1. 穆斯堡尔谱学原理

穆斯堡尔效应是一种无反冲发射和共振吸收现象。在无反冲的情况下，原子核发射的射线能量等于核激发态和基态的能量差，能谱的宽度为能级的自然宽度。当原子核的周围环境发生变化时，通过超精细相互作用，核能级产生相应的移位和分裂，并在穆斯堡尔谱上能灵敏的反映出来。通过穆斯堡尔的参数的分析，从而得到物质微观结构方面的各种信息。这种利用穆斯堡尔效应对物质进行微观结构分析的学科，就称为穆斯堡尔学。

1. 原子核发射和吸收射线过程
2. 原子光谱的共振吸收

共振现象是自然界普遍存在的一种现象。在力学和声学中，能观察到两个体系的机械共振和声共振现象。在原子体系中，也能观察到原子光谱的共振吸收和共振散射现象。例如在光路上放置一个钠光源和充有钠蒸汽的玻璃球。当钠光源发生Na-D线（即黄色光）被玻璃球中的钠原子吸收时，处于基态的Na原子被激发，当他回到基态时，向4方向发射Na-D线，这是早在1904年就被证实的原子的共振荧光效应。

原子共振吸收时的吸收截面由布赖特-维格纳公式给出：



式中是入射光子的能量，是入射光子的波长，是激发态的能量，为能级宽度（依照测不准关系，任何有寿命的激发态必定存在一定的能量宽度）， 和 是激发态和基态的自旋。对Na-D线，， 。根据动量守恒定律，自由原子发射光子或吸收光子时，原子要反冲。原子反冲的能量为



公式中为光子能量，为原子质量，为光速。原子发射和吸收光子时反冲能量很小，例如Na原子发射Na-D线时的反冲能量只有，小于能量宽度。因此，只要入射光子的能量在附近，就能实现共振吸收。

1. 原子核的共振吸收

原子体系中共振荧光现象的存在，使人们想到原子核中存在着分裂的能级，是否也存在着射线的共振吸收？可是，早期的实验很难观察到原子核的射线共振吸收现象。这是因为原子核发射射线时，原子核收到反冲。假定原子核在发射射线前是处于自由的，静止的状态，那么发射射线时原子核获得的反冲动能为



式中为原子核的质量，为光子动能，它与能量的关系为



核的反冲动能 和大小相等，方向相反。反冲动能是由原子核内部激发态返回基态时提供，因此激发态在退激发时所发出的射线能量比相应的跃迁能量要小即

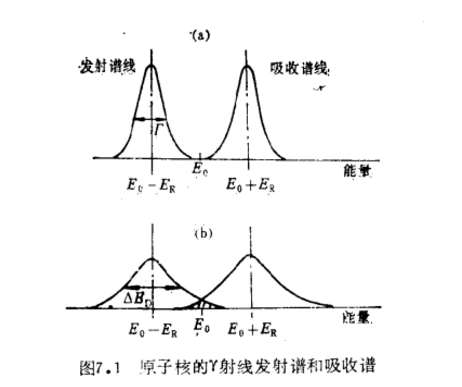


式中为核激发态和基态的能量差。

同理，自由的，静止的原子核在吸收射线时，原子核也受到反冲，因此光子的能量不是全部用来激发原子核，有一部分提供为核的反冲能，即要将吸收核从基态激发到激发态所需的射线能量为



如果能级的能量差为，那么发射线和吸收线两者的能量相差，如图1.1(a)所示。若远大于能级宽度，则发射线和吸收线没有重叠部分，无法实现共振吸收。以 核为例，，，而它的，显然比大几个数量级。这就是为什么观察不到自由原子核的射线共振吸收现象的根本原因。



