



Fortgeschrittenen Praktikum II:

Der Mößbauer-Effekt

Jessica Schäper
Moritz Bültmann

Durchgeführt von 22.02.2016 bis 4.3.2016

Inhaltsverzeichnis

1 Abstract	1
2 Aufgabenstellung	2
3 Theoretische Grundlagen	3
3.1 Wechselwirkung der Photonen mit Materie	3
3.2 Zerfalsschema von Cobalt	3
3.3 Lebensdauer und Linienbreite	4
3.3.1 Dopplerverbreiterung	4
3.4 Resonanzabsorption	4
3.5 Der Mößbauer-Effekt	6
3.6 Gittermodelle	6
3.6.1 Einstein-Modell	6
3.6.2 Debye-Modell	7
3.7 Isomerie-Verschiebung	9
3.8 Hyperfein-Aufspaltung	9
3.9 Verwendete Geräte	10
3.9.1 Szintillator	10
3.9.2 Photomultiplier	11
4 Aufbau	12
4.1 Mößbauer-Spektrum	12
4.2 Geschwindigkeitsmessung	13
5 Durchführung	14
5.1 Eichspektrum	14
5.2 Compton-Untergrund	14
5.3 Einlinienabsorber (Edelstahl)	14
5.4 Sechslinienabsorber (Natureisen)	14
5.5 Plexiglas	15
5.6 Geschwindigkeitsmessung	15
6 Auswertung	16
6.1 Energiedurchdringung und Identifizierung des 14.4keV Peaks	16
6.2 Comptonuntergrund	20
6.3 Abschwächung des Plexiglasfensters	21
6.4 1-Linien-Absorber: Edelstahl	23
6.4.1 Linienbreite und Halbwertszeit	25
6.4.2 Isomerieverschiebung	25
6.4.3 Alternative Berechnung der Linienbreite	26
6.4.4 Debye-Waller-Faktor der Quelle	27
6.5 6-Linien-Absorber: natürliches Eisen	27
6.5.1 Aufspaltungsenergien und Isomerieverschiebung	28
6.5.2 Magnetisches Moment der Kerne	29
6.5.3 Magnetfeld am Kernort	30
6.5.4 Linienbreite, Halbwertszeit und Lebensdauer	31
6.5.5 Debye-Waller-Faktoren	32

6.6 Geschwindigkeitsmessung des Absorbers	33
7 Zusammenfassung und Diskussion	38
7.1 Energieeichung	38
7.2 Comptonuntergrund	38
7.3 Plexiglas	38
7.4 Edelstahl	39
7.5 Natürliches Eisen	40
7.6 Geschwindigkeitsmessung	41
8 Anhang	43
8.1 Grafiken	43
8.1.1 Oszilloskop-Signale	43
8.1.2 K_α -Linien	44
8.1.3 Nahaufnahmen des 6-Linien-Mößbauer-Spektrums	45
8.1.4 Geschwindigkeitsmessung	46
8.2 Laborheft	52
8.3 Quelltext (R)	55

1 Abstract

Die 1958 von Rudolf Mößbauer entdeckte Rückstoßfreie Resonanzabsorption in Festkörpern ist die Grundlage vieler Anwendungen in der Spektroskopie. Aufgrund der enormen bei der Mößbauerspektroskopie erreichten Genauigkeit kann sogar die Energieverschiebung von Photonen im Schwerefeld der Erde (ca. $\Delta E/E \approx 10^{-16}$ pro Meter) gemessen werden, was als Nachweis für die allgemeine Relativitätstheorie dient. Auch sind sogenannte "MIMOS" (winzige Mößbauer-Spektrometer) zur Analyse von Marssstein bei Marssonden im Einsatz.

In diesem Versuch soll mit Hilfe des Mößbauer-Effekts die äußerst schmale Linie des 14.4keV-Übergangs in Eisen-57 jeweils mit dem 1-Linien-Absorber Edelstahl und dem 6-Linien-Absorber Natureisen aufgenommen und deren Lebensdauer bestimmt werden. Dazu wird der Absorber auf einem beweglichen Schlitten, welcher mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten im mm/s-Bereich bewegt werden kann, von einer Quelle bestrahlt, in der durch den Zerfall von Cobalt-57 zu angeregtem Eisen-57 beim Übergang des Eisens in den Grundzustand Photonen der Energie 14.4keV ausgesendet werden. Hinter dem Absorber wird mit Hilfe eines Szintillators die Zählrate in Abhängigkeit der Absorbergeschwindigkeit aufgenommen. Das entstehende Spektrum weist den typischen Mößbauer-Peak auf, aus dessen Breite und Verschiebung zur theoretischen Resonanzfrequenz $v_{res} = 0$ die Lebensdauer des angeregten Zustands und die Isomerie-Verschiebung bestimmt werden. Für Natureisen kann außerdem aus der Hyperfein-Aufspaltung das magnetische Feld am Kernort bestimmt werden.

Für den 1-Linien-Absorber Edelstahl wurden folgende Werte gefunden:

Identifizierung des Übergangs: $E_{14.4\text{keV}} = (14.5 \pm 1.3)$ keV

Compton-Untergrund: $A = (41.9 \pm 0.3)$ s⁻¹

Linienbreite: $\Gamma = (7.3 \pm 0.3) \cdot 10^{-9}$ eV

Halbwertszeit: $T_{1/2} = (63 \pm 3)$ ns

Isomerieverschiebung: $E_{iso} = (-8.4 \pm 0.4) \cdot 10^{-9}$ eV

eff. Absorberdicke: $T_A = 6.4 \pm 0.6$

alt. Berechnung d. Linienbreite: $\Gamma_{alt} = (3.9 \pm 0.2) \cdot 10^{-9}$ eV

alt. Halbwertszeit: $T_{1/2,alt} = (117 \pm 6)$ ns

Debye-Waller-Faktor d. Quelle: $f_Q = 0.50 \pm 0.06$

Die Isomerieverschiebung des 6-Linien-Absorbers (natürliches Eisen) ist:

Isomerieverschiebung: $E_{iso} = (-4.9 \pm 0.5) \cdot 10^{-9}$ eV

Die Fülle der erhaltenen Werte würde den Rahmen des Abstracts sprengen, sodass auf die restlichen Werte verwiesen wird:

magnetisches Moment: 6.5.2

Magnetfeld am Kernort: 6.5.3

Linienbreiten: 6.5.4

Debye-Waller-Faktoren: 6.5.4

Zusätzlich wird mit Hilfe eines Lasers eine ausführliche Geschwindigkeitsmessung am Schlitten durchgeführt und diese mit verschiedene Analysemethoden (Betrachtung der Residuen, Fouriertransformation) ausgewertet um zu überprüfen ob dieser gleichmäßig fährt und die an der Steuerung eingestellte Geschwindigkeit mit der tatsächlichen übereinstimmt. Dabei fiel auf, dass die gefahrenen Geschwindigkeiten systematisch zu hoch sind und vor allem bei hohen Geschwindigkeiten regelmäßige Schwankungen auftreten.

2 Aufgabenstellung

1. Dokumentierung der Signalwege und des Timings.
2. Aufnahme der K_{α} -Linie verschiedener Metalle zur Energieeichung.
3. Untersuchung der 14,4keV-Linienbreite von Eisen hinsichtlich der Zerfallsbreite.
4. Aufnahme des Untergrunds durch schrittweise Abschirmung der Quelle durch Aluminium-Platten.
5. Aufnahme der Spektren von Einlinienabsorber (Edelstahl) und Sechslinienabsorber (Natureisen) mit Rücksicht auf die statistischen Fehler.
6. Überprüfung der Geschwindigkeitseinstellungen des Absorbers.

3 Theoretische Grundlagen

3.1 Wechselwirkung der Photonen mit Materie

Durchdringt ein Photonenstrahl Materie, so gilt für seine Intensität:

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu x}$$

Die Anfangsintensität I_0 nimmt also exponentiell in Abhängigkeit des von Photonenergie und Material abhängigen Absorptionskoeffizienten μ mit der Dicke x des Materials ab.

Die Abnahme der Intensität ist hauptsächlich auf den Photoeffekt, den Compton-Effekt und die Paarbildung zurückzuführen:

$$\mu_{tot} = \mu_{photo} + \mu_{paar} + \mu_{compton}$$

- **Photoeffekt:** Wird ein Photon von einem Elektron der Atomhülle absorbiert, so kann dieses in einen höher energetischen Zustand der Hülle gehoben werden (innerer Photoeffekt) oder bei ausreichender Energie des Photons sogar komplett aus dieser herausgelöst werden (äußerer Photoeffekt). Die Lücke in der Hülle wird meist von einem Elektron der äußeren Schalen wieder gefüllt.
 - **Comptoneffekt:** Trifft ein Photon auf ein Elektron, so kann es an diesem gestreut werden und dabei einen Teil seiner Energie abgeben.
 - **Paarbildung:** Ab einer Photonenenergie von mehr als der doppelten Ruhemasse des Elektrons (511eV) kann das Photon im elektrischen Feld des Kerns ein Elektron-Positron-Paar erzeugen. Ein Rückstoßpartner (Kern) wird wegen der Energie-Impuls-Relation benötigt und nimmt die Rückstoßenergie auf. Das entstandene Paar annihielt nach kurzer Zeit wieder.

3.2 Zerfalsschema von Cobalt

Das in diesem Versuch verwendete Cobalt ^{57}Co zerfällt mit einer Halbwertszeit von 270 Tagen zu 99.8% über Elektroneneinfang (EC) zu angeregtem Eisen $^{57}\text{Fe}^*$.

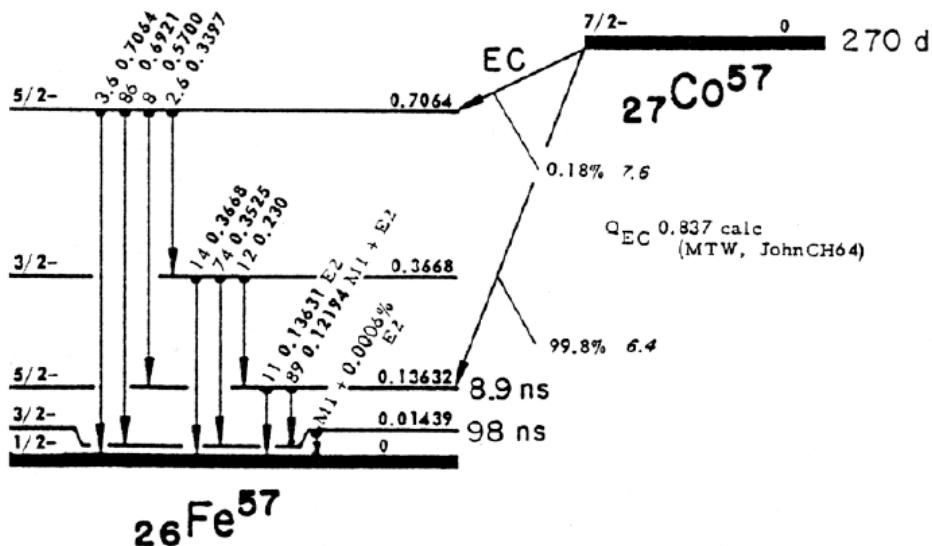
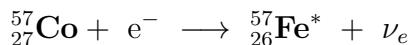


Abbildung 1: Zerfallsschema von ^{57}Co [Anlt]

Der angeregte Zustand von $^{57}\text{Fe}^*$ geht unter anderem über einen 14.4 keV Zustand mit einer Halbwertszeit von 98 ns in den Grundzustand über.

3.3 Lebensdauer und Linienbreite

Die mittlere Lebensdauer eines Zustands gibt den Erwartungswert der Zeit an, die dieser Zustand existiert.

$$\tau := \langle t \rangle = \int_0^\infty t \lambda e^{-\lambda t} dt = \frac{1}{\lambda}$$

Die natürliche Linienbreite ist eine Eigenschaft, die aus der Heisenbergschen Unschärferelation der wirkungskonjugierten Größen Energie und Zeit herrührt.

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Es folgt für die natürliche Zerfallsbreite, welche ein Breit-Wigner-Profil aufweist:

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$$

Für den 14.4keV-Übergang von ^{57}Fe liegt die Lebensdauer bei $\tau = 1.4 \cdot 10^{-7}\text{s}$ und die natürliche Linienbreite damit bei $\Gamma = 4.7 \cdot 10^{-9}\text{ eV}$. Die relative Breite des Peaks beträgt somit $\frac{\Gamma}{E_\gamma} = 3 \cdot 10^{-13}$, es liegt also eine sehr scharfe Linie vor.

3.3.1 Dopplerverbreiterung

Die thermische Bewegung der Kerne sorgt für eine Dopplerverschiebung in alle Richtungen und somit für eine Verbreiterung der natürlichen Linienbreite um:

$$\Gamma_{Dop} = 2\sqrt{\ln 2} \cdot E_\gamma \cdot \sqrt{\frac{2kT}{Mc^2}}$$

Ihr liegt ein Gauß-Profil zugrunde.

3.4 Resonanzabsorption

Sendet ein Kern beim Übergang von einem angeregten Zustand E_a in den Grundzustand E_g ein Photon aus, welches auf einen anderen Kern trifft und bei diesem den gleichen Übergang anregt, so spricht man von Resonanzabsorption.

Wird von einem freien, ruhenden Kern ein Photon ausgesendet so muss dem Kern aufgrund der Impulserhaltung der gleiche Impuls $p_K = -p_\gamma$ übertragen werden wie das Photon davonträgt. Mit der Photonenenergie $E_\gamma = p_\gamma c$ und der Kernmasse M erhält man für die Rückstoßenergie:

$$E_R = \frac{p^2}{2M} = \frac{p_\gamma^2}{2M} = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2}$$

Da Energieerhaltung gelten muss, wird also nicht die gesamte Übergangsenergie E_0 auf das Photon übertragen:

$$E'_\gamma = E_0 - E_R$$

Genauso muss beim Auftreffen eines Photons auf einen Kern wieder Energie für den Stoß aufgebracht werden. Das Photon verliert demnach abermals den Energiebetrag E_R :

$$E_\gamma = E_0 - 2E_R$$

Die Rückstoßenergie (und somit die Verschiebung der Photonenenergie) liegt im Bereich von 10^{-3}eV also weit über der natürlichen Linienbreite des Kern-Übergangs. Bei freien Atomen sollte es demnach nicht zur Resonanzabsorption kommen, da sich die Photonenenergie so weit verschiebt, dass sie nichtmehr im Bereich der natürlichen Linienbreite des Übergangs liegt.

Bei Raumtemperatur liegt jedoch die Dopplerverbreiterung im Bereich der Rückstoßenergie. Damit überlappen das Emissions- und das Absorptionspektrum wieder und es kann auch bei freien Atomen zur Resonanzabsorption kommen.

