ГЛАВА 20

Испускание гамма-лучей без отдачи

Когда ядро изолированного атома испускает гамма-квант низкой энергии, то атом испытывает отдачу и энергия испускаемого гамма-кванта становится меньше на величину энергии отдачи. Если атом в исходном состоянии находится в покое, то конечную скорость атома с массой M можно вычислить непосредственно из закона сохранения импульса; в самом деле,

$$0 = M\mathbf{v} + \mathbf{K}, \tag{20.1}$$

где $\mathbf{K}$ — волновой вектор гамма-кванта ($|\mathbf{K}| = \omega/c$). Вместе с тем можно просто сказать, что волновой вектор атома, испытавшего отдачу, равен $-\mathbf{K}$. Из (20.1) получим

$$-v = \frac{\omega}{Mc}; \tag{20.2}$$

если энергия гамма-кванта примерно равна 100 *кэв* (10^{-7} *эрг*), а атом, его испустивший, имеет массу 10^{-23} *г*, то

$$v \approx \frac{10^{-7}}{10^{-23} \cdot 3 \cdot 10^{10}} \approx 3 \cdot 10^{5}\ \textit{см/сек},$$

т. е. скорость v по порядку величины близка к средней тепловой скорости.

Тогда для энергии отдачи R имеем

$$R = \frac{K^2}{2M} = \frac{E_0^2}{2Mc^2}, \tag{20.3}$$

где E_0 — энергия гамма-кванта. Для только что рассмотренного примера $R \approx 10^{-14}/2 \cdot 10^{-23} \cdot 10^{21} \approx 10^{-12}$ *эрг*, что соответствует изменению (сдвигу) частоты гамма-кванта на величину

$$\Delta\omega = \frac{R}{\hbar} \approx 10^{15}\ \textit{сек}^{-1}. \tag{20.4}$$

Такой сдвиг частоты иногда может оказаться больше естественной ширины линии спектра гамма-излучения; например, некоторые представляющие практический интерес линии имеют ширину порядка 10^7 *сек*$^{-1}$. Таким образом, испускаемый гамма-квант может вследствие отдачи иметь частоту, недостаточную для того, чтобы он мог поглотиться другим ядром того же типа. Поэтому отдача может служить причиной гашения резонансной флуоресценции гамма-лучей.

Линии гамма-излучения от свободных атомов, находящихся в тепловом равновесии, будут уширены из-за эффекта Допплера, так как для скоростей тоже существует тепловое распределение. Среднее значение квадрата допплеровской ширины $\langle(\Delta\omega)^2\rangle$ определяется приближенным соотношением

$$\frac{\langle(\Delta\omega)^2\rangle}{\omega^2} \approx \frac{\langle v\rangle^2}{c^2}, \qquad (20.5)$$

где $\langle v^2\rangle$ — среднее значение квадрата тепловой скорости атома. Если ввести величину Δ, определяемую соотношением $\Delta^2 = \langle(\Delta\omega)^2\rangle$, то из (20.5) получим

$$\Delta^2 \approx \frac{\omega^2}{c^2}\langle v^2\rangle = \frac{K^2}{2M} 2M \langle v^2\rangle, \qquad (20.6)$$

или

$$\Delta^2 \approx R \cdot k_B T, \qquad (20.7)$$

где R — энергия отдачи, а k_B — постоянная Больцмана. Для приведенных выше численных значений величина Δ равна по порядку величины R. Следовательно, допплеровская ширина может быть значительно больше естественной ширины спектральной линии долгоживущего гамма-излучателя.

Если излучающие атомы находятся внутри кристалла, то часть гамма-квантов испускается без заметной отдачи и ширина соответствующей спектральной линии близка к естественной ширине. Это явление известно под названием эффекта Мессбауэра. В спектре гамма-излучения твердого тела можно обнаружить как резкие линии, практически не смещенные по частоте (отличаемые по величине сечения вторичного поглощения), так и широкие смещенные линии фона. Для данного кристалла соотношение между первыми и вторыми зависит от температуры — доля несмещенного излучения возрастает с понижением температуры, но никогда не достигает единицы. Ширина резких линий от температуры не зависит. Естественная ширина обычно определяет всю ширину данной линии.

