6 Quantisierung der Gitterschwingungen: Phononen

6.a Diagonalisierung und Normalkoordinaten

In diesem Abschnitt behandeln wir die Phononen quantenmechanisch unter Verwendung dessen, was wir bereits bei der klassischen Behandlung in Abschnitt 4 hergeleitet haben. Wir schreiben dazu den Hamilton-Operator in einer etwas kompakten Schreibweise mittels Matrizen

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p}{\sqrt{M}}\right)^\dagger \left(\frac{p}{\sqrt{M}}\right) + \frac{1}{2}\left(\sqrt{M}\eta\right)^\dagger \Phi \left(\sqrt{M}\eta\right). \tag{6.1}$$

Dabei sind p und η Spaltenvektoren, M ist diagonal. Die Diagonalisierung von Φ geschieht mittels einer unitären Transformation

$$\Phi = U^\dagger \hat{\omega}^2 U, \quad U^\dagger U = 1, \tag{6.2}$$

wobei $\hat{\omega}^2$ die Diagonalmatrix mit den Quadraten der Eigenfrequenzen ist. Wir können dann

$$H = \frac{1}{2}\left(U\frac{p}{\sqrt{M}}\right)^\dagger \left(U\frac{p}{\sqrt{M}}\right) + \frac{1}{2}\left(U\sqrt{M}\eta\right)^\dagger \hat{\omega}^2 \left(U\sqrt{M}\eta\right) \tag{6.3}$$

mit

$$\Phi_{ni\alpha}^{mj\beta} = \sum_{\lambda,q} U_{ni\alpha}^{(\lambda)*}(\mathbf{q})\omega_\lambda^2(\mathbf{q})U_{mj\beta}^{(\lambda)}(\mathbf{q}) \tag{6.4}$$

$$U_{ni\alpha}^{\lambda*}(q) = \frac{u_{ni\alpha}^\lambda(\mathbf{q})}{\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} c_{i\alpha}^\lambda(\mathbf{q}) \mathrm{e}^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n} \tag{6.5}$$

schreiben. Dabei werden die Indices $\lambda, \mathbf{q}$ als vordere, $mj\beta$ als hintere Indices von $U_{mj\beta}^{(\lambda)}(\mathbf{q})$ angesehen.

Von hier aus können wir die Normalkoordinaten einführen

$$P_\lambda(\mathbf{q}) = \left(U\frac{p}{\sqrt{M}}\right)^{(\lambda)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{ni\alpha} c_{i\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}\frac{p_{ni\alpha}}{\sqrt{M_i}} \tag{6.6}$$

$$Q_\lambda(\mathbf{q}) = \left(U\sqrt{M}\eta\right)^{(\lambda)}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{ni\alpha} c_{i\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_n}\sqrt{M_i}\eta_{ni\alpha}. \tag{6.7}$$

Diese Transformation haben wir im Abschnitt 4 in zwei Schritten durchgeführt: Erst führten wir eine Fourier-Transformation durch; dies ist eine unitäre Transformation, anschließend diagonalisierten wir die $3r \times 3r$-Matrizen ebenfalls durch eine unitäre Transformation.

Da nach (4.21) $D(-\mathbf{q}) = D^*(\mathbf{q})$, kann man $c_{i\alpha}^\lambda(-\mathbf{q}) = c_{i\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q})$ wählen. Dann erhält man

$$P_\lambda(-\mathbf{q}) = P_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), \quad Q_\lambda(-\mathbf{q}) = Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}). \tag{6.8}$$

Die Kommutatoren erhält man zu

$$[Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), Q_\mu(\mathbf{q}')] = 0, \quad [P_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = 0. \tag{6.9}$$

und

$$[Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = \sum_{ni\alpha,mj\beta} U_{ni\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q})\sqrt{M_i}U_{mj\beta}^\mu(\mathbf{q}')\frac{1}{\sqrt{M_j}}[\eta_{ni\alpha}, p_{mj\beta}]. \tag{6.10}$$

Der Kommutator auf der rechten Seite ergibt $\mathrm{i}\hbar\delta_{nm}\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$. Damit reduziert sich der Kommutator auf

$$[Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), P_\mu(\mathbf{q}')] = \sum_{ni\alpha} U_{ni\alpha}^{\lambda*}(\mathbf{q})U_{ni\alpha}^\lambda(\mathbf{q}') = \mathrm{i}\hbar(UU^\dagger)_{\mu\mathbf{q}',\lambda\mathbf{q}} = \mathrm{i}\hbar\delta_{\lambda,\mu}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}. \tag{6.11}$$

Der Hamilton-Operator selbst nimmt die Diagonalform

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\lambda\mathbf{q}}(P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q}) + \omega_\lambda^2(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q})) \tag{6.12}$$

in Form von entkoppelten Oszillatoren an. (Lediglich die Oszillatoren für $\mathbf{q}$ und $-\mathbf{q}$ sind noch miteinander verknüpft.