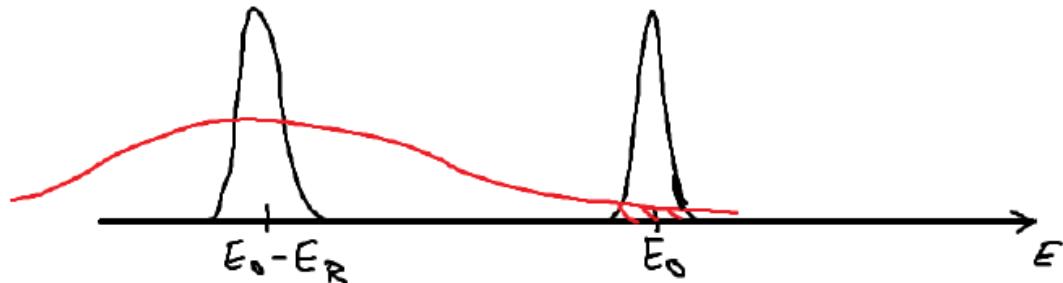


Abbildung 2: Dopplerverbreiterung der Emissionsenergie führt zu Überlapp mit Absorptionspeak und damit zu Resonanzabsorption bei Raumtemperatur [Jak15]

Bei tieferen Temperaturen nimmt die Dopplerverbreiterung und somit die Resonanzabsorption ab. Mit einer gerichteten Bewegung kann jedoch die Energieverschiebung $E_0 - E_R$ ausgeglichen werden. Bei einer Quellengeschwindigkeit v_Q ergibt sich für die gesamte Energieverschiebung¹:

$$\Delta E = 2E_R - E_{dop} = \frac{E_\gamma^2}{Mc^2} - E_\gamma \frac{v_Q}{c}$$

Durch variieren der Geschwindigkeit der Quelle kann die Energie der ausgesendeten Photonen gezielt verändert werden.

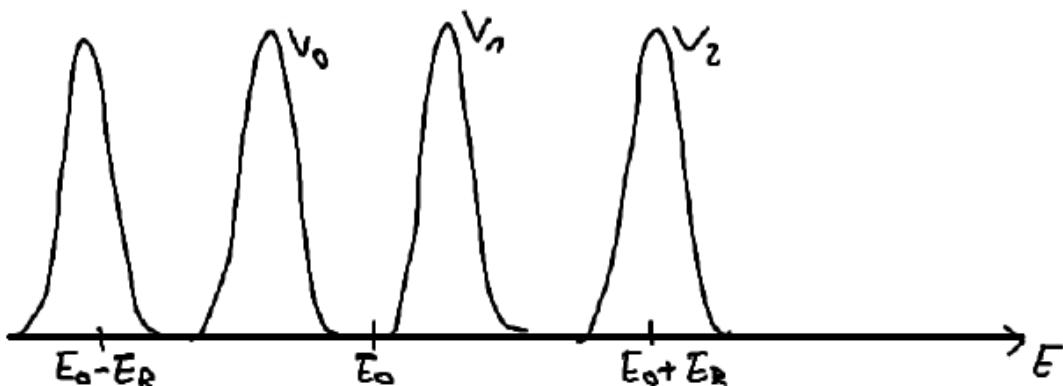


Abbildung 3: Die Energie der Photonen kann durch Geschwindigkeitsvariation der Quelle verändert werden [Jak15]

¹Herleitung siehe [Jak15]

3.5 Der Mößbauer-Effekt

Wird der Kern in ein Kristallgitter eingebaut, so fängt der gesamte Kristall den Rückstoß des Photons auf. Da die Masse des Kristalls viel größer ist als die eines einzelnen Atoms, ist die dabei auf das Gitter übertragene Energie äußerst gering. Beispielsweise verliert das Photon beim Rückstoß auf ein Mol Eisen Energie in der Größenordnung 10^{-27} eV. Der Verlust ist viel kleiner als die natürliche Linienbreite und reicht nicht aus um die Photonenenergie aus dem Bereich der natürlichen Linienbreite heraus zu verschieben. Trifft das Photon auf einen Absorber der gleichen Stoffsorte, ist auch hier der Rückstoß vernachlässigbar klein und der Übergang kann dort angeregt werden.

Genauso wie bei freien Atomen kann hier ebenfalls die Photonen-Energie durch gerichtete Bewegung verschoben werden. Misst man nun die Transmissionsrate hinter dem Absorber, so wird diese einen Einbruch bei einer relativen Resonanzgeschwindigkeit v_{res} aufweisen. Aufgrund der Rückstoßfreien Emission und Absorbtion liegt diese theoretisch bei $v_0 = 0$ (in der Praxis liegt sie nicht genau bei Null, siehe Abschnitt 3.7 Isomerie-Verschiebung).

Diesen Effekt bezeichnet man als Mößbauer-Effekt.

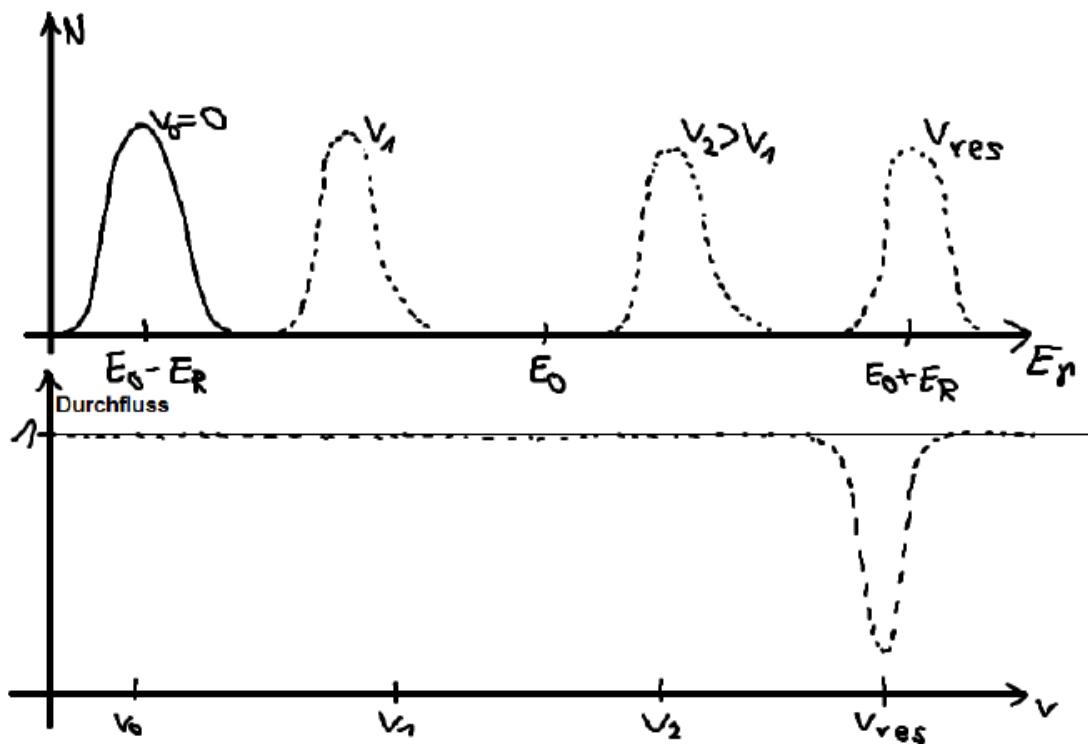


Abbildung 4: oben: Durch Bewegung der Quelle kann die Photonenenergie von $E_0 - ER$ auf $E_0 + ER$ verschoben werden, was genau der Energie entspricht, die beim Absorber benötigt wird (trotz Rückstoßenergie) den Übergang anzuregen. unten: Die hinter dem Absorber gemessene Transmission hat bei der Resonanzgeschwindigkeit v_{res} ein Minimum. Bei Rückstoßfreier Emission/Absorbtion in Festkörpern sollte diese Geschwindigkeit bei $v_{res} = 0$ liegen, da ER vernachlässigbar ist [Jak15]

3.6 Gittermodelle

3.6.1 Einstein-Modell

Im Einstein-Modell wird angenommen, dass ein Festkörper aus unabhängigen harmonischen Oszillatoren besteht, welche alle die gleiche Frequenz ω_E besitzen. Durch Energieübertrag (beispielsweise durch Rückstoß) können Gitterschwingungen (Phononen) der Energie $\hbar\omega_E$ angeregt werden. In den meisten Fällen ist die Rückstoßenergie bei einem γ -Übergang des Kerns jedoch kleiner als die für

ein Phonon benötigte Energie. Für ^{57}Fe gilt beispielsweise $E_R \approx 0.2 \cdot 10^{-2}\text{eV}$ und $\hbar\omega_E \approx 10^{-2}\text{eV}$. Da das Gitter keine Energien zwischen $n \cdot \hbar\omega_E$ und $(n + 1) \cdot \hbar\omega_E$ annehmen kann, kann nur die Wahrscheinlichkeit dafür angegeben werden, dass ein Phonon angeregt und somit die Energie $\hbar\omega_E$ übertragen wird. Bei ^{57}Fe sind statistisch vier von fünf Emissionen rückstoßfrei.²

Für den Bruchteil der rückstoßfreien Emission/Absorbtion gilt also nach dem Einstein-Modell:

$$f_E = 1 - \frac{E_R}{\hbar\omega}$$

Nach diesem Modell sollte demnach im Spektrum ein Peak bei der Übergangsenergie und einer um $\hbar\omega$ verschobener Peak zu sehen sein.

In der Realität liegt in Festkörpern jedoch ein kompliziertes Schwingungsspektrum vor und auch die Phononen weisen eine natürliche Linienbreite auf. Das Einstein-Modell erweist sich bei hohen Temperaturen als gute Näherung, versagt jedoch bei tiefen.

3.6.2 Debye-Modell

Das Debye-Modell geht von einer (nur durch \hbar begrenzten) kontinuierlichen Frequenzverteilung gemäß der Dispersionsrelation $\omega(\vec{k}) = v \cdot \vec{k}$ (mit Wellenvektor \vec{k} und Ausbreitungsgeschwindigkeit v der Gitterschwingungen) und somit einem kontinuierlichen Energiespektrum aus. Die 1.Brioullin-Zone des Gitters wird durch eine Kugel mit dem Debye-Wellenvektor k_D als Radius ersetzt woraus sich die Debye-Frequenz

$$\omega_D = v \cdot k_D$$

als Grenzfrequenz und die Debye-Temperatur

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k}$$

ergeben. Die Debye-Temperatur gibt an bei welcher Temperatur alle Schwingungsmoden angeregt sind.

²Es sollte hier angemerkt werden dass lediglich der Energieübertrag nur jedes fünfte Mal stattfindet. Der Impuls wird jedesmal an das gesamte Gitter abgegeben.

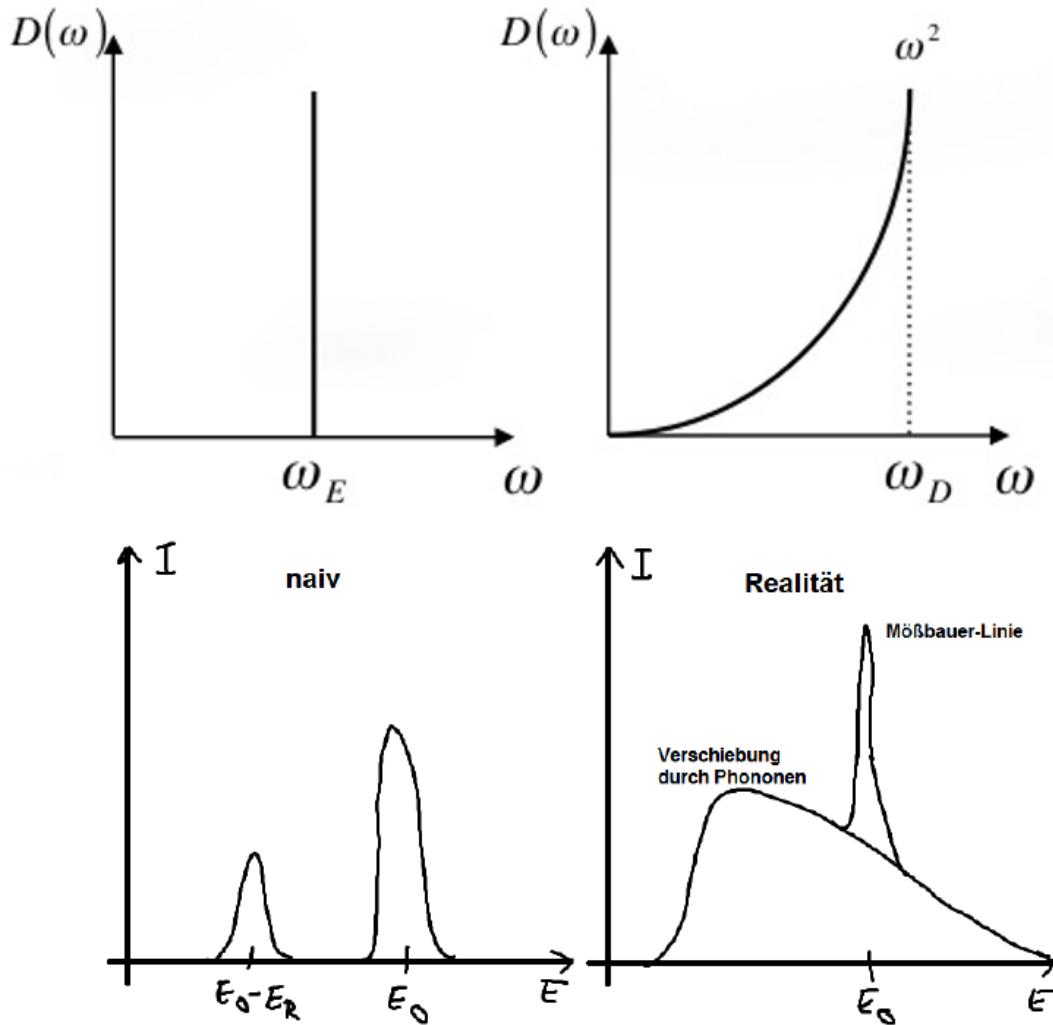


Abbildung 5: oben: Vergleich Frequenzverteilung bei Einstein (links) und Debye (rechts) unten: Energieverteilung im Festkörper beim Einstein-Modell (links) und in der Realität (durch Debye gut beschrieben, rechts)[Jak15]

Auf Grundlage des Debye-Modells kann der Bruchteil der rückstoßfreien Emissionen besser bestimmt werden als beim Einstein-Modell. Es ergibt sich der **Debye-Waller-Faktor**:

$$f = \exp \left[-\frac{3E_R}{2k\theta_D} \left(1 + \left(\frac{2T^2}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} \frac{xdx}{e^x - 1} \right) \right) \right]$$

Bei Temperaturen die weit unter der Debye-Temperatur liegen ($T \ll \theta_D$) und Kerne in arteigenen kubischen Gittern kann der Debye-Faktor genähert werden:

$$f \approx \exp \left[-\frac{E_R}{k\theta_D} \left(\frac{3}{2} + \left(\frac{\pi T}{\theta_D} \right)^2 \right) \right]$$

Für ^{57}Fe ergibt sich bei Raumtemperatur ein Debye-Waller-Faktor von $f = 0.8$, es wird also im Mittel nur bei jeder fünften Emission ein Phonon angeregt, der Rest ist rückstoßfrei.