Смещенные линии спектра гамма-излучения, обусловленные отдачей, появляются в тех случаях, когда испускание гамма-квантов сопровождается испусканием или поглощением фононов в кристалле. Энергия фононов составляет часть кинетической энергии, получаемой свободным атомом в результате отдачи.

Если мы вспомним то, что нам известно о дифракции рентгеновских лучей в кристаллах, нам не покажется особенно удивительным явление испускания гамма-лучей в кристалле, не сопровождающееся возбуждением фононов; в конце концов, брэгговские отражения рентгеновских лучей тоже относятся к процессам, не сопровождающимся испусканием без отдачи, или к упругим процессам. Рентгеновский спектр неупругого диффузного рассеяния полностью аналогичен той части гамма-спектра, которая связана с испусканием и поглощением фононов. Действительно, рентгеновские лучи, используемые обычно в дифракционных исследованиях, имеют энергии того же порядка, что и энергии, применяемые при исследовании явлений испускания гамма-излучения ядрами без отдачи. Так, например, доля упругого рассеяния при дифракции рентгеновских лучей с энергией 20 *кэв* оказывается точно такой же, как и при испускании гамма-лучей с энергией 20 *кэв*. В предыдущей главе было показано, что при брэгговском отражении интенсивность рентгеновских максимумов пропорциональна величине

$$\exp[-(1/3)K^2\langle u^2\rangle_T],$$

где $\mathbf{K}$ — волновой вектор рентгеновского кванта, $\langle u^2\rangle_T$ — среднее значение квадрата смещения атома в результате тепловых и нулевых колебаний. Фактор Дебая — Валлера характеризует температурную зависимость упругого рассеяния. Тот же фактор определяет долю происходящих без отдачи актов испускания гамма-квантов при их поглощении в кристалле.

Обзор применения эффекта излучения гамма-квантов без отдачи к проблемам физики твердого тела можно найти в статье Абрагама [1].

Матричный элемент матрицы перехода. Сначала рассмотрим испускание или поглощение гамма-кванта свободным ядром атома, не связанного с решеткой. Этот переход описывается матричным элементом M соответствующего оператора A, взятым для начального $|i\rangle$ и конечного $|f\rangle$ состояний ядра, т. е.

$$M = \langle f|A(\mathbf{x}_l,\ \mathbf{p}_l,\ \sigma_l)|i\rangle. \tag{20.8}$$

Оператор A зависит от координат, импульсов и спинов частиц ядра. Выразим теперь оператор A через координату в системе центра масс ядра ($\mathbf{x}$) и относительные координаты ($\mathbf{q}$), включающие в себя и спин. Зависимость A от координаты $\mathbf{x}$ в системе центра масс полностью определяется требованиями трансляционной инвариантности и инвариантности по отношению к преобразованиям Галилея, т. е. требованием сохранения импульса и требованием независимости вероятности перехода для движущегося нерелятивистского наблюдателя от скорости последнего. При испускании гамма-кванта импульс равен $-\mathbf{K}$ и указанные требования удовлетворяются лишь в том случае, если оператор A имеет вид

$$A = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}} a(\mathbf{q}), \tag{20.9}$$

где оператор $a(\mathbf{q})$ зависит только от относительных координат и спина частиц и в явном виде зависит от типа перехода (электрический, магнитный, дипольный, квадрупольный и т. д.). Однако явный вид функции $a(\mathbf{q})$ нас сейчас интересовать не будет. Множитель $\exp i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}$ в операторе A допускает существование не равных нулю матричных элементов при использовании волновых функций гамма-лучей с координатной зависимостью типа $\exp(-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x})$.