6.b Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren

Wir definieren die Phononen-Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren durch

$$a_\lambda(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(\omega_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) + i\mathbf{P}_\lambda(\mathbf{q})), \tag{6.13}$$

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) := \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(\omega_\lambda(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) - i\mathbf{P}_\lambda^\dagger(\mathbf{q})). \tag{6.14}$$

Für die Kommutatoren findet man

$$\begin{aligned}[][a_\lambda(\mathbf{q}), a_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})\omega_\mu(\mathbf{q}')}}(-i\omega_\lambda(\mathbf{q})[Q_\lambda(\mathbf{q}), P_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] + i\omega_\mu(\mathbf{q}')[P_\lambda(\mathbf{q}), Q_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] \\ &= \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})\omega_\mu(\mathbf{q}')}}(\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})\delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{qq}'} + \hbar\omega_\mu(\mathbf{q}')\delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{qq}'}) = \delta_{\lambda\mu}\delta_{\mathbf{qq}'}. \end{aligned} \tag{6.15}$$

Ähnlich zeigt man auch

$$[a_\lambda(\mathbf{q}), a_\mu(\mathbf{q}')] = 0, \quad [a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}), a_\mu^\dagger(\mathbf{q}')] = 0. \tag{6.16}$$

Für den Phonon-Teilchenzahl-Operator erhalten wir dann

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}\left(\omega_\lambda^2(\mathbf{q})Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) + P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q})\right) + \frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\left(Q_\lambda^\dagger(\mathbf{q})P_\lambda(\mathbf{q}) - P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q})\right). \tag{6.17}$$

Unter Verwendung von (6.8) und (6.11) können wir den letzten Term umformen $P_\lambda^\dagger(\mathbf{q})Q_\lambda(\mathbf{q}) = Q_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})P_\lambda(-\mathbf{q}) - \mathrm{i}\hbar$. Berücksichtigen wir noch, dass $\omega_\lambda(-\mathbf{q}) = \omega_\lambda(\mathbf{q})$, so können wir den Hamilton-Operator durch den Phonon-Teilchenzahl-Operator ausdrücken

$$H = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})(a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \tag{6.18}$$

Der Grundzustand des Hamilton-Operators ist gegeben durch $a_\lambda(\mathbf{q})|0>= 0$. Der Zustand mit jeweils $n_\lambda(\mathbf{q})$ Phononen in der $(\lambda, \mathbf{q})$-Mode

$$|\{n_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle = \prod_{\lambda\mathbf{q}}\left(\frac{1}{\sqrt{n_\lambda(\mathbf{q})!}}(a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}))^{n_\lambda(\mathbf{q})}\right)|0\rangle \tag{6.19}$$

mit der Energie

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})(n_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \tag{6.20}$$

Für spätere Zwecke drücken wir die Auslenkungen $\boldsymbol{\eta}$ durch die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren aus. Hierzu machen wir die orthogonale Transformation(6.7) rückgängig,

$$\sqrt{M}\eta = U^\dagger Q, \tag{6.21}$$

und setzen aus (6.13) und (6.14)

$$Q_\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda(\mathbf{q})}}(a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})), \tag{6.22}$$

was explizit

$$\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\lambda\mathbf{q}}\sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}}c_i^\lambda(\mathbf{q})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}(a_\lambda(\mathbf{q}) + a_\lambda^\dagger(-\mathbf{q})) \tag{6.23}$$

ergibt. Ersetzen wir für den $a^\dagger$-Term noch $-\mathbf{q}$ durch $\mathbf{q}$, so können wir

$$\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\lambda\mathbf{q}}\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}}\mathbf{c}_i^{\lambda*}(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \text{h.c.}\right) \tag{6.24}$$

schreiben.

7 Phononenstatistik und spezifische Wärme

7.a Bose-Statistik

Wie wir gesehen haben, können harmonische Phononen

$$n_\lambda(\mathbf{q}) = 0, 1, 2, ... \tag{7.1}$$

fach angeregt sein; sie genügen daher der Bose-Statistik. Die Wahrscheinlichkeit für eine n-fache Besetzung beträgt

$$p_n = \frac{r^{n+\frac{1}{2}}}{\sum_{n'=0}^{\infty} r^{n'+\frac{1}{2}}} = r^n - r^{n+1}, \quad r = \mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}} \tag{7.2}$$

Als mittlere Besetzung ergibt sich die Bose-Funktion

$$\overline{n} = \sum_{n=0}^{\infty} n p_n = 0\cdot(1-r)+1\cdot(r-r^2)+2\cdot(r^2-r^3)+... = r+r^2+r^3+... = \frac{r}{1-r} = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}}{1-\mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1}. \tag{7.3}$$

7.b Energie und spezifische Wärme I

Die mittlere Energie (Energie-Erwartungswert) ist dann

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}-1} + \frac{1}{2} \right). \tag{7.4}$$

Bei **hohen Temperaturen** $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})$ für alle Äste λ und Wellenvektoren $\mathbf{q}$ folgt

$$\frac{1}{\mathrm{e}^x-1} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x+\frac{x^2}{2}+...} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x} + O(x). \tag{7.5}$$

