

Versuchsprotokoll

Mößbauerspektroskopie

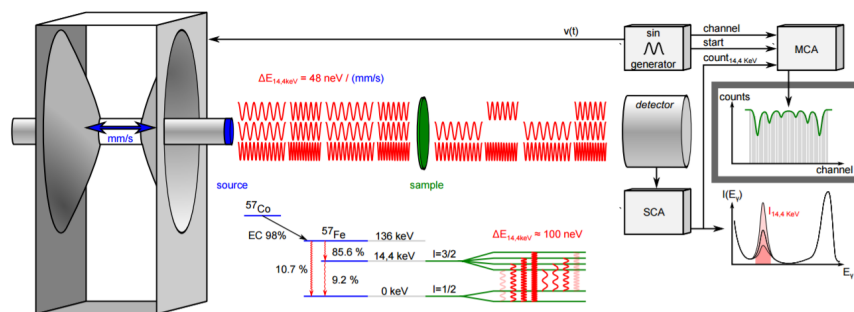
Maximilian Obst, Thomas Adlmaier

Protokoll: 1. Dezember 2016

Messung: 18.11.2016

Ort: Technische Universität Dresden, Institut für Festkörperphysik

Betreuer: Philipp Materne

Abbildung 1: Aufbau und Funktionsprinzip der Mößbauerspektroskopie an ^{57}Fe [1]

Inhaltsverzeichnis

1	Physikalische Grundlagen	3
1.1	Hyperfeinwechselwirkungen	3
1.1.1	Magnetischer Kernspineffekt	3
1.1.2	Elektrische Kernspineffekte	3
1.1.3	Isotopeneffekte	4
1.2	Mößbauereffekt	4
1.3	Dopplereffekt	5
1.4	Radioaktiver Zerfall	5
2	Durchführung	6
2.1	Kalibrierung	6
2.2	Eisenfolie	7
2.3	Ferrocen	7
2.4	Auswirkungen eines Magnetfeldes	7
3	Analyse	7
3.1	Kalibrierung	7
3.2	Mößbauerspektrum von ^{57}Fe	8
3.3	Anpassungen des Modells für Eisen	8
3.3.1	Grundmodell	8
3.3.2	Anpassung auf ein rein magnetisches Feld	9
3.3.3	Einfluss der Probendicke	9
3.3.4	Ausrichtung des Magnetfelds der Atome	10
3.3.5	Variation des Magnetfeldes	10
3.4	Beschreibung und Erklärung der Beobachtungen für Eisen	10
3.5	Anpassungen des Modells für Ferrocen	13
4	Diskussion	14
4.1	Fazit	14
	Literatur	14

1 Physikalische Grundlagen

Die Mößbauerspektroskopie ist ein physikalisches Analyseverfahren, bei dem zerstörungsfrei ein Material auf seine Bestandteile sowie ihre elektrische Interaktion untersucht wird. Das Hauptanwendungsgebiet ist dabei die Unterscheidung zwischen zwei- und dreiwertigem Eisen. [2] Für die Mößbauerspektroskopie werden sowohl der Doppler- als auch der Mößbauer-Effekt genutzt.

1.1 Hyperfeinwechselwirkungen

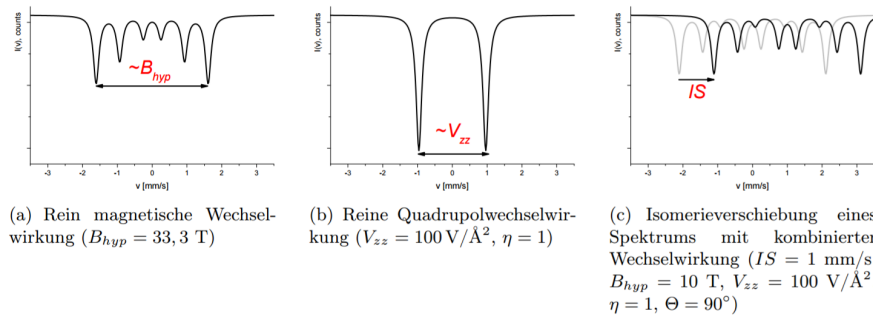


Abbildung 2: Hyperfeinwechselwirkungen von ^{57}Fe [1]

Die Hyperfeinstruktur ist eine Aufspaltung der Energieniveaus in den Spektrallinien der Atomspektren und damit einer der Effekte, die der Entartung entgegenwirken. Sie ist etwa 2000 mal kleiner als die Feinstruktur und wird durch die Interaktion der Elektronen mit dem Kernspin, die in elektrische und magnetische unterschieden werden können, und den verschiedenen Isotopen eines Atoms bewirkt. [3]

1.1.1 Magnetischer Kernspineffekt

Der magnetische Kernspineffekt führt zur sogenannten Zeeman-Aufspaltung: Dabei wird das Spektrum in $2I + 1$ Zustände geteilt. Für ^{57}Fe kann das Zeeman-Spektrum in Bild 2(a) gesehen werden.

$$H_z = -g_I \mu_n I_z B_z \quad (1)$$

1.1.2 Elektrische Kernspineffekte

Die Effekte des elektrischen Kernpotentials lassen sich über folgende Formel verstehen:

$$H_{\text{elektr.}} = \int \rho(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) d^3 \quad (2)$$

Diese Formel kann mit einer Taylorreihe entwickelt werden:

$$H_{\text{elektr.}} \approx Ze\Phi(0) - \frac{Ze \langle r^2 \rangle \rho_e(0)}{6\epsilon_0} + \frac{e}{6} \sum_i^3 V_{ii} Q_{ii} \quad (3)$$

Hierbei beschreibt der erste Teil die normalen Kernzustände, der zweite eine Isomerieverschiebung und der dritte das Quadropolmoment. Die Isomerieverschiebung beschreibt dabei die Energie des Kerns in der Elektronenhülle. Da sie nur von Größen aufgestellt wird (Ladungsdichte der Hülle ρ_e und Kernradius $\langle r^2 \rangle$, die für das ganze Atom gelten, verschiebt sie alle Übergangsenergien in gleichem Maß, wie in Bild 2(c) gesehen werden kann. Da eine Isomerieverschiebung auch in der Strahlungsquelle auftreten kann, muss sie stets auf die Quelle bezogen werden. Das Quadropolmoment schließlich lässt im Sonderfall, dass $V_{xx} = V_{yy}$ darauf schließen, wie groß der Kernspin ist: Bei einem Kernspin von $\frac{1}{2}$ entsteht keine Aufspaltung, bei $\frac{3}{2}$ wird das Spektrum schon in zwei Zustände geteilt - dieser Fall tritt bei ^{57}Fe auf und das entstehende Bild kann in Bild 2(b) gesehen werden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass im genannten Sonderfall das Quadropolmoment nur vom Quadrat der z-Richtung der Hauptquantenzahl I_z abhängig ist.

1.1.3 Isotopeneffekte

- **Kernmassen-Effekt** Bei Absorption und Emission von Photonen durch Atome findet eine Auslenkung der Atomkerne von ihrer Ruhelage statt. Dies führt zu einer Schwingung, die die effektive Masse der Elektronen absenkt. Das wiederum führt zu einer Ausspaltung der Energieniveaus, die von der Masse des Atomkerns und somit dem Isotop abhängt. Dieser Effekt wird bei steigender Kernmasse geringer.
- **Kernvolumen-Effekt** Elektronen der s-Schale haben eine große Wahrscheinlichkeit, sich im Atomkern zu befinden. Dies führt zu einer Abweichung des Potentials, was eine Anhebung der Energieniveaus zur Folge hat. Dieser Effekt wird größer, ja größer der Kern wird, die Abweichung bei verschiedenen Isotopen ist aber bei kleinen Kernen größer, da hier die Volumendifferenzen stärker ins Gewicht fallen.

1.2 Mößbauereffekt

Wie unter Isotopeneffekte beschrieben, beginnt ein Atomkern zu schwingen, sobald er ein Photon emittiert oder absorbiert. Diese Schwingung ist von der Energie des Photons und

der Masse des Atomkerns abhängig. Der Mößbauereffekt jedoch beseitigt diese Effekte nahezu vollständig: Bestimmte Elemente sind in der Lage, den entstehenden Stoß über das gesamte Gitter zu verteilen. Damit ist der Anteil der Masse des Atomkerns um Größenordnungen höher. Der Stoß wird damit nahezu rückstoßfrei.

