Mößbauereffekt

Roland Gersch, Fatma Kul, Tanja Striepling, Christian Stromenger
Betreuer: Dr. Ernest Michael

21.06.02

Inhaltsverzeichnis

1 Vorbereitung

1.1 Emission von Gammastrahlung

Betrachtet wird ein Atomkern, der in zumindest zwei Zuständen existieren kann. Den Zustand höherer Energie E_a bezeichnet man als angeregten, den niedrigster Energie E_g als Grundzustand. Letzterer ist meistens außerordentlich stabil. Es geschehen daher häufig Übergänge von einem angeregten Zustand in den Grundzustand. Dabei wird die Energiedifferenz $\hbar\omega_0 := E_a - E_g$ frei. Diese kann nun entweder durch Emission eines Gammaquants oder durch innere Konversion abgegeben werden.

1.1.1 Formen der Energieemission

Innere Konversion (Internal Conversion "IC"). Hierbei wird $\hbar\omega_0$ an eines der Hüllenelektronen des Atoms abgegeben. Dieses Elektron verläßt den Atomverband. Voraussetzung für das Auftreten dieses Phänomens ist, daß $\hbar\omega_0$ größer als die Bindungsenergie zumindest eines Hüllenelektrons ist.

Gammaemission. Hierbei wird $\hbar\omega_0$ in Form eines Lichtquants abgegeben. Dessen Kreisfrequenz ist gegeben durch ω_0. Aufgrund der hohen Energieen, die bei Kernübergängen auftreten, handelt es sich um sehr kurzwellige Strahlung aus dem Gammabereich des Spektrums.

Konversionskoeffizient / Koeffizient der inneren Umwandlung. Sei $w(\gamma)$ die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Kernübergang die Emission eines Gammaquants nach sich zieht, $w(\mathrm{IC})$ analog für die innere Umwandlung. Nun bezeichnet man

$$\frac{w(\mathrm{IC})}{w(\gamma)} =: \alpha = \alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \ldots \tag{1}$$

als Konversionskoeffizienten. Da das gelöste Elektron aus einer beliebigen Schale stammen kann, setzt sich α wie in (1) zusammen. α läßt sich aus der Kernladungszahl Z des Atoms und dem Charakter des Kernübergangs berechnen.

1.1.2 Grundform der Emissionslinien

Die beiden betrachteten Zustände werden vollständig beschrieben durch ihre Wellenfunktionen Ψ_a und Ψ_g. Da die Lebensdauer der Zustände nicht unendlich ist, haben die zugeordneten Energieeigenwerte eine Unschärfe ΔE. Diese bestimmt sich über die Heisenbergsche Unschärferelation: $\tau\Delta E = \hbar/2$. Hierbei ist τ die Abklingzeit der Wellenfunktion, also die Zeitspanne, nach der die Amplitude von Ψ auf $\frac{1}{e}$-tel ihres anfänglichen Wertes abgefallen ist. Praktisch fällt dieser Wert nur beim angeregten

Zustand ins Gewicht, da der Grundzustand eines stabilen Kerns eine sehr lange Lebensdauer hat.

Die zeitliche Abhängigkeit der Wellenfunktion kann jetzt angegeben werden:

$$\begin{aligned}\Psi_a &\sim e^{-i(E_a - i\Delta E/\hbar)t} \\ \Psi_g &\sim e^{-iE_g}\end{aligned}$$

Betrachte nun die Wahrscheinlichkeitsdichte n des angeregten Zustands:

$$n \sim |\Psi_a|^2 \sim e^{-2t\Delta E/\hbar}$$

Bilde nun die zeitliche Ableitung von n:

$$\frac{dn}{dt} = -2n\Delta E/\hbar$$

Dies ist die bekannte Differentialgleichung für einen exponentiellen Zerfall mit Zerfallswahrscheinlichkeit $\Gamma := 2\Delta E/\hbar$. Physikalisch betrachtet muß Γ aufspalten in $\Gamma = \Gamma(\mathrm{IC}) + \Gamma(\gamma)$.

Unterdrücke zunächst die innere Konversion (z.B. durch entfernen aller Hüllenelektronen). Jetzt läßt sich die Ladungsdichte $\rho(t)$ beim Übergang berechnen durch $\Psi_g^* \cdot \Psi_a$.

Nun bestimmt die Ladungsdichte aber das elektrische Feld, so daß wohl gilt:

$$\vec{E}(t) \sim \rho(t) \sim e^{(-\Gamma/2 - i\hbar\omega_0)t} \tag{2}$$

Das elektrische Feld klingt also exponentiell ab. Fouriertransformation von $\vec{E}(t)$ liefert eine Koeffizientenfunktion

$$F(\omega) \sim \int_0^\infty \vec{E}(t) e^{i\hbar\omega t} \mathrm{d}t.$$

Einsetzen von $\vec{E}$ aus (2) liefert

$$F(\omega) \sim \int_0^\infty e^{(-\Gamma/2 - i\hbar\omega_0 + i\hbar\omega)t} \mathrm{d}t.$$

Ausführen dieses Integrals liefert $F(\omega) \sim \frac{1}{i\Gamma/2 + \hbar\omega - \hbar\omega_0}$. $F(\omega)$ ist die Amplitude, mit der das elektrische Feld bei Frequenz ω schwingt. Die durch diese Schwingung verursachte Strahlungsintensität $I(\omega)$ läßt sich berechnen:

$$I(\omega) = |F(\omega)|^2 \sim \frac{|\hbar\omega - \hbar\omega_0 - i\Gamma/2|^2}{\left((\hbar\omega - \hbar\omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2\right)^2} = \frac{1}{(\hbar\omega - \hbar\omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

$I(\omega)$ ist in Abbildung 1 aufgetragen.

Einsetzen von experimentellen Daten liefert eine sehr kleine Halbwertsbreite Γ (Größenordnung 10^{-9}eV. Die Energieschärfe von so erzeugten Gammaquanten ist also sehr hoch.

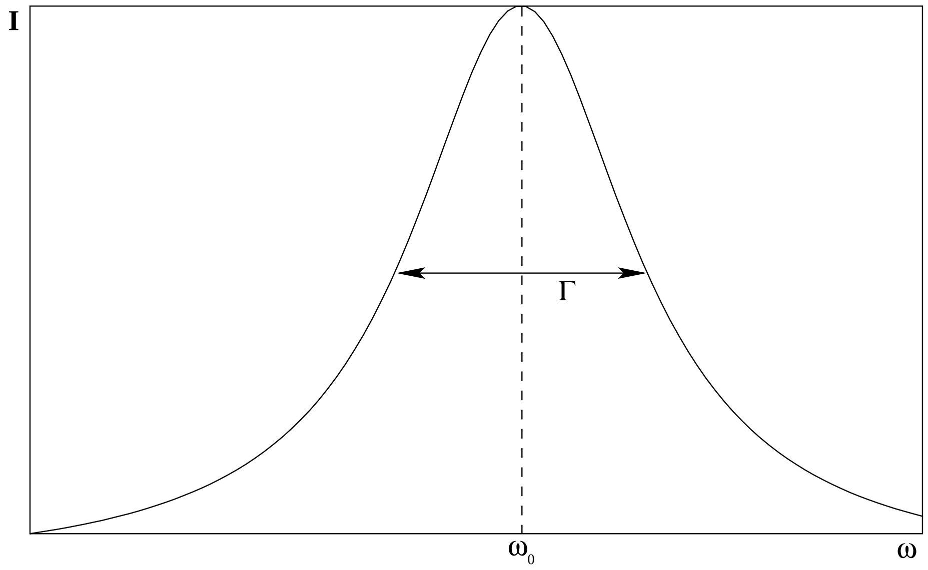

Abbildung 1: Lorentzform einer Spektrallinie

1.2 Wechselwirkung mit Materie

Wenn ein Photon mit Frequenz ν auf Materie trifft, gibt es im Wesentlichen drei Möglichkeiten, wie das Photon mit der Materie wechselwirken kann: Den Photoeffekt, die Comptonstreuung und die Paarbildung.

1.2.1 Photoeffekt

Der Querschnitt dieser Art der Wechselwirkung liegt bei $\frac{Z^5}{(h\nu)^{3,5}}$, falls $h\nu >> B$ ist. Sie betrifft nur Atome, nie freie Elektronen. Die Energie des anfliegenden Photons $h\nu$ muss größer sein als die Bindungsenergie eines Elekrons in der Atomhülle B. Dann kann es passieren, dass das Elektron von dem Photon aus der Hülle herausgeschlagen wird. Die überschüssige Energie E_e wird in kinetische Energie des Elekrons umgewandelt; das Photon wird vollständig absorbiert.

Der Energiesatz lautet hier:

$$h\nu = E_e + B$$

1.2.2 Comptonstreuung

Hier liegt der Querschnitt bei $\frac{Z}{h\nu}$. Ein Photon interagiert mit einem freien, als ruhend angenommenen Elektron über einen elastischen Stoß. Durch den Stoß erhält das Elektron kinetische Energie und bewegt sich, das Photon wird von seiner Flugbahn abgelenkt und am Elektron gestreut. Durch Energie- und Impulserhaltung ergibt sich

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + (1 - cos(\Theta))\frac{h\nu}{m_0 c^2}},$$

wobei

ν' = Frequenz des Photons nach der Streuung,

Θ = Winkel des Photons nach der Streuung zur ursprünglichen Flugrichtung,

m_0 = Ruhemasse des Elektrons.

Am Energiesatz kann man nun folgende Spezialfälle ablesen:

$\Theta = 0$: Hier gilt offenbar $\nu = \nu'$ und das Photon fliegt unbeirrt geradeaus weiter, so als wäre das Elektron gar nicht da gewesen.