Damit folgt

$$E = \sum_{\lambda\mathbf{q}} k_\mathrm{B}T + O(\frac{1}{k_\mathrm{B}T}) = 3rNk_\mathrm{B}T + O(\frac{1}{k_\mathrm{B}T}). \tag{7.6}$$

Der führende Term ist das klassische Ergebnis (Dulong-Petit). Bei **tiefen Temperaturen**, das heißt sobald $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})$ für die optischen Phononen, sind deren Beiträge (bis auf das $\hbar\omega/2$) vernachlässigbar.Für die akustischen Phononen kann man bei hinreichend tiefen Temperaturen

$$\omega_\lambda(\mathbf{q}) = c_\lambda(\Omega)q \tag{7.7}$$

setzen. Dabei sind die $c_\lambda(\Omega)$ die Schallgeschwindigkeiten der drei akustischen Äste in Richtung Ω. Dann folgt für die Energie

$$E = E_0 + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \hbar c_\lambda(\Omega)q \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar c_\lambda q}{k_\mathrm{B}T}}-1} = E_0 + \frac{V_\mathrm{P}}{(2\pi)^3} \sum_\lambda \int \mathrm{d}^3q \hbar c_\lambda q \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar c_\lambda q}{k_\mathrm{B}T}}-1}. \tag{7.8}$$

Substituieren wir nun im Integral

$$x := \frac{\hbar c_\lambda}{k_\mathrm{B}T} q, \quad \mathrm{d}^3q = q^2 \mathrm{d}q\, d\Omega = \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar c_\lambda(\Omega)} \right)^3 x^2 \mathrm{d}x \mathrm{d}\Omega, \tag{7.9}$$

dann folgt

$$E = E_0 + \frac{V_\mathrm{P}(k_\mathrm{B}T)^4}{(2\pi\hbar)^3} \sum_\lambda \int \mathrm{d}\Omega \frac{1}{c_\lambda^3(\Omega)} \int_0^{x_\mathrm{max}} \frac{x^3\mathrm{d}x}{\mathrm{e}^x-1}. \tag{7.10}$$

Dabei ergibt die λ-Summe über die drei akustischen Äste und das Integral über den Raumwinkel Ω gerade $3 \cdot 4\pi\overline{c^{-3}}$. Das x-Integral ist bis $\frac{\hbar c}{k_{\mathrm{B}}T}q_{\max}$ zu erstrecken, was im Tieftemperatur-Bereich sehr groß wird, so dass wir bis $x_{\max} = \infty$ integrieren können. Dann erhält man mit

$$\int_0^\infty \frac{x^3 \mathrm{d}x}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{\pi^4}{15} \tag{7.11}$$

den Beitrag der Phononen zur Energie

$$E - E_0 = \frac{\pi^2}{10\hbar^3} V_{\mathrm{P}} (k_{\mathrm{B}}T)^4 \overline{c^{-3}}, \tag{7.12}$$

woraus dann auch das T^3-Gesetz der spezifischen Wärme folgt. Speziell für einen isotropen Körper hängt c nicht von der Richtung ab. Man erhält dann

$$\overline{c^{-3}}_{\mathrm{iso}} = \frac{1}{3c_{\mathrm{l}}^3} + \frac{2}{3c_{\mathrm{t}}^3}. \tag{7.13}$$

7.c Zustandsdichte

Es sei $z(\omega)d\omega$ die Anzahl von Phononenzuständen im Intervall $\omega...\omega+\mathrm{d}\omega$. Dann können wir die Energie schreiben als

$$E - E_0 = \int \mathrm{d}\omega z(\omega) \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}} - 1}. \tag{7.14}$$

Für die akustischen Phononen hat man im linearen Bereich $\omega \propto q$

$$\int_0^{\omega_0} z(\omega)\mathrm{d}\omega = C\omega_0^3, \tag{7.15}$$

da die Ausdehnung des Bereichs der Phononen im q-Raum in allen drei Richtungen proportional ω_0 ist. Durch Ableiten nach der oberen Grenze folgt

$$z(\omega) = 3C\omega^2. \tag{7.16}$$

Wir berechnen hieraus die Energie bei tiefen Temperaturen

$$E - E_0 = 3C \int \mathrm{d}\omega \hbar\omega^3 \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}} - 1} = 3C\hbar \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}\right)^4 \int \mathrm{d}x \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1} = 3C\hbar \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}\right)^4 \frac{\pi^4}{15} \tag{7.17}$$

Durch Vergleich mit (7.12) finden wir

$$C = \frac{V_{\mathrm{P}}}{2\pi^2}\overline{c^{-3}}, \quad z(\omega) = \frac{3V_{\mathrm{P}}}{2\pi^2}\omega^2\overline{c^{-3}}. \tag{7.18}$$