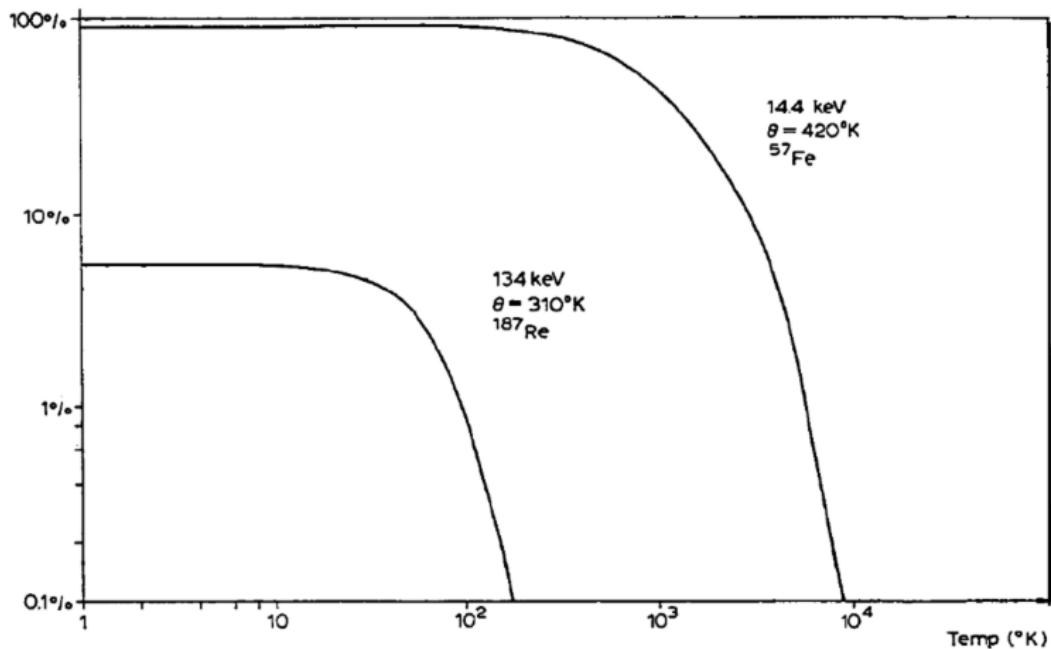


Abbildung 6: Debye-Waller-Faktor für Eisen und Rhenium: *Man erkennt deutlich dass der Debye-Waller-Faktor für ⁵⁷Fe bis über Raumtemperatur hinaus kaum absinkt. Es eignet sich also gut dazu, den Versuch ungekühlt durchzuführen.* [May94]

3.7 Isomerie-Verschiebung

Wird ein Atom in ein Gitter eingebaut also seine chemische Umgebung verändert, so ändert sich das Coulomb-Potential des Kerns und sein effektiver Radius. Da die Energie von Kernübergängen von deren Potential abhängt, sorgt dies dafür dass sich die Übergangsenergie leicht verschiebt. Dies nennt man Isomerie-Verschiebung. Da sich die Gitterumgebung der Quelle und die des Absorbers in diesem Versuch voneinander unterscheiden, ist hier mit diesem Effekt zu rechnen.

3.8 Hyperfein-Aufspaltung

Die Wechselwirkung zwischen dem Magnetfeld der Elektronenhülle und dem magnetischen Kernspin führt zur Aufhebung der Entartung der γ -Übergänge und somit zur Hyperfeinstruktur-Aufspaltung gemäß:

$$E_{mag} = \frac{\mu_I m_I}{I} B$$

mit dem magnetischen Kernmoment μ_I , dem Kernspin I , der magnetischen Quantenzahl m_I und dem Magnetfeld B am Kernort.

Dabei spaltet der Grundzustand in zwei und der angeregte Zustand in vier Linien auf. Von den dadurch entstehenden theoretischen acht Übergängen sind zwei aufgrund der Auswahlregel $\Delta m = 0, \pm 1$ für die magnetische Quantenzahl m verboten. Im Mößbauer-Spektrum werden demnach sechs Peaks sichtbar.

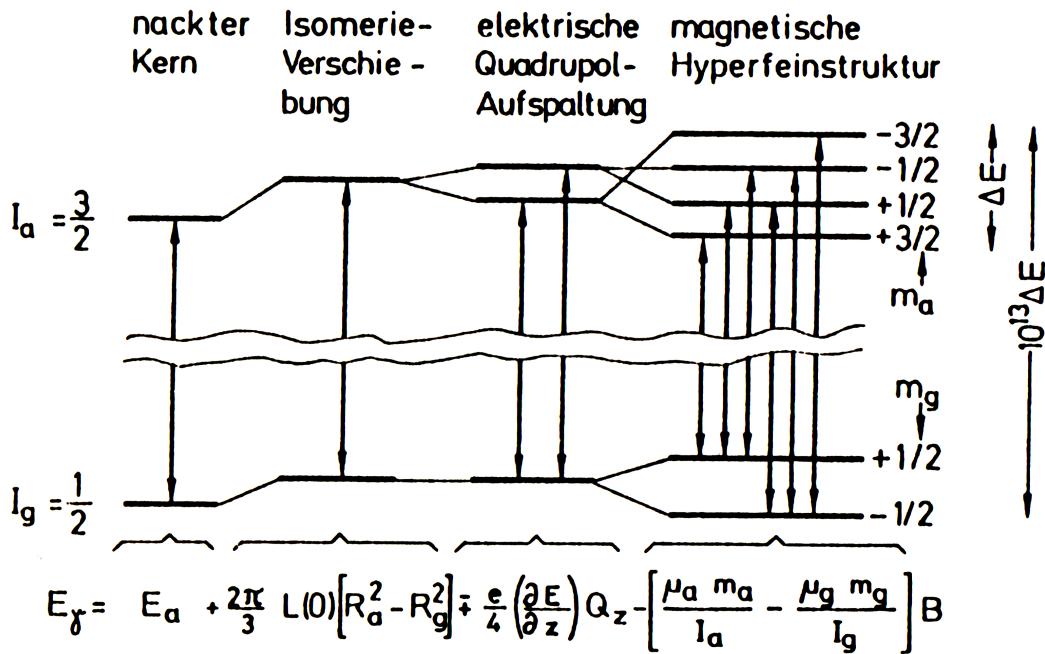


Abbildung 7: Hyperfeinaufspaltung von Eisen-57: Rechts ist die Hyperfeinaufspaltung mit ihren 6 Übergängen zu sehen. Zudem sind auch die elektrische Quadrupolaufspaltung und die Isomeriever- schiebung zu erkennen. Die Quadrupolaufspaltung wird in diesem Versuch nicht untersucht. Sie tritt bei deformierten Kernen mit nicht verschwindendem Quadrupolmoment und einer asymmetrischen Elektronenhülle, die einen Feldgradienten erzeugt, auf. Dies ist häufig in komplexen Eisenverbindungen (z.B. Borazit) zu finden. Im Spektrum wären hierbei 2 Peaks zu erkennen. [May94]

3.9 Verwendete Geräte

3.9.1 Szintillator

Bei dem hier verwendeten Natriumiodid-Szintillator liegt die Bandlückenenergie zwischen Valenz- und Leitungsband bei einigen eV, sodass thermische Elektronen nicht genug Energie besitzen um vom Valenz- in das Leitungsband zu gelangen.

Die einkommenden Photonen regen Elektronen in das Leitungsband an welche mit den Löchern im Valenzband rekombinieren. Geschieht dies an sogenannten Aktivatorzentren (Thallium-dotiert), an denen die Bandlückendifferenz geringer ist, reicht die Energie des dabei entstandenen Photons nicht aus um wieder ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen. Diese Photonen gelangen zu einem Photomultiplier. Die Anzahl der am Photomultiplier an kommenden Photonen ist dabei proportional zur Energie des ursprünglichen Photons.

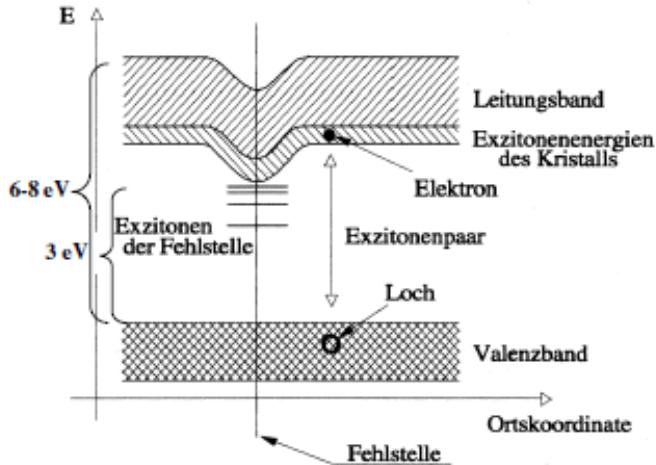


Abbildung 8: Aufbau eines Szintillators: Bandstruktur[4]

3.9.2 Photomultiplier

Um die vom Szintillationszähler emittierten Photonen in eine elektrische Signalleistung umzuwandeln wird ein Photomultiplier verwendet. Hierbei treffen die Photonen zuerst auf eine photoaktive Substanz, in der durch die Photonenergie Elektronen herausgelöst werden. Diese Elektronen werden in einem elektrischen Feld beschleunigt und treffen dann auf eine sog. Dynode. Auf der Dynode werden durch Stöße mehr Elektronen herausgelöst, da die Primärelektronen durch das E-Feld kinetische Energie erhalten haben. Durch Hintereinanderschalten mehrerer Dynoden entsteht ein Lawineneffekt, sodass man am Ende eine gut messbare Anzahl an Elektronen erhält.

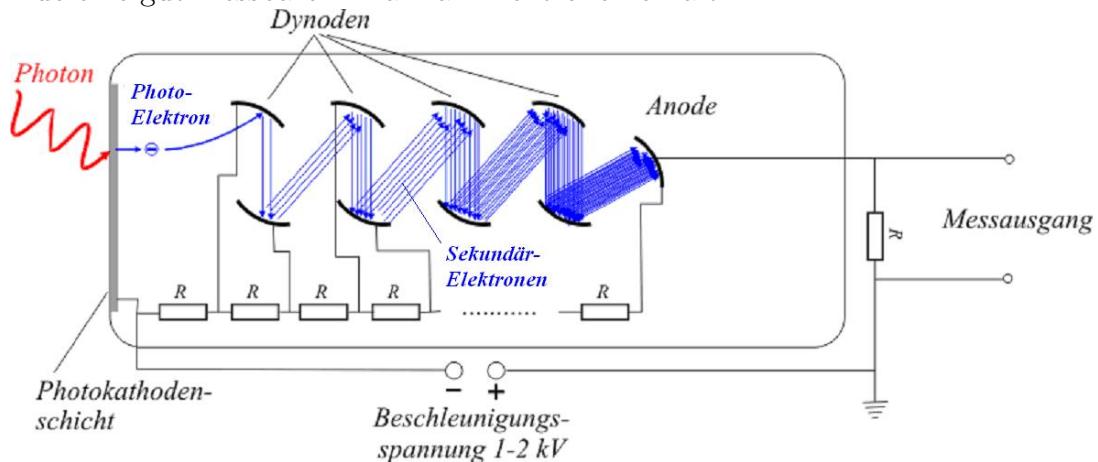


Abbildung 9: Funktionsweise eines Photomultipliers: Die einkommenden Photonen treffen auf eine Photokathodenschicht, aus der sie Elektronen herausgeschlagen. Diese werden über eine Kaskade von Dynoden beschleunigt und damit vermehrt. Bei der Anode kommen somit genügend Elektronen (Anzahl proportional zur Photonenergie) an, um einen messbaren Strompuls zu erzeugen.[1]

4 Aufbau

4.1 Mößbauer-Spektrum

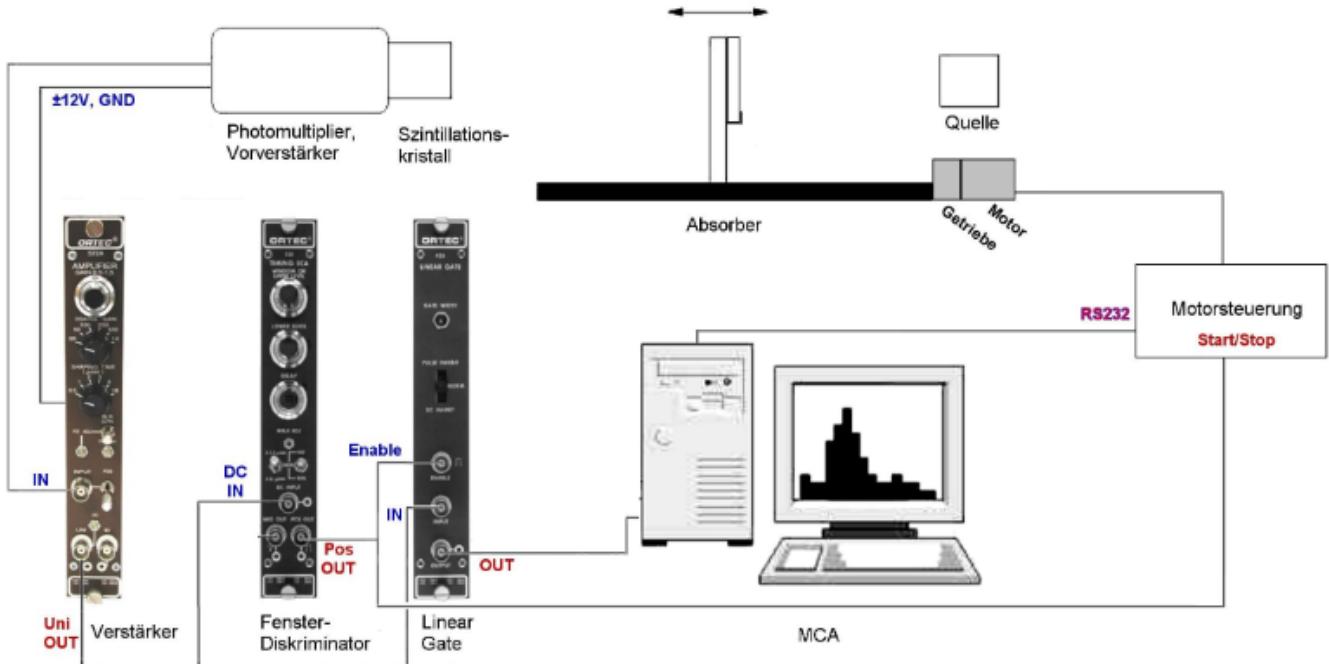


Abbildung 10: Versuchsaufbau zur Untersuchung des Mößbauereffekts: Das vom Szintillator aufgenommene und durch Photomultiplier, Vorverstärker und Verstärker verstärkte Signal wird einerseits über einen SCA, andererseits direkt über eine Delay-Einheit an ein Linear Gate und von dort aus an den MCA, welcher mit dem Computer verbunden ist, weitergeleitet.[Anlt]

Der auf einem Wagen befestigte Absorber kann mit einem Linearmotor computergesteuert (Lab-View Programm) mit Geschwindigkeiten im Bereich (0.01-10.0) mm/s bewegt werden. Dabei wird die Messung vom Programm automatisch gestartet wenn der Wagen eine konstante Geschwindigkeit erreicht hat. Hinter dem Absorber-Schlitten misst ein **Szintillator** die Transmissionsrate durch den Absorber. Das Szintillatorsignal wird von einem **Photomultiplier** in einen messbaren Strompuls umgewandelt welcher vom **Vorverstärker** mit Hilfe eines Kondensators in ein Spannungssignal umgewandelt wird. Der **Verstärker** integriert über dieses Signal und gibt ein gaußähnliches Spannungssignal aus, dessen Länge durch die 'shaping time' eingestellt werden kann.