$\Theta = \pi$: Das Photon wird reflektiert und fliegt die ursprüngliche Bahn zurück. Der mögliche Energieübertrag an das Elektron hat in diesem Fall sein Maximum. Die Energie das Photons nach dem Stoß beträgt hier $h\nu' = \frac{h\nu}{1+2\frac{h\nu}{m_0c^2}}$.

Die Lücke E_C zwischen maximaler Elektronenenergie für $\Theta = \pi$ und ursprünglicher Energie des Photons $h\nu$ beträgt also $E_C = \frac{h\nu}{1+2\frac{h\nu}{m_0c^2}}$. Für den Fall großer Photonenergie, also für $h\nu >> m_0c^2$, gilt daher:

$$E_C = \frac{m_0c^2}{2}$$

.

1.2.3 Paarbildung

Dies passiert mit einem Querschnitt von ca. $Z^2ln(h\nu)$. Die niedrigste Photonen-Energie, mit der Paarbildung möglich ist, liegt bei $2m_0c^2$. Ab dieser Energie kann es passieren, dass ein Photon sich in ein Elektron-Positron-Paar umwandelt. Elektron und Positron haben danach die kinetischen Energien E_e bzw E_p und jeweils die Ruheenergie m_0c^2, wobei der Energiesatz

$$h\nu = 2m_0c^2 + E_e + E_p$$

erfüllt ist.

Gleich im Anschluss an die Paarbildung wird das Positron im Festkörper abgebremst. Nach $10^{-13}s$ hat es soviel Energie verloren, dass es sich mit einem Elektron zu Positronium vereinigt. Das Positronium zerstrahlt dann meist in zwei sogenannte Vernichtungsquanten der jeweiligen Energie von 511 keV = m_0c^2.

1.2.4 Querschnittzusammenfassung

Trägt man die in den letzten drei Abschnitten angegebenen Querschnitte für diese drei Arten der Wechselwirkung zusammen, so erhält man folgende Graphik:

Auf den Trennlinien zwischen den Bereichen sind die Möglichkeiten gleichermaßen wahrscheinlich.

1.2.5 Resonanzabsorption

Dieses Phänomen kann eintreten bei zwei identischen Atomkernen A und B mit gleicher Protonen- und gleicher Neutronenzahl. Falls A sich in einem angeregten Zustand der Energie E_a befindet, dann kann der Kern nach kurzer Dauer in den Grundzustand der Energie E_g übergehen. Dabei wird ein γ-Quant der Energie $E_0 = E_a - E_g$ ausgesendet (auf das Rückstossproblem wird in Abschnitt 1.1.2 eingegangen). Trifft das Quant auf Kern B, so kann es diesen anregen, denn es hat ja exakt die dazu nötige Energie $E_a - E_g$. Der Kern befindet sich dann im angeregten Zustand und das γ-Quant wird vollständig absorbiert.

Es ist sicher zu stellen, dass das Photon nach Verlassen von Kern A wirklich die zur Resonanzabsorption nötige Energie E_0 hat. Damit die Rückstossenergie E_R möglichst minimal wird (im Idealfall 0), benutzt man Festkörper zur Erzeugung der Kernresonanzabsorption.

1.2.6 Gammaemission im Gas

In einem Gas bewegen sich die Teilchen mit maxwellverteilter Geschwindigkeit. Betrachte nun ein einzelnes Atom der Masse M in einem angeregten Zustand der Energie E_a, das sich mit Geschwindigkeit $\vec{v}$ bewegt. Beim Übergang zum Grundzustand (Energie E_g) werde ein Photon mit Wellenzahl $\vec{k}$ abgegeben. Der Impuls des Photons wird an das Atom übergeben. Es gilt:

$$\begin{aligned}
E_{\text{Atom,vorher}} &= E_a + \frac{\langle \vec{p}, \vec{p} \rangle}{2M} \\
E_{\text{Atom,nachher}} &= E_g + \frac{(\vec{p} - \hbar\vec{k})^2}{2M} \\
&= E_g + \frac{(\vec{p})^2}{2M} - \langle \vec{v}, \vec{k} \rangle + \frac{\left(\hbar\vec{k}\right)^2}{2M}
\end{aligned}$$

Die Energie des abgegeben Photons ist also

$$E_{\text{Photon}} = \hbar\omega_0 + \hbar\langle \vec{v}, \vec{k} \rangle - \frac{\left(\hbar\vec{k}\right)^2}{2M} \tag{3}$$

Offenbar weicht sie von der in 1.1.2 ermittelten Energie durch zwei Terme ab:

- Den Rückstoßterm $\frac{\left(\hbar\vec{k}\right)^2}{2M}$.

- Den Dopplerterm $\hbar\langle\vec{v},\vec{k}\rangle$.

Der geschwindigkeitsabhängige Dopplerterm kann die Energie des Photons sowohl vergrößern (das Atom bewegt sich in Richtung der Photonenausbreitung) als auch verkleinern, wenn sich das Atom in Richtung $-\vec{k}$ bewegt. Er führt also zu einer Verbreiterung der Spektrallinie.

Der Rückstoßterm verringert in jedem Fall die Energie des Photons. Die verbreiterte Spektrallinie wird also im Spektrum in Richtung größerer Wellenlängen verschoben.

In der Praxis ist der Einfluß von Rückstoß- und Dopplereffekt um viele Größenordnungen stärker als die lebensdauerbedingte natürliche Linienbreite aus 1.1.2.

1.2.7 Debye-Waller-Faktor

Betrachte nun statt eines einatomigen Gases wie in 1.2.6 ein komplexeres Gasmolekül als emittierendes Teilchen. Dieses Teilchen hat Freiheitsgrade der Rotation und der Vibration. Deren Energie ist gequantelt. Es gilt

$$E_{\mathrm{rot}} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\Theta} \tag{4}$$

$$E_{\mathrm{vib}} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\Omega\hbar \tag{5}$$

Dabei ist Θ das Trägheitsmoment des Moleküls, l die Drehimpulsquantenzahl, n die Hauptquantenzahl und Ω die Kreisfrequenz der Schwingung.

Eine Gammaemission kann nun sowohl die Schwingung als auch die Rotation des Moleküls anregen. Dessen innere Energie, die sogenannte Molekülenergie $E_{\mathrm{m}} = E_{\mathrm{vib}} + E_{\mathrm{rot}}$, ändert sich dann um ΔE_{m}.

Mit (5) und (4) ergibt sich nun:

$$\Delta E_{\mathrm{m}} = -\frac{l(l+1)-l'(l'+1)}{2\Theta}\hbar^2 - (n-n')\,\hbar$$

Moleküle sind schwerer als die Atome, aus denen sie bestehen. Sie bewegen sich bei einer Temperatur T also langsamer als die einzelnen Atome. Darum sind Rückstoß- und Dopplereffekt nun schwächer. Die Emissionslinie rückt also näher an ω_0 und wird schmaler. Gleichzeitig entstehen aber links und rechts neue Linien. Diese werden von ΔE_{m} bedingt. Allgemein ist ΔE_{m} abhängig vom Zustand der Rotation und Vibration vor und nach der Emission, charakterisiert durch die Quantenzahlen n, l, n', l':

$$\Delta E_{\mathrm{m}} = \Delta E_{\mathrm{m}}\,(n, l; n', l')$$

Die Intensität einer Nebenlinie zu l', n' ist nun abhängig von der Wahrscheinlichkeit $w\,(n, l; n', l')$, daß ein Molekül bei Gammaemission vom Zustand n, l in den Zustand n', l' übergeht.

Außerdem befinden sich bei gegebener Temperatur $T > 0$ nicht alle Moleküle im Zustand n, l, sondern nur ein Bruchteil $g(T; n, l)$. So läßt sich zumindest die Intensität der Hauptlinie ausrechnen:

$$\frac{I_{\text{Hauptlinie}}}{I_{\text{gesamt}}} = \sum_{nl} g(T; n, l) \cdot w\,(n, l; n, l) =: f(T)$$

f(T) heißt Debye-Waller-Faktor des Moleküls.

Bei $T = 0$ befinden sich alle Moleküle im Grundzustand $n = l = 0$. Sie können also keine, in der Nähe von $T = 0$ kaum, Energie aus ihrer Rotations/ Vibrationsbewegung an das Gammaquant abgeben. Daher bilden sich nur auf der linken Seite der Hauptlinie entsprechende Nebenlinien. Auch bei höheren Temperaturen bleibt die Verteilung der Linien asymmetrisch. Die Moleküle tendieren eher dazu, Teile der Energie des Quants in ihre innere Energie umzuwandeln, als dem Quant Teile ihrer inneren Energie mitzugeben.

1.2.8 Gammaemission im Festkörper

Ein Festkörper ist in guter Näherung ein Riesenmolekül. Die Anzahl der Einzelatome dieses Moleküls liegt in der Größenordnung 10^23. Ein Festkörper ist auf der Erde immer fixiert. Auch die Brownsche Bewegung ist vernachlässigbar. Daher beträgt seine Geschwindigkeit $\vec{v}$ immer 0. Der Dopplerterm aus (3) verschwindet also. Auch der Rückstoßterm verschwindet.

Die Atome des Festkörpers sind nun miteinander elastisch gekoppelt und können sich folglich auch gegeneinander eingeschränkt bewegen. Die Bedingt durch die elastische Kopplung handelt es sich bei den Bewegungen um Schwingungen. Die Zahl der Teilchen sei N. Es gibt $3N$ verschiedene Schwingungsmodi des Kristalls, jede mit ihrer eigenen charakteristischen Frequenz Ω_s. Die möglichen Schwingungsenergieen für jede Mode sind gequantelt, die Gesamtenergie einer Mode beträgt $E_s = \left(n_s + \frac{1}{2}\right) \hbar\Omega_s$. Der Zustand einer Mode ist durch die Angabe von n_s vollständig charakterisiert.