Рассмотрим теперь испускание или поглощение гамма-лучей ядрами атомов, связанных в кристалле. Оператор, описывающий переходы оказывается тем же оператором A, но матричные элементы мы должны вычислять для начального и конечного состояний всей решетки, а не для свободного ядра. Теперь можно выписать выражение для матричного элемента, описывающего переход, при котором гамма-квант с импульсом $\mathbf{K}$ испускается ядром с координатой $\mathbf{x}$ в системе центра масс; при этом решетка переходит из состояния, характеризуемого набором квантовых чисел n_i, в состояние, характеризуемое набором квантовых чисел n_f. Внутреннее состояние излучающего гамма-квант ядра изменяется: до испускания гамма-кванта оно описывается волновой функцией $|i\rangle$, а после испускания гамма-кванта — функцией $|f\rangle$. Для матричного элемента имеем

$$M_L = \langle n_f|\exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x})|n_i\rangle \cdot \langle f|a(\mathbf{q})|i\rangle. \tag{20.10}$$

Итак, матричный элемент представляет собой произведение двух сомножителей — первый из них зависит только от решетки, а второй — только от внутренней структуры ядра.

Вероятность перехода зависит от квадрата этого матричного элемента. Нас интересует прежде всего доля общего числа переходов, а именно доля переходов, происходящих без отдачи, т. е. те переходы, при которых состояние решетки не изменяется. Обозначим через $P(n_i, n_f)$ вероятность перехода, при котором набор квантовых чисел фононов n_i превращается в набор n_f. Тогда

$$P(n_i, n_f) = |\langle n_f|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_i\rangle|^2, \tag{20.11}$$

поскольку для любого начального состояния n_i решетки справедливо соотношение

$$\sum_{n_f} P(n_f, n_i) = \sum_{n_f} \langle n_i|e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_f\rangle \langle n_f|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_i\rangle =$$
$$= \langle n_i|e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_i\rangle = \langle n_i|n_i\rangle = 1. \tag{20.12}$$

Этот результат подтверждает нормировку (20.11); иными словами, полная вероятность того, что какое-то событие произойдет (или не произойдет), равна единице.

Существует установленное Липкиным мощное правило сумм, согласно которому средняя энергия, перешедшая к решетке, как раз равна энергии отдельного ядра, которую оно приобрело бы, будучи свободным, при отдаче. Это правило сумм позволяет также хотя бы установить, может ли происходить излучение без отдачи.

Если в кристалле силы связи зависят только от положений атомов (и не зависят от их скоростей), то единственным членом в гамильтониане, не коммутирующим с $\mathbf{x}$, будет член, определяющий кинетическую энергию того же ядра, а именно $p^2/2M$. Тогда из решения задачи 1.4 (см. гл. 1) имеем

$$[H,\ e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}]=\frac{1}{2M}e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}\left(K^2+2\mathbf{K}\cdot\mathbf{p}\right). \tag{20.13}$$

Кроме того,

$$[[H,\ e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}],\ e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}]=-\frac{K^2}{M}. \tag{20.14}$$

Заметим также, что

$$[[H,\ e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}]\,e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}]=2H-e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}He^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}-e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}He^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}. \tag{20.15}$$

Выпишем теперь, используя результат (20.11), диагональный матричный элемент ii оператора (20.15) в представлении, в котором числа заполнения фононов диагональны; он имеет вид

$$\begin{aligned}\langle n_i|[[H,\ e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}],\ e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}]|n_i\rangle &= \\ =2\langle n_i|H|n_i\rangle-\sum_f\{\langle n_i|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_f\rangle\langle n_f|e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_i\rangle\langle n_f|H|n_f\rangle &- \\ -\langle n_i|e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_f\rangle\langle n_f|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{x}}|n_i\rangle\langle n_f|H|n_f\rangle\} &= 2\sum_f(\varepsilon_i-\varepsilon_f)P(n_f,\ n_i).\end{aligned} \tag{20.16}$$

Отсюда, учитывая (20.14), получим

$$\sum_f\{\varepsilon(n_f)-\varepsilon(n_i)\}P(n_f,\ n_i)=\frac{K^2}{2M}=R, \tag{20.17}$$

где R, согласно (20.3), точно совпадает с энергией отдачи свободного атома.

Вероятность испускания гамма-кванта без отдачи определяется величиной $P(n_i,\ n_i)$. Для одного гармонического осциллятора с собственной частотой ω величина, стоящая в левой части соотношения (20.17), больше, чем

$$\omega\sum_{f\neq i}P(n_f,\ n_i)=\omega\{1-P(n_i,\ n_i)\},$$

и поэтому

$$P(n_i,\ n_i) > 1 - \frac{R}{\omega}. \qquad (20.18)$$

Это неравенство показывает, что для излучения гамма-кванта без отдачи необходимо по меньшей мере выполнение условия $\omega > R$. Статистическое среднее величины $P(n_i,\ n_i)$ практически эквивалентно фактору Дебая — Валлера.