Das vom Verstärker kommende Signal wird durch einen **Single Channel Analyzer (SCA)** geleitet, in welchem eine obere und untere Grenze für die durchzulassenden Signale eingestellt werden kann. Diese Information wird an ein **Linear Gate** weitergegeben welches ebenfalls das Signal des Verstärkers erhält und dieses nur dann durchlässt wenn dessen Energie im vom SCA vorgegebenen Bereich liegt. Zwischen dem Verstärker und dem Linear Gate befindet sich zusätzlich eine **Delay-Einheit** mit welcher mit Hilfe des Oszilloskops dafür gesorgt werden kann dass die Signale des Verstärkers und die Information des SCA gleichzeitig am Linear Gate ankommen. Von dort aus wird das Signal an einen **Multi Channel Analyzer (MCA)** weitergeleitet, welcher das Signal abhängig von dessen Energie in Channel einordnet. Das Spektrum kann mit dem Programm "Gamma Acquisition & Analysis" auf dem Computer angezeigt werden.

4.2 Geschwindigkeitsmessung

Zur Überprüfung der Geschwindigkeitseinstellungen wird ein Strahlengang mit einem Laser (grün) aufgebaut. Am beweglichen Absorber wird ein Spiegel angebracht, der den Laserstrahl reflektiert und auf einen Schirm mit Karomuster (Gitterlänge 0.5 cm) wirft. Mit einer Kamera wird der zu sehende Laserpunkt auf dem Schirm aufgezeichnet und parallel mit einem weiteren LabView-Programm ausgewertet. Hierbei fügt das Programm mehrmals pro Sekunde eine Gaußkurve an die ausgewählte Intensitätsverteilung um den Laserpunkt zu lokalisieren. Der Schirm steht im 90°-Winkel zum eintreffenden Laserstrahl.

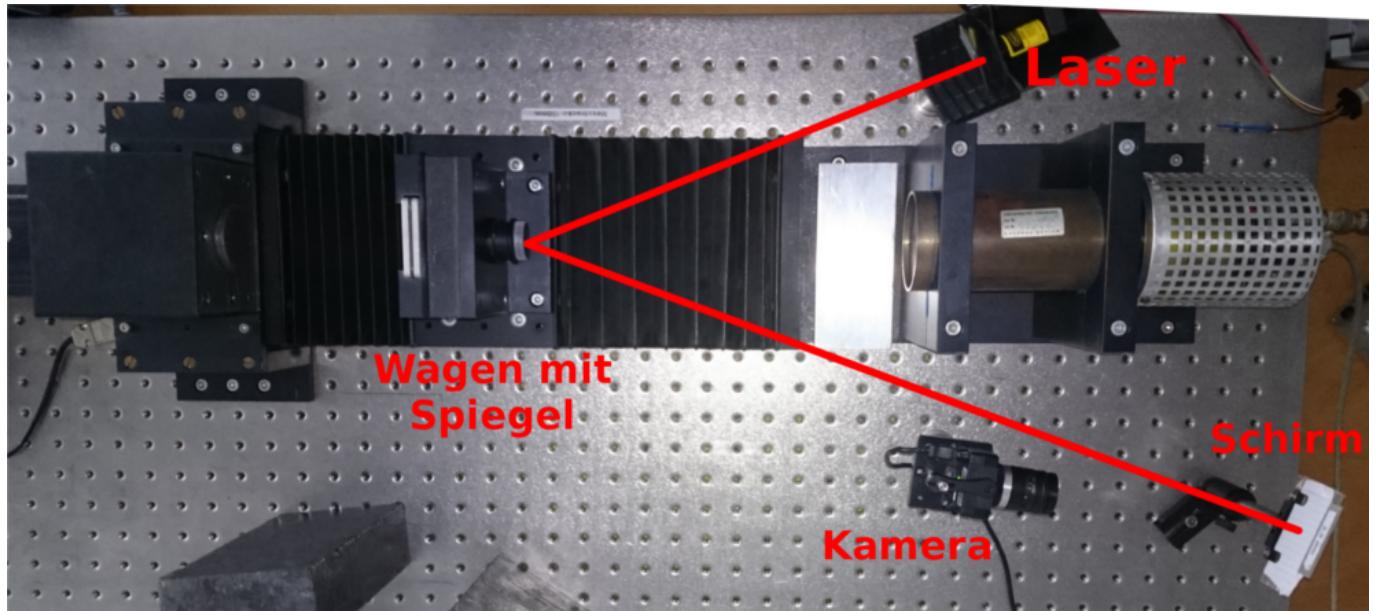


Abbildung 11: Aufbau der Geschwindigkeitsmessung mit Hilfe eines Lasers: *Der Laserstrahl ist mit rot eingezzeichnet. Kurz nach dem Laser sind Abschwächungsplatten aufgebaut, damit die Kamera nicht übersättigt ist und erfolgreiche Gaußfits gewährleistet sind.*

5 Durchführung

Nach Aufbauen der Schaltung wie in Abb.10 gezeigt, wird das Signal nach jeder Einheit auf dem Oszilloskop betrachtet und überprüft (die Oszilloskop-Bilder sind im Anhang zu finden). Außerdem wird das Delay so eingestellt dass das Signal des SCA und das des Verstärkers gleichzeitig beim Linear Gate ankommen. Der MCA wird mit 2048 Channeln betrieben.

Einstellungen an den Einheiten

<u>Amplifier:</u>	gain: 1.15	coarse gain: 50	shaping time: $2\mu s$
<u>SCA:</u>	upper level: 1.3		lower level: 0.7
<u>Delay:</u>	$3\mu s$		

5.1 Eichspektrum

Mit Hilfe einer Americium-Quelle werden verschiedene Materialien angeregt und deren Spektrum bei nicht eingeschränktem SCA-Fenster mit dem MCA aufgenommen. Dies wurde mit allen uns zur Verfügung stehenden Materialien (Terbium, Barium, Silber, Molybdän, Rubidium, Kupfer) gemacht. Die jeweiligen K_α -Linien werden zur Energieeichung des MCA benutzt. Anschließend wird das Cobald-Spektrum aufgenommen und die Grenzen des SCA auf den 14.4keV-Peak eingestellt.

Messdauer je Spektrum: 600s

5.2 Compton-Untergrund

Mit ruhendem Absorber wird für 23 verschiedene Abschirmdicken von Aluminium im Bereich von (0 – 12) mm die Transmissionsrate im 14.4keV-Bereich mit dem MCA aufgenommen. Die Zählrate der einzelnen Channel wird summiert um auf den gesamten Untergrund im gemessenen Bereich zu kommen.

Messdauer je Abschirmdicke: 600s

5.3 Einlinienabsorber (Edelstahl)

Mit dem Edelstahl-Absorber im Wagen werden verschiedene Geschwindigkeiten von $(0.01-4.00)\frac{mm}{s}$ durchgefahren. Dabei werden im Bereich des Mößbauer-Peaks (bei ca. $0.2\frac{mm}{s}$) wesentlich kleiner Schritte gewählt als im äußereren Bereich.

Die genauen Messzeiten und -punkte sind im Anhang zu finden.

5.4 Sechslinienabsorber (Natureisen)

Mit dem Natureisen-Absorber werden Geschwindigkeiten von $(0.1-7.7)\frac{mm}{s}$ durchgefahren. Im Bereich der beiden inneren Peaks (bei ca. 1 und $3\frac{mm}{s}$) werden zusätzlich einige längere Messungen genommen um den relativen Fehler zu verringern.

Auch hier befinden sich die genauen Messwerte im Anhang.

5.5 Plexiglas

Um zu überprüfen ob die Plexiglasabschirmung um die Absorber-Proben eine Auswirkung auf die Zährrate hat, wird eine Plexiglas-Platte in den Wagen gestellt und für 6 verschiedene Geschwindigkeiten die Zählrate aufgenommen. Außerdem wird die Zählrate ohne Plexiglas aufgenommen um den Abschirmungseffekt des Plexiglas zu bewerten.

5.6 Geschwindigkeitsmessung

Das vorhandene LabView-Programm wird zur Geschwindigkeitssteuerung verwendet.

Geschwindigkeiten: $\pm 5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$, $\pm 1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$, $\pm 0.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$, $\pm 0.25 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$, $\pm 0.15 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$, $\pm 0.1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$, $\pm 0.05 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$

Es werden zuerst die Seiten a und b gemessen und daraus der Winkel θ bestimmt. Zudem wurde der Winkel zur Überprüfung auch direkt mit einem Geodreick abgelesen (siehe Abb. 25).

Danach wird der Absorber mit verschiedenen Geschwindigkeiten betrieben und der Schirm mit der Kamera aufgezeichnet.

Zuletzt wird der Motor angehalten, wenn der Laser möglichst mittig auf dem Schirm zu sehen ist. Diese Messung dient zur Bestimmung der statistischen Fehler der Gaußfits.

6 Auswertung

6.1 Energiedeichung und Identifizierung des 14.4keV Peaks

Bevor man mit der Vermessung der Absorberspektren beginnen kann, muss zuerst der 14.4 keV Peak identifiziert werden. Dazu wird eine Energiedeichung durchgeführt, die es erlaubt, jedem Channel des MCA eine Energie zuzuordnen. Dafür wurden bekannte K_{α} -Linien verschiedener Stoffe mit dem MCA aufgenommen. An den bekannten Peaks wurde jeweils folgender Gaußfit durchgeführt.

$$f(x) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

Ein Fit ist hier als Beispiel eingefügt. Den Rest der gefitteten Spektren sind im Anhang 8 zu finden. Um die Parameter zu erhalten wird der Ausdruck

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{Daten}}} \left(\frac{y_i - f(x_i)}{\sigma_{y_i}} \right)^2$$

mit dem Levenberg-Marquardt-Algorithmus nach den Parametern minimiert. Dieses Verfahren kommt bei jedem unserer Fits zum Einsatz.

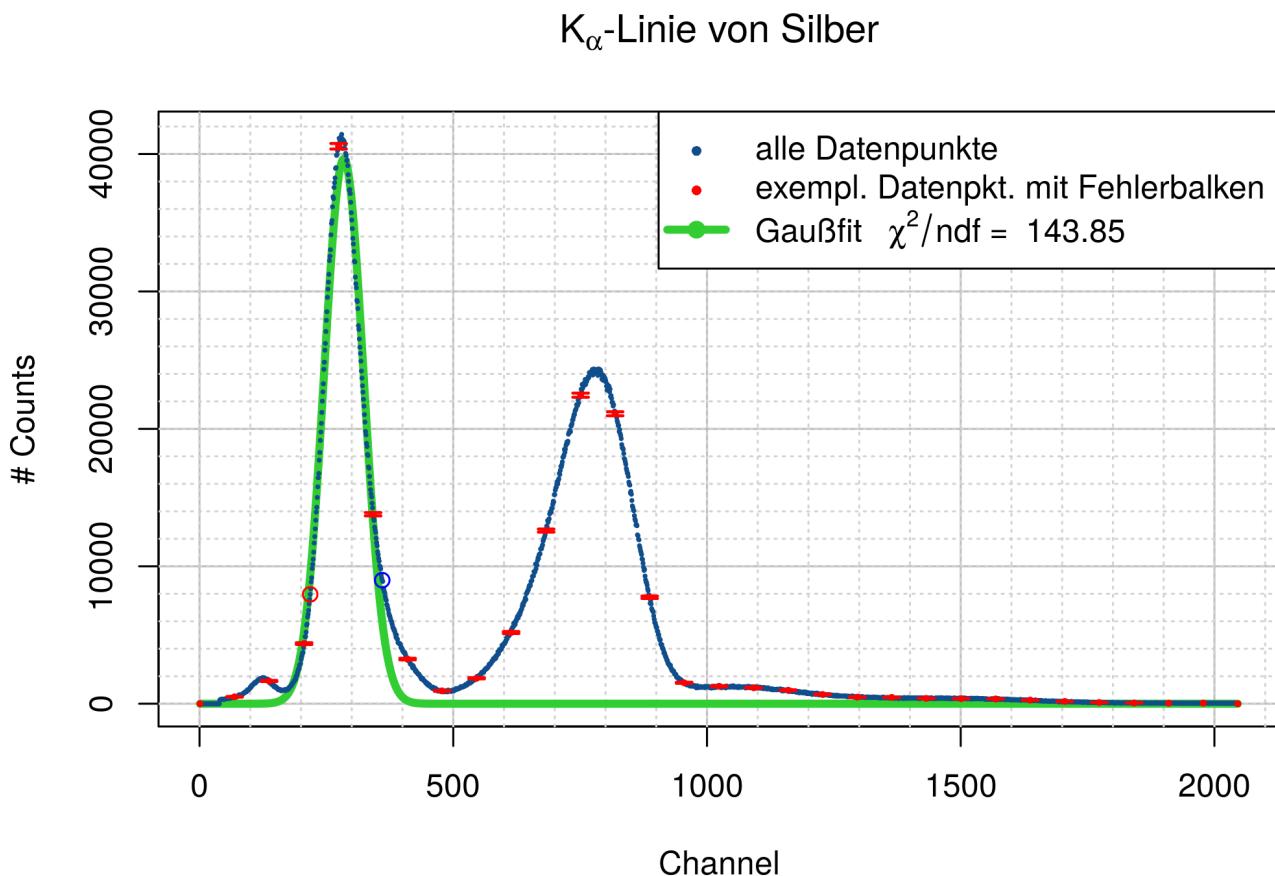


Abbildung 12: Das Röntgenspektrum von Silber mit der K_{α} -Linie: Die beiden Kreise (rot und blau) zeigen den Bereich, der zum Fitten benutzt wurde.