7.d Debye-Frequenz und Phononen-Energie II

Die Zustandsdichte (7.18) gilt nur für niedrige Frequenzen. Da keine beliebig hohen Frequenzen auftreten, muss sie für hinreichend große Frequenzen verschwinden. Debye setzte daher näherungsweise

$$z(\omega) = \begin{cases} \frac{3V_{\mathrm{P}}}{2\pi^2}\omega^2\overline{c^{-3}} & \omega \le \omega_{\mathrm{D}} \\ 0 & \omega > \omega_{\mathrm{D}} \end{cases} \tag{7.19}$$

an. Das heißt, er nahm an, dass das ω^2-Gesetz bis zu einer Grenzfrequenz ω_{D} gilt, es aber keine Phononen mit höheren Frequenzen gibt. Man bezeichnet diese Abschneidefrequenz heute als Debye-Frequenz. Die Debye-Frequenz selbst errechnet sich daraus, dass es insgesamt 3N akustische Phononen gibt,

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\omega = 3N = \frac{V_{\mathrm{P}}}{2\pi^2}\omega_{\mathrm{D}}^3\overline{c^{-3}}. \tag{7.20}$$

Daraus erhält man die Debye-Frequenz.

Wir können nun die Energie ausdrücken als

$$E - E_0 = \frac{3V_{\mathrm{P}}}{2\pi^2}\overline{c^{-3}} \int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} \mathrm{d}\omega \hbar\omega^3 \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\hbar\omega}{k_{\mathrm{B}}T}} - 1} = \frac{3V_{\mathrm{P}}}{2\pi^2}\frac{(k_{\mathrm{B}}T)^4}{\hbar^3}\overline{c^{-3}} \int_0^{\frac{\hbar\omega_{\mathrm{D}}}{k_{\mathrm{B}}T}} \mathrm{d}x \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}. \tag{7.21}$$

Mit der Debye-Temperatur $k_{\mathrm{B}}\Theta_{\mathrm{D}} = \hbar\omega_{\mathrm{D}}$ erhält man aus (7.20)

$$V_{\mathrm{P}}\overline{c^{-3}} = \frac{6\pi^2 N}{\omega_{\mathrm{D}}^3} = 6\pi^2 N \left(\frac{\hbar}{k_{\mathrm{B}}\Theta_{\mathrm{D}}}\right)^3 \tag{7.22}$$

und damit

$$E - E_0 = 9Nk_{\mathrm{B}}\frac{T^4}{\Theta_{\mathrm{D}}^3}\int_0^{\frac{\Theta_{\mathrm{D}}}{T}} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\mathrm{d}x \tag{7.23}$$

Ähnlich erhält man durch Differenzieren von (7.21) nach der Temperatur die spezifische Wärme, die von den Phononen herrührt

$$c_{\mathrm{D}}(t) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = 3Nk_{\mathrm{B}}\frac{T^3}{\Theta_{\mathrm{D}}^3}\int_0^{\frac{\Theta_{\mathrm{D}}}{T}} \frac{x^4\mathrm{d}x}{(\mathrm{e}^x - 1)^2}, \tag{7.24}$$

eine Funktion, die bis auf den Faktor N nur vom Verhältnis T/Θ_{D} abhängt. Allerdings wird die Zustandsdichte von der Debye-Näherung im Allgemeinen abweichen, so dass diese Funtion nur eine Näherung darstellt.

Zusätzlich hat man optische Phononen. Im einfachsten Fall nimmt man an, sie haben unabhängig von Wellenvektor und den 3(r-1) Ästen die gleiche (Einstein-)Frequenz ω_{E}. Dann erhält man den Beitrag

$$c_{\mathrm{E}}(T) = 3N(r-1)k_{\mathrm{B}}\frac{(\Theta_{\mathrm{E}}/T)^2}{(\mathrm{e}^{\Theta_{\mathrm{E}}/T} - 1)^2} \tag{7.25}$$

mit der Einstein-Temperatur Θ_{E} definiert durch $k_{\mathrm{B}}\Theta_{\mathrm{E}} = \hbar\omega_{\mathrm{E}}$.

Selbst wenn man die für harmonische Phononen korrekte Gleichung (7.14) verwendet, hat man für höhere Temperaturen Abweichungen auf Grund der Anharmonizitäten zu erwarten.

8 Neutronen-Streuung und Debye-Waller-Faktor

Wir gehen aus von einem Anfangszustand eines einfallenden Neutrons mit Impuls $\hbar\mathbf{k}_0$ und einem Festkörper, dessen Phononen $n^0_\lambda(\mathbf{q})$-fach angeregt sind,

$$\Psi_0 = c_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} |\{n^0_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle \tag{8.1}$$

Wir betrachten nun die Streuwelle bei Streuung an Atomen der Streulänge f_i. Man findet für die Streuwelle

$$\Psi_{\mathrm{str}} = c_0 \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \sum F_{n,n^0}(\mathbf{K}) |\{n_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle \tag{8.2}$$

mit

$$\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0, \quad \mathbf{k} = k\frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{n}}k^2 + E(\{n_\lambda\}) = \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{n}}k_0^2 + E(\{n^0_\lambda\}) \tag{8.3}$$

und

$$F_{n,n^0}(\mathbf{K}) = \sum_{mi} \langle\{n_\lambda(\mathbf{q})\}| f_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{mi}+\boldsymbol{\eta}_{mi})} |\{n^0_\lambda(\mathbf{q})\}\rangle. \tag{8.4}$$