Das emittierte Photon kann nun mit diesen Moden wechselwirken. Die Summe der Energieen der Moden sind das Analogon zur inneren Energie der Moleküle aus Abschnitt 1.2.6. Der Unterschied zum Gasmolekül besteht in der Feinheit der Quantisierung. Die Frequenzen Ω_s (und folglich auch die entsprechenden Energien $\hbar\Omega_s$) sind so nahe beieinander, daß man sie in guter Näherung als Kontinuum auffassen kann. Ansonsten kann man die Analyse wie beim Gas durchführen.

Die Wahrscheinlichkeit, daß die Mode s vom Zustand n_s in den Zustand n'_s übergeht, heiße $w(n_s, n'_s)$. Die Wahrscheinlichkeit, bei Temperatur T die s-te Mode im Zustand n_s anzutreffen, sei $g(T; n_s)$. Die Summen über die Wahrscheinlichkeiten sind jeweils auf 1 normiert. Der Debye-Waller-Faktor ist wie oben:

$$f(T) = \sum_{n_s} g(T, n_s) w(n_s, n_s)$$

und bestimmt den Bruchteil der Quanten in der Hauptlinie.

Angenommen, jede Mode würde mit ungefähr gleicher Wahrscheinlichkeit in einen anderen Zustand übergehen wie im ursprünglichen verbleiben. Dann wäre der Bruchteil der Quanten in der Hauptlinie verschwindend gering. Das deckt sich nicht mit den experimentellen Erfahrungen z.B. bei Eisen. Hier liegen 80% der Quanten in der Hauptlinie.

Die Dominanz der Hauptlinie bezeichnet man als den Mößbauereffekt, die Linie selber als Mößbauerlinie. Sie hat die in Abschnitt 1.1.2 vorhergesagt natürliche Linienbreite Γ.

Das Strahlungsspektrum außerhalb der Hauptlinie ist asymmetrisch. Wie beim Gas nimmt auch der Festkörper bei mäßigen Temperaturen eher Energie des Photons auf, als daß er Energie an das Photon abgibt. Die genaue Form des Spektrums wird durch die Form des Spektrums der Ω_s bestimmt.

1.2.9 Das Einsteinmodell

Ein Festkörper läßt sich in Näherung beschreiben als Ensemble von drei harmonischen Oszillatoren pro Teilchen, die nicht wechselwirken. Der Hamiltonoperator eines harmonischen Oszillators ist bekanntlich

$$\hat{h_i} = \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_i.$$

Der Hamiltonoperator $\hat{H}$ ist dann $\sum_i \hat{h_i}$. Der Dichteoperator eines harmonischen Oszillators ist ja gegeben durch $\hat{\rho} = \mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}$. Bezüglich seiner Eigenbasis hat $\hat{H}$ die Gestalt

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega/2 & & & \\ & \hbar\omega/2+\hbar\omega & & \\ & & \hbar\omega/2+2\hbar\omega & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Sei $x := \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega}$. Dann hat $\hat{\rho}$ die Gestalt

$$\begin{pmatrix} \sqrt{x} & & & \\ & \sqrt{x}x & & \\ & & \sqrt{x}x^2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Die Zustandssumme ist dann $Z_{\text{Einstein}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{x}x^n = \sqrt{x}\frac{1}{1-x}$. Hieraus folgen viele Eigenschaften des Ensembles von Oszillatoren, daß den Festkörper beschreibt.

1.2.10 Das Debye-Modell

Im Debye-Modell berücksichtigt man die Wechselwirkung zwischen den Oszillatoren. Es ergeben sich $3N$ Schwingungsmoden (N:Teilchenzahl). Bei niedrigen Temperaturen sind aber die Schwingungsmoden mit hoher Frequenz selten angeregt. Sie werden daher im Debye-Modell konsequent weggelassen. Betrachtet werden also die akustischen Phononen.

Man kann leicht die Anzahl von Zuständen innerhalb einer Kugel im Impulsraum mit Radius $\left|\vec{k}\right|$ berechnen. Sei die Gitterkonstante a, dann nimmt ein Zustand ein $\vec{k}$-Raumvolumen von $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ ein. Also befinden sich in der Kugel

$$N(\vec{k}) = \frac{\frac{4}{3}\pi|\vec{k}|^3}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3} = \frac{a^3}{6\pi^2}k^3$$

Zustände. Akustische Phononen folgen einer linearen Dispersionsrelation, es gilt also $\omega = sk$ mit der Schallgeschwindigkeit im Medium s. Differentiation nach ω (und Division durch das Volumen der Einheitszelle) ergibt die Zustandsdichte pro Frequenz:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{a^3}\frac{dN(\omega)}{d\omega} = \frac{1}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{s^3}$$

Beachtung aller drei möglichen akustischen Zweige (zwei transversal, einer longitudinal) liefert mit $1/\bar{s}^3 := (1/s_1^3 + 1/s_2^3 + 1/s_3^3)$:

$$\rho_{\text{akust.}}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{\bar{s}^3}$$

Diese Funktion ist aber nicht über alle Frequenzen integrierbar, also nicht normierbar. Um dies zu erreichen, setzt man $\rho_D := \left\{ \begin{smallmatrix} \rho_{\text{akust.}} & \omega<\omega_D \\ 0 & \omega>\omega_D \end{smallmatrix} \right\}$

Nun kann man mit den bekannten Formeln wieder viele thermodynamische Größen ausrechnen. Schön ist, daß die Theorie ihren Gültigkeitsbereich selbst klar macht: Ist die Temperatur T hoch genug, um optische Schwingungen anzuregen, gilt die Näherung nicht mehr. Die Grenztemperatur ist definiert durch $k_BT = \hbar\omega$.

1.2.11 Zerfallsschema von ^{57}Co.

^{57}Co zerfällt durch K-Einfang in ^{57}Fe. Dieses befindet sich zunächst größtenteils in einem hohen angeregten Zustand, von dem es unter Emission eines 123-keV-Gammaquants in einen angeregten Zustand 14,4 keV über dem Grundzustand übergeht. Der Übergang zum Grundstand geschieht nun mit Konversionskoeffizient $\alpha = 9$, also werden nur 10% als Gammaquanten emittiert.

Siehe hierzu Abbildung 2, entnommen aus [3].

1.3 Form der Mößbauerlinien

Trägt man die Intensität I gegen die zugehörige Energie E auf, so erhält man den Graphen der Funktion

$$I(E) = \frac{\alpha}{(E-E_0)^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2},$$

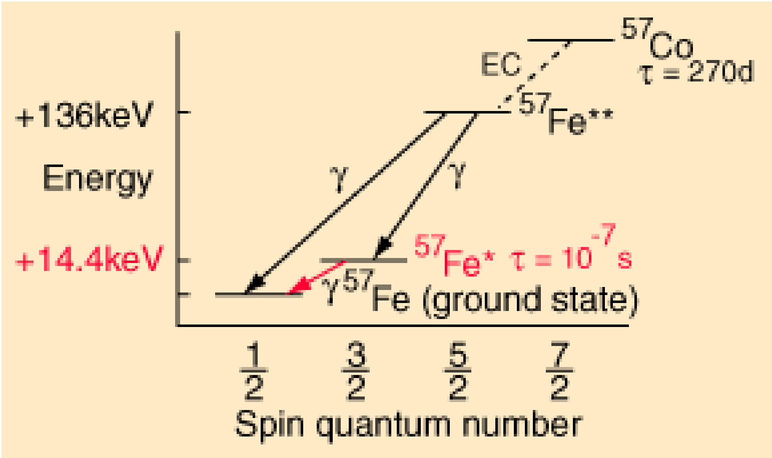

Abbildung 2: Zerfallsschema ^{57}Co

wobei α ein Proportionalitätsfaktor ist. Die Halbwertsbreite Γ des Spektrums ist gegeben durch die Heisenberg'sche Unschärferelation $\Gamma \cdot \tau = \frac{h}{2\pi}$, wobei τ die mittlere Lebensdauer des angeregten Zustandes E_a ist.

1.3.1 Bestimmung der Zählrate $Z(v)$.

Bewegt sich nun zusätzlich die Quelle relativ zum Absorber mit der Geschwindigkeit v, so ist E_0 durch $E_0(1+v)$ zu ersetzen. Damit erhält man für die Intensitätsverteilung

$$I(v, E) = \frac{1}{2\pi} \frac{f \cdot \Gamma}{(E - E_0(1+v))^2 + (\frac{\Gamma}{2})^2}.$$

Damit die Intensität $\int I(v, E) dE$ unter der Mößbauerlinie gleich dem Debye-Waller-Faktor f ist, ist als Proportionalitätsfaktor $\frac{f \cdot \Gamma}{2\pi}$ zu wählen.

Für die Wahrscheinlichkeit $D(E)$, dass ein γ-Quant der Energie E den Absorber durchdringt, auch Durchlässigkeit genannt, gilt

$$D(E) = exp(-dn\sigma(E)),$$

wobei n = Teilchenzahldichte des Absorbers, d = Dicke des Absorbers und $\sigma(E)$ = Wirkungsquerschnitt pro Atom. Nun zerlegt man $\sigma(E)$ in $\sigma(E) = \sigma' + \sigma_r(E)$. σ' ist energieunabhängig und beinhaltet sowohl die Auswirkungen der Elektronenhülle (Photoeffekt, Compton-Streuung) als auch die Absorptionsprozesse, bei denen sich durch Anregung von Gitterschwingungen der Zustand des Kristallgitters ändert. $\sigma_r(E)$ ist der Resonanzquerschnitt. Da eine Absorption nichts anderes als eine zeitlich rückwärts ablaufende Emission ist, gilt $\sigma_r(E) \sim I(E)$ Der Proportionalitätsfaktor beträgt hier

$$\sigma_0 \beta f' (\frac{\Gamma}{2})^2,$$

$$\sigma_0 = \frac{2\pi \cdot (2j_a + 1)}{k^2(1+\alpha)(2j_g - 1)}$$

wobei: β = Isotopenhäufigkeit, f' = Debye-Waller-Faktor des Absorbers, α = Konversionskoeffizient, j_a, j_b = Spins des Atomkerns im angeregten und im Grundzustand.