Man kann erkennen, dass der χ^2/ndf -Wert sehr hoch ist und folglich das Modell nicht gut die Daten beschreibt. Da der 14.4 keV Peak nur identifiziert, aber nicht genau vermessen werden muss, reicht

ein einfacher Gaußfit jedoch völlig aus. Die eingezeichneten Fehler sind

$$s_N = \sqrt{N}$$

Die Anzahl der Counts N ist eine poissonverteilte Größe, da man eine geringe Wahrscheinlichkeit eines Übergangs in einem einzelnen Atom hat, aber eine hohe Anzahl an Atomen. Außerdem ist der Erwartungswert der Counts in einem bestimmten Zeitfenster nahezu konstant.

Element	Positionen der K_α -Linien [Channel]	Literaturwerte der Energien der K_α -Linie [keV][Lan97]
Silber	284 ± 10	22.1
Barium	400 ± 12	32.06
Kupfer	347 ± 16	8.04
Molybdän	219 ± 8	17.44
Rubidium	151 ± 7	13.37
Terbium	580 ± 17	44.23

Die Positionen der K_α -Linien ergeben sich aus dem Fitparameter μ der Fits. Die Konfidenzintervalle sind als Fehlerbalken ungeeignet, da sie durch die Fülle an Daten und den stark vereinfachten Fits viel zu klein ausfallen. Deshalb wird als Fehlerabschätzung der Parameter σ herangezogen.

$$s_\mu = \frac{\sigma}{4}$$

Dies entspricht ungefähr dem Plateau der Gaußfunktion am Maximum.

Die tabellierten Daten werden nun mit einer linearen Regression gefittet, sodass man den linearen Zusammenhang zwischen Channelnummer und Energie erhält.

$$f(x) = mx + c$$

Da die genauen Fitfunktionen in R nur Fehler in y-Richtung akzeptieren (Bsp.: 'onls()' ist auch für Fehler in x-Richtung geeignet, liefert aber sehr viel ungenauere Parameter), wurden die Channel auf der y-Achse aufgetragen und die Energien auf der x-Achse.

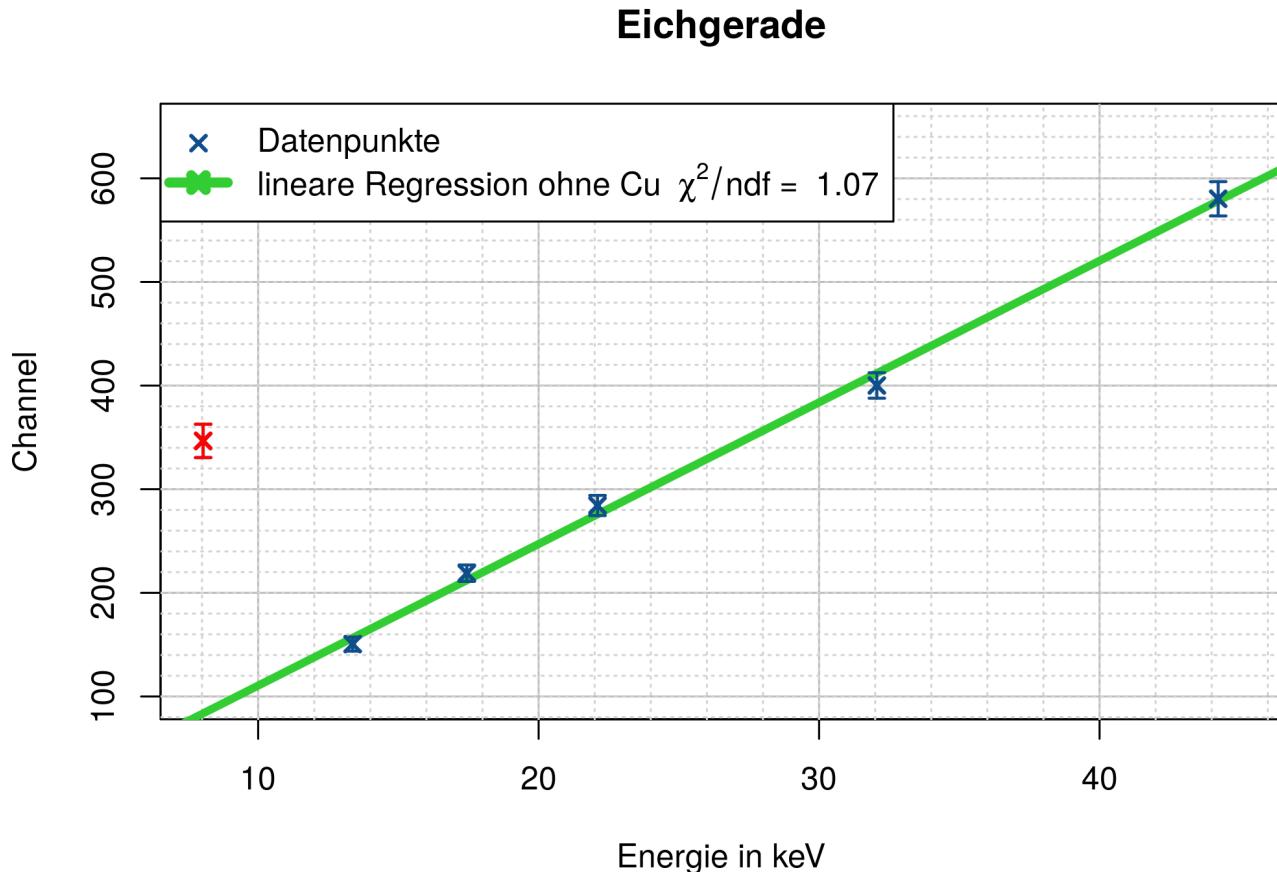


Abbildung 13: Eichgerade: Der Channelwert von Kupfer passte nicht zur der sich andeutenden Geraden und wurde, wie in [Anlt] beschrieben, weggelassen.

Um Channel in Energie umzurechnen muss die Fitfunktion invertiert werden:

$$x_{\text{Energie}} = \frac{y_{\text{Channel}} - c}{m}$$

Dabei müssen die Fehler der Parameter der linearen Regresssion mit Gaußscher Fehlerfrtpflanzung in Energiefehler umgerechnet werden.

$$s_x = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial c} s_c^2\right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial m} s_m^2\right)^2 + 2 \frac{\partial x}{\partial c} \frac{\partial x}{\partial m} \text{cov}(m, c)}$$

Die Parameter sind

$$m = (13.7 \pm 0.8) \text{ keV}^{-1}$$

$$c = -26 \pm 18$$

$$\text{cov} = \begin{pmatrix} 0.2 & -4.8 \\ -4.8 & 113.6 \end{pmatrix}$$

Das Kobaltspektrum wurde auch mit dem MCA aufgezeichnet und die Channel in Energie umgerechnet.

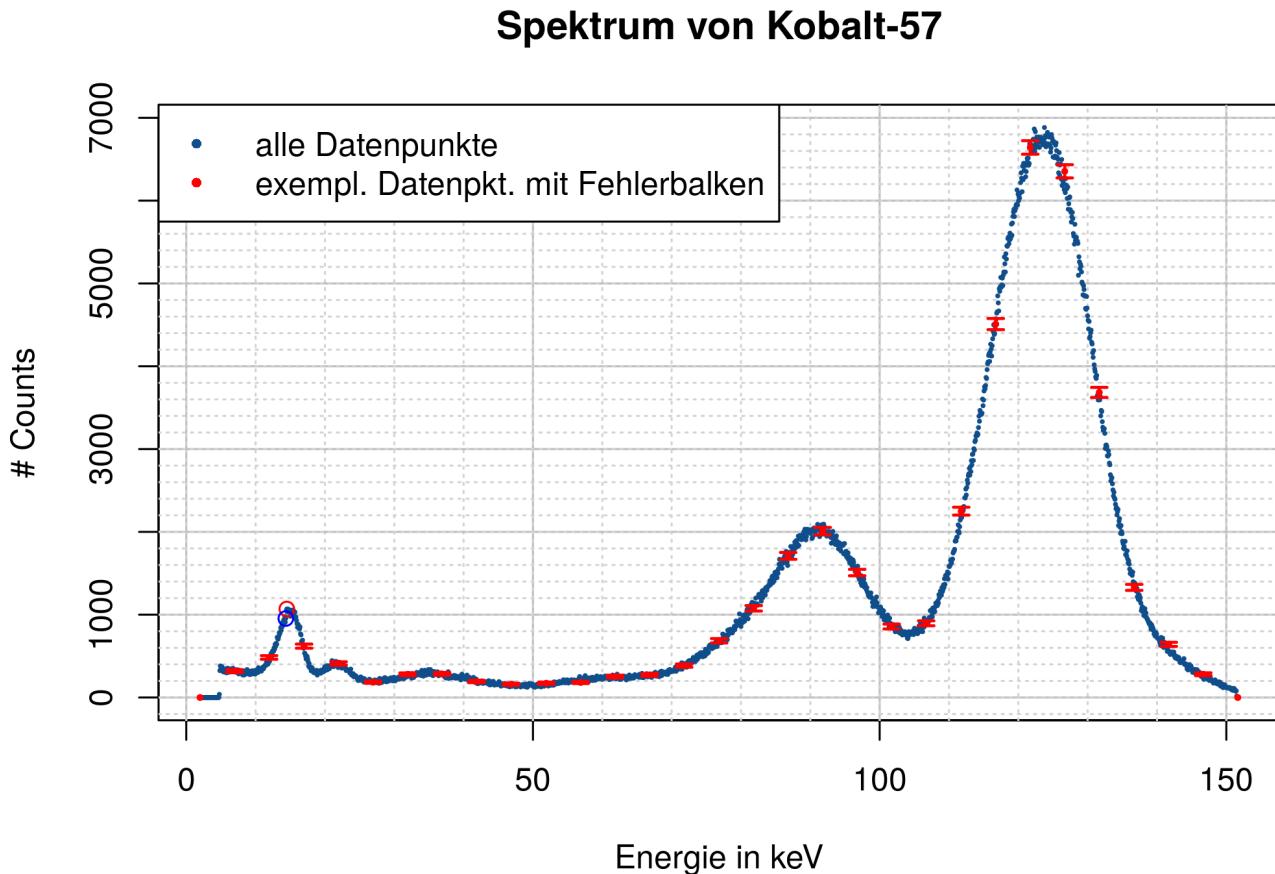


Abbildung 14: Kobaltspektrum: Der rote Kreis zeigt das Maximum im von uns gefundenen 14.4 keV Peak. Der blau Kreis zeigt, wo bei dieser Eichung 14.4 keV liegen. Die Channel unterliegen wieder einer Poissonverteilung.

Man findet den 14.4 keV Peak also bei

$$E_{14.4\text{keV}} = (14.5 \pm 1.3) \text{ keV}$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass die Hälfte der Channellänge als Fehler hinzuaddiert werden muss, da Energien eines bestimmten Intervalls vom MCA einem Channel zugeordnet werden, das heißt, dass der MCA ein endliches Auflösevermögen hat. Dieser Fehler ist jedoch vernachlässigbar klein.

$$s_{\text{Channel}} = \frac{E_{14.4 \text{ keV}} - E_{\text{Nachbar-Channel}}}{2} = 0.07 \text{ keV}$$

6.2 Comptonuntergrund

Ein Photon, das eine höhere Energie besitzt, als 14.4 keV würde durch das SCA-Fenster normalerweise unterdrückt, jedoch kann die Energie eines solchen Photons in Materie (Absorber, Szintillator) durch Comptonstreuung abnehmen, sodass es dann als Fehlsignal in das Fenster des SCA passt. Für diesen Untergrund kommen hauptsächlich die Übergänge 122 keV (Wahrscheinlichkeit 85.6%) und 136 keV (Wahrscheinlichkeit 10.6%) in Frage (siehe Abb. 14) [Anlt].

Um diesen Untergrund von den Mößbauerspektren abzuziehen, werden verschieden dicke Aluplatten vor den Szintillator gebracht. Allgemein gilt, dass die Zählrate der Gammaquanten einer Energie, die die Platten durchdringen, mit zunehmender Dicke d exponentiell abnimmt.

$$\dot{N}_E(d) = \dot{N}_0 e^{-\mu d}$$

μ ist der Massenabschwächungskoeffizient, der von der Energie der Photonen abhängt.

Man macht außerdem die Annahme, dass die beiden energiereichen Übergänge ungefähr den gleichen Massenabschwächungskoeffizienten haben, sodass die Daten (Zählrate und Dicke der Aluplatten) durch einen doppelten Exponentialfit beschrieben werden können.

$$f(d) = A e^{-ad} + B e^{-bd}$$

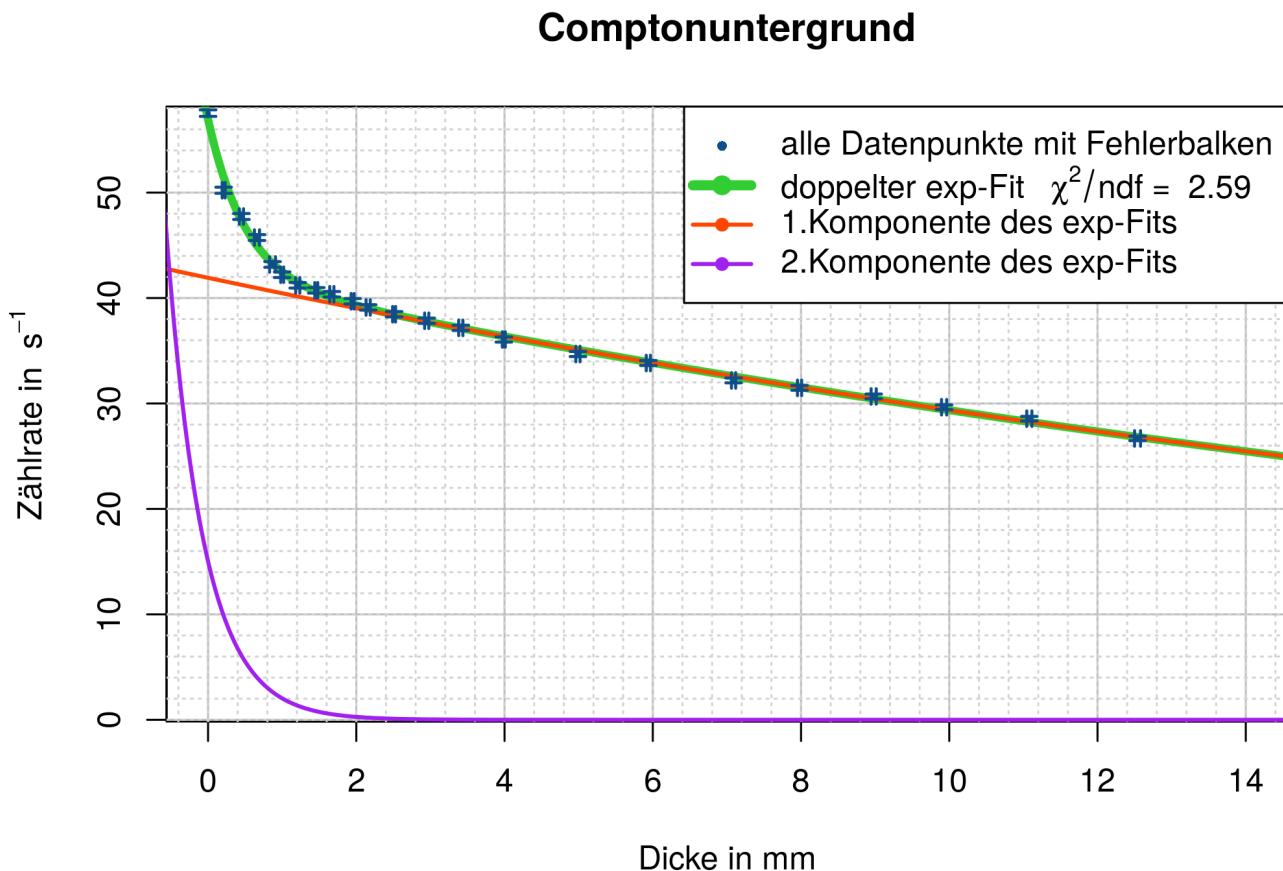


Abbildung 15: Comptonuntergrund: Die erste Komponente des Fits beschreibt den Comptonuntergrund. Die zweite Komponente des Fits beschreibt die Abschwächung der 14.4 keV Photonen. Die Fehlerbalken in x-Richtung sind die abgeschätzten Messfehler auf die Plattendicke. Die Fehlerbalken in y-Richtung entspringen wieder der poissonverteilten Zählereignisse.