Der einfallende Neutronenstrom ist gegeben durch $J_0 = c_0^2 A v_0$, wobei A die Querschnittsfläche des Probekörpers und v_0 die Geschwindigkeit der Neutronen ist. Der gestreute Strom ergibt sich zu $\mathrm{d}J_1 = \sum_{\{n\}} v|F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2 c_0^2 \mathrm{d}\Omega$. Daraus errechnet sich der Wirkungsquerschnitt (pro Elementarzelle)

$$\frac{\mathrm{d}J_1}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{N}{A}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} J_0 = N \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} c_0^2 v_0, \tag{8.5}$$

d.h. zu

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{N}\sum_{\{n\}} \frac{k}{k_0} |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2. \tag{8.6}$$

Mitteln wir über die Besetzungen $\{n^0\}$ und ziehen wir die Abhängigkeit von ω heraus $\hbar\omega = E_n - E_{n^0}$, so folgt der doppelt differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} &= \frac{1}{N}\sum_{\{n\},\{n^0\}} \frac{k}{k_0} |F_{n,n^0}(\mathbf{K})|^2 \delta(\omega - \frac{1}{\hbar}(E_n - E_{n^0})) p(\{n^0\}) \\
&= \frac{1}{N}\sum_{ij\delta n} \frac{k}{k_0} f_i f_j \delta(\omega - \sum \omega_\lambda(\mathbf{q})\delta n_\lambda(\mathbf{q})) \sum_{mn} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{mi}-\mathbf{R}_{nj})} \\
&\times \sum_{\{n^0\}} \langle\{n^0+\delta n\}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi}}|\{n^0\}\rangle\langle\{n^0\}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{nj}}|\{n^0+\delta n\}\rangle p(\{n^0\}),
\end{aligned} \tag{8.7}$$

wobei $p(\{n^0\})$ die Besetzungswahrscheinlichkeit im Festkörper angibt.

Wir entwickeln nun unter Verwendung von (6.24)

$$\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\lambda\mathbf{q}} \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \mathrm{h.c.}\right), \quad \gamma_i^\lambda(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M_i\omega_\lambda(\mathbf{q})}}\mathbf{K}\cdot\mathbf{c}_i^{\lambda *}(\mathbf{q}). \tag{8.8}$$

Die Matrixelemente $\langle n^0+\delta n|...|n^0\rangle$ können wir nun faktorisieren in ein Produkt von Matrixelemente für jeweils einen Oszillator

$$\langle\{n^0+\delta n\}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi}}|\{n^0\}\rangle = \prod_{\lambda\mathbf{q}}\langle n^0_\lambda(\mathbf{q})+\delta n_\lambda(\mathbf{q})|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{N}}(\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}a_\lambda^\dagger(\mathbf{q}) + \mathrm{h.c.})\right)|n^0_\lambda(\mathbf{q})\rangle. \tag{8.9}$$

Da sich die Besetzungszahlen für die meisten Phononen-Moden nicht oder nur um eins verändern, genügt es, die Matrix-Elemente zu betrachten, bei denen die Besetzungszahl ungeändert bleibt oder sich nur um ± 1 ändern. Da bei fast allen die Änderung der Besetzungszahl 0 ist und N solche Matrix-Elemente zu multiplizieren sind, müssen wir in der Entwicklung der Exponentialfunktion auch noch die Terme der Ordnung $1/N$ mitnehmen. Falls alle $\delta n = 0$ (elastische Streuung), dann folgt durch Entwicklung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned}
\prod_{\lambda\mathbf{q}} \langle n_\lambda^0(\mathbf{q})|\exp(...)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle &= \prod_{\lambda\mathbf{q}} \langle n_\lambda^0(\mathbf{q})|1 - |\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})|^2 \frac{1}{2N}(a_\lambda^\dagger a_\lambda + a_\lambda a_\lambda^\dagger)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle \\
&= \exp(-\frac{1}{N}\sum_{\lambda\mathbf{q}} |\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})|^2 (n_\lambda^0(\mathbf{q}) + \frac{1}{2})) =: \exp(-\tilde{W}_i). \qquad (8.10)
\end{aligned}$$

Einige Phononen können aber angeregt oder absorbiert werden. Für diese einzelnen ersetzt man den entsprechenden Faktor im Produkt über alle $\lambda, \mathbf{q}$ (der praktisch gleich 1 ist) durch

$$\begin{aligned}
\langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) + 1|\exp(...)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle &= \langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) + 1|\frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})a_\lambda^\dagger(\mathbf{q})|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle \\
&= \frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})\sqrt{n_\lambda^0(\mathbf{q}) + 1}, \qquad (8.11) \\
\langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) - 1|\exp(...)|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle &= \langle n_\lambda^0(\mathbf{q}) - 1|\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^{\lambda *}(\mathbf{q})a_\lambda(\mathbf{q})|n_\lambda^0(\mathbf{q})\rangle \\
&= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{N}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}\gamma_i^{\lambda *}(\mathbf{q})\sqrt{n_\lambda^0(\mathbf{q})}. \qquad (8.12)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde ebenfalls die Exponentialfunktion entwickelt. Die 1 trägt nichts bei, der Beitrag linear im Erzeuger bzw. Vernichter ist der Wesentliche, da die höheren wegen der Faktoren $1/\sqrt{N}$ für große Systeme vernachlässigbar sind.

