ROE - Röntgenstrahlung: Braggreflexion und Röntgenfluoreszenzanalyse

Simon Weinzierl, Yannic Werner

14. Juli 2025

Physikalisches Fortgeschrittenen
praktikum P3B nach der Studienordnung für Studienbeginn bis W
S2022/23

Alle Teile dieses Dokuments (Vorbereitung, Protokoll, Auswertung) wurden von beiden Teilnehmern in gleichen Teilen und ohne fremde Hilfe bearbeitet. Sofern fremde Quellen verwendet wurden, sind diese angegeben.

Der IATEX-Code ist auf GitHub unter https://github.com/WeinSim/P3B/FHV verfügbar.

 \bigodot Alle Rechte vorbehalten.

1



Inhaltsverzeichnis

1	Vol	bereitung	4					
	1.1	Physikalischer Hintergrund	4					
		1.1.1 Röntgenröhre	4					
		1.1.2 Linienspektrum eines Stoffe, Schalenmodell, mögliche Übergänge (Quantenmechanik)	4					
		1.1.3 Röntgenstrahlung (Bremsstrahlung, chrakteristische Strahlung)	6					
		1.1.4 Zustandekommen der charakteristischen Strahlung im Röntgenspektrum (K_{α}, K_{β})	7					
	1.2	Aufgaben aus dem Text	8					
		1.2.1 Teile der jeweiligen Aufgaben	8					
2	Ver	ruschsablaufplan	9					
	2.1	Benötigte Materialien	9					
	2.2	Teilversuch 1: Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlung des Molybdän an einem NaCl-Eiskristall	10					
	2.3	Teilversuch 2: Energiespektrum einer Röntgenröhre in Abhängigkeit der Spannung	11					
	2.4	4 Teilversuch 3: Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz						
	2.5	Teilversuch 4: Röntgenfluoreszenzanalyse	13					
	2.6	Teilversuch 5: Identifiaktion einer unbekannten Probe	14					
3	Ver	rsuchsprotokoll	15					
4	Aus	swertung	16					
	4.1	Teilversuch 1: Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlung des Molybdän an einem NaCl-Eiskristall	16					
	4.2	Teilversuch 2: Energiespektrum einer Röntgenröhre in Abhängigkeit der Spannung $\ \ldots \ \ldots$	17					
	4.3	Teilversuch 3: Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz	18					
	4.4	Teilversuch 4: Röntgenfluoreszenzanalyse	19					
	4.5	Teilversuch 5: Identifiaktion einer unbekannten Probe	20					
5	Anı	merkung: Graphische Auswertung und Fehlerfortpflanzung mit Python-Code	21					

Literatur

1 Vobereitung

1.1 Physikalischer Hintergrund

1.1.1 Röntgenröhre

[?]

Röntgenstrahlung entsteht durch die Geschewindigkeitsänderung geladener Teilchen. Dabei wird die Röntgen-strahlung durch das Abbremsen energiereicher Elektronen in einer Röntgenröhre erzeugt.

Folgend ist der Aufbau einer Röntgenröhre skizzenhaft dargestellt:

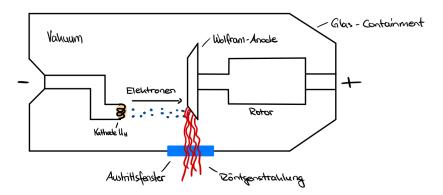


Abbildung 1: Skizzenhafte Röntgenröhre

Durch das anlegen einer Heizspannung von einigen Volt an der Kathode, treten, bedingt durch den thermoelektrischen Effekt, schwach, oder gar nicht gebundene Elektronen aus der Heizwendel aus. Durch die angelegte Anodenspannung werden die Elktronen von der Kathode zur Anode beschleunigt und treffen anschließend auf die Anode.

Durch die Bremsstrahlung und durch die Wechselwirkungen untern den einzelnen Elektronen kommt es zur Entstehung von Röntgenstrahlung. Deren Überlagerung bildt das emittierte Röntgenspektrum. Die Eigenschaften und die Entstehung von Bremsstrahlung und der charakteristischen Strahlung werden im Kapitel 1.1.3 genauer beleuchtet.

1.1.2 Linienspektrum eines Stoffe, Schalenmodell, mögliche Übergänge (Quantenmechanik)

[?] [?, 1050–1051] [?]