Испускание гамма-кванта без отдачи в решетке. Случай абсолютного нуля. Задача об испускании гамма-квантов в кристаллической решетке при абсолютном нуле относится к числу наиболее простых. Предположим, что силы связи в кристалле чисто гармонические. Пусть кристалл содержит N одинаковых атомов массы M, расположенных в какой-то из решеток Браве. Введем для них нормальные координаты. Если $\mathbf{x}_0$ — положение равновесия радиоактивного ядра, то можно написать

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{u}, \qquad (20.19)$$

где $\mathbf{u}$ — смещение этого атома из положения равновесия. Воспользуемся разложением $\mathbf{u}$ по фононным координатам (см. гл. 2); имеем

$$\mathbf{u} = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{q}j} \left(\frac{1}{2M\omega_{\mathbf{q}j}}\right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{q}j} (a_{\mathbf{q}j} \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_0) \exp(-i\omega_{\mathbf{q}j}t) + \\ + a^{+}_{\mathbf{q}j} \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_0) \exp(i\omega_{\mathbf{q}j}t)), \qquad (20.20)$$

где $\mathbf{e}_{\mathbf{q}j}$ — единичный вектор j-й компоненты поляризации нормального колебания $\mathbf{q}$. Удобно несколько упростить обозначения, положив $\mathbf{x}_0 = 0$ и обозначив одной буквой s индексы $\mathbf{q}j$. Итак,

$$\mathbf{u} = N^{-1/2} \sum_s \left(\frac{1}{2M\omega_s}\right)^{1/2} \mathbf{e}_s (a_s e^{-i\omega_s t} + a_s^{+} e^{i\omega_s t}). \qquad (20.21)$$

Это выражение можно представить в виде

$$\mathbf{u} = N^{-1/2} \sum_s Q_s \mathbf{e}_s, \qquad (20.22)$$

где Q_s — амплитуда нормального колебания s. Соответствующий импульс равен

$$P_s = M\dot{Q}_s = -iM\omega_s \left(\frac{1}{2M\omega_s}\right)^{1/2} (a_s e^{-i\omega_s t} - a_s^{+} e^{i\omega_s t}). \qquad (20.23)$$

Гамильтониан для нормальных колебаний запишется в виде

$$H = \frac{1}{2} \sum \left\{ M\omega_s^2 Q_s^2 + \frac{1}{M} P_s^2 \right\}. \qquad (20.24)$$

Для нормального колебания s нормированная волновая функция основного состояния в координатном представлении имеет точно такой же вид, что и известная волновая функция гармонического осциллятора, т. е.

$$\langle x|0_s\rangle = \alpha_s^{1/2}\pi^{-1/4}\exp\left[-\alpha_s^2 Q_s^2/2\right], \qquad \alpha_s^2 = M\omega_s. \tag{20.25}$$

Вероятность испускания гамма-кванта без отдачи из основного состояния равна

$$P(0,\ 0) = |\langle 0|e^{i\cdot\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}|0\rangle|^2 = \left|\prod_s \langle 0_s|\exp\left[i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{e}_s)\,Q_s N^{-1/2}\right]|0_s\rangle\right|^2, \tag{20.26}$$

где 0 означает, что все осцилляторы решетки находятся в своих основных состояниях. Используя выражение (20.25), получим

$$P(0,\ 0) = \left|\prod_s\left\{(\alpha_s/\pi^{1/2})\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\alpha_s^2 Q_s^2\right]\exp(i\beta_s Q_s)\,dQ_s\right\}\right|^2, \tag{20.27}$$

где $\beta_s = (\mathbf{K}\cdot\mathbf{e}_s)N^{-1/2}$. Заметим, что величина в фигурных скобках равна $\exp(-\beta_s^2/4\alpha_s^2)$, и поэтому

$$P(0,0) = \left|\prod_s \exp\left[-\frac{\beta_s^2}{4\alpha_s^2}\right]\right|^2 = \prod_s \exp\left[-\beta_s^2\langle Q_s^2\rangle\right] = \exp\left[-\frac{\sum_s(\mathbf{K}\cdot\mathbf{e}_s)^2\langle Q_s^2\rangle}{N}\right], \tag{20.28}$$