1. 多普勒效应能量补偿

为增加射线发射谱和吸收谱之间的重叠区域，可采用多普勒能量补偿方法。

假定在发射射线前，核的动量为，发射能量为 的射线后，核的动量为 。发射射线时，由于核的反冲，其能量变化为



其中为光子的动量。式(1.7)可改写成



其中，， 是射线发射方向和核运动方向之间的夹角，而



是核运动造成的谱线多普勒位移，式中为核运动速度。根据原子核系统总能量（动能和激发能）和动量守恒定律，动能的变化等于跃迁能量 与发射光子的能量 之差，即



因此，考虑了核反冲和多普勒效应后，原子核发射的射线能量为



如果使多普勒位移补偿反冲能量损失（即 ），那么就有可能观察到核的共振吸收。1950年Moon使用高速离心机旋转放射源 ，那么在切线方向放射源的速度时，观察到原子核的共振吸收现象。不过由于原子核热运动造成的多普勒效应使谱线展宽，共振吸收曲线的分布较宽。原子核处于热；运动状态时，运动速度是遵循统计分布的。在无规则的热运动时，某些原子核向着探测器方向运动，另一些则背向着探测器方向运动，结果由许多原子核发射的射线叠加起来的谱线将由于多普勒效应而展宽。如果原子核的运动速度是按麦克斯韦分布，则谱成的多普勒展宽为

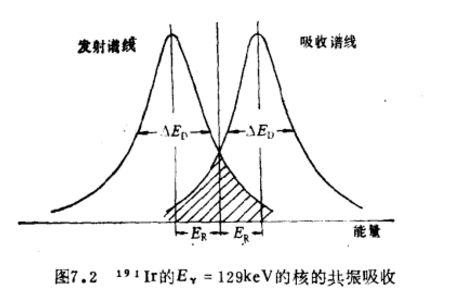


式中 时观察发射方向的原子核热运动均方速度。一般如图7.1（b）所示。多普勒展宽增加了发射谱和吸收谱的重叠区，有利于共振现象出现。热运动能量与温度有关，升高源和吸收体温度有利于增加多普勒展宽，实现核的共振吸收。

1. 穆斯堡尔效应

上面讲的用多普勒效应能量补偿或多普勒展宽办法虽然能得到有核反冲的射线共振吸收，但因发射谱线和吸收谱线的重叠区小，因而共振程度小，实际应用的意义不大。

1. 穆斯堡尔实验

1957年，穆斯堡尔在研究 核的共振吸收时指出对于能量的跃迁，计算得到的自由反冲能量，能级宽度由于 大于值，

因此无法实现共振吸收。在室温时（）,按式（1.12）计算的多普勒展宽。因为，发射谱线和吸收谱线有一部分重叠，如上图所示，这样应观察到核的共振吸收。穆斯堡尔为了证明共振吸收存在，把共振核置于晶体中，并把放射源装在转盘上，使源相对于吸收体运动。他把放射源和吸收体放在液态氮中，预期由于温度低，多普勒展宽将减小，发射线和吸收线的重叠部分也减少，从而共振吸收效应也减少。实验的结果却出乎意料，核的共振吸收反而加强。

在实验事实得到肯定后，就联想到被晶格束缚的原子核的热中子共振吸收理论。早在1939年Lamb就指出，如果晶体在很低温度下，束缚在晶体中的原子核有一定的几率在中子共振吸收时不单独发生反冲，而愁个晶体受到反冲。同样把这个理论的思想移用到原子核发射射线的情况。因为晶体的质量比单个原子核的质量大十几个数量级，按式(1．3)计算的很小，所以，实际上反冲能的损耗可以忽略，刚且被束缚在晶体中的核不能做随机的热运动，那么也趋于零。所以，在实验中会出现没有能量位移和谱线宽度接近自然宽度的极窄的发射谱线和吸收谱线，实现了无反冲发射和共振吸收，即穆斯堡尔效应，也称射线无反冲发射及共振吸收效应。穆斯堡尔谱线十分窄，能用来研究核能级差异的极其微小的变化( )，固有的能量分辨率，以 放射源为例，它有一支线的能量为，它的，因此线宽与之比