Mit jeder Phononenanregung ($\delta n = 1$) ist ein Phasenfaktor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}$ verknüpft, mit jeder Phononenvernichtung ein Faktor $\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m}$ verknüpft. Bei der Mittelung über die verschiedenen Besetzungen n^0 wird aus $\tilde{W}_i$

$$W_i(\mathbf{K}) = \frac{1}{N}\sum_{\lambda\mathbf{q}} |\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})|^2(\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}). \qquad (8.13)$$

Unter Verwendung des Ausdrucks (8.8) für $\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi}$ folgt

$$W_i(\mathbf{K}) = \frac{1}{2}\overline{(\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\eta}_{mi})^2}. \qquad (8.14)$$

Setzen wir die Ausdrücke in den differentiellen Wirkungsquerschnitt ein, so folgt

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} &= \frac{1}{N}\frac{k}{k_0}\sum_{\{\delta n\}ij} f_i f_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{0i}-\mathbf{R}_{0j})}\delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}}\omega_\lambda(\mathbf{q})\delta n_\lambda(\mathbf{q})) \\
&\times \sum_{mn} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{K}+\sum\delta n_\lambda(\mathbf{q})\mathbf{q})\cdot(\mathbf{R}_m-\mathbf{R}_n))}\mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K})-W_j(\mathbf{K})}\prod_{\lambda\mathbf{q}} S_{\lambda\mathbf{q},i,j}(\delta n_\lambda(\mathbf{q})) \qquad (8.15)
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
S(0) &= 1, \qquad (8.16) \\
S_{\lambda,\mathbf{q},i,j}(+1) &= \frac{1}{N}\gamma_i^\lambda(\mathbf{q})\gamma_j^{\lambda *}(\mathbf{q})(\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + 1), \qquad (8.17) \\
S_{\lambda,\mathbf{q},i,j}(-1) &= \frac{1}{N}\gamma_i^{\lambda *}(\mathbf{q})\gamma_j^\lambda(\mathbf{q})\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}). \qquad (8.18)
\end{aligned}$$

Es bleibt die Summe über m und n auszuwerten. Im Gitter mit periodischen Randbedingungen ergibt sie

$$\sum_{mn} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{K}+\sum\delta n_\lambda(\mathbf{q})\mathbf{q})\cdot(\mathbf{R}_m-\mathbf{R}_n)} = N^2\sum_{\mathbf{G}}\delta_{\mathbf{K}+\sum\delta n_\lambda(\mathbf{q})\mathbf{q},\mathbf{G}} \qquad (8.19)$$

wobei $\mathbf{G}$ die reziproken Gittervektoren sind. Wir wollen nun das Kronecker-δ in ein Dirac-δ umwandeln. Hierzu verwenden wir aus (4.27)

$$\sum_{\mathbf{k}} ... \to \frac{V_{\mathrm{P}}}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k... \qquad (8.20)$$

woraus dann mit

$$\sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{0}} = 1 = \int \mathrm{d}^3 k \delta^3(\mathbf{k}) \tag{8.21}$$

$$\delta_{\mathbf{k},\mathbf{0}} \to \frac{(2\pi)^3}{V_\mathrm{P}} \delta^3(\mathbf{K}) \tag{8.22}$$

folgt. Damit haben wir

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2\sigma_\mathrm{coh}}{\mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\omega} &= \frac{k}{k_0} \frac{(2\pi)^3}{V_\mathrm{Z}} \sum_{\mathbf{G},\{\delta n\}} \delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}} \omega_\lambda(\mathbf{q})\, \delta n_\lambda(\mathbf{q}))\, \delta^3(\mathbf{K} + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_\lambda(\mathbf{q})\, \mathbf{q} - \mathbf{G}) \\ &\times \sum_{ij} f_i f_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot(\mathbf{R}_{0i} - \mathbf{R}_{0j})} \mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})} \prod_{\lambda\mathbf{q}} S_{\lambda\mathbf{q},i,j}. \end{aligned} \tag{8.23}$$

Man bezeichnet diesen Wirkungsquerschnitt als kohärenten Wirkungsquerschnitt. Es wurde angenommen, dass das Streuverhalten nur von den jeweiligen Platz in der Elementarzelle, das heißt von i abhängt. Wir finden dann zum einen den Debye-Waller-Faktor e^{-2W} oder für verschiedene Atomsorten $\mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K}) - W_j(\mathbf{K})}$. Er hängt nach (8.13) von $\mathbf{K}$ und von der Temperatur ab. Weiter beobachten wir die Energie-Erhaltung, die im $\delta(\omega - ...)$ steckt, das heißt es gilt

$$\frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{n}} k^2 + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \omega_\lambda(\mathbf{q})\, \delta n_\lambda(\mathbf{q}) = \frac{\hbar^2}{m_\mathrm{n}} k_0^2. \tag{8.24}$$