Die Zählrate berechnet sich durch (N Anzahl gemessener Ereignisse, t Messzeit)

$$\dot{N} = \frac{N}{t}$$

Die Fehler auf die Zählrate sind (unter Annahme dass die Messzeit t einen vernachlässigbaren Fehler hat)

$$s_N = \frac{\sqrt{N}}{t}$$

Die Anzahl der Ereignisse wurde mit dem MCA gemessen, sodass man die Ereignisse aller Channel aufsummieren muss.

Die Gesamtdicke d der Platten erhält man aus der Summe der einzelnen benutzten Platten. Mit der Plattenanzahl M ergibt sich der Fehler ($s_d = 0.02$ mm):

$$s_d = \sqrt{M} s_{d_i}$$

Extrapoliert man nun den Comptonanteil zur null hin, so ergibt sich A als Comptonuntergrund.

$$A e^{-a \cdot 0} = A$$

$$A = (41.9 \pm 0.3) \text{ s}^{-1}$$

6.3 Abschwächung des Plexiglasfensters

Die Abschwächung lässt sich mit den uns gegebenen Mitteln nicht experimentell ermitteln, da nur zwei Plexigasdicken zur Verfügung standen.

Jedoch lässt sich der Abschwächungskoeffizient aus Literaturangaben ermitteln. Betrachtet man die Tabelle aus [3], fällt auf, dass man den Abschwächungskoeffizienten durch Extrapolation mit einem Exponentialfit bestimmen kann. Dazu fittet man die vier Werte um 14.4 keV herum.

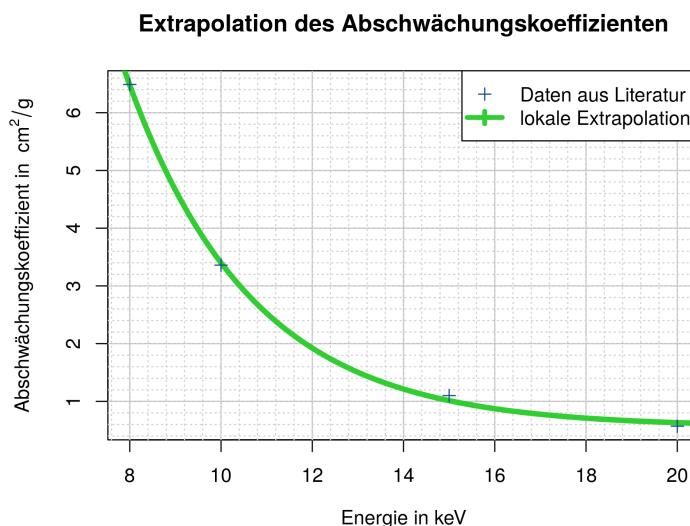


Abbildung 16: Extrapolation: Um 14.4 keV herum verhält sich der Abschwächungskoeffizient ungefähr exponentiell.

$$\mu/\rho \text{ (14.4keV)} = (1.124 \pm 0.3) \text{ cm}^2/\text{g}$$

Daraus folgt für den Massenabschwächungskoeffizient mit $\rho = 1.19 \text{ g/cm}^3$ [5]

$$\mu \text{ (14.4keV)} = (1.3 \pm 0.3) \text{ cm}^{-1}$$

Aus einer Messung der Zählrate mit und ohne Plexiglas der Dicke $d = (1.95 \pm 0.02)$ mm zeigt sich die nicht zu vernachlässigende Abnahme der Zählrate.

$$\dot{N}_{\text{ohne}} = (84.2 \pm 0.3) \text{ s}^{-1}$$

$$\dot{N}_{\text{mit}} = (60.6 \pm 0.2) \text{ s}^{-1}$$

Die erhaltenen Daten passen nicht zur Theorie

$$\dot{N}_{\text{mit}} = \dot{N}_{\text{ohne}} \cdot e^{-\mu d} = (72.1 \pm 0.3) \text{ s}^{-1}$$

Betrachtet man die Zählraten in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit, fällt keine Geschwindigkeitsabhängigkeit auf.

Plexiglas als Absorber

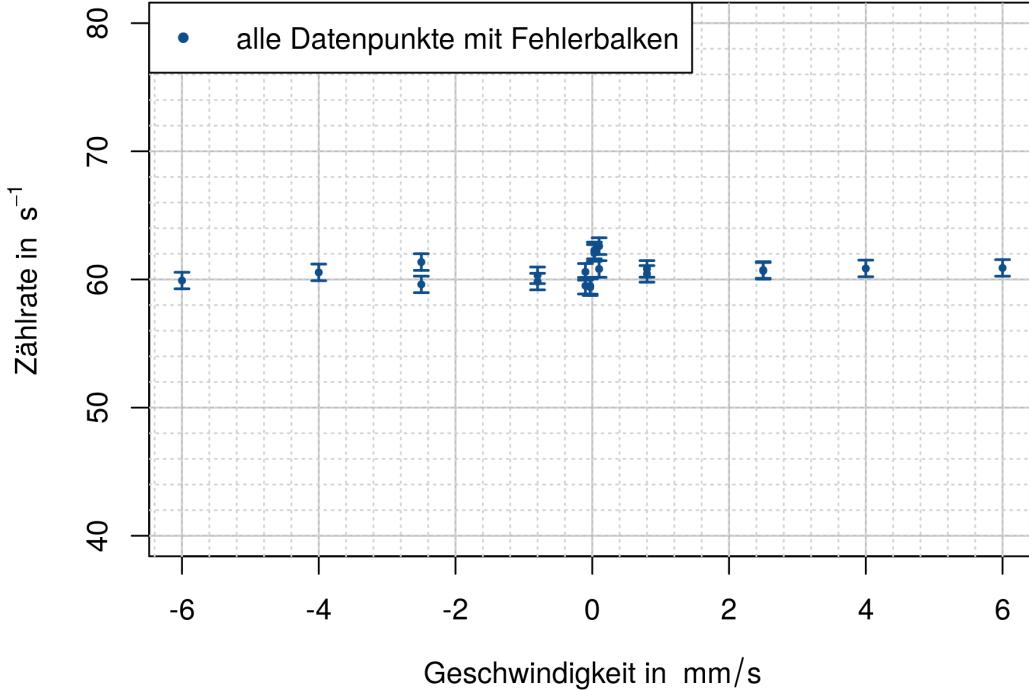


Abbildung 17: Der Plexiglasabsorber: *Es kann keine Abhängigkeit von der Geschwindigkeit festgestellt werden. Die Abschwächung des Mößbauerspektrum um eine konstante Zählrate durch das Plexiglas sorgt also nicht für eine Verzerrung des Spektrums.*

6.4 1-Linien-Absorber: Edelstahl

Für die Mößbauer-Spektren wurde das vorhandene LabView Programm benutzt, das die Messzeit, die Anzahl der Ereignisse und die Geschwindigkeit in eine Datei schreibt. Auch hier erhält man die Zählrate durch Teilen der Zahl der Ereignisse durch die Messzeit. Auch der Fehler berechnet sich analog zum Fehler der Zählrate des Comptonuntergrunds.

Der Comptonuntergrund muss von den Zählraten des Mößbauerspektrums abgezogen werden, sodass sich die Fehler der beiden Größen wie folgt addieren.

$$s_{\dot{N}} = \sqrt{s_{\text{Moess}}^2 + s_A^2}$$

Da das Mößbauerspektrum mehr als einmal mit unterschiedlichen Schrittweiten der Geschwindigkeiten aufgenommen wurde, ergaben sich für manche Geschwindigkeiten mehrere Messwerte. Bei den so entstandenen Doppelungen wurden die Zählraten gemittelt und die Fehler gemäß Gaußscher Fehlerfortpflanzung berechnet.

Es wurden drei Fits am Mößbauerspektrum durchgeführt.

- Gaußfit: $f(x) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} + C$
- Lorentzfit: Aus quantenmechanischen Überlegungen erhält man, dass die Linienbreite eine reine Lorentz-Kurve ist. $f(x) = \frac{A}{\pi} \frac{\gamma}{(x-\mu)^2 + \gamma^2} + C$. Hierbei ist das FWHM $\Gamma = 2\gamma$.
- Voigtfit: Aus endlicher Absorberdicke und den Motorungenauigkeiten erhält man eine Faltung aus der natürlichen Linienbreite und einer Gaußkurve. Diese Funktion ist nicht analytisch berechenbar, weshalb man auf Numerische Lösungen zurückgreifen muss. Gaußanteil und Lorentzanteil der Linienbreite ergeben sich aus den Parametern σ und γ .
 $f(x) = A \cdot \text{Voigt}(x, \gamma, \sigma, \mu) + C$

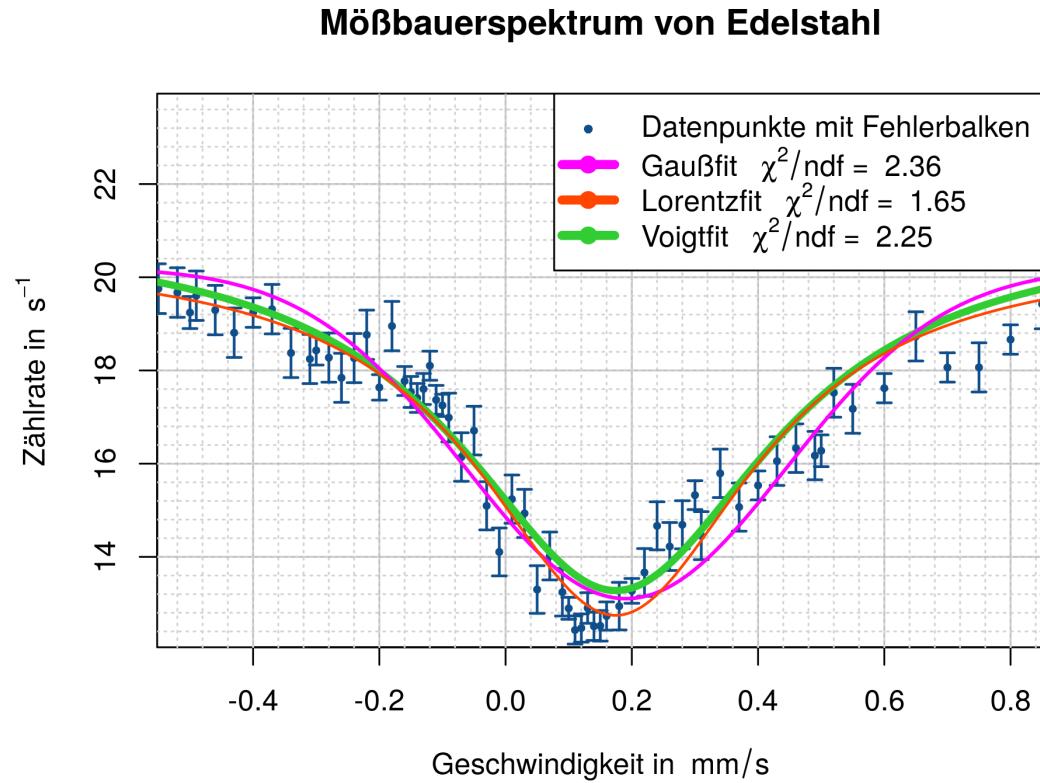
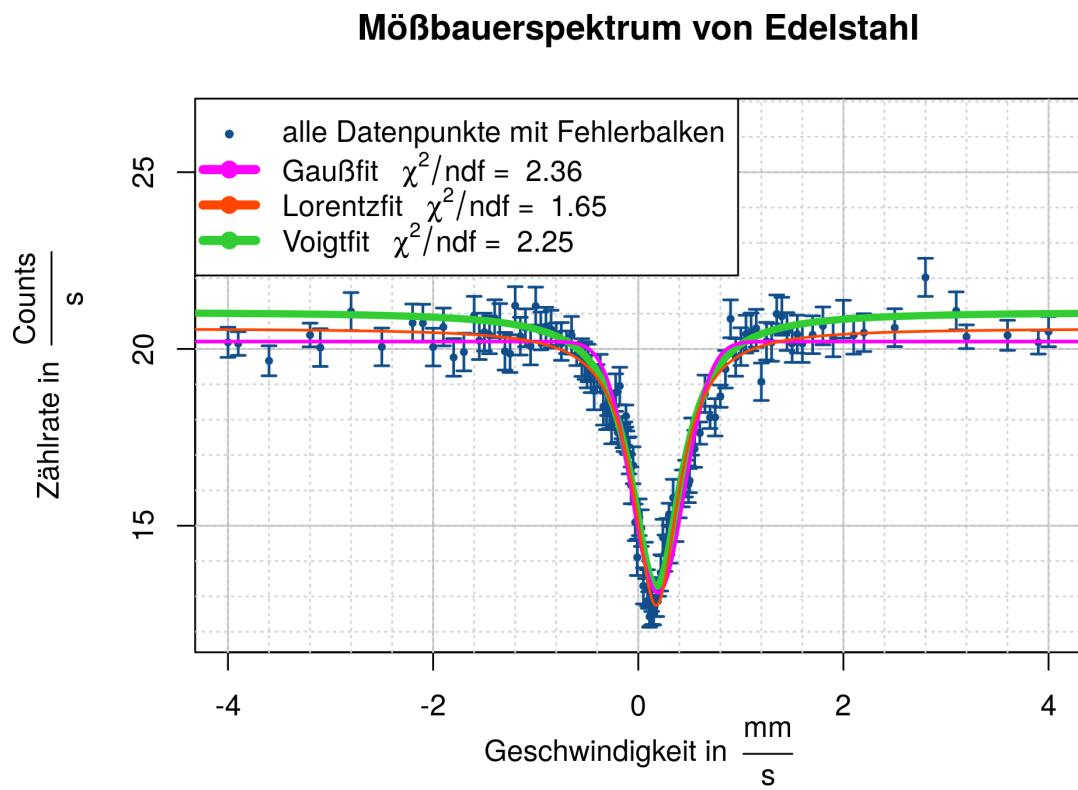


Abbildung 18: Mößbauerspektrum von Edelstahl: Der obere Graph zeigt das Mößbauerspektrum mit allen Datenpunkten. Der untere Graph zeigt das Spektrum vergrößert um das Minimum an.