Ein Linienspektrum ist ein Strahlungsspektrum, welches voneinander getrennte, diskrete Linien zeigt. Das können zum Beispiel Absoroptions- oder Emissionlinien in Lichtspektren sein. Jedoch weisen auch manche Teilchenstrahlungen, wie die Alphastrahlung Lininespektren auf. Daraus kann man ableiten, dass auch Teilchen diskrete kinetische Energien haben.

Jedes Material (Atom, Molekül) hat dabei chrakteristische, diskrete Energieniveaus, auf welchen sich die Elektronen befinden können. Der Wechsel von einem Energienievau auf ein anderes erfolgt dabei durch Aufnahme/Abgabe eines Pohotons. Aus der Energiedifferenz lässt sich dann die zugehörige Wellenlänge über folgende Formel bestimmen: $\lambda = \frac{c}{v}$.

Ein angeregtes Atom oder Molekül befindet sich immer nur sehr kurz in seinem angeregten Zustand. Es fällt nach einer ehr kurzen Zeitspanne wieder in einen tieferen Energiezustand zurück. Die ausge-

sandten Photonen erscheinen dann mit einer ganz bestimmten Energie als Emissionslienien auf einem Spektrum. So entstehen chrakteristische Spektren, wie zum Beispiel das Spektrum von Wasserstoff oder Helium.

Das Schalenmodell ist ein Modell, um den Aufbau von Atomen zu beschreiben. Das Schalenmodell basiert hierbei auf dem Bohr'schen Atommodell. Im Atomkern befinden sich die Protonen und Neutronen. Die negativ geladenen Elektronen bewegen sich in Schalen um den positiv gelandenen Kern. Folgende Skizze soll das Schalenmodll verdeutlichen:

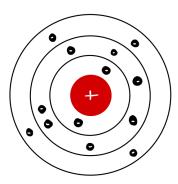


Abbildung 2: Schalenmodell

Die Schalen haben, wie in der Abbildung ersichtlich, unterschiedlich Abstände zum Kern. Die Schalen werden von innen nach außen mit unterschiedlichen Buchstaben bezeichnet, beginnend mit der "KSchalge, LSchale und MSchale. Dabei haben die Schalen unterschiedlich viel Platz für Elektronen Über die Formel $e=2n^2$ lässt sich die maximale Anzahl an Elektronen für jede Schale bestimmen.

Jedoch hat das Schalenmodell auch Grenzen. Will man Elemente mir mehr als 20 Elektronen beschreiben, so ist das Schalenmodell zur Beschreibung nicht mehr geeignet!

Der Zusammenhang mit der Quantenmechanik ist nun leicht hergestellt. Die Quantenmechanik besagt, dass ein Elektron in einem Atom nur auf bestimmen Energieniveaus existieren kann und nicht zwischen den Niveaus! Wie oben bereits beschrieben können also folgende Aussagen getroffen werden:

- 1. Abstieg: ein Photon wird emittiert (von E_2 nach E_1)
- 2. Aufstieg: ein Photon wird absorbiert

Die Energie des Photons wird also genau durch den Energieunterschied der beiden Zustände beschrieben:

$$E_{Photon} = E_{oben} - E_{unten} = h * f = \frac{h*c}{\lambda}$$

mit h als Planksches Wirkungsquantum, f als Frequenz, λ als Wellenlänge und c als Lichtgeschwindigkeit.

Folgende Aussagen lassen sich also zusammenfassend treffen:

- 1. Die Energiedifferenzen werden durch Linienspektren beschrieben
- 2. Die Energiedifferenzen entstehen durch Übergänge von Elektronen zwischen den unterschiedglichen Energieniveaus
- 3. Jedem Übergang ist eine chrakteristische Linie zugeordnet

4. Jedes Atom wird durch ein charakteristisches Linienspektrum beschrieben

Beispiel Wasserstoffatom:

• Lyman-Serie: Übergang nach n = 1

• Balmer-Serie: Übergang nach n=2

• Paschen-Serie: Übergang nach n=3

• Bracket-Serie: Übergang nach n=4

• Pfund-Serie: Übergang nach n=5

Hier ist wohl die Balmer-Serie die bekannteste Serie, da hier das Linienspektrum mit dem bloßen Auge sichtbar ist.

1.1.3 Röntgenstrahlung (Bremsstrahlung, chrakteristische Strahlung)

[?] [1010–1011; 1384] [?] [?]