Weiter gibt es noch eine Quasi-Impuls-Erhaltung, die in der zweiten δ-Funktion steckt,

$$\mathbf{k} + \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_\lambda(\mathbf{q})\, \mathbf{q} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{G}. \tag{8.25}$$

Dies ist nicht die Impuls-Erhaltung. Abgesehen von den akustischen "Phononen" mit $\mathbf{q} = 0$, die gar keine Oszillatoren sind, tragen die Phononen keinen Impuls, da sie an den verschiedenen Orten in unterschiedlicher Phase schwingen. Tatsächlich wird der Impuls vollständig an diese akustischen "Phononen" mit $\mathbf{q} = 0$ übertragen,das heißt in die Translationsbewegung. Die Quasi-Impuls-Erhaltung rührt nicht von der Translationsinvarianz her (in dem Sinne, dass die Energie des Körpers invariant gegenüber einer Verschiebung aller Atome um einen konstanten Vektor ist), sondern von der Gitterperiodizität. Es handelt sich also um eine zusätzliche Symmetrie, die zu der zusätzlichen Erhaltung des Quasi-Impulses bis auf reziproke Gittervektoren $\mathbf{G}$ führt.

Falls alle $\delta n = 0$ sind, haben wir die elastische Streuung mit der Energie-Erhaltung, $\delta(\omega)$, die als Bragg-Streuung auftritt, $\sum_\mathbf{G} \delta^3(\mathbf{K} - \mathbf{G})$, und mit der Amplitude $\sum_i f_i \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_{0i}} \mathrm{e}^{-W_i(\mathbf{K})}$.

Falls ein $\delta n = \pm 1$, dann erhält man die Faktoren $\delta(\omega \mp \omega_\lambda(\mathbf{q}))$ und $\delta^3(\mathbf{K} \pm \mathbf{q} - \mathbf{G})$. Bis auf reziproke Gittervektoren ändert sich der Impuls des Neutrons um den Quasi-Impuls des Phonons. Die Faktoren $\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + 1$ für die Erzeugung eines Phonons und $\overline{n}_\lambda(\mathbf{q})$ für die Vernichtung ergeben die Stokes- und die Anti-Stokes-Linie. Diese Ein-Phonon-Prozesse erlauben die Messung der Phononendispersion. Das Intensitätsverhältnis von Stokes- zu Anti-Stokes-Linie ist durch $(\overline{n} + 1)/\overline{n} = \mathrm{e}^{\hbar\omega/(k_\mathrm{B}T)}$ gegeben.

Falls zwei $\delta n = \pm 1$, hat man für festes $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \pm \mathbf{q}_1 \pm \mathbf{q}_2$ eine kontinuierliche Verteilung von $\pm\omega(\mathbf{q}_1) \pm \omega(\mathbf{q}_2)$.

Die Verteilung auf 0-, 1-, 2-Phononen-Prozesse hängt von der Temperatur ab. Der Debye-Waller-Faktor bietet für die Verteilung eine Abschätzung. Berechnen wir für ein primitives Gitter das folgende Integral über den Streuquerschnitt, wobei wir die Beiträge, bei denen insgesamt ν Phononen erzeugt und absorbiert werden, mit p^ν multiplizieren,

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}\omega \mathrm{d}^3 K \frac{k_0}{k} \frac{\mathrm{d}^2\sigma_\mathrm{coh}}{\mathrm{d}\Omega \mathrm{d}\omega} p^{\sum |\delta n|} &= \frac{(2\pi)^3}{V_\mathrm{Z}} f^2 \mathrm{e}^{-2W} \prod_{\lambda\mathbf{q}} \sum_{\delta n} S_{\lambda\mathbf{q}}(\delta n) p^{|\delta n|} \\ = \frac{(2\pi)^3}{V_\mathrm{Z}} f^2 \mathrm{e}^{-2W} \mathrm{e}^{\frac{2}{N} \sum_{\lambda\mathbf{q}} p |\gamma^\lambda(\mathbf{q})|^2 (\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2})} &= \frac{(2\pi)^3}{V_\mathrm{Z}} f^2 \mathrm{e}^{-2W + 2pW}. \end{aligned} \tag{8.26}$$

Durch Entwickeln nach p erhält man die Beiträge für verschiedene $\sum |\delta n|$. Gegenüber dem elastischen Streuqerschnitt ist der Beitrag für $\sum |\delta n| = 1$ um den Faktor $2W$ kleiner oder größer, der für $\sum |\delta n| = 2$ um den Faktor $2W^2$. Summiert man alle Beiträge auf ($p = 1$), so hebt sich der Debye-Waller-Faktor weg.