где мы воспользовались тем, что в основном состоянии

$$\langle Q_s^2\rangle = \langle 0_s|Q_s^2|0_s\rangle = 1/2\alpha_s^2. \tag{20.29}$$

Если предположить, что $\langle Q_{\mathbf{q}j}^2\rangle = \langle Q_{\mathbf{q}}^2\rangle$, т. е. не зависит от поляризации j, то

$$\frac{\sum_j(\mathbf{K}\cdot\mathbf{e}_s)\langle Q_s^2\rangle}{N} = \frac{K^2\langle Q_{\mathbf{q}}^2\rangle}{N}. \tag{20.30}$$

Далее

$$\langle u^2\rangle = N^{-1}\sum_s\langle Q_s^2\rangle = 3N^{-1}\sum_{\mathbf{q}}\langle Q_{\mathbf{q}}^2\rangle, \tag{20.31}$$

и поэтому, комбинируя (20.28), (20.30) и (20,31), получим

$$P(0,\ 0) = \exp\left[-\frac{K^2\langle u^2\rangle}{3}\right]. \tag{20.32}$$

Используя свойства полиномов Эрмита или иным путем (см., например, курс Мессиа [2]) можно получить тот же результат и для гармонической системы фононов, находящейся не в основном состоянии, а для канонического распределения фононов.

Тогда для вероятности f испускания гамма-кванта без отдачи в случае канонического распределения фононов, соответствующего температуре T, получим

$$f = P(n_T,\ n_T)\exp\left[-\frac{K^2\langle u^2\rangle_T}{3}\right]. \tag{20.33}$$

Тот же результат получается даже для системы ангармонических осцилляторов при условии, что полное число атомов $N \gg 1$ (это вытекает из теоремы, доказанной Глаубером [3]). Для гармонического осциллятора имеем

$$M\omega_s^2\langle Q_s^2\rangle = \left(n_s + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_s, \tag{20.34}$$

и поэтому, согласно (20.31),

$$\frac{1}{3}K^2\langle u^2\rangle = \frac{K^2}{2M}\cdot\frac{2}{3N}\sum_s \frac{n_s + \frac{1}{2}}{\omega_s} = \frac{2R}{3N}\sum_s \frac{n_s + \frac{1}{2}}{\omega_s}, \tag{20.35}$$

где $R = K^2/2M$ — энергия отдачи свободного атома.

При абсолютном нуле $n_s = 0$, и тогда в правой части (20.35) мы получаем $\frac{R}{3N}\sum_s \omega_s^{-1}$.

Для дебаевской модели кристалла $\omega = vq$, где v — скорость звука, а q — волновой вектор. Заметим, что величина $\frac{1}{3N}\sum_s \frac{1}{q_s}$ как раз равна среднему значению $1/q$ по всем $3N$ нормальным фононным колебаниям. Тогда, используя обычное определение дебаевской температуры $\Theta = \omega_m/k_B$, получим

$$\frac{1}{3N}\sum_s \frac{1}{q_s} = \frac{\int_0^{q_m} q\,dq}{\int_0^{q_m} q^2\,dq} = \frac{3}{2}\cdot\frac{1}{q_m} = \frac{3v}{2\omega_m} = \frac{3v}{2k_B\Theta}. \tag{20.36}$$

Следовательно,

$$\frac{R}{3N}\sum_s \frac{1}{\omega_s} = \frac{3R}{2k_B\Theta}$$

и

$$P(0,\ 0) = \exp\left[-\frac{3R}{2k_B\Theta}\right]. \tag{20.37}$$

Итак, относительное число актов испускания гамма-квантов без отдачи при абсолютном нуле будет значительным в том случае, если энергия отдачи для свободного атома меньше максимальной возможной энергии фононов.