Wie bereits in Kapitel 1.1.1 erwähnt, wird in diesem Kapitel die Bremsstrahlung und die charakteristische Strahlung genauer betrachtet.

Die Kathode in der Röntgenröhre beschleunigt die Elektronen auf eine Geschewindigkeit von circa 0,35c. Die ausgetretenen Elektronen treffen nun mit dieser hohen Geschwindigkeit auf die Anode in der Röntgenröhre. Durch das extreme Abbremsen der Elektronen, entsteht elektrische Strahlung, die sogenannte Bremsstrahlung. Je stärker die Elektronen abgebremst werden, umso mehr Strahlung senden diese aus. Da nicht alle Elektronen gleich stark abgebremst werden, besitzen die Photonen der Bremsstrahlung unterschiedliche Wellenlängen. Dadurch ist das Spektrum der Bremsstrahlung ein kontinuierliches Spektrum. Die minimale Wellenlänge wird häufig als λgr bezeichnet. Die minimale Wellenlänge lässt sich durch folgende Formel bestimmen:

$$\lambda_{qr} = \frac{hc}{eU}$$

wobei h das Planksche Wirkungsquantum, c die Lichtgeschwindigkeit, e die Elementarladung und U die Beschleunigungsspannung ist.

Aus der Formel lässt sich ableiten, dass die minimale Wellenlänge und die Beschleunigungsspannung indirekt proportional zueinander sind. Mit steigender Beschleunigungsspannung sinkt die minimale Wellenlänge.

Abschließend lässt sich also zur Bremsstrahlung folgendes zusammenfassen: das kontinuierliche Spektrum entsteht durch das Abbremsen der ausgesandeten, beschleunigten Elektronen der Kathode. Durch das unterschiedlich starke Abbremsen der Elektronen werden Photonen mit unterschiedlichen Energiewerten entsandt, wobei die minimale Wellenlänge/die maximale Photonenenergie von der Beschleunigungsspannung der Röntgenröhre abhängen.

Neben der Bremsstrahlung, tritt bei ausreichend großer Beschleunigungsspannung auch ein charakteristisches Linienspektrum auf. Diese Röntgenstralhung is jedoch nur bei höheren Ordnungszahlen auf. Das liegt daran, dass Atome mit höherer Ordnungszahl zahlreiche Atome in den äußeren Elektronenschalen haben. Diese sind nicht so stark an den Atomkern gebunden und können somit leichter austreten als Elektronen, welche sich nahe dem Kern befinden. Im folgenden soll die Entstehung der chrakteristischen Stralung stichpunktartig beschrieben werden:

- 1. Ein Anode-Atom wird durch ein sehr schnelles Elektron angeregt. Ein Elektron wird folgich auch ein noch freies, höheres, Energieniveau angehoben. Auf einer der unteren Schalen entsteht somit eine Lücke. Wie bekannt, gehen angeregt Atome nach kurzer Zeit in energetisch günstigere Zustände über. Folglich kann folgendes passieren:
- 2. Möglichkeit 1: Ein Elektron der höchsten Schale fällt nun wieder zurück auf die Lücke der untersten Schale. Dabei wird ein Photon emittiert.
- 3. Möglichkeit 2: Die Lücke der untersten Schale wird durch ein Elektron auf einer höheren Schale aufgefüllt. Hierbei wird ein Photon emittiert. Die so enstandene Lücke in der höheren Schale wird erneut durch ein Elektron einer Schale darüber aufgefüllt. Es wird wieder ein Photon emittiert. Dieser Vorgang läuft so lange ab, bis wieder alle Schalen aufgefüllt sind, bis auf die äußerste Schale.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass das Röntgen-Spektrum durch charakteristische Strahlung identifiziert werden kann. Elektronenübergänge zwischen den unterschiedlichen Schalen der Atome sind die Ursache für das Auftreten der charakteristischen Strahlung.

1.1.4 Zustandekommen der charakteristischen Strahlung im Röntgenspektrum (K_{α}, K_{β})

In Kapitel davor schon beschrieben. Schauen, wie man das in diesem Kapitel noch einbauen kann. Evtl Skizze und Verweis nach oben???? Übernahme der Stichpunkte nach unten?!

1.2 Aufgaben aus dem Text

1.2.1 Teile der jeweiligen Aufgaben

[...]