1.3 Dopplereffekt

Der Doppler-Effekt beschreibt die Dehnung oder Stauchung von Wellen, die durch eine Bewegung des Wellen-Aussenders hervorgerufen werden. Beschrieben wird der Effekt häufig über die entstehende Frequenzänderung. Ohne Medium, also für elektromagnetische Wellen, kann diese Änderung mit folgenden Formeln beschrieben werden:

$$f_{\text{Beobachter;allgemein}} = f_{\text{Quelle}} \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 - \frac{v}{c} \cos(\alpha)} \quad (4)$$

$$f_{B;\text{longitudinal}} = f_{\text{Quelle}} \sqrt{\frac{c+v}{c-v}} \quad (5)$$

$$f_{B;\text{transversal}} = f_{\text{Quelle}} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (6)$$

Dabei beschreibt α den Winkel zwischen Bewegung und der Strecke Beobachter-Quelle.

1.4 Radioaktiver Zerfall

Nicht alle Atomkerne sind stabil. Einige können zerfallen. Dieser Zerfall ist je nach Atomkern unterschiedlich, es werden vier Arten unterschieden:

Alpha-Strahlung: Hier werden beim Zerfall des Atomkerns He^{2+} -Kerne freigesetzt. Diese sind sehr schwer und können daher schwere Schäden in ihrer Umgebung anrichten. Allerdings fliegen diese Teilchen nicht sehr weit und können gut abgeschirmt werden.



Beta-Strahlung: Bei dieser Strahlungsart wandelt sich ein Neutron in ein Proton oder umgekehrt. Die entstehenden Elektronen oder Positronen fliegen weiter als Alpha-Teilchen, haben aber auch eine verringerte schädigende Wirkung.



Gamma-Strahlung: Diese Strahlung führt nicht zu einer Veränderung des Atomkerns sondern bringt diesen nur von einem angeregten Zustand zurück in den Grundzustand.

Dabei werden hochenergetische Photonen ausgesendet, die nur schwach schädigend wirken, aber eine hohe Reichweite haben und kaum abzuschirmen sind.



2 Durchführung

Im Versuch wird eine ummantelte ${}^{57}\text{Co}$ -Quelle verwendet, die Gammastrahlung emittiert. Die Energie der emittierten Photonen haben Peaks bei 136 keV, 122 keV und 14,4 keV. Für die Messung sind Photonen der Energie 14,4 keV interessant. Für die Detektion wird ein Silicium-Detektor verwendet. Ziel des Versuchs ist eine Einführung in die Verwendungsmethoden von lokalen Sonden, im speziellen der Mößbauer-Spektroskopie.

2.1 Kalibrierung

Um die Messung möglichst genau zu machen, soll das Programm nur Photonen aufzeichnen, die im gewollten Energiespektrum liegen. Dafür muss am Anfang das Gamma-Fenster auf den 14,4 keV-Peak gesetzt werden. Um diesen zu bestimmen, wird je eine 5-minütige Messung des Pulshöhenspektrums von der Quelle ohne Probe und mit einer $4 \times 3 \mu\text{m}$ -Eisenfolie aufgenommen. Die Spektren werden übereinandergelegt und aus dem entstehenden Bild der 14,4 keV-Peak bestimmt. Anschließend wird das Gammafenster auf diesen Peak gesetzt.

Danach wird das Mößbauer-Spektrum der $4 \times 3 \mu\text{m}$ -Eisenfolie etwa 75 Minuten lang aufgenommen. Dafür wird eine Spannung U_{Antrieb} von etwa 195 mV an den Antrieb der ${}^{57}\text{Co}$ -Quelle angelegt. Mithilfe des aufgenommenen Spektrums wird der α -Faktor zwischen U_{Antrieb} und Geschwindigkeit v_{Quelle} bestimmt. Dafür wird das Programm Moessfit verwendet, welches mit einem ersten abgeschätzten α -Faktor einen Fit an das Mößbauer-Spektrum anlegt und einen dafür passenden Wert des Magnetfeldes zwischen den Atomen $B_{\text{fit};\text{Atome}}$ angibt. Mit dem Wissen, dass das Magnetfeld zwischen den Atomen $B_{\text{th};\text{Atome}}$ 33,3 T entsprechen soll, wird über die Formel 12 der korrekte α -Faktor bestimmt. Anschließend werden die in Moessfit zur Verfügung stehenden Variablen angepasst, bis das verwendete Modell bestmöglich dem betrachteten Verhalten entspricht. Die Anpassungen werden physikalisch erklärt.

$$v_{\text{Quelle}} = \alpha_{\text{exp}} U_{\text{Antrieb}} \quad (11)$$

$$\alpha_{\text{exp}} = \alpha_{\text{Schätzung}} \frac{B_{\text{th};\text{Atome}}}{B_{\text{fit};\text{Atome}}} \quad (12)$$

2.2 Eisenfolie

Nun wird das Mößbauer-Spektrum einer 25 μm -Eisenfolie wieder über etwa 75 Minuten aufgenommen. Im aufgenommenen Bild werden wieder die Variablen angepasst, bis das Modell bestmöglich übereinstimmt. Anschließend wird das betrachtete Spektrum mit dem der 4x3 μm -Eisenfolie verglichen und die Abweichungen physikalisch erklärt.

2.3 Ferrocen

Der Versuch wird ein weiteres Mal für Ferrocen durchgeführt. Dabei wird eine verringerte Antriebsspannung verwendet, die eine Geschwindigkeit der Quelle von $2,5 \text{ mm s}^{-1}$ bewirkt. Wieder werden im aufgenommenen Bild die Variablen angepasst und die Anpassungen physikalisch erklärt.

2.4 Auswirkungen eines Magnetfeldes

Im letzten Versuchsteil werden an die 25 μm -Eisenfolie zwei unterschiedliche Magnetfelder angelegt, wieder über etwa 75 Minuten das Mößbauer-Spektrum aufgenommen und in den erhaltenen Bildern die Variablen angepasst, bis das Modell die Werte am Besten wiedergibt. Die Bilder und Variablen werden miteinander und mit den Bildern und Variablen der anderen Eisenfolien-Messungen verglichen und die Ergebnisse physikalisch interpretiert.

3 Analyse

3.1 Kalibrierung

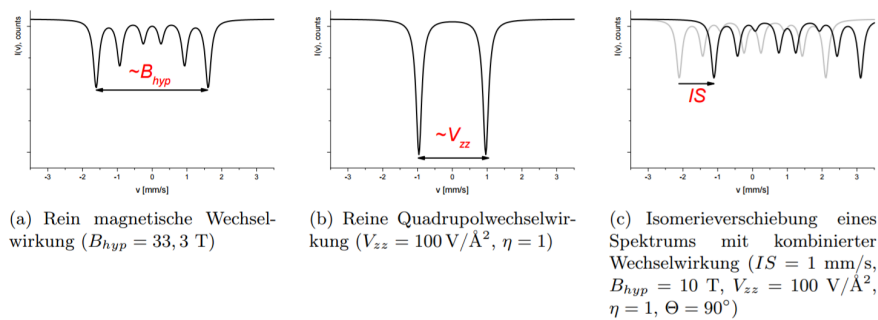


Abbildung 3: Pulshöhenspektren der verwendeten Quelle ohne und mit 4x3 μm -Eisenfolie

Zunächst wurde zur Festlegung des Gamma-Fensters das Pulshöhenspektrum der Quelle

mit und ohne $4 \times 3 \mu\text{m}$ -Eisenfolie aufgenommen. Das Ergebnis kann in Bild 3 gesehen werden. Für eine bessere Sichtbarkeit der Ergebnisse wurde eine logarithmische Skala bei der Ordinate gewählt. Es können 8 Peaks in drei Gruppen beobachtet werden: Die erste Gruppe umfasst Peaks bei den Kanälen 56, 228 und 361, die zweite bei 1171 und 1349 und die dritte bei 2508, 2803 und 3024. Das Spektrum einer ^{57}Co -Quelle umfasst im Normalfall 4 Peaks, wie in Bild 4 gesehen werden kann. Von diesen können zwei zur ersten Gruppe gerechnet werden: Der 7 keV-Peak und der 14,4 keV-Peak, die den Peaks in den Kanälen 56 und 228 entsprechen. Diese Zuordnung ist möglich, da diese Peaks eine hohe Verringerung bei Einbringen des Eisens erfahren: Den Photonen niedriger Energie gelingt es seltener, das Eisen zu durchdringen. Die Photonen der Energie 14,4 keV werden vom Eisen absorbiert und in alle Raumrichtungen wieder abgestrahlt, was eine Verringerung im betrachteten Raumwinkel bedeutet. Die übrigen zwei Peaks können zur dritten Gruppe gezählt werden: Der größte Peak bei Kanal 2508 entspricht dem Peak bei 122 keV, der den größten Abstrahlungspeak einer ^{57}Co -Quelle entspricht. Der Peak danach bei Kanal 2803 kann dem darauf folgendem Peak bei 136 keV zugeordnet werden. Damit ist der gesuchte Peak bei 14,4 keV identifiziert. Die übrigen 4 Peaks bei den Kanälen 361, 1171, 1349 und 3024 sowie die Stufen bei den Kanälen 700 und 1745 sind schwieriger zu erklären.