Damit folgt für die Zählrate:

$$Z(v) = (1-f)exp(-dn\sigma') + \int I(v,E)D(E)dE.$$

Den ersten Term erhält man durch die Quanten im Kontinuum der Nebenlinien: Hier findet keine Resonanzabsorption statt, daher darf man $\sigma(E)$ durch σ' ersetzen. Der zweite Term beschreibt die Resonanzabsorption der Mößbauerlinie.

Betrachtet man nun insbesondere den Fall $v >> 0$, also $Z(\infty)$, so wird die Resonanzabsorption zunichte gemacht und man erhält wegen $\int I(v,E)dE = f$, dass $Z(\infty) = exp(-dn\sigma')$.

Also erhält man für das Verhältnis von $Z(v)$ zu $Z(\infty)$:

$$\frac{Z(v)}{Z(\infty)} = 1 - f + \int I(v,E)exp(-dn\sigma_r(E))dE$$

.

1.3.2 Dünne Absorber

Falls die Dicke des Absorbers $d << 1$ ist, so kann man aufgrund der Taylor-Entwicklung der Eponentialfunktion $exp(-dn\sigma_r(E))$ durch $1-dn\sigma_r(E)$ ersetzen. Damit erhält man für kleine d:

$$\frac{Z(v)}{Z(\infty)} = 1 - dn \int I(v,E)\sigma_r(E)dE.$$

Durch Einsetzen der Ausdrücke für $I(v,E)$ und $\sigma_r(E)$ kann man das entstehende Integral mithilfe des Residuensatzes elementar lösen und erhält:

$$\frac{Z(v)}{Z(\infty)} = 1 - \frac{1}{2} ndff'\sigma_0\beta \frac{(\frac{\Gamma}{E_0})^2}{(\frac{\Gamma}{E_0})^2 + v^2}$$

1.3.3 Reduzierte Dicke

Die reduzierte Dicke T_A ist definiert als

$$T_A = f'n\alpha\sigma_0 d,$$

wobei alle Größen wie in 1.3.1.

1.4 Hyperfeinstruktur-Wechselwirkung und relativistische Temperaturverschiebung

1.4.1 Magnetische Hyperfeinstrukturaufspaltung

Die Hyperfeinstrukturaufspaltung ist eine Folge der Wechselwirkung des magnetischen Moments des Atomkerns mit dem magnetischen Moments der Elektronenhülle. Diese Wechselwirkung bewirkt eine gegenseitige Ausrichtung der Drehimpulse $\vec{I}$ des Kerns und $\vec{J}$ der Hülle.

Die Wechselwirkungsenergie ist klein gegen die Kopplungsenergie der Elektronen innerhalb der Hülle und der Nukleonen innerhalb des Kerns. Daher greift die relativ schwache Hyperfeinstrukturwechselwirkung zwischen $\vec{I}$ und $\vec{J}$ nicht in die innere Kopplungen von Hülle und Kern ein, sondern führt lediglich zu einer Kopplung der beiden Drehimpulse zum Gesamtdrehimpuls $\vec{F}$ des Atoms $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$.

Zur quantitativen Berechnung der sich ergebenen Korrekturen zu den Energieniveaus, betrachtet man den Kern als praktisch punktförmig und das von der Elektronenhülle erzeugte Magnetfeld als konstant im Bereich des Kernvolumens. Die magnetische Energie ist dann $V_{HFS} = -\vec{\mu_I} \cdot \vec{B_0}$, wobei $\vec{\mu_I}$ das magnetische Moment des Kerns und $\vec{B_0}$ das magnetische Feld der Hülle am Kernort ist. Man kann diese dann als Störungsterm im Hamiltonoperator betrachten und die Korrekturen in erster Ordnung mit Hilfe der stationären Störungsrechnung ausrechnen.

Es gilt $\vec{B_0} = B_0 \frac{\vec{J}}{J\hbar}$ und $\vec{\mu_I} = g_I \mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar} = \frac{\mu_I \mu_K}{\hbar} \frac{\vec{I}}{I}$ mit $g_I = \frac{\mu_I}{I}$. Hierbei ist $\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 3,152 \cdot 10^{-8} eV/T$ das Kernmagneton und g_I der sogenannte *g-Faktor*, der das Verhältnis von magnetischem Moment (in *Magnetonen*) zum Drehimpuls (in Einheiten von $\hbar$) angibt.

Einsetzen von $\vec{B_0}$ und $\vec{\mu}$ ergibt

$$V_{HFS} = -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{\hbar^2 IJ} (\vec{I} \cdot \vec{J}) = -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{\hbar^2 IJ} \cdot \frac{1}{2} (F^2 - I^2 - J^2). \tag{6}$$

In erster Näherung ergibt sich nun die Energie des gestörten Systems, indem man zur ungestörten Energie den Erwartungswert des Störterms hinzuaddiert, dabei wird dieser Erwartungswert mit den Eigenfunktionen des ungestörten Problems berechnet.

$$\Delta E_{HFS} =< V_{HFS} >= \frac{A}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)] \tag{7}$$

mit $\frac{A}{2} = -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{2IJ}$.

Aus (7) erhält man

$$\Delta E_{F+1} - \Delta E_F = A(F+1) \tag{8}$$

was besagt, dass der Abstand zweier Terme in einem *Hyperfeinstruktur-Multiplett* proportional zum größeren der beiden F-Werte ist. Wegen dieser Beziehung nennt man A den *Intervallfaktor*.

Da der Intervallfaktor A das Produkt aus dem Kernmoment μ_K und dem Hüllenfeld B_0 enthält, lässt sich, falls eine der beiden Größen bekannt ist, die andere durch Messung des Linienabstands bestimmen.

1.4.2 Hyperfeinaufspaltung bei ^{57}Fe

Für den Grundzustand von ^{57}Fe gilt $I_g = \frac{1}{2}$ und für den ersten angeregten Zustand $I_a =^{57} Fe$. Da die magnetische Quantenzahl m_I nach den Regeln der Quantenmechanik dann die Werte $I, I-1 \cdots -(I-1), -I$ annehmen kann, ergibt sich, dass der Grundzustand in zwei Zustände aufspaltet und der angeregte Zustand in vier. Mit der Auswahlregel $\Delta m_I = \pm 1$ sind dann sechs Übergänge möglich.

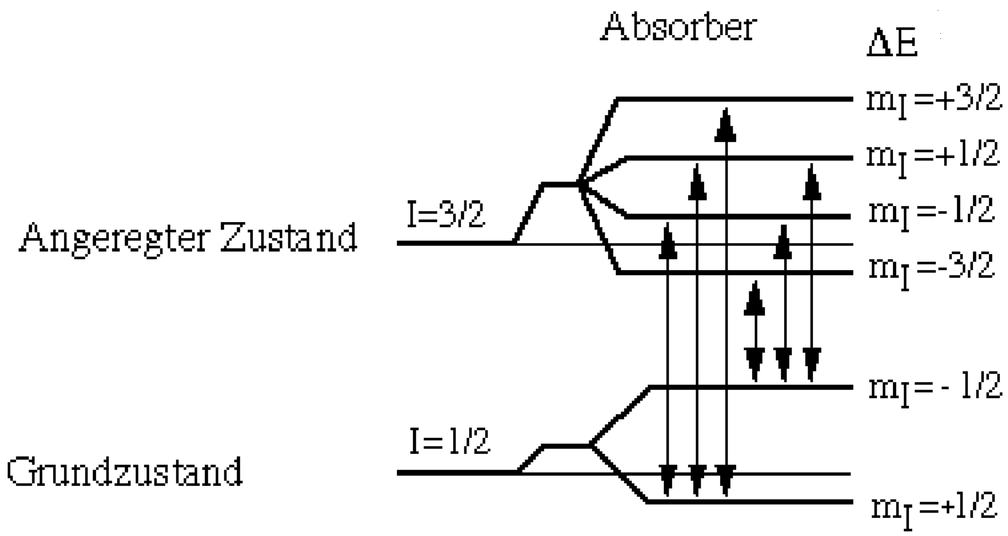

Abbildung 3: Hyperfeinaufspaltung von ^{57}Fe

Legt man das B-Feld in z-Richtung also $\vec{B} = B_0 \vec{e_z}$ erhält man $V_{HFZ} = -\mu_z B_z$, also nach Gleichung (6)

$$V_{HFS} = -\frac{\mu_I \mu_k B_0}{\hbar I}(\hat{I}_z) \tag{9}$$

und damit

$$< V_{HFS} >= -\frac{\mu_I \mu_K B_0}{I} m_I \tag{10}$$

Für die Übergangsenergien gilt dann

$$\Delta E = (E_a - \frac{\mu_a \mu_K}{I_a} m_a B) - (E_g - \frac{\mu_g \mu_K}{I_g} M_g B) = \hbar\omega_0 - B(\frac{\mu_a \mu_K}{I_a} m_a - \frac{\mu_g \mu_K}{I_g} m_g), \tag{11}$$

wobei die Magnetonen in Einheiten des Kernmagnetons μ_K gemessen sind. Bei einer bewegten Quelle gilt damit für die Resonanzgeschwindigkeit folgende Bedingung

$$\hbar\omega_0(1+\frac{\Delta v}{c}) = \hbar\omega_0 - B(\frac{\mu_a\mu_K}{I_a}m_a - \frac{\mu_g\mu_K}{I_g}m_g) \tag{12}$$

$$\Delta v = -\frac{c}{\hbar\omega_0}(\frac{\mu_a\mu_K}{I_a}m_a - \frac{\mu_g\mu_K}{I_g}m_g)B \tag{13}$$