2 Veruschsablaufplan

2.1 Benötigte Materialien

- 1. Eins
- 2. Zwei

2.2Teilversuch 1: Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlung des Molybdän an einem NaCl-Eiskristall

(I)	Ziel:
(II)	Versuchsmethode:
(III)	Versuchsskizze:
	Abbildung 3: Versuchsskizze Teilversuch 1
(IV)	Planung der Durchführung

- - \bullet eins
 - \bullet zwei
- (V) Vorüberlegungen zur Durchführung & Auswertung
 - \bullet eins
 - \bullet zwei

2.3 Teilversuch 2: Energiespektrum einer Röntgenröhre in Abhängigkeit der Spannung

(I)	el:
(II)	ersuchsmethode:
(III)	ersuchsskizze:
	Abbildung 4: Versuchsskizze Teilversuch 2
(TT/)	lanung dan Dunchfühmung

- (IV) Planung der Durchführung
 - \bullet eins
 - \bullet zwei
- (V) Vorüberlegungen zur Durchführung & Auswertung
 - \bullet eins
 - \bullet zwei

2.4 Teilversuch 3: Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz

(I)	Ziel:
(II)	Versuchsmethode:
(III)	Versuchsskizze:

Abbildung 5: Versuchsskizze Teilversuch 3

- (IV) Planung der Durchführung
 - \bullet eins
 - zwei
- (V) Vorüberlegungen zur Durchführung & Auswertung
 - \bullet eins
 - zwei

2.5 Teilversuch 4: Röntgenfluoreszenzanalyse

(I)	Ziel:
(II)	Versuchsmethode:

Abbildung 6: Versuchsskizze Teilversuch 4

- (IV) Planung der Durchführung
 - \bullet eins

(III) Versuchsskizze:

- zwei
- (V) Vorüberlegungen zur Durchführung & Auswertung
 - \bullet eins
 - zwei

2.6 Teilversuch 5: Identifiaktion einer unbekannten Probe

(I)	Ziel:
(II)	Versuchsmethode:
(III)	Versuchsskizze:
	Abbildung 7: Versuchsskizze Teilversuch 5

- (IV) Planung der Durchführung
 - \bullet eins
 - \bullet zwei
- (\mathbf{V}) Vorüberlegungen zur Durchführung & Auswertung
 - \bullet eins
 - zwei

3 Versuchsprotokoll

Auf den folgenden Seiten befindet sich das eingescannte Versuchsprotokoll. Alle Daten wurden selbst gemessen. Sofern fremde Hilfe benutzt wurde, wurde sie klar gekennzeichnet.

Messunsicherheiten wurden angegeben und folgend in der Auswertung verwendet. Alle weiteren Rechnungen und Analysen finden in der Versuchsasuwertung statt.

..... width=!,height=!,pages=..., pagecommand=, frame=true

4 Auswertung

4.1 Teilversuch 1: Bragg-Reflexion von Röntgenstrahlung des Molybdän an einem NaCl-Eiskristall

4.2	Teilversuch 2: Energiespektrum einer Röntgenröhre in Abhängigkeit der
	Spannung

4.3	Teilversuch	3: Duane	-Huntsches	${f Verschieb}^{\cdot}$	ungsgesetz
-----	-------------	----------	------------	-------------------------	------------

4.4	Teilversuch	4:	Röntgenfluoreszenzanal	vse
T. T	TCIIVCISUCII	ъ.	1 Contigenina di Cazenzana	. y .ɔ'

4.5	Teilversuch	5:	Identifiaktion	einer	unbekannten	Probe
4. 0	TCIIVCISUCII	υ.	identinaktion	CILICI	underannien	TIONC

5 Anmerkung: Graphische Auswertung und Fehlerfortpflanzung mit Python-Code

Alle Berechnungen inkl. Fehlerbestimmung wurden mit einem selbstgeschriebenen Python-Skript durchgeführt, um uns die Arbeit zu erleichtern und Fehler zu vermeiden. Alle Ergebnisse, die auf diese Weise zustande gekommen sind, sind entsprechend mit einem blauen Hintergrund gekennzeichnet; s. folgendes Beispiel:

$$F = ma = 20 \,\mathrm{kg} \cdot 9,81 \, \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}^2} = (19,62 \pm 0,5) \,\mathrm{N}$$
 tv1()

Dies soll bedeuten, dass die Berechnung des Wertes und der Unsicherheit von der Python-Funktion namens tv1 durchgeführt wird. Die Unsicherheit wird mithilfe der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung berechnet. Außerdem wird das Python-Package matplotlib zum Erstellen von Graphen verwendet.