При отличных от нуля температурах мы должны ввести равновесное значение n_s; легко видеть, что для этого нам нужно найти величину

$$\frac{3k_B^2T^2}{2\pi^2v^3}\int\limits_0^{\Theta/T}\frac{x}{e^x-1}\,dx,$$

которая при $T\ll\Theta$ равна

$$\frac{k_B^2T^2}{4v^3}=\frac{3}{2}\pi^2N\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2. \tag{20.38}$$

Все выражение для показателя экспоненты в (20.32) при $T\ll\Theta$ имеет вид

$$\frac{1}{3}K^2\langle u^2\rangle_T=\frac{3R}{2k_B\Theta}\left\{1+\frac{2\pi^2}{3}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2\right\}, \tag{20.39}$$

т. е. содержит в себе вклад, уже найденный выше для случая абсолютного нуля.

Временные корреляции в эффектах испускания гамма-квантов без отдачи и форма линии. Поставим перед собой задачу определения формы линии гамма-излучения. Рассмотрим испускание гамма-кванта ядром атома, связанного в решетке, содержащей N атомов с массой каждого, равной M. Предположим, что форма линии гамма-излучения ядра, находящегося в состоянии покоя, описывается функцией

$$I(E)=\frac{\Gamma^2}{4}\,\frac{1}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}, \tag{20.40}$$

где Γ — время жизни данного ядра; отметим, что $I(E_0)=1$. Пусть i — исходное состояние решетки, ε_i — энергия этого состояния, f — состояние решетки после испускания гамма-кванта (т. е. конечное состояние), а ε_f — его энергия; тогда функция, описывающая форму линии, имеет вид

$$I(E)=\frac{\Gamma^2}{4}\,\frac{1}{(E-E_0+\varepsilon_f-\varepsilon_i)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \tag{20.41}$$

Если $\rho(i)$ — вероятность того, что система первоначально находилась в состоянии i, а $P(fi)=|\langle f|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}|i\rangle|^2$ — вероятность того, что исходное фононное состояние i перейдет в состояние f, то функцию, описывающую форму линии, можно записать следующим образом:

$$I(E)=\frac{\Gamma^2}{4}\sum_{if}\rho(i)\frac{|\langle f|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}|i\rangle|^2}{(E-E_0+\varepsilon_f-\varepsilon_i)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \qquad (20.42)$$

Далее имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dt\exp\left\{-i(E-E_0)t-\frac{1}{2}\Gamma|t|-i(\varepsilon_f-\varepsilon_i)t\right\}=$$

$$=\frac{\Gamma}{(E-E_0+\varepsilon_f-\varepsilon_i)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}. \qquad (20.43)$$

Несколько преобразуя входящие в (20.42) величины, получим

$$\sum_f e^{i\varepsilon_i t}\langle i|e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}|f\rangle e^{-i\varepsilon_f t}\langle f|e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}|i\rangle=\langle i|e^{iHt}e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}e^{-iHt}e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}}|i\rangle, \qquad (20.44)$$

где H — фононный гамильтониан. Если воспользоваться гейзенберговским представлением $\mathbf{u}(t)=e^{iHt}\mathbf{u}(0)e^{-iHt}$, то правая часть (20.44) примет вид

$$\langle i|\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t)]\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]i\rangle.$$

Предположим, что функция ρ имеет тот же вид, что и функция канонического распределения, и введем следующее обозначение для теплового среднего:

$$\langle\exp[-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t)]\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]\rangle_T=$$

$$=\sum_i\rho(i)\langle i|\exp[-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t)]\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]|i\rangle. \qquad (20.45)$$

Тогда из (20.42) и (20.43) находим

$$I(E)=\frac{\Gamma}{4}\int_{-\infty}^{\infty}dt\exp\left[-i(E-E_0)t-\frac{1}{2}\Gamma|t|\right]\times$$

$$\times\langle\exp[-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t)]\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]\rangle_T. \qquad (20.46)$$

Заметим, что $[\mathbf{u}(t),\ \mathbf{u}(0)]\neq 0$ при $t\neq 0$. Этот результат легко получить, если ввести операторы рождения и уничтожения a^+, a; действительно,

$$\mathbf{u}(t)=N^{-1/2}\sum_s\left(\frac{1}{2M\omega_s}\right)^{1/2}\mathbf{e}_s(a_s e^{-i\omega_s t}+a_s^+e^{i\omega_s t}). \qquad (20.47)$$