1.4.3 Elektrostatische Wechselwirkung des Atomkerns mit der Umgebung

Im Festkörper ist der Atomkern von elektrischen Ladungen umgeben, die am Kernort ein elektrisches Potential $\phi(\vec{r})$ erzeugen. Dann ist die potentielle Energie einer Ladung q in diesem Potential durch $q \cdot \phi(\vec{r})$ und die Feldstärke $\vec{E}(\vec{r}) = -grad\phi(\vec{r})$ gegeben. Damit ergibt sich für einen Kern mit der Ladungsdichte $\rho(\vec{r})$ die elektrostatische Energie

$$E = \int \rho(\vec{r})\phi(\vec{r})dV. \tag{14}$$

Entwicklung des Potentials $\phi(\vec{r})$ um $r = 0$ ergibt:

$$\begin{aligned}\phi(\vec{r}) =& \phi(0) + x\partial_x\phi(0) + y\partial_y\phi(0) + z\partial_z\phi(0)\\ &+ \frac{1}{2}[x^2\partial_x^2\phi(0) + y^2\partial_y^2\phi(0) + z^2\partial_z^2\phi(0) + xy\partial_x\partial_y + ...] + ...\end{aligned} \tag{15}$$

Einsetzen in (14) ergibt folgende Terme

Monopolterm:

$$E_0 = \int \phi(0)\rho(\vec{r})dV = Ze\phi(0) \tag{16}$$

Dipolterm:

$$E_1 = \int grad(\phi)|_0 \cdot \vec{r}\rho(\vec{r})dV \tag{17}$$

Quadrupolterm:

$$E_2 = \frac{1}{2}(\sum_{ij}\partial_i\partial_j\phi|_0) \cdot \int r_i r_j \rho(\vec{r})dV \tag{18}$$

Der Monopolterm trägt nur zur potentiellen Energie des Gitters bei, und ist somit in diesem Zusammenhang nicht von Interesse.

Der Dipolterm verschwindet. Dies überlegt man sich folgender Maßen:
$\rho(\vec{r})$ ist eine gerade Funktion, denn aus der Paritätserhaltung folgt:

$$\rho(-r) = q|\psi_{Kern}(-r)|^2 = q|\psi_{Kern}(r)|^2 = \rho(r)$$

$\vec{r} \cdot grad(\vec{r})|_0$ dagegen ist eine ungerade Funktion. Also ist das Produkt auch ungerade, weswegen dann der Dipolterm als Integral einer ungeraden Funktion über den gesamten Raum verschwindet. Atomkerne haben also kein elektrisches Dipolmoment.

Der Quadrupolterm ist dafür verantwortlich, dass man außerdem bei nicht kugelsymmetrischen Kernen noch weitere Linienaufspaltungen beobachtet.

Die Doppelsumme $\sum_{ij} \partial_i \partial_j \phi|_0$ im Quadrupolterm (18) bildet eine symmetrische (3×3)-Matrix. Durch Diagonalisierung erhält man:

$$\begin{aligned} E_2 &= \frac{1}{2} \sum_i \partial_i^2 \phi|_0 \cdot \int r_i^2 \rho(\vec{r}) dV \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \partial_i^2 \phi|_0 \cdot \int (r_i^2 - \frac{r^2}{3} \cdot \rho(\vec{r})) dV + \frac{1}{6} \int \rho(\vec{r}) r^2 dV \sum_i \partial_i^2 \phi|_0 \end{aligned} \tag{19}$$

Der erste Term von (19) ist dann verantwortlich für eine Linienaufspaltung bei einem nicht kugelsymmetrischen Kern, während der zweite Term für die sogenannte Isomerieverschiebung verantwortlich ist.

Isomerieverschiebung Aus der klassischen Elektrodynamik ist die Poisson-Gleichung:

$$\nabla^2 \phi|_0 + \frac{\rho_e}{\varepsilon_0} \tag{20}$$

bekannt. Damit ergibt sich:

$$\sum_i \partial_i^2 \phi|_0 = \nabla^2 \phi|_0 = -\frac{\rho_e}{\varepsilon_0} = \frac{e|\psi(0)|^2}{\varepsilon_0} \tag{21}$$

denn die Ladungsdichte, die die Elektronen am Kernort erzeugen ist

$$\rho_e = -e|\psi(0)|^2.$$

Damit ergibt sich für den zweiten Term aus (19)

$$\frac{1}{6\varepsilon_0} e|\psi(0)|^2 \cdot \int \rho(\vec{r}) r^2 dV \tag{22}$$

Dieser Term beschreibt die *Monopolwechselwirkung* der Elektronenhülle mit dem Kern. Der Durchmesser des Kerns wird durch den einen effektiven Radius beschrieben. Dieser Radius ändert sich aber bei der Anregung des Kerns, da die Ladungsverteilung im Kern im Grundzustand eine andere ist als im angeregten Zustand. Das führt dann dazu, dass die Energieniveaus in den Zuständen unterschiedlich verschoben werden. Je stärker der Größenunterschied der Kerne, um so größer der Unterschied in der Verschiebung.

$$\begin{aligned} E^g &= \frac{1}{6\varepsilon} e|\psi(0)|^2 \cdot \int \rho^g(\vec{r}) r^2 dV \\ E^a &= \frac{1}{6\varepsilon} e|\psi(0)|^2 \cdot \int \rho^a(\vec{r}) r^2 dV \end{aligned} \tag{23}$$

Da $\int \rho dV = Ze$ die Kernladung ergibt, kann man mit

$$\int \rho(\vec{r}) r^2 dV = Ze < r^2 > \quad (24)$$

den mittleren quadratischen Kernradius einführen.

Beim Übergang vom angeregten Zustand in den Grundzustand gilt also:

$$E^a - E^g \frac{1}{6\varepsilon_0} Ze^2 |\psi(0)|^2 \cdot (< r^2 >_a - < r^2 >_g) \quad (25)$$

Die Elektronendichte am Kernort $|\psi(0)|^2$hängt von der Chemie des Festkörpers ab. Sind Mössbauerquelle und Absorber verschiedene Substanzen, muss man $|\psi_Q(0)|^2$ und $|\psi_A(0)|^2$ unterscheiden. Für eine bewegte Quelle erhält man unter Berücksichtigung des Doppler-Effekts:

$$\hbar\omega_Q = \hbar\omega_0(1 + \frac{v}{c}) + \frac{Ze^2}{6\varepsilon_0} |\psi_Q(0)|^2 (< r^2 >_a - < r^2 >_g) \quad (26)$$

und für den ruhenden Absorber:

$$\hbar\omega_A = \hbar\omega_0 + \frac{Ze^2}{6\varepsilon_0} |\psi_A(0)|^2 (< r^2 >_a - < r^2 >_g). \quad (27)$$

Resonanzabsorbtion erhält man, falls $\omega_A = \omega_Q$. Daraus ergibt sich für die Geschwindigkeit bei der Resonanz auftritt:

$$v_{res} = \frac{Ze^2 c}{6\varepsilon\hbar\omega_0} (|\psi_A(0)|^2 - |\psi_Q(0)|^2)(< r^2 >_a - < r^2 >_g) \quad (28)$$

Quadrupolaufspaltung Wir nehmen jetzt an, dass die z-Achse durch den Kristallaufbau gegen über den beiden anderen Richtungen, die völlig gleichwertig sind, ausgezeichnet ist. Das elektrische Feld zeige also in z-Richtung und sei zylindersymmetrisch. Außerdem führen wir den *Feldgradienten* in z-Richtung ein und bezeichnen ihn mit V_{zz}, also $V_{zz} := \partial_z E_z = \partial_z^2 \phi|_0$. Wenn man von den kugelsymmetrisch verteilten s-Elektronen absieht, die aber eh nicht zum Feldgradienten beitragen, ist die Ladungsdichte am Kernort Null und es gilt $div\vec{E} = 0$. Damit gilt:

$$\partial_x E_x + \partial_y E_y + V_{zz} = 0 \quad (29)$$

bzw. wegen der Symmetrie: $\partial_x E_x = -\frac{V_{zz}}{2}$ und $\partial_y E_y = -\frac{V_{zz}}{2}$, woraus sich ergibt:

$$\sum_i i^2 \cdot \partial_{ii}\phi = [-\frac{V_{zz}}{2}x^2 - \frac{V_{zz}}{2}y^2 + V_{zz}z^2] = \frac{V_{zz}}{2}(2z^2 - y^2 - x^2) = \frac{V_{zz}}{2}(3z^2 - r^2) \quad (30)$$

in (18) eingesetzt ergibt sich so:

$$E_2 = \int \frac{1}{4} V_{zz} \cdot (3z^2 - r^2)\rho(\vec{r}) dV = \frac{1}{4} V_{zz} \cdot eQ_z \quad (31)$$

mit $Q_z = \frac{1}{e}\int(3z^2 - r^2)\rho(\vec{r})dV$.

Q_z nennt man das Quadrupolmoment bzgl. der z-Achse. Es verschwindet für kugelsymmetrische Ladungsverteilungen. Die Energie E_2 ist also verursacht durch einen deformierten Kern in einem inhomogenen Feld.