Der verwendete Code ist sowohl auf GitHub verfügbar (https://github.com/WeinSim/P3B/FHV) als auch auf den folgenden Seiten zu finden und kann mit dem Befehl python Main.py ausgeführt werden. Für eine genauere Beschreibung des Codes siehe die README-Datei auf GitHub sowie die Kommentare im Code. (Manche Sonderzeichen im Code (\ddot{a} , \ddot{o} , \ddot{u} , Δ , etc.) werden von IATEXnicht richtig erkannt, deswegen kann der Code auf den nachfolgenden Seiten an einigen Stellen unvollständig erscheinen. Auf GitHub wird aber alles richtig angezeigt.)

Main.py:

```
1 import math
2 import random as rd
3 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6 from matplotlib.backends.backend_pdf import PdfPages
8 from Expressions import *
# markers - linestyle - color
11
12 def tv1():
    print("--- Teilversuch 1 ---")
13
14
15
      # transmittiert
      \# r = [0.0, 5.5, 7.5, 8.5, 10.0, 10.5, 11.0, 12.0, 12.5, 13.0, 13.5]
17
     r = [4.5, 5.5, 7.0, 8.5, 9.0, 9.5, 10.0, 10.5, 11.5, 12.0]
18
      evalTV1("Transmittiert", r)
19
20
      # transmittiert
21
22
      r = [5.0, 6.0, 7.0, 8.0, 8.5, 9.0, 9.5, 10.0, 10.5, 11.0]
23
      evalTV1("Reflektiert", r)
24
25
def evalTV1(name, r):
      n = np.arange(1, len(r) + 1)
27
      r2 = []
28
      for ri in r:
29
          r2.append(ri * ri)
31
      coefs = np.polyfit(n, r2, 1)
      # deltaCoefs = linRegUncertainty(n, r2, coefs)
      deltaCoefs = [0.1, 0.1]
      varM = Var(coefs[0], deltaCoefs[0], "m")
37
      varT = Var(coefs[1], deltaCoefs[1], "t")
38
      params = [varM]
39
40
      cR = Const(12.141e3)
41
      cL = Const(635e-6)
42
43
      r = Div(varM, cL)
44
      1 = Div(varM, cR)
45
46
      print(f"{name}:")
47
48
      printVar(varM)
49
      printVar(varT)
50
51
      rVal = r.eval()
52
53
      rUnc = gaussian(r, params)
      printExpr("R", rVal * 1e-3, rUnc * 1e-3)
54
55
      printDiff(rVal, cR.eval(), rUnc)
56
      1Val = 1.eval()
57
      lUnc = gaussian(1, params)
58
      printExpr("lambda", lVal * 1e3, lUnc * 1e3)
  printDiff(lVal, cL.eval(), lUnc)
```

```
61
62
       print()
63
       fit = np.polyval(coefs, n)
64
65
       pp = PdfPages(f"../Abbildungen/GraphTV1_{name}.pdf")
66
67
       plt.figure()
68
       plt.clf()
69
70
       # plt.plot(d, p, "-o")
71
       plt.plot(n, r2, "o", label=f"Messwerte")
72
       plt.plot(n, fit, "-", label=f"Ausgleichsgerade")
73
74
75
       plt.title(f"Radius^2 vs. Interfernzordnung")
       plt.xlabel('Interferenzordnung')
76
77
       plt.ylabel('Radius^2 (m^2)')
       plt.legend()
78
       pp.savefig()
80
81
       pp.close()
82
83 def printExpr(name, value, unc):
       print(f"{name} = {value}")
84
       print(f" {name} = {unc}")
85
86
87 def printVar(var):
       printExpr(var.name, var.value, var.uncertainty)
88
89
90 def printDiff(val, theo, unc):
       u = abs(val - theo) / unc
91
       print(f"Abweichung vom theoretischen Wert: {u} * Unsicherheit")
92
93
94 def tv2():
       print("--- Teilversuch 2 ---")
95
96
       print("Fresnelbiprisma 1:")
97
       s = Var(385e-3, 3e-3, "s")
       bB = Var(18e-3, 1e-3, "B")
       b = Var(2180e-3, 5e-3, "b")
       f = Const(300e-3)
101
       dm = Var(30e-3, 1e-3, "delta_m")
102
       evalSpiegel(s, bB, b, f, dm, 54)
103
104
       print("Fresnelbiprisma 2:")
       s = Var(385e-3, 3e-3, "s")
106
       bB = Var(12e-3, 1e-3, "B")
107
       b = Var(2115e-3, 5e-3, "b")
108
       f = Const(300e-3)
109
       dm = Var(20e-3, 1e-3, "delta_m")
110
       evalSpiegel(s, bB, b, f, dm, 25)
112
       print("Fresnelbiprisma 3:")
       s = Var(385e-3, 3e-3, "s")
114
115
       bB = Var(9e-3, 1e-3, "B")
116
       b = Var(2115e-3, 5e-3, "b")
       f = Const(300e-3)
117
118
       dm = Var(15e-3, 1e-3, "delta_m")
119
       evalSpiegel(s, bB, b, f, dm, 13)
120
   print("Fresnelbiprisma:")
```

```
s = Var(380e-3, 3e-3, "s")
122
       bB = Var(21e-3, 1e-3, "B")
123
       b = Var(2510e-3, 5e-3, "b")
124
       f = Const(300e-3)
125
       dm = Var(25e-3, 1e-3, "delta_m")
126
       evalSpiegel(s, bB, b, f, dm, 35)
127
128
def evalSpiegel(s, bB, b, f, dm, m):
      params = [s, bB, b, f, dm]
130
131
       a = Div(Mult(bB, f), Sub(b, f))
132
       printExpr("a", a.eval() * 1e3, gaussian(a, params) * 1e3)
133
134
       delta = Div(dm, Const(m))
135
136
       lam = Div(Mult(a, delta), Add(s, b))
137
       lamUnc = gaussian(lam, params)
138
139
       lamVal = lam.eval()
140
       printExpr("lambda", lamVal * 1e6, lamUnc * 1e6)
141
       theo = 635e-9
142
143
      unc = abs(lamVal - theo) / lamUnc
144
       print("Abweichung vom theoretischen Wert: %.3f * Unsicherheit" % (unc))
145
146
       print()
147
148 tv1()
149 tv2()
```