Mit diesem Ergebnis wurde das Gamma-Fenster auf die Kanäle ??? bis ??? gesetzt.

Für die Antriebsspannung U_{Antrieb} wurde der Wert (190.5 ± 0.2) mV eingestellt. Zu Beginn wurde ein $\alpha_{\text{Schätzung}}$ -Wert von 0.02 angenommen. Diese Annahme führt zu einem $B_{\text{fit;Atome}}$ von 19,07 T. Damit ergibt sich über die Formel 12 folgender α -Faktor:

$$\alpha_{\text{exp}} = 0.03493034309$$

3.2 Mößbauerspektrum von ^{57}Fe

3.3 Anpassungen des Modells für Eisen

3.3.1 Grundmodell

Für die Auswertung wird das Programm Moessfit verwendet. Eine Ansicht der standardmäßig verwendeten Fitparameter findet sich in Bild ???. Die Parameter beschreiben folgende Dinge:

- B : Betrag des lokalen Magnetfelds
- V_{zz} : z-Komponente des lokalen elektrischen Felds
- η : $(V_{xx}-V_{yy})/V_{zz}$, entspricht der Asymmetrie des E-Feldes
- θ : Winkel zwischen B-Feld und z-Achse, siehe Bild ??

- ϕ : Winkel zwischen B-Feld und x-Achse, siehe Bild ??
- CS : Isomerieverschiebung in Bezug zur Isomerieverschiebung der Quelle (hier als 0 gesetzt)
- ω : Breite der Linien/Peaks
- I_0 : Basis-Linie der Intensität des Fits
- A_0 : Fläche unter dem Fit-Graphen
- β : Texturwinkel zwischen einfallenden Photonen und z-Achse, siehe Bild ??
- γ : Texturwinkel zwischen einfallenden Photonen und B-Feld, siehe Bild ??

3.3.2 Anpassung auf ein rein magnetisches Feld

Um die Bilder 5 auszuwerten, muss das verwendete Modell und damit die Fitparameter angepasst werden. Dafür ist zunächst die Beobachtung hilfreich, dass wir bei allen Diagrammen 6 Peaks sehen. Dabei sind die Peaks in der Größe geordnet: Die größten liegen außen, die kleinsten innen. Diese Peaks entsprechen also sehr gut denen in Bild 2(a). Es ist also davon auszugehen, dass für die Auswertung die Einflüsse des elektrischen Feldes weitestgehend ignoriert werden können - damit werden die Parameter V_{zz} und η nicht mehr benötigt. Die in kleinen Gruppen ausgerichteten Eisenatome erzeugen aber durchaus ein Magnetfeld und die Interaktion mit diesem erzeugt die 6 Peaks. Der Literaturwert dieses natürlichen lokalen Magnetfeldes ist 33,3 T. Mit der Definition, dass das betrachtete B-Feld entlang der z-Achse verläuft, können auch θ und ϕ auf null gesetzt und in Folge ignoriert werden. Mit diesen Definitionen spielt γ keine Rolle mehr und kann ignoriert werden. Benötigt werden also weiterhin: B , CS , ω , I_0 , A_0 und β .

3.3.3 Einfluss der Probendicke

Nach diesen Anpassungen sind die Bilder ?? zu sehen. Es ist deutlich erkennbar, dass der Fit nicht mehr mit den Werten übereinstimmt. Um dies zu beheben, muss zunächst betrachtet werden, was gemessen werden soll: Gesucht werden die Einflüsse der Probendicke und der Ausrichtung der Magnetfelder der Atome im Eisen. Um den Einfluss der Probendicke deutlicher zu machen und das Programm in diese Richtung zu sensibilisieren, liefert Moessfit die Möglichkeit, das Transmissionsintegral ta zu berechnen. Dieses beschreibt direkt den Einfluss der Probendicke: Je größer ta wird, desto stärker absorbieren die kleinen Peaks im Diagramm im Vergleich zu den großen.

3.3.4 Ausrichtung des Magnetfelds der Atome

Das Ergebnis der Anpassung nach ta ist in den Bildern 7 zu sehen. Der Fit stimmt eindeutig besser mit den Werten überein, die Berechnung von ta hat also das Modell verbessert. Um nun auch die Ausrichtung der Magnetfelder der Eisen-Atome zu berechnen und deutlich zu machen, wird $beta$ transformiert zu $fraglong$, was für den Anteil der Eisen-Atome steht, deren Magnetfeld parallel zum Strahl der Photonen steht. Im Anschluss werden die Atome, die parallel zum Photonenstrahl stehen und die, die senkrecht dazu stehen, getrennt betrachtet: Ihr Anteil an $A0$ des Graphen wird getrennt ausgerechnet und anschließend addiert. Damit wird der mittlere Winkel der Atome $beta$ nicht mehr gebraucht.

3.3.5 Variation des Magnetfeldes

Der Einfluss der vorgenommenen Änderungen kann in Bild 8 gesehen werden. Dieses Modell beschreibt bereits einen großen Teil der Daten, hat aber noch eine Schwäche: Bei der Betrachtung des Mößbauerspektrums der mit einem äußeren Magnetfeld ausgerichteten Eisen-Atome zeigt sich, dass die mittleren Peaks vom Modell als kleiner berechnet werden, als sie im Bild zu sehen sind. Grund dafür ist die Annahme, dass das Magnetfeld überall konstant ist. Durch das Anlegen eines äußeren Feldes ist diese Annahme jedoch nicht mehr richtig. Daher werden zwei zusätzliche Parameter eingeführt, die eine Beschreibung des realen Magnetfeldes als Normalverteilung erlauben: $B0$ und $sigma$. Formel 13 zeigt die Nutzung der Parameter. Für $B0$ wird das normale magnetische Feld im Eisen, also 33,3 T, gewählt.

$$B_{Feld} = e^{-\frac{B-B0}{2sigma^2}} \quad (13)$$

Für das verwendete Modell werden also die Parameter B , CS , $omega$, $I0$, ta , $fraglong$, $B0$ und $sigma$ verwendet. Die Ergebnisse können in den Bildern 9 gesehen werden, ihre Werte sind in den Tabellen 1 und 2 zusammengefasst.

3.4 Beschreibung und Erklärung der Beobachtungen für Eisen

Zunächst werden die Peaks in Moessfit vermessen und mit der Nulllinie $I0$ verglichen. Daraus ergeben sich Absorptionsraten für jeden Peak, die in Tabelle 3 zu sehen sind.