1. 穆斯堡尔实验的基本解释

在固体物理中，可以用振子的振动(简谐运动)来描述晶体中晶格原子的运动。束缚于晶格位置的核发射射线时的反冲功量由整个晶体带走，而不能采用经典的概念来描述反冲动的传递过程。按经典图象，发射射线时，核受到反冲，将其动量通过晶体中原子间的联系再传递给邻近原子。若断定发射射线的核先受到反冲，它的反冲能量。按照测不准原理，这一过程需要时间，其中是指晶格的束缚能，为震动波长，为晶格间距，是反冲声波在晶体中传播速度。斯堡尔效应显著时，必须有。先在这段时间内，反冲声波在晶体中传递距离已超过晶体中原子间距离。因此，我们不能分辨是单个原子核先受到反冲，还是邻近原子核同时受到反冲，只能认为是这个核与整个晶体同时受到反冲。整个晶体移动的能量是很小的。核的激发能主要分配给所发射的了光子和晶格振动。

在量子力学中，晶格原子振动的能量态为一系列的声子态，是声子的振动频率，每个声子的能量为



式中为量子数。假如发射射线前，晶格处于零声子态()，那么，在发射射线后，它仍可以处于零声子态，没有声子发射，这时完全等于激发态能量差。也可能激发到能量较高的声子态(声子能量)，这时就不成为无核反冲的发射。有核反冲与无核反冲的几率分别为和。显然



从反冲能分配角度看，有关系式



而





根据(1.3)和(1.4),



为波矢，即为光子的动量。

从式(1．17)可知，无核反冲发射的几率的大小与反冲能和晶格振动能有关。当时，没有声子发射，才有可能存在无核反冲的发射，所以穆斯堡尔效应也称为射线零声子发射及共振吸收效应。

在固体中，晶格原子的振动用简谐运动来描写，每一自由度的平均能量可以写成



其中为振幅的均方值。由式(1.13)取，则式(7.19)为



由此得到



将式(1.18)和式(1.21)代入(1.17)，于是得到



其明显的物理意义为

1. 随的增加而减小，即射线的能量越大，那么无反冲共振吸收几率越小。
2. 晶体束缚能越大，则越小，就越大。
3. 当温度升高时，也越大，变小。所以可用制冷办法使增大。

根据晶体的德拜模型，穆斯堡尔得到射线的无反冲发射几率为



而式中

其中时玻尔兹曼常数，是晶体温度，是晶体的德拜温度，为自由发射时的反冲能量，统称为德拜-沃勒因子，从式(1．23)可知，射线能量小，晶体的德拜温度高，晶体所处的环境温度低时，穆斯堡尔效应显著．

另外，束缚在固体晶格中的原子核，其激发态寿命()比晶格振动周期()长得多。这意味着当核处于激发态时，晶格原子发生了许多次振荡。在这时间内，晶格原子振动速度的平均值为零。因此多普勒展宽也趋近于零。

四、穆斯堡尔参数

原子核周围环境(核外电子、邻近原子)变化会影响原于核的能级。虽然这种影响极微小，但由于穆斯堡尔效应的能量分辨率极高，在穆斯堡尔谱中峰的位置，形状、宽度和面积上都能灵敏地反映出来。原子核与核周围环境间的超精细相互作用产生的同质异能位移、四极分裂和磁致分裂，这些统称为穆斯堡尔参数。

1. 同质异能位移

同质异能位移又称射线能量的化学移。它是由穆斯堡尔核的核电荷分布与核周围的电子之间静电作用引起的。核的线度与原子相比要小许多，在大多数情况中可以认为核电荷为点电荷。当确定几率的电子 (例如电子)在核外运动时，对电子的静电作用相当于点电荷的作用。事实上，核电荷在核内是有分布的。如果电子进入核内，则核电荷对电子的有效作用减小了。

假定核的半径为，电荷均匀分布在这球体里。按经典电学，容易算出在距原子核球心为处的电子的电势为



按照量子力学，核电荷体积效应引起电子与原子核静电相互作用的能量差为



式中为电子波函数，这里我们假定了核范围内电子密度是一常数，利用(1.24),我们不难得到



因为基态和激发态的核半径不一样，因此与电子的相互作用能量也就不—样。根据式(1.26)，对于发射核，它的激发态和基态与电子之间相互作用能之差可用下式表示：



式中为核常数；为电子波函数；和是由于核电荷分布与电子作用