Expressions.py:

```
1 import math
3 class Add:
      def __init__(self, child1, child2):
5
          self.child1 = child1
          self.child2 = child2
     def eval(self):
9
          return self.child1.eval() + self.child2.eval()
10
11
      def derivative(self, var):
          return Add(self.child1.derivative(var), self.child2.derivative(var))
13
14
15
     def __str__(self):
16
          return toStr(self, "+")
17
     def isEqual(self, other):
18
          if not isinstance(other, Add):
19
              return False
20
          if self.child1.isEqual(other.child1) and self.child2.isEqual(other.child2):
21
              return True
22
          if self.child1.isEqual(other.child2) and self.child2.isEqual(other.child1):
23
              return True
24
          return False
25
26
      @staticmethod
27
      def priority():
28
          return 0
29
31 class Sub:
32
      def __init__(self, child1, child2):
33
           self.child1 = child1
          self.child2 = child2
37
      def eval(self):
          return self.child1.eval() - self.child2.eval()
38
39
40
      def derivative(self, var):
41
          return Sub(self.child1.derivative(var), self.child2.derivative(var))
42
     def __str__(self):
43
          return toStr(self, "-")
44
45
     def isEqual(self, other):
46
          if not isinstance(other, Sub):
47
              return False
48
          return self.child1.isEqual(other.child1) and self.child2.isEqual(other.child2)
49
50
51
      Ostaticmethod
      def priority():
52
53
          return 0
54
55 class Mult:
56
      def __init__(self, child1, child2):
57
          self.child1 = child1
58
          self.child2 = child2
```

```
def eval(self):
61
           return self.child1.eval() * self.child2.eval()
62
63
       def derivative(self, var):
64
           return Add(Mult(self.child1, self.child2.derivative(var)), Mult(self.child1.
65
       derivative(var), self.child2))
66
       def __str__(self):
67
           return toStr(self, "*")
68
69
       def isEqual(self, other):
70
           if not isinstance(other, Mult):
71
               return False
72
           if self.child1.isEqual(other.child1) and self.child2.isEqual(other.child2):
73
74
               return True
           if self.child1.isEqual(other.child2) and self.child2.isEqual(other.child1):
75
76
               return True
           return False
77
78
       @staticmethod
       def priority():
80
           return 1
81
82
83 class Div:
84
       def __init__(self, child1, child2):
85
           self.child1 = child1
86
           self.child2 = child2
87
88
       def eval(self):
89
           c2 = self.child2.eval()
90
           if c2 == 0.0 or c2 == -0.0:
91
               return float('NaN')
92
           return self.child1.eval() / c2
93
94
       def derivative(self, var):
95
           num = Sub(Mult(self.child2, self.child1.derivative(var)), Mult(self.child2.
       derivative(var), self.child1))
           return Div(num, Pow(self.child2, 2))
       def __str__(self):
99
           return toStr(self, "/")
100
101
       def isEqual(self, other):
           if not isinstance(other, Div):
               return False
104
           return self.child1.isEqual(other.child1) and self.child2.isEqual(other.child2)
106
       @staticmethod
107
       def priority():
108
109
           return 1
111 class Pow:
112
113
       def __init__(self, child1, value):
           self.child1 = child1
114
           self.value = value
115
116
117
       def eval(self):
118
           return math.pow(self.child1.eval(), self.value)
```

```
def derivative(self, var):
120
           return Mult(Mult(Const(self.value), Pow(self.child1, self.value - 1)), self.
121
       child1.derivative(var))
       def __str__(self):
           useParens = not (isinstance(self.child1, Var) or isinstance(self.child1, Const))
           baseStr = self.child1.__str__()
           if useParens:
126
               baseStr = f"({baseStr})"
127
           return f"{baseStr} ^ {self.value}"
128
129
       def isEqual(self, other):
130