Die Parameter der zwei relevanten Fits sind

	Lorentzfit	Voigtfit
$A [s^{-1}]$	6.6 ± 0.2	7.4 ± 0.3
$C [s^{-1}]$	21.05 ± 0.11	20.58 ± 0.09
gemessene Linienbreite		
$\Gamma_{mes} [\text{mm/s}]$	0.267 ± 0.010	0.302 ± 0.013
$\mu [\text{mm/s}]$	0.174 ± 0.006	0.175 ± 0.007
$\sigma [\text{mm/s}]$	—	0 ± 3

Der Parameter σ ist nicht genau null, sondern $\sigma = 5 \cdot 10^{-6}$. Der große Fehler darauf entsteht durch eine sehr kleine Krümmung der zu im Fit minimierenden Summe in Richtung σ . Anschaulich bedeutet das, dass σ bei der Minimierung keine große Änderung hervorruft (further reading:[Cra46]). Der Optimierer konvergiert, trotz seiner Robustheit, nicht mehr gegen einen bestimmten Wert da man einen von den Startbedingungen sehr stark abhängigen Parameter erhält, der aber trotzdem immer sehr viel kleiner als sein Fehler ist.

Man weiß also nicht, wie hoch der Gaußanteil des Voigtfits ist.

6.4.1 Linienbreite und Halbwertszeit

Die Linienbreite, unter der Annahme dass die Quelldicke klein ist, berechnet sich zu

$$\Gamma = E_0 \frac{\Gamma_{mes}}{2c}$$

Hierbei ist c die Lichgeschwindigkeit und $E_0 = 14.412 \text{ keV}$ der Literaturwert für die Energie des 14.4 keV Übergangs [Gr71].

$$\boxed{\Gamma = (7.3 \pm 0.3) \cdot 10^{-9} \text{ eV}}$$

Desweiteren erhält man, wie in Abschnitt 3.3 angegeben die Lebensdauer τ und kann daraus die Halbwertszeit $T_{1/2}$ bestimmen.

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{\hbar}{\Gamma \cdot \{e\}} \\ \implies T_{1/2} &= \ln(2) \cdot \tau \end{aligned}$$

Γ muss in SI Einheiten umgerechnet werden, deshalb taucht in der Formel für τ $\{e\} = 1.6 \cdot 10^{-19} \frac{\text{J}}{\text{eV}}$ auf.

$$\boxed{T_{1/2} = (63 \pm 3) \text{ ns}}$$

$$\boxed{\tau = (91 \pm 4) \text{ ns}}$$

6.4.2 Isomerieverschiebung

Die Isomerieverschiebung ergibt sich aus dem Lokalisationstionsparameter μ . Auch μ muss in Energie umgerechnet werden.

$$E_{iso} = E_0 \frac{\mu}{c}$$

Der Fehler auf E_{iso} ergibt sich aus den Fehlern des Fitparameters mit Gaußscher Fehlerfortpflanzung.

$$E_{iso} = (-8.4 \pm 0.4) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

6.4.3 Alternative Berechnung der Linienbreite

Bisher wurde die Quell- und Absorberdicke als vernachlässigbar angesehen, jedoch beträgt die Quelldicke immerhin einige hundert Å und die Absorberdicke 25 µm [Anlt]. Für die alternative Berechnung wird die einheitenlose effektive Absorberdicke benötigt.

$$T_A = f_A n_A \beta s_0 d_A$$

- $f_A = 0.8$ ist der Debye-Wallerfaktor des Absorbers bei Zimmertemperatur
- $n_A = 0.7 \cdot 8.331 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ist die Teilchendichte des Absorbers. Hierbei wurde die Massendichte $\rho = 7.874 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ [2] in eine Teilchendichte umgerechnet. Durch die Unsicherheit des Eisenanteils (0.70 ± 0.05)[Anlt] hat n_A auch eine Unsicherheit.
- $\beta = 0.022$ [Anlt] ist der Isotopanteil von ^{57}Fe in Eisen.
- $\alpha = (8.44 \pm 0.50)$ [Mui63] ist der innere Konversionskoeffizient. Er beschreibt das Verhältnis aus der Zahl der emittierten Konversionselektronen und der Zahl der emittierten, nicht konvertierten Gammaquanten.
- $d_A = 25 \mu\text{m}$ [Anlt] ist die Absorberdicke.
- $s_0 = 2\pi\lambda^2 \frac{2I^*+1}{2I+1} \frac{1}{1+\alpha}$ [Fra62] ist der Wirkungsquerschnitt, wobei $I = \frac{1}{2}$ und $I^* = \frac{3}{2}$ die Kernspins des angeregten Zustands und des Grundzustands angeben.

Damit folgt für die Absorberdicke

$$T_A = 6.4 \pm 0.6$$

Betrachtet man das linke Diagramm auf S.223 in [Fra62], so kann man die Linienverbreiterung W ablesen. Hierbei betrachtet man die 'unsplit' Linie, da keine Hyperfeinaufspaltung in Edelstahl stattfindet.

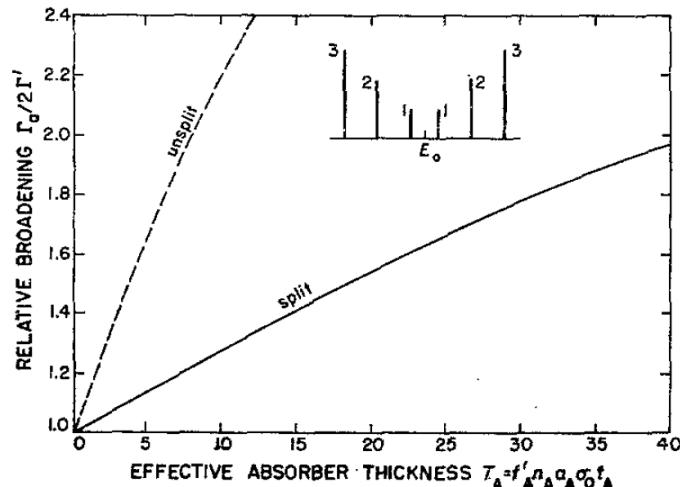


Abbildung 19: Linienverbreiterung von Edelstahl in Abhängigkeit von der effektiven Absorberdicke [Fra62]

Der Fehler auf W wurde durch Abschätzen ermittelt. Dabei wurden $T_A - s_{T_A}$ und $T_A + s_{T_A}$ auf die W-Achse übertragen, sodass das entstandene Intervall den Fehler angibt.

$$W = 3.73 \pm 0.13$$

Daraus folgt die alternative Linienbreite

$$\Gamma_{\text{alt}} = (3.9 \pm 0.2) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

Hieraus folgt dann auch eine andere Lebensdauer und Halbwertszeit

$$T_{1/2,\text{alt}} = (117 \pm 6) \text{ ns}$$

$$\tau_{\text{alt}} = (168 \pm 9) \text{ ns}$$

6.4.4 Debye-Waller-Faktor der Quelle

Der Debye-Waller-Faktor der Quelle lässt sich mit Hilfe der uns bekannten Größen und einer Formel aus [Weg66] berechnen.

$$f_Q = \frac{Z_\infty - Z_\mu}{Z_\infty} \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{T_A}{2}\right) \cdot J_0\left(i \frac{T_A}{2}\right)}$$

Hierbei ist

$$Z_\infty = A \text{ Voigt}(x \rightarrow \infty) + C$$

$$Z_\mu = A \text{ Voigt}(\mu) + C$$

und J_0 ist die Besselfunktion nullter Ordnung. Die Ableitung der Besselfunktion wurde mit WolframAlpha analytisch berechnet, sodass es möglich ist einen Fehler durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung anzugeben.

$$f_Q = 0.50 \pm 0.06$$

Das heißt, dass 50% der Photonen rückstoßfrei von der Quelle emittiert werden.

6.5 6-Linien-Absorber: natürliches Eisen

Beim 6-Linien-Absorber wird analog zum 1-Linien-Absorber vorgegangen, jedoch werden andere Fits benötigt, da natürliches Eisen ferromagnetisch ist und somit eine Hyperfeinaufspaltung mit 6 erlaubten Übergängen besitzt.

- 6-facher Gaußfit:

$$f(x) = \sum_{i=1}^6 \frac{A_i}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} e^{-\frac{(x-\mu_i)^2}{2\sigma_i^2}} + C$$

- 6-facher Lorentzfit:

$$f(x) = \sum_{i=1}^6 \frac{A_i}{\pi} \frac{\gamma_i}{(x - \mu_i)^2 + \gamma_i^2} + C$$

- 6-facher Voigtfit:

$$f(x) = \sum_{i=1}^6 A_i \cdot \text{Voigt}(x, \gamma_i, \sigma_i, \mu_i) + C$$

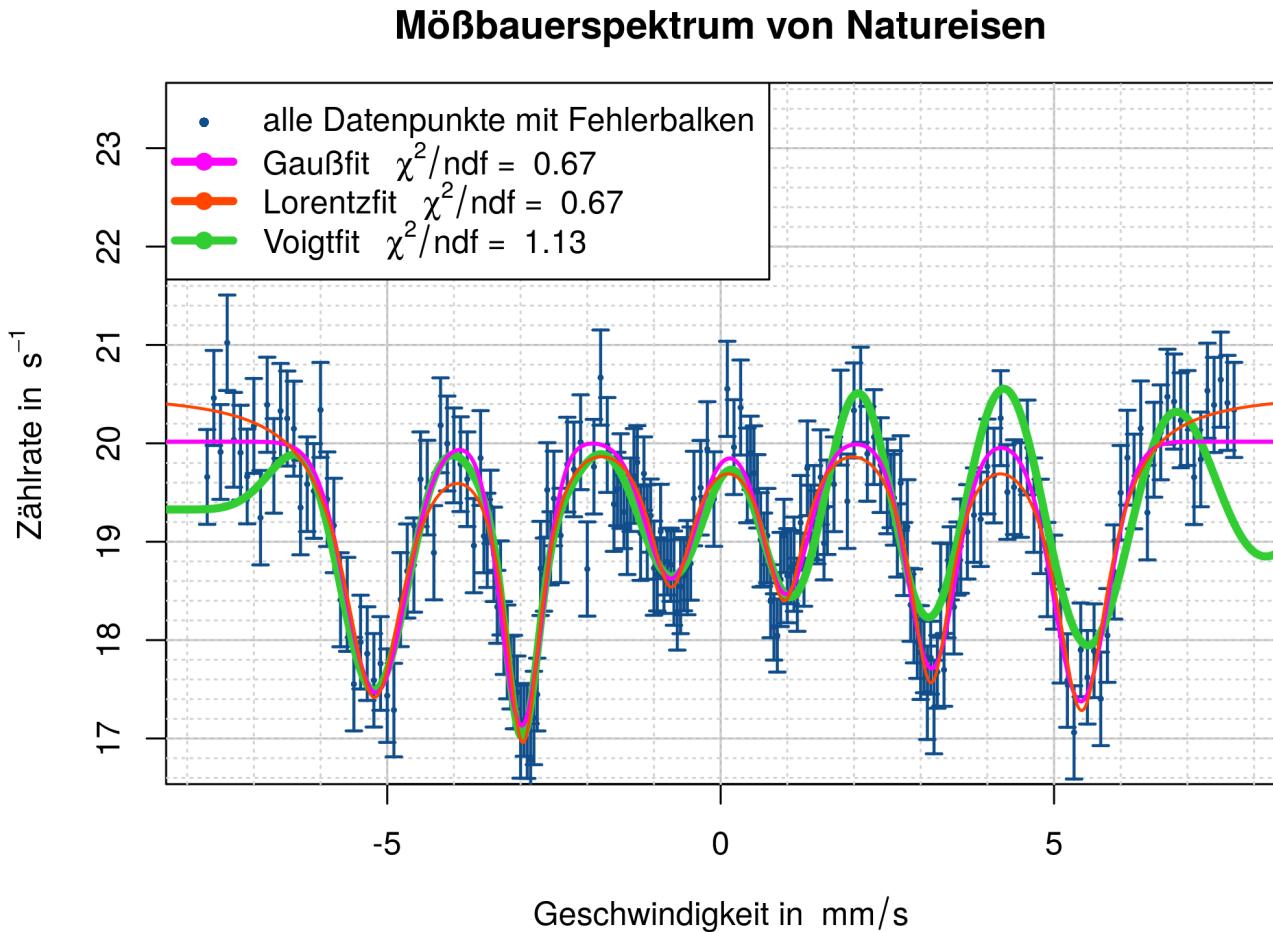


Abbildung 20: Mößbauerspektrum von natürlichem Eisen:*Im Anhang 8 findet man alle Minima vergößert dargestellt.*

Man erkennt direkt, dass der Voigtfit misslungen ist, da er ein globales Maximum besitzt. Da aber nur die Positionen der Minima wichtig sind um die Hyperfeinaufspaltung zu untersuchen, werden die Parameter des Lorentzfit weiter verwendet.

6.5.1 Aufspaltungsenergien und Isomerieverziehung

Aus den Geschwindigkeiten der Minima lässt sich mit Hilfe des Dopplereffekts auf die Energiedifferenzen, bezogen auf 14.4 keV, schließen.

$$E_i = E_0 \frac{v}{c}$$

Minimum	Geschwindigkeit [mm/s]	Energiedifferenz $E_{mes, i} [10^{-9}\text{eV}]$
1	-5.19 ± 0.04	-250 ± 2
2	-2.96 ± 0.02	-142.4 ± 0.8
3	-0.74 ± 0.04	-35.6 ± 2
4	0.96 ± 0.03	46.1 ± 1.5
5	3.15 ± 0.02	151.6 ± 1.0
6	5.42 ± 0.03	260.4 ± 2

Betrachtet man die theoretischen Aufspaltungsenergien der Hyperfeinstruktur,

Peak	1	2	3	4	5	6
m_a	3/2	1/2	-1/2	1/2	-1/2	-3/2
m_g	1/2	1/2	1/2	-1/2	-1/2	-1/2
Energie	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6

$$E_1 = (\mu_a - \mu_g) B = -E_6$$

$$E_2 = \left(\frac{1}{3}\mu_a - \mu_g\right) B = -E_5$$

$$E_3 = -\left(\frac{1}{3}\mu_a + \mu_g\right) B = -E_4$$

so fällt auf, dass die Peaks ohne Isomerieverschiebung symmetrisch um die Geschwindigkeit 0 herum verteilt sein müssten. Die beobachtbare Verschiebung der Symmetrieachse röhrt folglich von der Isomerieverschiebung her. Die Symmetrieachse lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$v_{iso} = \frac{v_1 + v_6}{2} = \frac{v_2 + v_5}{2} = \frac{v_3 + v_4}{2}$$

Daraus ergeben sich direkt die drei Energiewerte für die Isomerieverschiebung

$$E_{iso, 34} = (-5.2 \pm 1.2) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{iso, 25} = (-4.6 \pm 0.6) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{iso, 16} = (-5.4 \pm 1.1) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

Das gewichtete Mittel dieser Werte ergibt

$$E_{iso} = (-4.9 \pm 0.5) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{iso, lit} = -5.288 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

6.5.2 Magnetisches Moment der Kerne

Das magnetische Moment des Grundzustands μ_g ist gegeben durch [Wei97]

$$\mu_g = (0.090604 \pm 0.000009) \mu_N$$

Dabei ist μ_N das Kernmagneton.