Allerdings ist der Ausdruck (31) rein klassisch. Quantenmechanisch ist das Quadrupolmoment der Erwartungswert des Operators $r^2(3cos^2\theta - 1)$ für die Kernwellenfunktion Ψ, wobei θ der Winkel zwischen der Symmetrieachse des deformierten Kerns und der des elektrischen Feldes ist. Da dieser Winkel nicht beliebige Werte annehmen kann, ergeben sich für E_2 diskrete Werte, die von den Drehimpulsquantenzahlen abhängen. Statt der klassischen Energie E_2 ergibt sich für die quantenmechanische Quadrupolenergie:

$$E_Q = \frac{1}{4}V_{zz}eQ \cdot \frac{3m_I^2 - I(I+1)}{3I^2 - I(I+1)} \tag{32}$$

Kernniveaus mit $I = 0$ oder $I = \frac{1}{2}$ kann man kein Quadrupolmoment zu ordnen, daher spalten nur Zustände mit $I > \frac{1}{2}$ auf. Beim ^{57}Fe mit $I_g = \frac{1}{2}$ und $I_a = \frac{3}{2}$ spaltet also nur der angeregte Zustand auf und man erhält ein sogenanntes *Quadrupoldublett.* Für die Quadrupolenergien erhält man nach Gleichung (32) $E_Q = \pm\frac{1}{2}eQV_{zz}$ und daraus für die Energiedifferenz zwischen den beiden Linien $\Delta E_Q = \frac{eQ}{2}V_{zz}$. Da man bei der Mössbauerspektroskopie, die Energie mit Hilfe des *Dopplereffekts* misst ergibt sich:

$$\Delta E_Q = \frac{1}{2}eQV_{zz} = \frac{\hbar}{c}\omega_0 \cdot \Delta v. \tag{33}$$

1.4.4 Relativistische Temperaturverschiebung

Befinden sich Quelle und Absorber nicht auf gleicher Temperatur, so erhält man eine weitere Verschiebung des Spektrums aufgrund relativistischer Effekte. Um diese Verschiebung qualitativ zu verstehen, stellt man sich vor, dass die strahlenden Atomkerne kleine Uhren sind, die sich mit Wärmegeschwindigkeit durch das Gitter bewegen. Einem ruhenden Beobachter scheint es nun aufgrund der *Zeitdilatation* so, als ob eine bewegte Uhr nachgeht, d.h. er beobachtet eine Verringerung der Periodenzahl pro Sekunde, oder mit anderen Worten eine kleiner Frequenz. Ihm erscheint also die von den Atome ausgestrahlte Energie geringer, als sie theoretisch sein müsste. Das man diesen zugegebener Maßen winzigen Effekt überhaupt messen kann, liegt an der großen Genauigkeit der Mössbauerspektroskopie.

2 Auswertung

2.1 Gammaspektrum

Durchführung. Zunächst wurde ungefähr zwanzig Minuten lang das Spektrum der Kobaltquelle ohne Absorber aufgenommen. Danach wurde ein Aluminiumabsorber

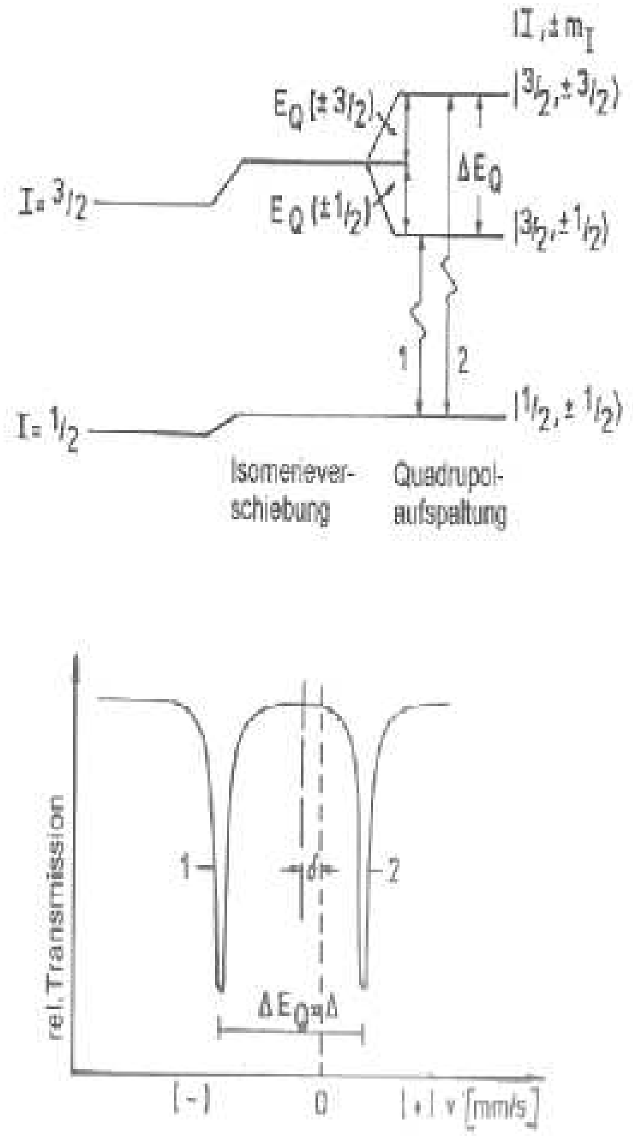

Abbildung 4: Quadrupolaufspaltung und Isomerieverschiebung bei ^{57}Fe

zwischen Quelle und Detektor gebracht und die Messung wiederholt. Das Ergebnis findet sich in Abbildung

Zuordnung der Linien. Die Linien 1, 3 und 4 unseres Spektrums ändern sich nicht durch Einfügen des Absorbers. Daher können sie nicht durch die Quelle verursacht werden, sondern stammen aus dem Detektor. Die einzige vom Aluminiumabsorber elimierte Linie ist die 2.Linie bei 503 Counts. Ihre Asymmetrie entpuppt sich als Überlagerung mit einer kleineren Linie bei 598 Counts (siehe Tabelle 1).

Die Mößbauerlinie muss die eliminierte Linie sein. Damit kann man nun die Eichung des Spektrums durchführen. Aus den Daten 0 Kanäle $\hat{=}$ 0 keV und 503 Kanäle $\hat{=}$ 14,4 keV ergibt sich dann der Proportionalitätsfaktor 1 Kanal $\hat{=}$ 0,0286 keV.

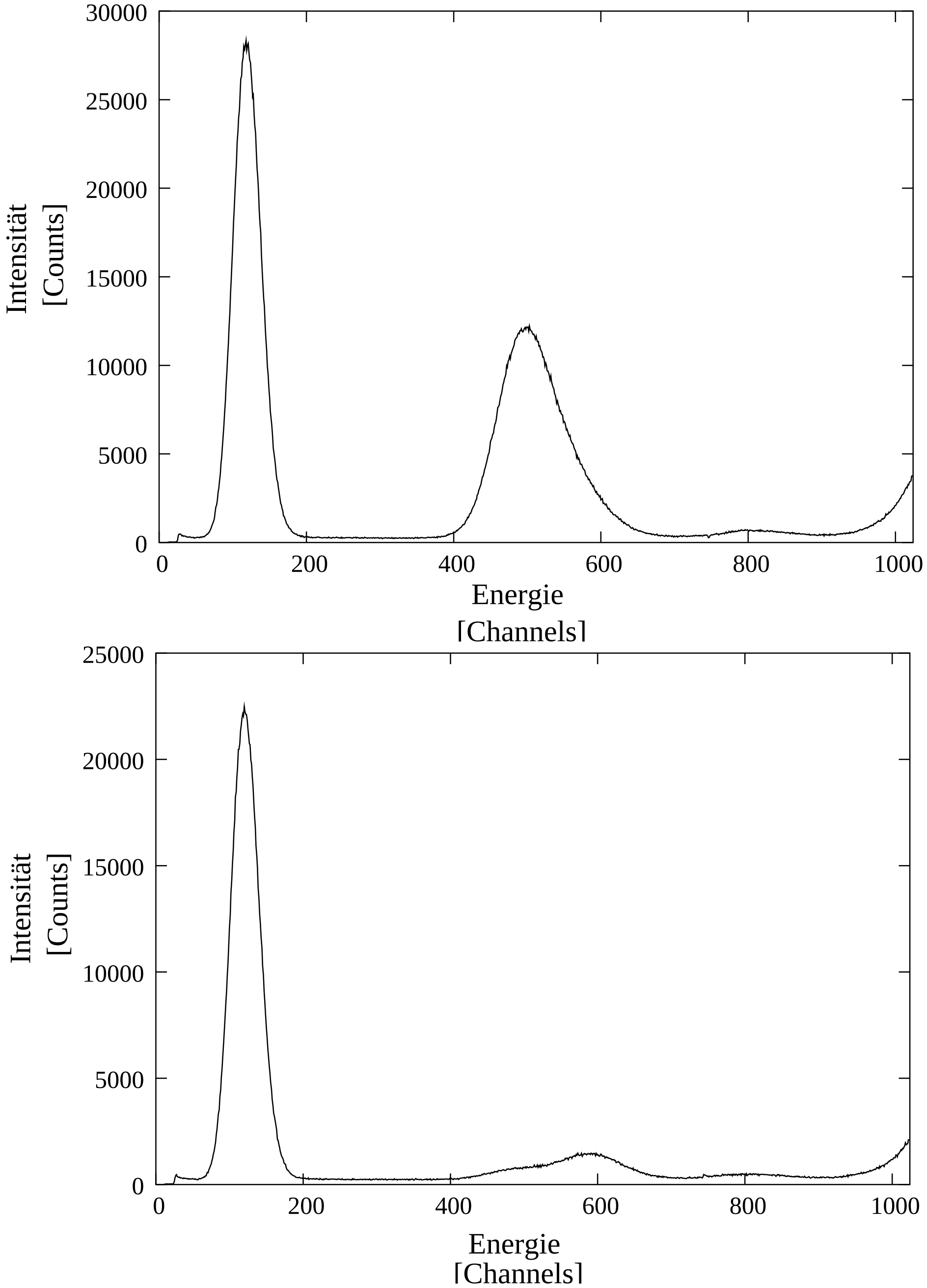

Abbildung 5: Spektrum der ^{57}Co-Quelle mit und ohne Aluminiumfolie

	Energie [Kanäle]	Ereignisse [Counts]	HW-Breite [Kanäle]	Energie [keV]	HW-Breite [keV]
1. Linie	120	30613	21 ± 2	3,4	$0{,}6 \pm 0{,}01$
2. Linie	503	12213	50	14,4	$1{,}4\pm 0{,}01$
3. Linie	598	1957	50 ± 2	17,1	$1{,}4 \pm 0{,}01$
4. Linie	796	724	74 ± 2	22,8	$2{,}1 \pm 0{,}01$