           if not isinstance(other, Pow):
131
               return False
           return self.child1.isEqual(other.child1) and self.value == other.value
133
134
135
       @staticmethod
       def priority():
136
           return 1
137
138
139 class Sin:
140
       def __init__(self, child1):
141
           self.child1 = child1
142
143
       def eval(self):
144
           return math.sin(self.child1.eval())
145
146
       def derivative(self, var):
147
           return Mult(Cos(self.child1), self.child1.derivative(var))
148
149
       def __str__(self):
           c1 = self.child1.__str__()
           return f"sin({c1})"
152
       def isEqual(self, other):
154
           if not isinstance(other, Sin):
                return False
           return self.child1.isEqual(other.child1)
159 class Cos:
       def __init__(self, child1):
161
           self.child1 = child1
162
       def eval(self):
164
           return math.cos(self.child1.eval())
166
       def derivative(self, var):
167
           return Mult(Mult(Const(-1), Sin(self.child1)), self.child1.derivative(var))
168
169
       def __str__(self):
           c1 = self.child1.__str__()
           return f"cos({c1})"
172
173
174
       def isEqual(self, other):
           if not isinstance(other, Cos):
175
176
               return False
177
           return self.child1.isEqual(other.child1)
179 class Log10:
```

```
180
       def __init__(self, child1):
181
            self.child1 = child1
182
183
       def eval(self):
184
           return math.log(self.child1.eval()) / math.log(10)
185
186
       def derivative(self, var):
187
           return Pow(Mult(self.child1, Const(math.log(10))), -1)
188
189
       def __str__(self):
190
           c1 = self.child1.__str__()
191
           return f"log_10({c1})"
192
193
194
       def isEqual(self, other):
195
          if not isinstance(other, Log10):
               return False
196
           return self.child1.isEqual(other.child1)
197
198
199 class Const:
200
       def __init__(self, value):
201
           self.value = value
202
203
       def eval(self):
204
           return self.value
205
206
       def derivative(self, var):
207
           return Const(1) if self is var else Const(0)
208
209
       def __str__(self):
210
           return f"{self.value}"
211
212
       @staticmethod
213
       def priority():
214
           return 3
215
       def isEqual(self, other):
           if not isinstance(other, Const):
                return False
           return self.value == other.value
221
222 class Var:
223
       def __init__(self, value, uncertainty, name):
224
           self.value = value
225
           self.name = name
226
           self.uncertainty = uncertainty
227
228
      def eval(self):
229
           return self.value
230
231
       def derivative(self, var):
232
           return Const(1) if self is var else Const(0)
233
234
235
       def __str__(self):
           return self.name
236
237
238
       def isEqual(self, other):
239
           return self is other
```

```
@staticmethod
241
242
        def priority():
            return 3
243
244
245 def toStr(expr, infix):
       c1Parens = expr.child1.priority() <= expr.priority()</pre>
246
       c2Parens = expr.child2.priority() <= expr.priority()</pre>
247
       c1 = expr.child1.__str__()
248
       c2 = expr.child2.__str__()
249
       if c1Parens:
250
            c1 = f''(\{c1\})''
251
       if c2Parens:
252
            c2 = f''(\{c2\})''
253
       return f"{c1} {infix} {c2}"
254
       # return f"({self.child1.__str__()} + {self.child2.__str__()})"
255
256
257 def simplify(expr):
       match expr:
258
            case Add() | Sub() | Mult() | Div():
259
                expr.child1 = simplify(expr.child1)
260
                expr.child2 = simplify(expr.child2)
261
                if isinstance(expr.child1, Const) and isinstance(expr.child2, Const):
262
                     return Const(expr.eval())
263
            case Pow() | Sin() | Cos() | Log10():
264
                expr.child1 = simplify(expr.child1)