Тогда

$$[\mathbf{u}(0),\ \mathbf{u}(t)]=\frac{1}{2NM}\sum_s\omega_s^{-1}\{[a_s,\ a_s^+]e^{i\omega_s t}+[a_s^+,\ a_s]e^{-i\omega_s t}\}. \qquad (20.48)$$

Выражение в фигурных скобках равно $2i\sin\omega_s t$, и следовательно,

$$[\mathbf{u}(0),\ \mathbf{u}(t)] = \frac{i}{NM}\sum_s \frac{\sin\omega_s t}{\omega_s}. \qquad (20.49)$$

Таким образом, наш коммутатор является c-числом.

Напомним, далее, теорему (см. [2]) о том, что если $[A, B]$ коммутирует по отдельности с A и B, то

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,\ B]} \qquad (20.50)$$

Отсюда следует, что

$$\langle \exp[-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t)]\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]\rangle_T =$$
$$= \langle \exp[-i\mathbf{K}\cdot\{\mathbf{u}(t)-\mathbf{u}(0)\}]\rangle_T \exp\left\{\frac{1}{2}[\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t),\ \mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]\right\}. \qquad (20.51)$$

Если предположить, что все фононы с поляризацией j и данным волновым вектором $\mathbf{q}$ вырождены, то, не делая никаких новых предположений, можно всегда выбрать одно из трех направлений поляризации параллельным $\mathbf{K}$. Тогда (20.51) можно переписать в виде

$$\exp[-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(t)]\exp[i\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}(0)]\rangle_T =$$
$$= \langle \exp[-iK\{u(t)-u(0)\}]\rangle_T \exp\left\{\frac{1}{2}K^2[u(t),\ u(0)]\right\}, \qquad (20.52)$$

где u — компонента вектора $\mathbf{u}$ в направлении $\mathbf{K}$.

Используя точный результат для гармонического осциллятора (см. [2]), получим

$$\langle \exp[iK\{u(t)-u(0)\}]\rangle_T = \exp\left[-\frac{1}{2}K^2\langle\{u(t)-u(0)\}^2\rangle_T\right. \qquad (20.53)$$

и, следовательно,

$$I(E) = \frac{\Gamma}{4}\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[-i(E-E_0)t - (1/2)\Gamma|t| - Q(t)], \qquad (20.54)$$

где

$$Q(t) = \frac{1}{2}K^2\{\langle\{u(t)-u(0)\}^2\rangle_T + [u(0),\ u(t)]\}. \qquad (20.55)$$

Если одно из направлений поляризации параллельно $\mathbf{K}$, то из (20.47) имеем

$$u(t) = N^{-1/2}\sum_{\mathbf{q}}\left(\frac{1}{2M\omega_{\mathbf{q}}}\right)^{1/2}(a_{\mathbf{q}}e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t} + a_{\mathbf{q}}^{+}e^{i\omega_{\mathbf{q}}t}). \qquad (20.56)$$

Тогда

$$\{u(t)-u(0)\}^2=\frac{1}{2NM}\sum_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}^{-1}\{a_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}}(1-e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t})^2+$$

$$+a_{\mathbf{q}}^{+}a_{\mathbf{q}}^{+}(1-e^{i\omega_{\mathbf{q}}t})^2+2(a_{\mathbf{q}}a_{\mathbf{q}}^{+}+a_{\mathbf{q}}^{+}a_{\mathbf{q}})(1-\cos\omega_{\mathbf{q}}t)\}, \qquad (20.57)$$

откуда

$$\langle\{u(t)-u(0)\}^2\rangle_T=\frac{1}{NM}\sum_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}^{-1}(2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle+1)(1-\cos\omega_{\mathbf{q}}t). \qquad (20.58)$$

Как и в предыдущей главе, мы можем представить $\exp(-Q(t))$ в виде двух множителей, один из которых зависит от времени, а другой не зависит от него. Вводя $R=K^2/2M$, получим

$$e^{-Q(t)}=\exp\left[-\left(\frac{R}{N}\right)\sum_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}^{-1}(2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle+1)\right]\times$$

$$\times\exp\left\{\frac{R}{N}\sum_{\mathbf{q}}\omega_{\mathbf{q}}^{-1}\left[(2\langle n_{\mathbf{q}}\rangle+1)\cos\omega_{\mathbf{q}}t+i\sin\omega_{\mathbf{q}}t\right]\right\}. \qquad (20.59)$$