Aus der Tabelle sind verschiedene Dinge zu entnehmen:

1. Die 25 μm -Eisenfolie absorbiert stärker als die 4x3 μm -Eisenfolie
2. Keine der Folien zeigt das „normale“ Verhalten, wonach die Linien die Größenverhältnisse 1:2:3 haben sollten. Die 25 μm -Eisenfolie zeigt ein 1:1,87:2,22, die

Eisenfolie	CS [mm/s]	$I0$ [counts]	ta
4x3 μm	$-0,1122 \pm 0,0018$	16846 ± 7	$4,51 \pm 0,06$
25 μm	$-0,1127 \pm 0,0014$	11939 ± 6	$7,44 \pm 0,08$
25 μm mit Stabmagneten	$-0,1115 \pm 0,0021$	9554 ± 5	$6,21 \pm 0,08$
25 μm mit Ringmagneten	$-0,1091 \pm 0,0016$	8873 ± 5	$8,08 \pm 0,10$

Tabelle 1: 1. Teil der Werte mit Fehlern der Mößbauerspektren der Eisenfolien

Eisenfolie	$fraglong$	$B0$ [T]	$sigma$
4x3 μm	$0,170 \pm 0,011$	$33,294 \pm 0,013$	$-0,2 \pm -1,0$
25 μm	$0,273 \pm 0,009$	$33,305 \pm 0,011$	$0,225 \pm 0,035$
25 μm mit Stabmagneten	$0,063 \pm 0,012$	$33,066 \pm 0,019$	$0,48 \pm 0,04$
25 μm mit Ringmagneten	$0,185 \pm 0,011$	$33,216 \pm 0,012$	$0,19 \pm 0,05$

Tabelle 2: 2. Teil der Werte mit Fehlern der Mößbauerspektren der Eisenfolien

4x3 μm -Eisenfolie ein 1:2,40:2,45 Verhalten

3. Wenn die 25 μm -Eisenfolie mit Stabmagneten geordnet wird, sinken die Absorption des ersten und dritten Peaks um 25 %, während die des zweiten Peaks annähernd gleich bleibt
4. Die Beeinflussung der 25 μm -Eisenfolie durch zwei Ringmagnete führt zu einer höheren Absorption des zweiten Peaks

Der erste Punkt lässt sich über ta quantifizieren: Während die 25 μm -Eisenfolie einen ta -Wert von 7,4422 aufweist, hat die 4x3 μm -Eisenfolie einen Wert von 4,5057, also etwa 40 % weniger. Diese Abweichung stimmt sehr gut mit den ersten Peaks beider Folien überein, die ebenfalls eine Abweichung von etwa 40 % zeigen. Beim dritten Peak ist der Unterschied schon größer, hier ist der Peak der 4x3 μm -Eisenfolie nur etwa 35 % kleiner als der der 25 μm -Eisenfolie. Beim zweiten Peak gibt es einen deutlichen Unterschied, der Peak der 4x3 μm -Eisenfolie ist nur etwa 24 % kleiner als der der 25 μm -Eisenfolie. Für diese Abweichungen dürfte es zwei Gründe geben:

- Da die 25 μm -Eisenfolie mehr als doppelt so dick wie die 4x3 μm -Eisenfolie ist, tritt der Effekt der nicht zu vernachlässigenden Probendicke deutlicher zu Tage. Die 25 μm -Eisenfolie hat eine Flächendichte von $19,7 \text{ mg cm}^{-2}$, die 4x3 μm -Eisenfolie $9,4 \text{ mg cm}^{-2}$ - berechnet wird dies mit dem Wissen, dass Eisen eine Dichte von $7,874 \text{ g cm}^{-3}$ hat [5]. Daher wird der dritte Peak bei der 25 μm -Eisenfolie stärker nivelliert als bei der 4x3 μm -Eisenfolie
- Dadurch, dass die 4x3 μm -Eisenfolie aus vier sehr dünnen 3 μm -Folien besteht,

Eisenfolie Peaks	Innere Peaks [%]	Mittlere Peaks [%]	Äußere Peaks [%]
4x3 µm	5,92	14,23	14,48
25 µm	9,99	18,65	22,17
25 µm mit Stabmagneten	7,21	18,97	15,64
25 µm mit Ringmagneten	10,13	21,59	22,51

Tabelle 3: Absorption der Peaks in %

ist die Ausrichtung der Magnetfelder der Atome nicht mehr zufällig wie in einer optimalen Pulverprobe. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Magnetfelder senkrecht zum Photonenstrahl ausgerichtet sind, ist viel höher. Der Vergleich der *fraglong*-Werte beider Folien bestätigt diese Überlegung: Während die 25 µm-Eisenfolie einen *fraglong*-Wert von 0,2733 erreicht, hat die 4x3 µm-Eisenfolie einen Wert von 0,1702. Bei einem optimalen Pulver müssten alle Raumrichtungen gleich stark vertreten sein, also die Ebene transversal zum Strahl 0,6667 und die Linie longitudinal zum Strahl 0,3333 erreichen. Von *fraglong* = 0,3333 weichen aber beide Folien ab, die 4x3 µm-Eisenfolie sogar deutlich

Diese Erkenntnisse erklären auch direkt den zweiten Punkt: Da beide Folien dicker als die vom Modell erlaubten 1 mg cm^{-2} sind, findet eine signifikante Nivellierung der zweiten und dritten Peaks im Vergleich zum ersten statt. Die große Abweichung des zweiten Peaks der 4x3 µm-Eisenfolie wiederum lässt sich durch die stärkere Ordnung in der Folie im Vergleich zur 25 µm-Eisenfolie erklären. Der zweite Peak wird also offenbar durch eine stärkere Anordnung in die Richtung senkrecht zum Photonenstrahl verstärkt.

Für die Erklärung der massiven Abweichung der Absorption bei der 25 µm-Eisenfolie mit Stabmagneten im Vergleich zur Absorption der 25 µm-Eisenfolie ohne Magnet muss ebenfalls auf die Ordnung der Magnetfelder geschaut werden: Das äußere Magnetfeld führt zu einem *fraglong*-Wert von 0,0634. Dies führt zu dem im Vergleich zu den anderen beiden Peaks so großen zweiten Peak.

Eine interessante Beobachtung ist, dass die Ausrichtung der Eisenfolien zu einer anderen effektiven Dicke der Folien führen: So gibt Moessfit im Vergleich zur 25 µm-Eisenfolie ohne Magnet für die 25 µm-Eisenfolie mit Stabmagneten einen etwa 16,5 % kleineren und für die 25 µm-Eisenfolie mit Ringmagneten einen etwa 8,5 % höheren Wert von *ta* aus.

Zu guter Letzt wird die Auswirkung der Schwankung des Magnetfeldes beachtet. Dafür werden die *sigma*-Werte verglichen: Diese sind zwischen den beiden nicht-magnetisierten Folien mit einer Abweichung der 4x3 µm-Eisenfolie um +3,7 % im Vergleich zur 25 µm-Eisenfolie ohne Magnet nahezu gleich (da *sigma* quadratisch eingeht, spielt das Vorzeichen keine Rolle), weichen aber stark ab, sobald die Folien magnetisiert werden. Die 25 µm-Eisenfolie mit Stabmagneten erreicht einen Wert von +113,3 %, die 25 µm-Eisenfolie mit Ringmagneten von -15,8 %. Damit schwankt das effektive Magnetfeld in der 25 µm-

Eisenfolie mit Stabmagneten mehr als doppelt so stark wie in der 25 μm -Eisenfolie ohne Magnet, während die Schwankung bei der 25 μm -Eisenfolie mit Ringmagneten geringer ausfällt. Diese Schwankungen können die Absorptionsunterschiede zu den unmagnetisierten Eisenfolien im ersten und dritten Peak erklären: Demnach würde eine geringere Schwankung des Magnetfeldes, wie sie mit den Ringmagneten realisiert ist, zu einer Erhöhung der Absorption führen, während eine höhere Schwankung zu einer Abschwächung der Absorption führen würde.

Die Isomerieverschiebung hingegen ändert sich weder durch eine veränderte Dicke noch durch das Anlegen eines Magnetfeldes und schwankt zwischen -0,10914 und -0,11268, was einem Mittelwert von -0,11091 und einer Abweichung von diesem um $\pm 1,6\%$ entspricht.

3.5 Anpassungen des Modells für Ferrocen

V_{zz} [$\text{V } \text{\AA}^{-2}$]	CS [mm/s]	ω [mm/s]	$I0$ [counts]	$A0$	β
$145,2 \pm 0,5$	$0,3301 \pm 0,0038$	$0,120 \pm 0,006$	10144 ± 6	619 ± 27	$51,6 \pm -1,0$

Tabelle 4: Werte mit Fehlern des Mößbauerspektrums von Ferrocen

Für Ferrocen muss das Modell eine andere Anpassung erfahren: Bei einer Betrachtung der Messwerte wird deutlich, dass nur zwei Peaks zu sehen sind. Diese stimmen sehr gut mit den beiden Peaks in Bild 2(b) überein. Daher liegt der Gedanke nahe, dass hier das Magnetfeld irrelevant ist und dafür das elektrische Feld betrachtet werden muss. Es werden also folgende Anpassungen vorgenommen: B wird aus genanntem Grund auf null gesetzt. η wird ebenfalls als null angenommen, da von einem symmetrischen Feld ausgegangen werden kann. Parallel zu den Anpassungen oben können auch θ und ϕ null gesetzt werden, und wie oben wird damit auch γ irrelevant. Da weder die Probendicke noch die Ausrichtung der Ferrocen-Moleküle weitergehend untersucht werden sollen, können diese Änderungen als vollständig angenommen werden. Es werden also folgende Parameter verwendet: V_{zz} , CS , ω , $I0$, $A0$ und β .