265
                if isinstance(expr.child1, Const):
266
                     return Const(expr.eval())
267
268
       match expr:
269
            case Add():
270
                if isinstance(expr.child1, Const):
271
                     if expr.child1.value == 0:
272
                         \begin{array}{ccc} \textbf{return} & \texttt{expr.child2} \end{array}
273
                if isinstance(expr.child2, Const):
274
                     if expr.child2.value == 0:
                         return expr.child1
                     if expr.child2.value < 0:</pre>
                          return Sub(expr.child1, Const(-expr.child2.value))
                 if expr.child1.isEqual(expr.child2):
                     return Mult(Const(2), expr.child1)
                if isinstance(expr.child1, Const):
                     if expr.child1.value == 0:
283
                          return Mult(Const(-1), expr.child2)
284
                 if isinstance(expr.child2, Const):
285
                     if expr.child2.value == 0:
286
                          return expr.child1
287
                     if expr.child2.value < 0:</pre>
288
                         return Add(expr.child1, Const(-expr.child2.value))
289
                 if expr.child1.isEqual(expr.child2):
290
                     return Const(0)
291
292
            case Mult():
293
                if isinstance(expr.child1, Const):
                     if expr.child1.value == 0:
294
295
                         return Const(0)
296
                     if expr.child1.value == 1:
297
                         return expr.child2
                if isinstance(expr.child2, Const):
299
                     if expr.child2.value == 0:
300
                          return Const(0)
                     if expr.child2.value == 1:
```

```
return expr.child1
302
                if expr.child1.isEqual(expr.child2):
303
                    return Pow(expr.child1, 2)
304
           case Div():
305
               if isinstance(expr.child1, Const):
306
                    if expr.child1.value == 0:
307
                        return Const(0)
308
                    if expr.child1.value == 1:
309
                        return Pow(expr.child2, -1)
310
                if isinstance(expr.child2, Const):
311
                    if expr.child2.value == 1:
312
                        return expr.child1
313
                if expr.child1.isEqual(expr.child2):
314
315
                    return Const(1)
316
           case Pow():
317
               if expr.value == 0:
318
                    return Const(1)
                if expr.value == 1:
319
                    return expr.child1
320
321
       return expr
322
323 # Calculate the gaussian uncertainty of expr
324 def gaussian(expr, params):
       total = 0
325
       for param in params:
           if type(param) == Const:
327
                continue
328
           der = simplify(expr.derivative(param))
329
           derVal = der.eval()
330
           delta = derVal * param.uncertainty
331
           total += delta ** 2
332
       return total ** 0.5
333
334
335 # Calculate the uncertainty of expr using the min-max method
336 def minMax(expr, params):
       minVal = expr.eval()
337
       maxVal = expr.eval()
338
       incDec = [False] * len(params)
       originalValues = []
       for param in params:
           originalValues.append(param.value)
       for j in range(2 ** len(params)):
343
           for i in range(len(incDec)):
                incDec[i] = not incDec[i]
345
                if incDec[i]:
346
                    break
347
           for i in range(len(params)):
348
                sign = 1 if incDec[i] else -1
349
                params[i].value = originalValues[i] + sign * params[i].uncertainty
350
           newVal = expr.eval()
351
           minVal = min(minVal, newVal)
352
353
           maxVal = max(maxVal, newVal)
354
       for i in range(len(params)):
355
           params[i].value = originalValues[i]
    return (maxVal - minVal) / 2
```

\cap						
O	u	U	μ	u	U	•

1 -- Output --