Множитель, зависящий от времени, содержит N членов, каждый порядка $1/N$; эту экспоненту мы разложим в ряд

$$1+\{\quad\}+\frac{1}{2}\{\quad\}^2+\ \ldots$$

Все члены в $\{\ \}$ зависят от времени; в $\{\ \}^2$ имеется N^2 членов порядка $1/N^2$, из которых только N членов не зависит от времени. Следовательно, для независящих от времени частей большой системы мы можем положить величину $\exp\{\ \}$ равной единице. Зависящие от времени части не дают сколько-нибудь значительного вклада в функцию $I(E_0)$. Обычные соображения, приводящие к этому результату, сводятся к тому, что при конечном времени между столкновениями фононов система «должна забыть» *на долгое время* величину $u(0)$, которую, следовательно, можно положить равной нулю.

Согласно (20.54) интенсивность в максимуме $E=E_0$ определяется в основном не зависящей от времени частью $Q(t)$, а именно

$$I(E_0)\approx\exp\left\{-\frac{2R}{3N}\sum_{s}\frac{\left(\langle n_s\rangle+\frac{1}{2}\right)}{\omega_s}\right\}, \qquad (20.60)$$

что точно соответствует ранее полученному результату (20.35). Множитель 1/3 в (20.60) появляется потому, что сумма берется по всем $3N$ нормальным колебаниям s, тогда как в (20.59) суммирование ведется лишь по N нормальным колебаниям с $\mathbf{q}$. Форма линии вне максимума такова, что функция $I(E)$ отлична от нуля каждый раз, когда разность $E - E_0$ равна какому-то из значений $\omega_{\mathbf{q}}$. Итак, в добавление к острому центральному пику шириной Γ мы получим размазанный непрерывный фон.

ЗАДАЧИ

20.1. Для дебаевской модели твердого тела найти при $T \gg \Theta$ приближенное выражение для относительного числа актов испускания гамма-квантов без отдачи.

20.2. Исследовать ширину линии гамма-излучения и обусловленный отдачей сдвиг частоты для свободного атома в газе, считая, что атом находится в тепловом равновесии с газом. Воспользоваться методом, которым мы получили (20.54) и (20.55). Пренебрегая столкновениями, получим

$$\langle \{u(t) - u(0)\}^2 \rangle_T = \langle v^2 \rangle_T t^2;$$

далее

$$[u(t), u(0)] = M^{-1} [tP, u] = -itM^{-1}.$$

Следовательно,

$$Q(t) = \frac{1}{2} K^2 \{ \langle v^2 \rangle t^2 + itM^{-1} \};$$

значит, линия смещается на величину $(1/2)K^2M^{-1}$, точно совпадающую с энергией отдачи R, определяемой (20.3). Довести расчет до оценки ширины линии.

20.3. Исследовать форму линии гамма-излучения, испускаемого атомами в газе, когда частота столкновений атомов ρ значительно больше ширины линии Γ.

Для броуновского движения свободной частицы хорошо известен следующий результат:

$$\langle \{u(t) - u(0)\}^2 \rangle_T = 2Dt,$$

где $D = k_B T/\rho M$ — коэффициент диффузии (вывод имеется, например, в книге автора [4]). Этот результат показывает, что ширина линии равна Γ, если $K^2 D \ll \Gamma/2$ или

$$\Delta^2 = R k_B T \ll 4\Gamma\rho,$$

где Δ — допплеровская ширина. Таким образом, при быстрой релаксации допплеровское уширение смазывается.

Литература

1. A b r a g a m A., в сб. «Low Temperature Physics», ed. by C. DeWitt, a. o., N. Y., 1962.
2. M e s s i a h A., Quantum Mechanics, Amsterdam, 1961—1962.
3. G l a u b e r R. J., Phys. Rev. 84, 395 (1951).
4. К и т т е л ь Ч., Элементарная статистическая физика, ИЛ, 1962.