcal{H}' | \phi_i, \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \rangle \\ = & \langle \vec{Q} | c_{\vec{Q}}^+ | 0 \rangle \underbrace{\frac{1}{V} \int e^{-i\vec{q}'\vec{r}} e^{-i\vec{Q}\vec{r}} e^{i\vec{q}\vec{r}} d^3r}_{\delta_{\vec{q}' + \vec{Q}, \vec{q}}} \underbrace{\langle \phi_f | \alpha(\vec{Q}) | \phi_i \rangle}_{\text{uninteressant}}. \end{aligned}$$

Sehen wir das nun für den Kristall an. Der Anfangszustand sei

$$| \{n_i\}, \phi_i \rangle$$

$\{n_i\}$: Phononenbesetzungszahl vor der Emission eines γ -Photons;

ϕ_i : interner Zustand des Kerns vor der Emission.

Der Endzustand sei

$$| \{n_f\}, \vec{Q}, \phi_f \rangle.$$

Wir benutzen nun dieselbe Wechselwirkung-Hamilton-Funktion:

$$\langle \{n_f\}, \vec{Q}, \phi_f | \mathcal{H}' | \{n_i\}, \phi_i \rangle = \langle \vec{Q} | c_{\vec{Q}}^+ | 0 \rangle \langle \{n_f\} | e^{-i\vec{Q}\vec{r}} | \{n_i\} \rangle \langle \phi_f | \alpha(\vec{Q}) | \phi_i \rangle$$

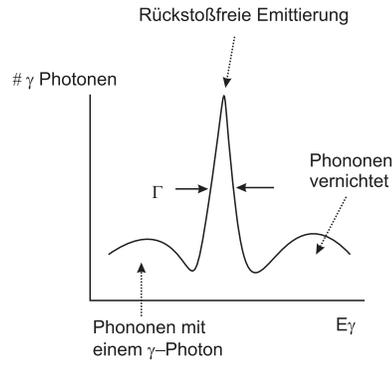


Abbildung 1.26:

Die Übergangsrate ist

$$\begin{aligned}
 T &= \left| \langle \phi_f \cdots | \mathcal{H}' | \phi_i \cdots \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \\
 &\propto \left| \langle \{n_f\} | e^{-i\vec{Q}\vec{r}} | \{n_i\} \rangle \right|^2 \\
 &\stackrel{\vec{r}=\vec{a}_n+\vec{u}_n}{\propto} \left| \langle \{n_f\} | \underbrace{e^{-i\vec{Q}\vec{a}_n}}_{\text{Zahl}} e^{-i\vec{Q}\vec{u}_n} | \{n_i\} \rangle \right|^2
 \end{aligned}$$

mit

$$e^{-i\vec{Q}\vec{u}_n} = 1 - i\vec{Q}\vec{u}_n - \frac{1}{2} (\vec{Q}\vec{u}_n)^2 + \dots$$

1: keine Phononen,

$i\vec{Q}\vec{u}_n$: ein Phonon emittiert oder absorbiert,

$\frac{1}{2} (\vec{Q}\vec{u}_n)^2$: Erzeugung oder Vernichtung von zwei Phononen oder gar nicht.

Für eine rückstoßfreie Emission eines γ -Photons, wobei das γ -Photon mit einer Energie gleich der Differenz zweier Energielevel des Kerns emittiert wird, müssen wir eine Übergangsrate für Phononen-Prozesse haben, die gleich

$$\left| \langle \vec{Q} | c_{\vec{Q}}^+ | 0 \rangle \right|^2 \left| \langle \phi_f | \alpha | \phi_i \rangle \right|^2$$

und

$$\left| \langle \{n_f\} | 1 - \frac{1}{2} (\vec{Q}\vec{u}_n)^2 + \dots | \{n_i\} \rangle \right|^2$$

ist.

Um solche Prozesse beobachten zu können, müssen wir wieder thermisch mitteln und erhalten den Debye-Waller-Faktor $e^{\langle (\vec{Q}\vec{u}_n)^2 \rangle_T}$. Der Debye-Waller-Faktor misst den Anteil von rückstoßfreien Emissionen.