Ferrocen besteht aus zwei Cyclopentadienyl-Ringen und einem Eisenkern dazwischen. Dieser Eisenkern gibt seine 2 delokalisierten 4s-Elektronen an die beiden Ringe ab und ist somit ein Fe^{2+} . Zusätzlich zu den von Eisen abgegebenen Elektronen hat jeder Ring 5 freie Valenzelektronen. Aus diesen Überlegungen wurde folgendes weiter vereinfachtes Modell entwickelt: Oberhalb und unterhalb des Eisenkerns befinden sich im Abstand R Punktladungen mit 6-facher Elementarladung. Das Fe^{2+} ist unsere lokale Sonde und erzeugt in diesem Modell kein elektrisches Feld. Somit folgt für das Feld im Modell:

Das Eisen hat nun aber die 2-fache positive Elementarladung. Er „spürt“ das elektrische Feld doppelt so stark. Das elektrische Feld ist somit um den Faktor 2 nach zu skalieren.

Für das elektrische Feld folgt hiermit:

Damit lässt sich die Komponente V_{zz} des elektrischen Feldtensors berechnen $V_{zz} =$
Formelwust

$$R = (168,23 \pm 0,18) \text{ pm}$$

Trotz des stark vereinfachten Modells ergibt sich ein Wert, der erstaunlich nahe am Literaturwert $R = 166 \text{ pm}$ liegt. Die Unsicherheit des Wertes ist auch sehr klein, jedoch wurde diese lediglich aus der Fitunsicherheit abgeleitet. Viele Abweichungen, die durch das vereinfachte Modell entstehen wurden hier nicht berücksichtigt. Eine weitere mögliche Verbesserung des Modells wäre ein Skalierungsfaktor, der die Abschirmung des Kerns durch die eigenen Elektronen beschreibt.

4 Diskussion

4.1 Fazit

Literatur

- [1] <https://tu-dresden.de/mn/physik/ifp/ressourcen/dateien/lehre/praktika/mbs?lang=de>
16.11.2016 16:00 Uhr
- [2] <https://de.wikipedia.org/wiki/M%C3%B6%C3%9Fbauerspektroskopie> 16.11.2016
16:15 Uhr
- [3] <https://de.wikipedia.org/wiki/Hyperfeinstruktur> 16.11.2016 16:15 Uhr
- [4] https://de.wikipedia.org/wiki/Doppler-Effekt#Doppler-Effekt_ohne_Medium
16.11.2016 17:50 Uhr
- [5] <https://de.wikipedia.org/wiki/Eisen> 24.11.2016 17:50 Uhr

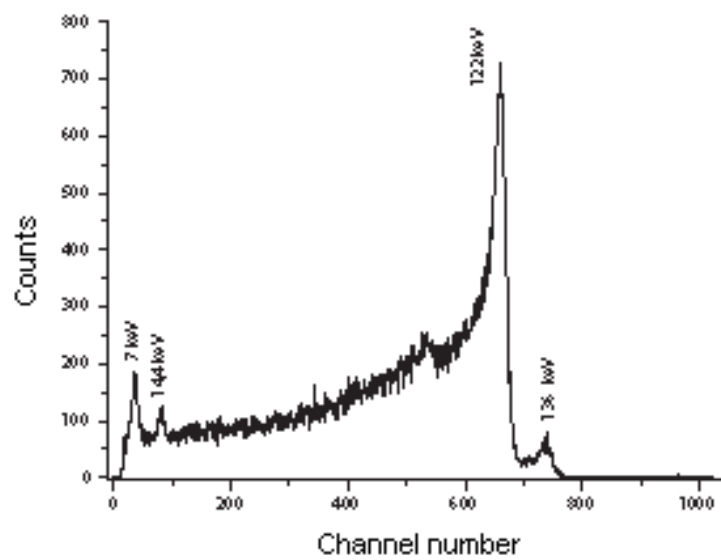
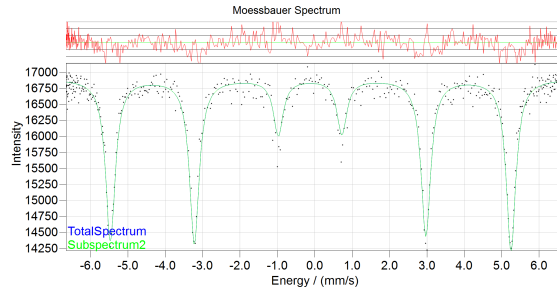


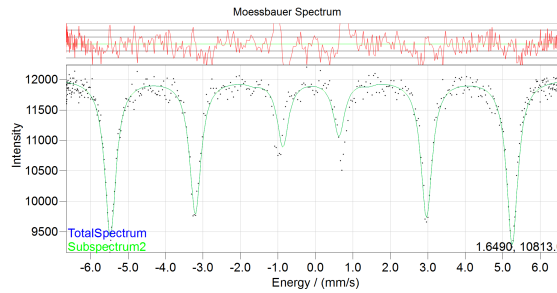
Abbildung 4: Gamma-Spektrum einer ^{57}Co -Quelle



(a) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 4x3 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.2719	43.2719	<input type="checkbox"/>	33.2719	<input checked="" type="checkbox"/>
Vzz	-10.7347	29.2653	<input type="checkbox"/>	9.26531	<input checked="" type="checkbox"/>
eta	1.10585	3.10585	<input type="checkbox"/>	2.10585	<input checked="" type="checkbox"/>
theta	-97.6932	2.3068	<input type="checkbox"/>	-47.6932	<input checked="" type="checkbox"/>
phi	-98.749	1.25105	<input type="checkbox"/>	-48.749	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.312364	0.0876364	<input type="checkbox"/>	-0.112364	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.055569	0.255569	<input type="checkbox"/>	0.155569	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	15214.2	18579.9	<input type="checkbox"/>	16897.1	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	5356.96	6320.46	<input type="checkbox"/>	5838.71	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	169.146	229.146	<input type="checkbox"/>	199.146	<input checked="" type="checkbox"/>
gamma	-112.211	-12.2113	<input type="checkbox"/>	-62.2113	<input checked="" type="checkbox"/>

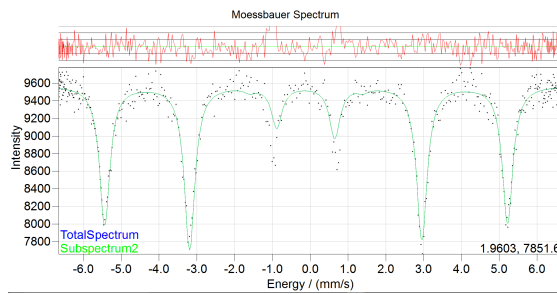
(b) Gefittete Werte des Spektrums



(c) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	22.3176	42.3176	<input type="checkbox"/>	32.3176	<input checked="" type="checkbox"/>
Vzz	61.8097	101.81	<input type="checkbox"/>	81.8097	<input checked="" type="checkbox"/>
eta	0.0582854	2.05829	<input type="checkbox"/>	1.05829	<input checked="" type="checkbox"/>
theta	-123.151	-23.151	<input type="checkbox"/>	-73.151	<input checked="" type="checkbox"/>
phi	-68.9306	31.0694	<input type="checkbox"/>	-18.9306	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.311018	0.0889819	<input type="checkbox"/>	-0.111018	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.082278	0.282278	<input type="checkbox"/>	0.182278	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	10827	13213.9	<input type="checkbox"/>	12020.5	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	6259.29	7345.32	<input type="checkbox"/>	6802.31	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	91.8463	151.846	<input type="checkbox"/>	121.846	<input checked="" type="checkbox"/>
gamma	-206.452	-106.452	<input type="checkbox"/>	-156.452	<input checked="" type="checkbox"/>