Inkohärente Streuung

Bisher waren wir davon ausgegangen, dass das Gitter streng periodisch ist, das heißt auch, dass an allen Gitterorten, die sich um Gittervektoren $\mathbf{R}_m$ unterscheiden, das gleiche Isotop eines Elements mit der gleichen Streulänge sitzt. Dies ist aber in der Regel nicht der Fall, was dazu führt, dass auch die Streulängen unterschiedlich sind. Wir wollen nun annehmen, dass die Isotope zufällig und unkorreliert verteilt sind. Dann hängt die Streulänge nicht nur von i, sondern auch von der Gitterzelle m ab. Dann hat man im Ausdruck für den Wirkungsquerschnitt (8.15) die Mittelung über

$$\overline{f_{mi} f_{nj}} = \overline{f_i}\,\overline{f_j} + \delta_{mn}\delta_{ij}(\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2) \tag{8.27}$$

vorzunehmen. Der erste Term liefert den oben angegebenen Beitrag; man muss nur f_i durch den Mittelwert $\overline{f_i}$ ersetzen. Der zweite Term liefert aber den inkohärenten Beitrag

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{inc}}}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\omega} = \frac{k}{k_0} \sum_{\{\delta n\} i} (\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2)\delta(\omega - \sum_{\lambda\mathbf{q}} \delta n_\lambda(\mathbf{q}))\mathrm{e}^{-2W_i(\mathbf{K})} \prod_{\lambda\mathbf{q}} S_{\lambda,\mathbf{q},i,i}. \tag{8.28}$$

Man hat nach wie vor die Energieerhaltung, aber die Delta-Funktion für die Quasi-Impuls-Erhaltung fehlt. Einen ähnlichen Beitrag erhält man für Ionen mit Gesamtspin ungleich Null, da die Streulänge vom Gesamtspin Ion plus Neutron abhängt.

Abschätzung des Debye-Waller-Faktors im kubisch primitiven Kristall:

Aus

$$W(\mathbf{K}) = \frac{\hbar}{2mN} \sum_{\lambda\mathbf{q}} |\mathbf{K}\cdot\mathbf{c}_\lambda(\mathbf{q})|^2 \frac{\overline{n}_\lambda(\mathbf{q}) + \frac{1}{2}}{\omega_\lambda(\mathbf{q})} \tag{8.29}$$

folgt nach Mittelung $|\mathbf{K}\cdot\mathbf{c}_\lambda(\mathbf{q})|^2 = \mathbf{K}^2|\mathbf{c}_\lambda(\mathbf{q})|^2/3 = K^2/3$ und Verwendung der Debye-Näherung

$$W(\mathbf{K}) = \frac{\hbar\mathbf{K}^2}{6MN} \sum_{\lambda\mathbf{q}} \frac{\overline{n} + \frac{1}{2}}{\omega} = \frac{3\hbar^2 K^2}{2M} \left(\frac{T}{\Theta_\mathrm{D}}\right)^2 \frac{1}{2k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D}} \int_0^{\Theta_\mathrm{D}/T} x\frac{\mathrm{e}^x + 1}{\mathrm{e}^x - 1}\mathrm{d}x. \tag{8.30}$$

Der Integrand kann für große x durch x, für kleine x durch 2 approximiert werden. Daraus folgt

$$\begin{array}{llll} \Theta_\mathrm{D} \gg T & \int \approx \frac{1}{2}\left(\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T}\right)^2, & W = \frac{3}{4}\frac{\hbar^2 K^2}{2M}\frac{1}{k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D}} & \text{(Nullpunktsschwingungen)} \\ \Theta_\mathrm{D} \ll T & \int \approx 2\frac{\Theta_\mathrm{D}}{T} & W = 3\frac{\hbar^2 K^2}{2m}\frac{k_\mathrm{B}T}{(k_\mathrm{B}\Theta_\mathrm{D})^2} & \text{(Ausdehnungsquadrat } \propto T) \end{array} \tag{8.31}$$

Mössbauer-Effekt

Beim Mössbauer-Effekt geht ein angeregtes Atom unter Abgabe eines γ-Quants in seinen Grundzustand über. Dies ist ein Prozess, der an einem Atom stattfindet. Der Rückstoss, den dieses eine Atom erleidet, wird nun auf eine unterschiedliche Anzahl von Phononen übertragen. Dabei kommt auch der Fall vor, dass kein Phonon angeregt wird. Die Verteilung ist ähnlich wie beim inkohärenten Wirkungsquerschnitt. An die Stelle des Faktors $\overline{f_i^2} - \overline{f_i}^2$ tritt die Zerfalls-Wahrscheinlichkeit des angeregten Zustands. Die Wahrscheinlichkeit, dass kein Phonon angeregt (oder absorbiert) wird ist durch den Debye-Waller-Faktor e^{-2W_i} gegeben. Es gibt umgekehrt auch den Fall, dass die Strahlung wieder absorbiert wird (Resonanz-Absorption). Da die Linie sehr scharf ist, können damit geringe Energieverschiebungen beobachtet werden, zum Beispiel der Energie-Verlust eines γ-Quants, das sich im Gravitationsfeld der Erde um etwa 10 m nach oben bewegt.