Tabelle 1: Linien im ^{57}Co-Spektrum

2.2 Eichung der Geschwindigkeit

Die Substanz Natriumnitrosylprussiat mit der bekannten Quadrupolaufspaltung von 1,7 mm/s wird als Absorber benutzt. Es ergibt sich das Spektrum in Abbildung 6. Klar erkennbar sind die Absorptionslinien bei 120/121 Kanälen und 145 Kanälen, was eine Aufspaltung von 24,5 Kanälen ergibt. Die Meßunsicherheit ist dabei eins, der Fehler der Eichung also 4%. Einem Channel entsprechen also 0.069 ± 0.002mm/s bzw. $4,83 \cdot 10^{-5} \pm 0.04$eV.

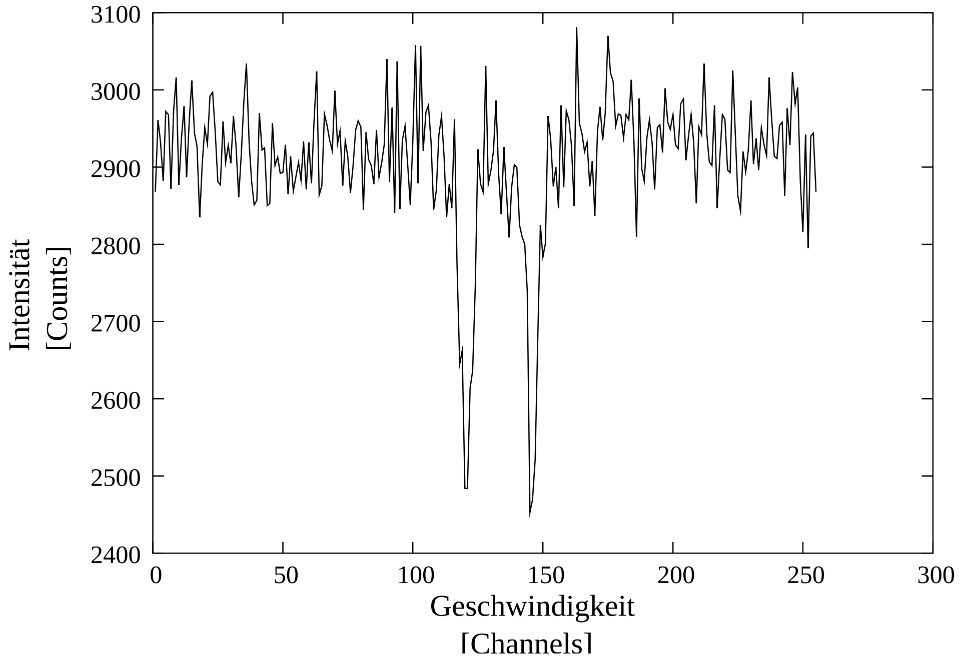

Abbildung 6: Spektrum von NNP zur Eichung

Feldgradient. Nach (33) berechnet sich der Feldgradient am Kernort so:

$$V_{zz} = \frac{2\omega_0\hbar}{eQ}\Delta v \tag{34}$$

Der Fehler ist nach Gauß:

$$\Delta V_{zz} = V_{zz}\sqrt{\left(\frac{\Delta(\Delta v)}{\Delta v}\right)^2 + \left(\frac{\Delta Q}{Q}\right)^2} \tag{35}$$

Einsetzen ergibt: $V_{zz} = 1,6 \pm 0,5 \cdot 10^{-7}$eV

Quadrupolaufspaltung. Die Quadrupolaufspaltung berechnet sich nach (33). Es ist $\Delta v = 1,7$mm/s nach Literatur, wir nehmen einen Fehler von 0,1 mm/s $\hat{=}$6% an. Einsetzen ergibt $\Delta E_Q = (8,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-8}$eV.

5.

2.3 Aufspaltung von metallischem Eisen

Linien. In Abbildung 7 sind klar sechs Absorptionslinien zu erkennen. Sie sind in Tabelle 2 aufgelistet.

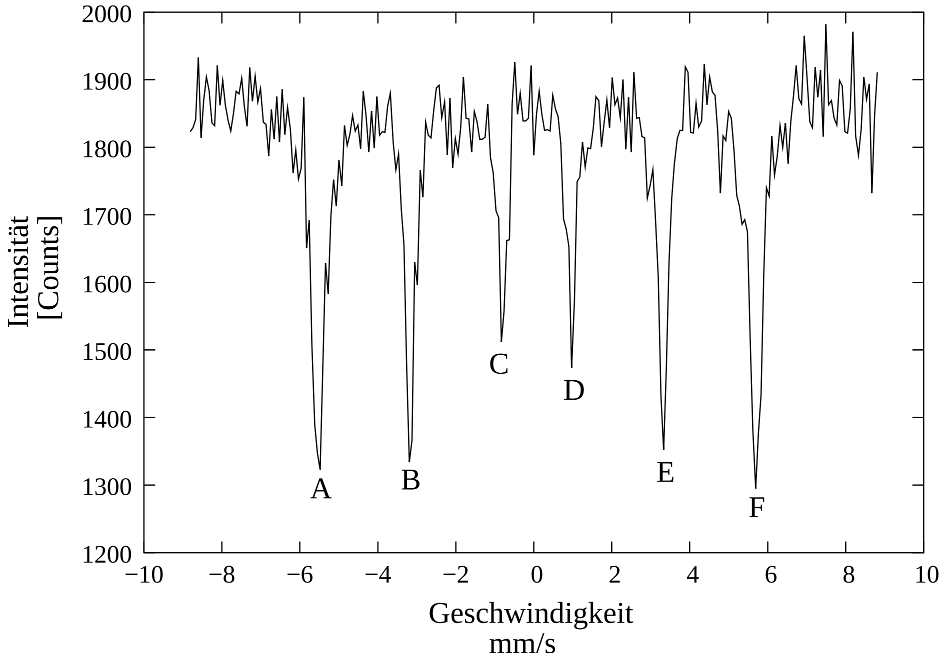

Abbildung 7: Absorptionsspektrum von metallischem Eisen

Linie	Position [Channels]	Intensität [Counts]	Breite [Channels]	Breite [mm/s]	Tiefe [%]
A	49	1323	$4,5 \pm 1$	$0,31 \pm 0,07$	71
B	82	1334	5 ± 1	$0.35 \pm 0,07$	72
C	116	1512	4 ± 1	$0.28 \pm 0,07$	81
D	142	1473	3 ± 1	$0.21 \pm 0,07$	79
E	176	1352	4 ± 1	$0.28 \pm 0,07$	73
F	210	1295	$4,5 \pm 1$	$0.31 \pm 0,07$	69

Tabelle 2: Absorptionslinien von metallischem Eisen

2.4 Hyperfeinstrukturaufspaltung von Eisen

In diesem Versuchsteil wurde ein ^{57}Fe-Absorber verwendet. In Abbildung 7 sind klar sechs Absorbtionslinien erkennbar. Sie sind in Tabelle 2 genauer beschrieben.

Die Linien müssen nun den einzelnen Übergängen zugeordnet werden. Zu diesem Zweck seien die Übergänge in Abbildung 3 von links nach rechts durchnummeriert, beginnend mit 1. Dann gehören die Übergänge 1-3 zu den Linien D-F in Abbildung 7, die Übergänge 4-6 zu den Linien A-C.

Dies begründet sich dadurch, daß so H für jeden Übergang konstant ist. In unserem Fall gilt $I_{g_1} = I_{g_2} = \frac{1}{2}$ und $I_{a_1} = I_{a_2} = \frac{3}{2}$. Formel (10) für verschiedene v läßt sich umformen nach μ_a und H:

$$\mu_a = 3\mu_g \cdot \frac{v_1 m_{g_2} - v_2 m_{g_1}}{v_1 m_{a_2} - v_2 m_{a_1}} \tag{36}$$

$$B = \frac{3\hbar\omega_0}{2c} \cdot \frac{v}{\mu_a m_a - 3\mu_g m_g} \tag{37}$$

Untar der oben angegebenen Zuordnung lassen sich nun μ_a und B für alle möglichen Kombinationen außer 1-6, 2-5 und 3-4 errechnen. Dann erhält man mit den Formeln (36) und (37) Tabelle 3.

Linienpaar	μ_a [μ_k]	B [Tesla]
1-2	-0,152	-34,7
1-3	-0,158	-33,7
1-4	-0,146	-35,6
1-5	-0,129	-38,2
2-3	-0,159	-34,1
2-4	-0,145	-35,3
2-6	-0,174	-32,9
3-5	-0,163	-35.3
3-6	-0,161	-34,7
4-5	-0,149	-36,5
4-6	-0,149	-36,5
5-6	-0,149	-36,5

Tabelle 3: Zuordnung Übergänge-Linien

Aus der Tabelle erhält man als Mittelwerte mit Standardabweichung:

$$\mu_a = (0,153 \pm 0,008)\mu_K$$

$$B = (35,3 \pm 1,1)T$$

2.5 Aufspaltung von metallischem Eisen II

Nach Absprache mit dem Assistenten wurde kein weiteres Eichspektrum mit einer anderen Geschwindigkeitsaufspreizung aufgenommen, sondern es wird das zuvor aufgenommene Eisenspektrum ausgewertet. In diesem Spektrum sind vier Linien deutlich zu erkennen.