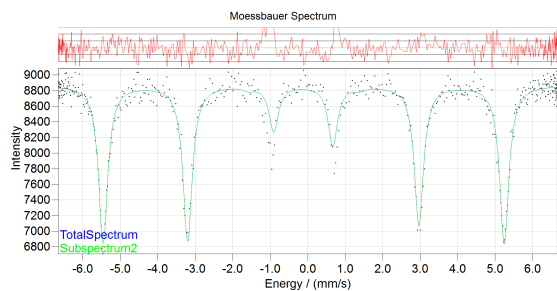
(d) Gefittete Werte des Spektrums



(e) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Stabmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	22.3577	42.3577	<input type="checkbox"/>	32.3577	<input checked="" type="checkbox"/>
Vzz	56.4481	96.4481	<input type="checkbox"/>	76.4481	<input checked="" type="checkbox"/>
eta	-0.275142	1.72486	<input type="checkbox"/>	0.724858	<input checked="" type="checkbox"/>
theta	-118.76	-18.7601	<input type="checkbox"/>	-68.7601	<input checked="" type="checkbox"/>
phi	-53.779	46.221	<input type="checkbox"/>	-3.77901	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.309638	0.0903622	<input type="checkbox"/>	-0.109638	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0687487	0.268749	<input type="checkbox"/>	0.168749	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	8616.64	10531.9	<input type="checkbox"/>	9574.25	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	3764.73	4610.54	<input type="checkbox"/>	4187.63	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	21.0146	81.0146	<input type="checkbox"/>	51.0146	<input checked="" type="checkbox"/>
gamma	39.5695	139.57	<input type="checkbox"/>	89.5695	<input checked="" type="checkbox"/>

(f) Gefittete Werte des Spektrums

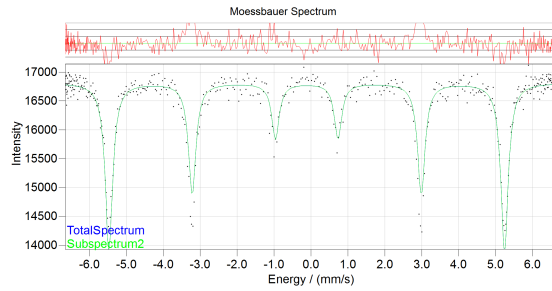


(g) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Ringmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	22.6405	42.6405	<input type="checkbox"/>	32.6405	<input checked="" type="checkbox"/>
Vzz	48.2504	88.2504	<input type="checkbox"/>	68.2504	<input checked="" type="checkbox"/>
eta	-0.275388	1.72461	<input type="checkbox"/>	0.724612	<input checked="" type="checkbox"/>
theta	-118.525	-18.5253	<input type="checkbox"/>	-68.5253	<input checked="" type="checkbox"/>
phi	-54.6896	45.3104	<input type="checkbox"/>	-4.68959	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.309381	0.0906187	<input type="checkbox"/>	-0.109381	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0474567	0.247457	<input type="checkbox"/>	0.147457	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	7982.71	9757.51	<input type="checkbox"/>	8870.11	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	3865.48	4739.93	<input type="checkbox"/>	4302.7	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	203.595	263.595	<input type="checkbox"/>	233.595	<input checked="" type="checkbox"/>
gamma	-160.532	-60.5318	<input type="checkbox"/>	-110.532	<input checked="" type="checkbox"/>

(h) Gefittete Werte des Spektrums

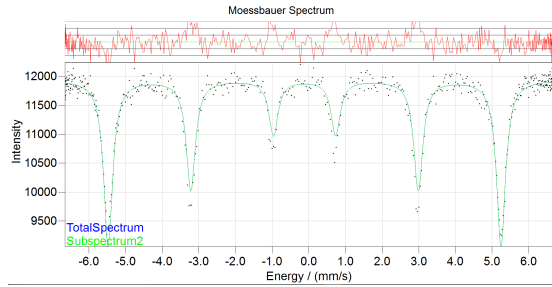
Abbildung 5: Mößbauerspektren und Werte von Eisenfolien ohne Vornahme von Anpassungen



(a) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 4x3 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.297	43.297	<input type="checkbox"/>	33.297	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.310674	0.0893259	<input type="checkbox"/>	-0.110674	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0214889	0.221489	<input type="checkbox"/>	0.121489	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	15127.5	18493.1	<input type="checkbox"/>	16810.3	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	3936.09	4899.58	<input type="checkbox"/>	4417.83	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

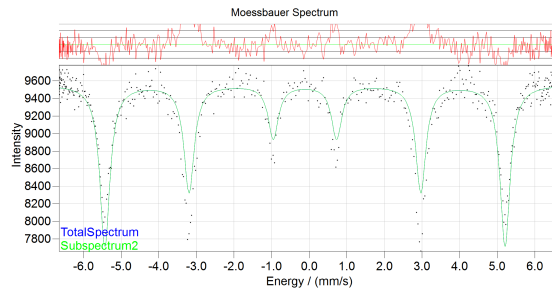
(b) Gefittete Werte des Spektrums



(c) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.3063	43.3063	<input type="checkbox"/>	33.3063	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.31182	0.0881802	<input type="checkbox"/>	-0.11182	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0479153	0.247915	<input type="checkbox"/>	0.147915	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	10739.9	13126.8	<input type="checkbox"/>	11933.4	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	4795.43	5881.45	<input type="checkbox"/>	5338.44	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

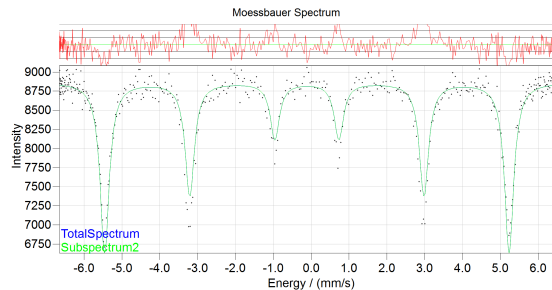
(d) Gefittete Werte des Spektrums



(e) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Stabmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.0721	43.0721	<input type="checkbox"/>	33.0721	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.309877	0.0901229	<input type="checkbox"/>	-0.109877	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0631652	0.263165	<input type="checkbox"/>	0.163165	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	8597.65	10512.9	<input type="checkbox"/>	9555.25	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	3338.85	4184.65	<input type="checkbox"/>	3761.75	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

(f) Gefittete Werte des Spektrums

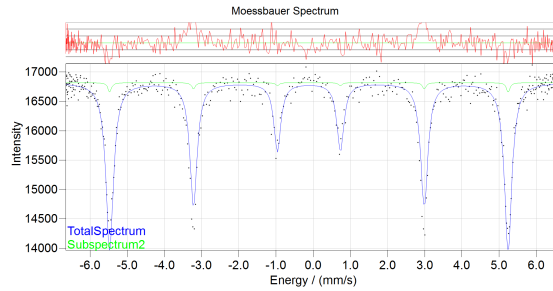


(g) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Ringmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.2155	43.2155	<input type="checkbox"/>	33.2155	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.308127	0.0918726	<input type="checkbox"/>	-0.108127	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0468677	0.246868	<input type="checkbox"/>	0.146868	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	7975.51	9750.3	<input type="checkbox"/>	8862.9	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	3668.46	4542.9	<input type="checkbox"/>	4105.68	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

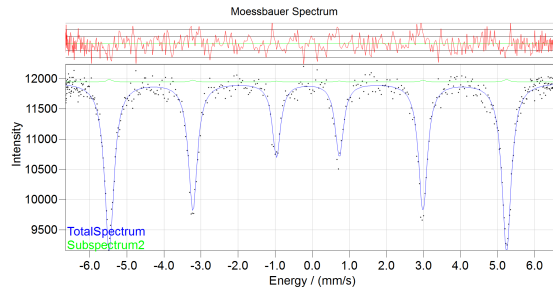
(h) Gefittete Werte des Spektrums

Abbildung 6: Mößbauerspektren und Werte von Eisenfolien mit Einschränkung auf rein magnetisches Feld und definierter Winkelausrichtung