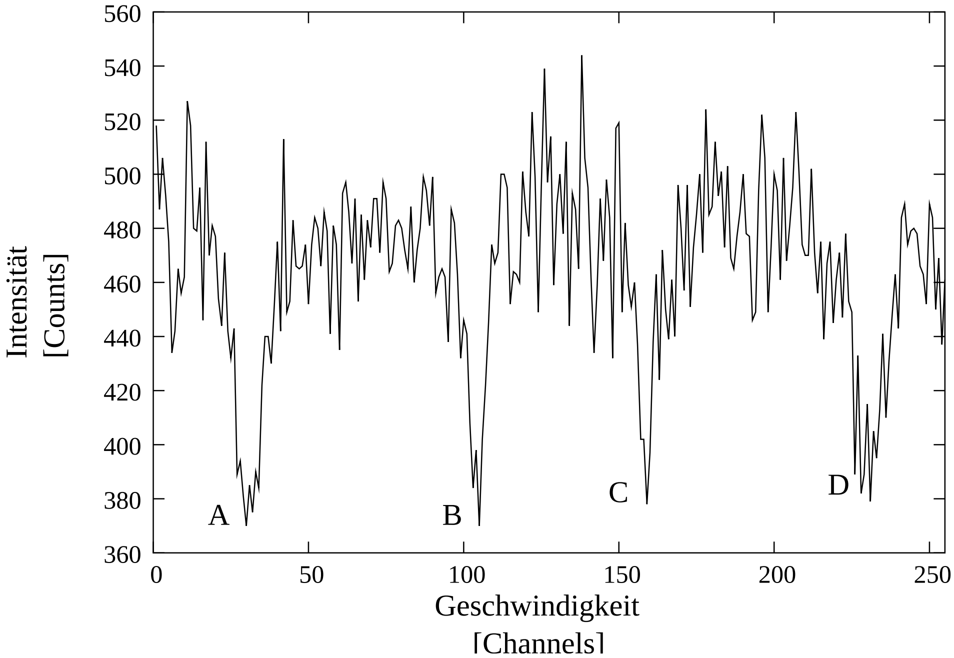

Abbildung 8: Absorptionsspektrum von metallischem Eisen II

Linie	Position [Channels]	Intensität [Counts]	Breite [Channels]	Tiefe [%]
A	30	370	$8,5 \pm 1$	77
B	105	370	$5,5 \pm 1$	77
C	159	378	5 ± 1	78
D	231	379	$7,5 \pm 3$	79

Tabelle 4: Absorptionsspektrum von metallischem Eisen II

2.6 Eisenphosphat

Linienbreite. Die Position der Linienpeaks und deren Breite ist Tabelle 5 zu entnehmen.

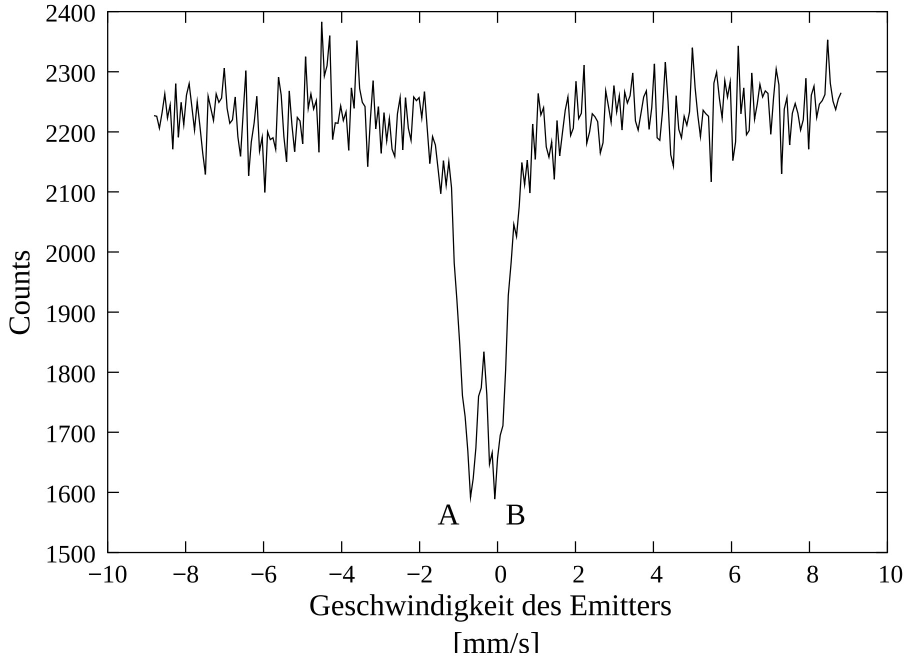

Abbildung 9: Absorptionsspektrum von Eisenphosphat

Linie	Position [mm/s]	Intensität [Counts]	Breite [mm/s]	Tiefe [%]
A	-0,69	1592	$0,62 \pm 0,14$	72
B	-0,07	1589	$0,76 \pm 0,14$	72

Tabelle 5: Absorptionsspektrum von Eisenphosphat

Feldgradient. Nach Formeln (34) und (35) erhält man den Feldgradienten $V_{zz} = (6 \pm 2) \cdot 10^{-8}$ eV.

Quadrupolaufspaltung. Nach (33) ist die Quadrupolaufspaltung $\Delta E_Q = (3,0 \pm 0,5) \cdot 10^-8$ eV. Der Fehler ergibt sich aus dem Fehler für die Position der Peaks: $\pm 0,069$ mm/s.

Isomerieverschiebung. Die Isomerieverschiebung erhält man als Position der Mitte der beiden Peaks, also $\delta = -0,38 \pm 0,09$ mm/s.

3 Zusammenfassung und Diskussion

Zunächst eine Korrektur: Bei der Berechnung der Feldgradienten ist uns leider ein kleiner Fehler unterlaufen. Bei der Umformung von (33) auf (34) hat sich der Faktor c unerlaubterweise aus dem Nenner entfernt. Die richtige Formel für V_{zz} lautet offenbar

$$V_{zz} = \frac{2\omega_0\hbar}{eQc}\Delta v. \tag{38}$$

Die korrekten Werte für V_{zz} wurden in Tabelle 6 eingetragen.

Zusammenfassung. Hier werden die gefundenen Ergebnisse zusammengetragen. Nebenstehend befindet sich jeweils der zugehörige Literaturwert.

Stoff	Größe	Wert	Literaturwert
NNP	Feldgradient V_{zz}	$(16 \pm 5) \cdot 10^{18} \frac{V}{cm^2}$ ($\pm 31\%$)	$16,32 \cdot 10^{18} \frac{V}{cm^2}$
	Quadrupolaufspaltung ΔE_Q	$(8,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-8}$ ($\pm 5\%$)	$8,2 \cdot 10^{-8}$ eV
Eisen	Kernmoment μ_a	$(0,153 \pm 0,008)\mu_K$ ($\pm 5\%$)	$0,15\mu_K$
	Kern-Magnetfeld B	$(35,3 \pm 1,1)$ T ($\pm 3\%$)	$33,3$ T
Eisenphosphat	Feldgradient V_{zz}	$(5,9 \pm 1,9) \cdot 10^{18} \frac{V}{cm^2}$ ($\pm 32\%$)	$7,968 \cdot 10^{18} \frac{V}{cm^2}$
	Quadrupolaufspaltung ΔE_Q	$(3,0 \pm 0,5) \cdot 10^{-8}$ eV ($\pm 17\%$)	$3,984 \cdot 10^{-8}$ eV
	Isomerieverschiebung δ	$(-0,38 \pm 0,09) \frac{mm}{s}$ ($\pm 24\%$)	$-0,42 \frac{mm}{s}$

Tabelle 6: Zusammenfassung der Versuchsergebnisse

Diskussion. Anhand von Tabelle 6 kann man direkt die erhaltenen Werte mit den Literaturwerten vergleichen. Dabei fällt auf, dass alle Werte bis auf das Kern-Magnetfeld von Eisen und den elektrischen Feldgradienten und die Quadrupolaufspaltung von Eisenphosphat innerhalb des Gauß'schen Fehlerbereiches mit dem jeweiligen Literaturwert übereinstimmen. Bei den drei genannten Größen liegt jedoch der Literaturwert stets innerhalb des doppelten Felhlerbalkens. Da außerdem alle relativen Fehler kleiner sind als 33%, läßt sich abschließend sagen, dass der Versuch aussagekräftige Ergebnisse liefert.

Literatur

[1] Ralf Stützle Christian Schirm. www.uni-konstanz.de/quantum-optics/atomoptics/ homepages/ralf/moessbauer-effekt.pdf.

[2] Professor Dr. Hellmut Eckert. www.uni-muenster.de/chemie/pc/eckert/mg/moess.pdf.

[3] R. Nave. Cobalt nuclear data. http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/pertab/co.html.

[4] P.Gütlich. *Physikalische Methoden in der Chemie: Mössbauer Spektroskopie I und II.* Chemie in unserer Zeit 4 bzw. 5, 1970 bzw. 1971.

[5] T.Mayer-Kuckuk. *Atomphysik.* Teubner Studienbücher, 1994.

[6] Herman Haken und Hans Christoph Wolf. *Atom- und Quantenphysik.* Springer Verlag, 1996.

[7] Horst Wegener. *Mößbauereffekt.* BI Hochschultaschenbücher, Mannheim, 1966.