(a) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 4x3 μm -Eisenfolie

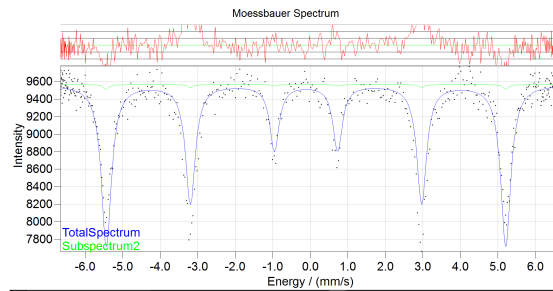
name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.2974	43.2974	<input checked="" type="checkbox"/>	33.2974	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.311143	0.0888567	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.111143	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	-0.043078	0.156922	<input checked="" type="checkbox"/>	0.056922	<input checked="" type="checkbox"/>
IO	15133.5	18499.2	<input checked="" type="checkbox"/>	16816.4	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	106.032	126.032	<input checked="" type="checkbox"/>	116.032	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	3.14874	5.14874	<input checked="" type="checkbox"/>	4.14874	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input checked="" type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

(b) Gefittete Werte des Spektrums

(c) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 25 μm -Eisenfolie

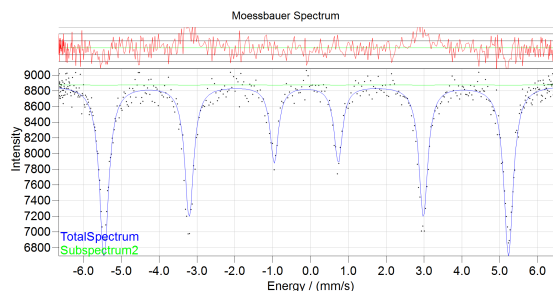
name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.3057	43.3057	<input checked="" type="checkbox"/>	33.3057	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.312506	0.087494	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.112506	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0244869	0.175513	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0755131	<input checked="" type="checkbox"/>
IO	10751.9	13138.8	<input checked="" type="checkbox"/>	11945.4	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	-50.7292	-30.7292	<input checked="" type="checkbox"/>	-40.7292	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	6.54364	8.54364	<input checked="" type="checkbox"/>	7.54364	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input checked="" type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

(d) Gefittete Werte des Spektrums

(e) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Stabmagneten ausgerichteten 25 μm -Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.0722	43.0722	<input checked="" type="checkbox"/>	33.0722	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.310484	0.0895155	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.110484	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.00844849	0.191552	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0915515	<input checked="" type="checkbox"/>
IO	8605.6	10520.8	<input checked="" type="checkbox"/>	9563.21	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	49.2604	69.2604	<input checked="" type="checkbox"/>	59.2604	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	5.21508	7.21508	<input checked="" type="checkbox"/>	6.21508	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input checked="" type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

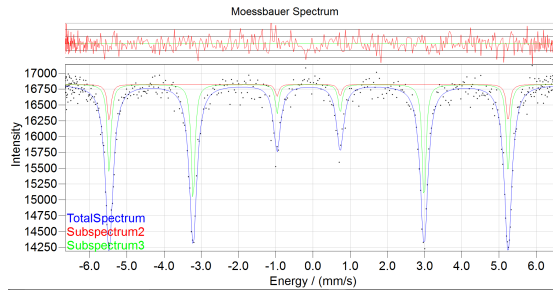
(f) Gefittete Werte des Spektrums

(g) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Ringmagneten ausgerichteten 25 μm -Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.2156	43.2156	<input checked="" type="checkbox"/>	33.2156	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.308763	0.0912372	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.108763	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	-0.028291	0.171709	<input checked="" type="checkbox"/>	0.071709	<input checked="" type="checkbox"/>
IO	7985.68	9760.48	<input checked="" type="checkbox"/>	8873.08	<input checked="" type="checkbox"/>
A0	-8.31903	11.681	<input checked="" type="checkbox"/>	1.68097	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	7.00411	9.00411	<input checked="" type="checkbox"/>	8.00411	<input checked="" type="checkbox"/>
beta	0	109.4	<input checked="" type="checkbox"/>	54.7	<input type="checkbox"/>

(h) Gefittete Werte des Spektrums

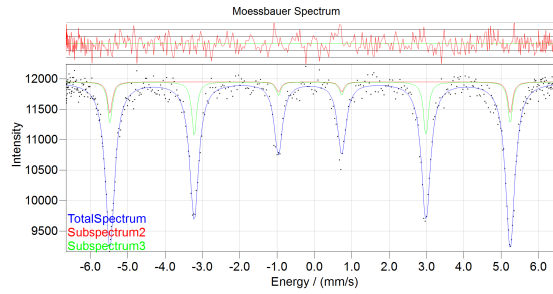
Abbildung 7: Mößbauerspektren und Werte von Eisenfolien mit Einführung von ta



(a) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 4x3 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.299	43.299	<input type="checkbox"/>	33.299	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.311692	0.088308	<input type="checkbox"/>	-0.111692	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0400603	0.15994	<input type="checkbox"/>	0.0599397	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	15141.3	18507	<input type="checkbox"/>	16824.2	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	3.32052	5.32052	<input type="checkbox"/>	4.32052	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	-0.829894	1.17011	<input type="checkbox"/>	0.170106	<input checked="" type="checkbox"/>

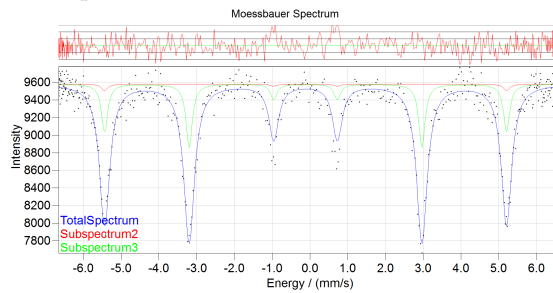
(b) Gefittete Werte des Spektrums



(c) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.3063	43.3063	<input type="checkbox"/>	33.3063	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.312584	0.0874159	<input type="checkbox"/>	-0.112584	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0230848	0.176915	<input type="checkbox"/>	0.0769152	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	10754.8	13141.7	<input type="checkbox"/>	11948.3	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	6.62854	8.62854	<input type="checkbox"/>	7.62854	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	-0.723288	1.27671	<input type="checkbox"/>	0.276712	<input checked="" type="checkbox"/>

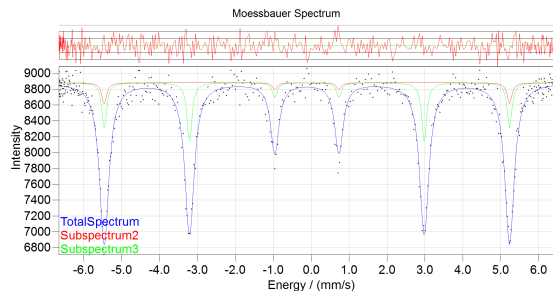
(d) Gefittete Werte des Spektrums



(e) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Stabmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.0777	43.0777	<input type="checkbox"/>	33.0777	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.311067	0.0889328	<input type="checkbox"/>	-0.111067	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0061902	0.199381	<input type="checkbox"/>	0.099381	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	8619.21	10534.4	<input type="checkbox"/>	9576.82	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	5.72632	7.72632	<input type="checkbox"/>	6.72632	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	-0.935277	1.06472	<input type="checkbox"/>	0.0647231	<input checked="" type="checkbox"/>

(f) Gefittete Werte des Spektrums

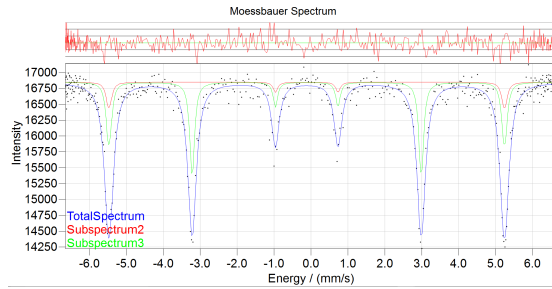


(g) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Ringmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	23.2173	43.2173	<input type="checkbox"/>	33.2173	<input checked="" type="checkbox"/>
CS	-0.309024	0.0909761	<input type="checkbox"/>	-0.109024	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0.0242151	0.175785	<input type="checkbox"/>	0.0757849	<input checked="" type="checkbox"/>
l0	7991.94	9766.73	<input type="checkbox"/>	8879.33	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	7.24045	9.24045	<input type="checkbox"/>	8.24045	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	-0.811374	1.18863	<input type="checkbox"/>	0.188626	<input checked="" type="checkbox"/>

(h) Gefittete Werte des Spektrums

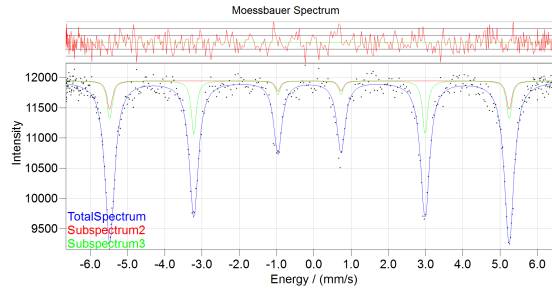
Abbildung 8: Mößbauerspektren und Werte von Eisenfolien mit Einführung des Ausrichtungsparameters *fraglong*



(a) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 4x3 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	0	69.2	<input checked="" type="checkbox"/>	34.6	<input type="checkbox"/>
CS	-0.129747	-0.0946066	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.112177	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0	0.14	<input checked="" type="checkbox"/>	0.07	<input type="checkbox"/>
l0	16774.4	16916.9	<input checked="" type="checkbox"/>	16845.6	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	3.86198	5.1495	<input checked="" type="checkbox"/>	4.50574	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	0.0626708	0.277829	<input checked="" type="checkbox"/>	0.17025	<input checked="" type="checkbox"/>
B0	33.168	33.4195	<input checked="" type="checkbox"/>	33.2938	<input checked="" type="checkbox"/>
sigma	0	-0.465517	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.232759	<input checked="" type="checkbox"/>

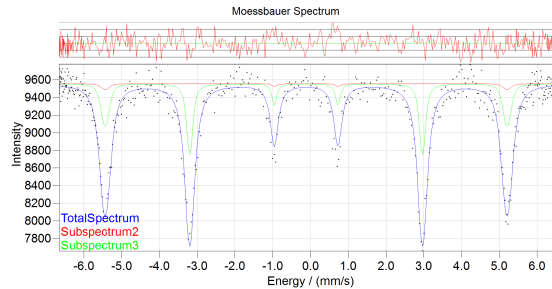
(b) Gefittete Werte des Spektrums



(c) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	0	69.2	<input checked="" type="checkbox"/>	34.6	<input type="checkbox"/>
CS	-0.127099	-0.0982578	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.112678	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0	0.14	<input checked="" type="checkbox"/>	0.07	<input type="checkbox"/>
l0	11879.9	11998.5	<input checked="" type="checkbox"/>	11939.2	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	6.63393	8.25042	<input checked="" type="checkbox"/>	7.44217	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	0.180199	0.366395	<input checked="" type="checkbox"/>	0.273297	<input checked="" type="checkbox"/>
B0	33.1981	33.4115	<input checked="" type="checkbox"/>	33.3048	<input checked="" type="checkbox"/>
sigma	-0.129597	0.578669	<input checked="" type="checkbox"/>	0.224536	<input checked="" type="checkbox"/>

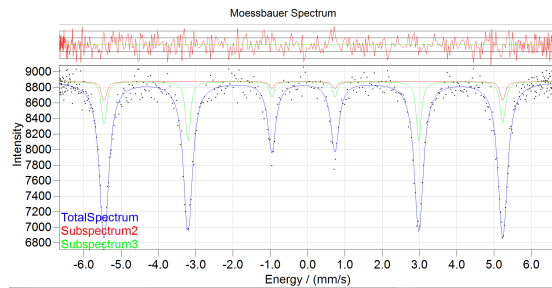
(d) Gefittete Werte des Spektrums



(e) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Stabmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	0	69.2	<input checked="" type="checkbox"/>	34.6	<input type="checkbox"/>
CS	-0.132658	-0.0903176	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.111488	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0	0.14	<input checked="" type="checkbox"/>	0.07	<input type="checkbox"/>
l0	9499.83	9607.76	<input checked="" type="checkbox"/>	9553.8	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	5.37272	7.04861	<input checked="" type="checkbox"/>	6.21067	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	-0.0526087	0.179332	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0633617	<input checked="" type="checkbox"/>
B0	32.8772	33.2556	<input checked="" type="checkbox"/>	33.0664	<input checked="" type="checkbox"/>
sigma	0.0710399	0.886764	<input checked="" type="checkbox"/>	0.478902	<input checked="" type="checkbox"/>

(f) Gefittete Werte des Spektrums



(g) Gefittetes Mößbauerspektrum von einer mit zwei Ringmagneten ausgerichteten 25 µm-Eisenfolie

name	slider min	slider max	Hide run	value	fit
B	0	69.2	<input checked="" type="checkbox"/>	34.6	<input type="checkbox"/>
CS	-0.124986	-0.0932848	<input checked="" type="checkbox"/>	-0.109135	<input checked="" type="checkbox"/>
omega	0	0.14	<input checked="" type="checkbox"/>	0.07	<input type="checkbox"/>
l0	8821.67	8924.14	<input checked="" type="checkbox"/>	8872.91	<input checked="" type="checkbox"/>
ta	7.07038	9.08788	<input checked="" type="checkbox"/>	8.07913	<input checked="" type="checkbox"/>
fraglong	0.0786634	0.290596	<input checked="" type="checkbox"/>	0.18463	<input checked="" type="checkbox"/>
B0	33.0961	33.3363	<input checked="" type="checkbox"/>	33.2162	<input checked="" type="checkbox"/>
sigma	-0.342449	0.720605	<input checked="" type="checkbox"/>	0.189078	<input checked="" type="checkbox"/>

(h) Gefittete Werte des Spektrums

Abbildung 9: Gefittetes Mößbauerspektrum von Eisenfolien mit Schwankungen von B (endgültiges Modell)

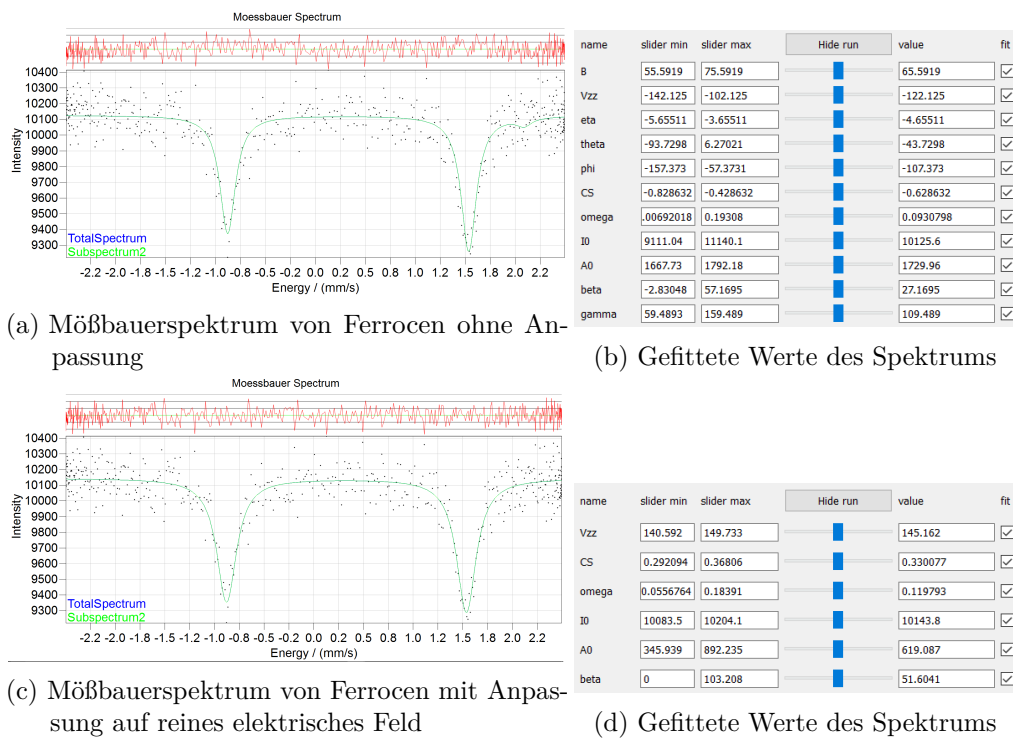


Abbildung 10: Gefittetes Mößbauerspektrum von Ferrocen mit und ohne Anpassung