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_{\text{Proton}}}$$

Um die unbekannte Magnetfeldstärke B in den E_i zu eliminieren und das magnetische Moment des angeregten Zustandes zu ermitteln wird E_2 durch E_3 geteilt und nach μ_a aufgelöst. Dazu werden zuerst die E_i aus den $E_{mes, i}$ ermittelt, indem die Isomerieverschiebung hinzugefügt wird.

$$E_i = E_{mes, i} + E_{iso}$$

Daraufhin erhält man

$$\frac{E_2}{E_3} = \frac{E_5}{E_4} = \frac{\frac{1}{3}\mu_a - \mu_g}{-\frac{1}{3}\mu_a - \mu_g}$$

$$\iff \mu_a = 3\mu_g \left(\frac{1 - \frac{E_2}{E_3}}{1 + \frac{E_2}{E_3}} \right)$$

Die zwei erhaltenen Werte für μ_a werden gemittelt zu

$$\boxed{\mu_a = (-0.152 \pm 0.003)\mu_N}$$

Die anderen beiden möglichen Verhältnisse führen auf

$$\frac{E_1}{E_3} = \frac{E_6}{E_4} : \quad \mu_a = \mu_g \left(\frac{1 - \frac{E_1}{E_3}}{1 + \frac{1}{3}\frac{E_1}{E_3}} \right)$$

$$\boxed{\mu_a = (-0.154 \pm 0.002)\mu_N}$$

$$\frac{E_1}{E_2} = \frac{E_6}{E_5} : \quad \mu_a = \mu_g \left(\frac{\frac{E_1}{E_2} - 1}{\frac{1}{3}\frac{E_1}{E_2} - 1} \right)$$

$$\boxed{\mu_a = (-0.158 \pm 0.004)\mu_N}$$

Alle Fehler wurden durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung aus den Konfidenzintervallen der betroffenen Fitparameter bestimmt. Die Mittelung der drei Werte für μ_a ist nicht sinnvoll, da die gleichen Fitparameter zugrundeliegen und die Fehlerrechnung unnötig kompliziert wird. Der Literaturwert ist [Wei97]:

$$\boxed{\mu_{a, lit} = (-0.15531 \pm 0.00004)\mu_N}$$

6.5.3 Magnetfeld am Kernort

Stellt man nun die Formeln für die E_i nach B um, so ergibt sich

$$\begin{array}{ll} B_1 = \frac{E_1}{\mu_a - \mu_g} & B_6 = \frac{E_6}{\mu_g - \mu_a} \\ B_2 = \frac{E_2}{\frac{1}{3}\mu_a - \mu_g} & B_5 = \frac{E_5}{\mu_g - \frac{1}{3}\mu_a} \\ B_3 = -\frac{E_3}{\frac{1}{3}\mu_a + \mu_g} & B_4 = \frac{E_4}{\frac{1}{3}\mu_a + \mu_g} \end{array}$$

Die Mittelwerte der einzelnen Zeilen ergeben

$$\boxed{B_{16} = (33.2 \pm 0.3)\text{T}}$$

$$\boxed{B_{25} = (32.9 \pm 0.2)\text{T}}$$

$$\boxed{B_{34} = (34.2 \pm 1.3)\text{T}}$$

6.5.4 Linienbreite, Halbwertszeit und Lebensdauer

Aus dem Lorentzfit folgen in Analogie zum 1-Linien-Absorber für jeden Peak (mit ursprünglicher und alternativer Methode):

	ohne T_A	mit T_A
Linienbreite Γ [10 ⁻⁹ eV]	13.7 ± 1.6	13.0 ± 1.6
	8.3 ± 0.6	8.0 ± 0.7
	10.4 ± 1.6	10.3 ± 1.7
	9.6 ± 1.4	9.5 ± 1.4
	9.6 ± 1.0	9.3 ± 1.0
	11.8 ± 1.4	11.2 ± 1.3
Lebensdauer τ [ns]	48 ± 6	51 ± 6
	80 ± 7	82 ± 7
	63 ± 10	64 ± 10
	68 ± 10	69 ± 10
	69 ± 7	71 ± 7
	56 ± 7	59 ± 7
Halbwertszeit $T_{1/2}$ [ns]	33 ± 4	35 ± 4
	55 ± 5	57 ± 5
	44 ± 7	44 ± 7
	47 ± 7	48 ± 7
	48 ± 5	49 ± 5
	39 ± 5	41 ± 5

Die einzelnen Werte sind von oben nach unten geordnet durch die Peaknummer, sodass oben jeweils der Wert von Peak 1 steht und unten der Wert von Peak 6.

Will man die effektive Absorbedicke berechnen, so muss man das für jeden Peak einzeln tun, da die Wirkungsquerschnitte der Übergänge unterschiedlich sind.

Die Peaks sollten ein Höhenverhältnis von 3:2:1:1:2:3 aufweisen. Auf dieses Verhältnis kommt man durch Betrachtung des Übergangsmatrixelements.

$$I_\gamma \propto \left| \left\langle \frac{1}{2}, M_g \right| \mathcal{M}(\text{M1}) \left| \frac{3}{2}, M_a \right\rangle \right| \mathcal{F}_{lm}(\theta)$$

Hierbei steht I_γ für die Intensität, der bra-Vektor für den Grundzustand, der ket-Vektor für den angeregten Zustand, $\mathcal{M}(\text{M1})$ für den Multipoloperator des M1-Übergangs und \mathcal{F} für die winkelabhängige Strahlungsdichte. Für einen tieferen Einblick empfiehlt sich [Wei97].

Geht man davon aus, dass der Gesamtwirkungsquerschnitt der gleiche wie beim 1-Linien-Absorber ist, so werden die einzelnen Wirkungsquerschnitte mit ihrem Intensitätsanteil $\frac{3}{12}, \frac{2}{12}, \frac{1}{12}$ gewichtet. Die effektive Absorbedicke kann nun analog zum 1-Linien-Absorber mit folgenden Werten berechnet werden: $n_A = 0.98 * 8.331 * 10^{22}$, $f_A, n_A, \beta, \alpha, d_A$ bleiben gleich. Es ergaben sich die Verhältnisse:

	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6
Verhältnis	2.3	1.5	1.0	1.0	1.5	2.1
Fehler	0.4	0.3	0	0.2	0.3	0.4

Mit Hilfe des Diagramms 16 erhält man dann die Korrektur für die Linienbreiten, wobei man die 'split' Kurve verwenden muss. Es fällt auf, dass die Korrekturen sehr klein ausfallen.

6.5.5 Debye-Waller-Faktoren

Die DW-Faktoren ergeben sich analog zu dem DW-Faktor des 1-Linien-Absorbers. Jedoch erhält man durch die 6 unterschiedlichen effektiven Absorberdicken auch 6 unterschiedliche DW-Faktoren.

	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6
f_Q	0.27	0.38	0.33	0.36	0.31	0.28
s_{f_Q}	0.03	0.03	0.05	0.05	0.03	0.03

6.6 Geschwindigkeitsmessung des Absorbers

Bei dem verwendeten Aufbau zur Geschwindigkeitsmessung wird keine richtige Längeneinheit verwendet, sondern eine Art Pixel oder Ticks, die einem Koordinatensystem des Labviewprogramms entspringen. Deshalb wurde karriertes Papier als Schirm eingesetzt. Dabei wird vorausgesetzt, dass der Fehler auf die Gitterlinienabstände sehr klein ist. Aus der Helligkeitsverteilung entlang einer Achse lässt sich so eine Formel finden um die Einheiten ineinander umzurechnen. Die Intensitätsverteilung der Gitterlinien ist im Anhang zu finden 8 .

Die Gitterlinienpunkte werden gegen den realen Abstand (in mm) aufgetragen. Danach wird ein Quadratischer Fit verwendet um die Daten zu beschreiben.

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

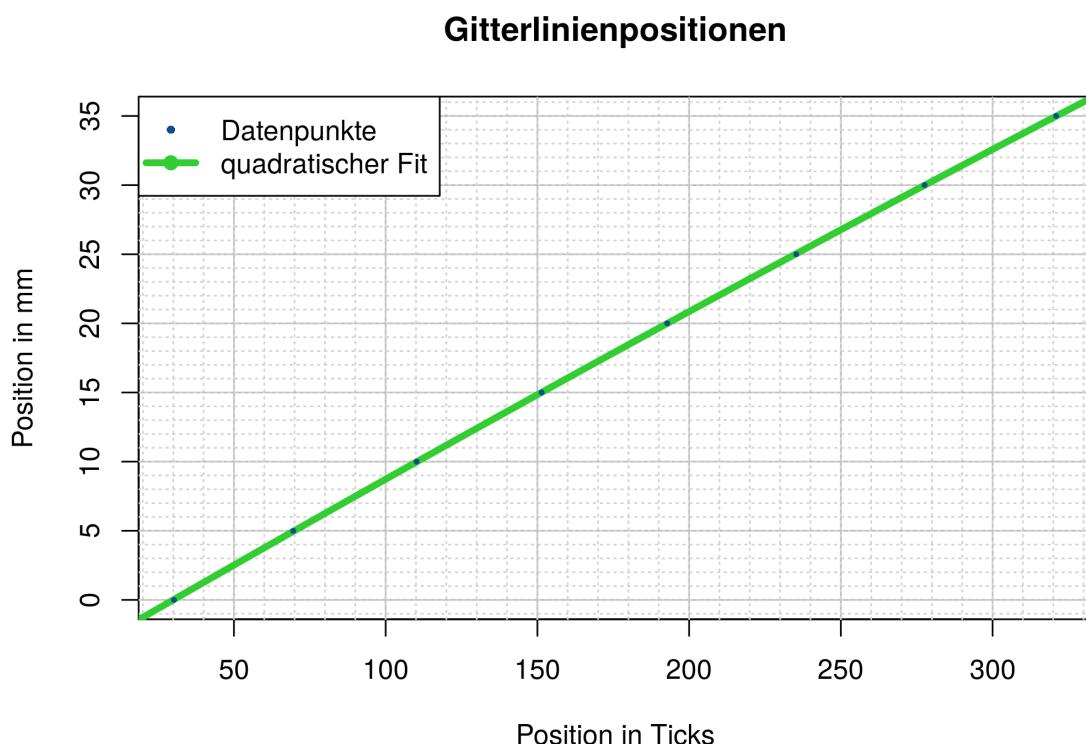


Abbildung 21: Gitterlinienpositionen: Auf der y-Achse ist die Strahlposition in mm angegeben, auf der x-Achse die entsprechende Pixelposition.

Warum man ein quadratisches Modell wählt ist ersichtlich, wenn man das Diagramm betrachtet, in dem die Gitterliniendifferenzen und ihre Positionen gegeneinander aufgetragen wurden. Die Pixelanzahl zwischen den Gitterlinien steigt nämlich an, da die Kamerablickrichtung und der Schirm nicht exakt senkrecht zueinander sind.

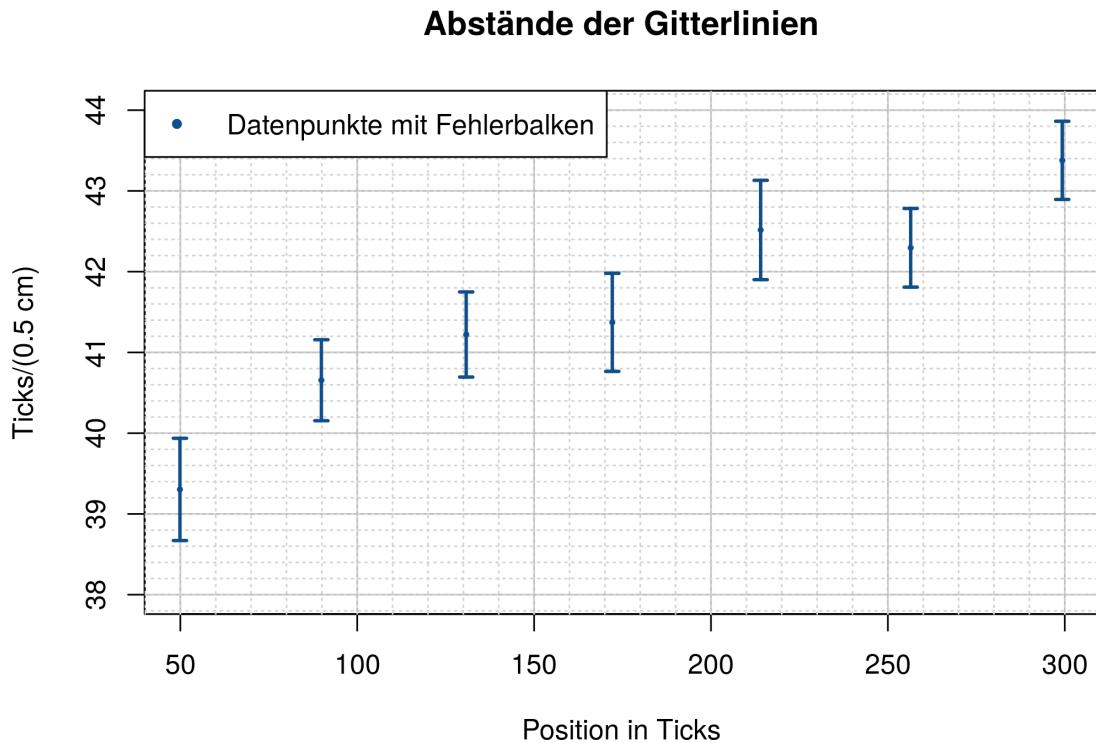


Abbildung 22: Gitterliniendifferenzen: Auf der y-Achse ist die Strahlposition in mm angegeben, auf der x-Achse die entsprechende Pixelposition.

Mit der erhaltenen Fitfunktion

$$a = -1.99 \pm 0.15$$

$$b = 0.1272 \pm 0.0005$$

$$c = -3.79 \pm 0.04$$

kann man die Laserpunktgeschwindigkeiten auf dem Schirm durch Lineare Regressionen ermitteln. Exemplarisch wird der Graph bei -5 mm/s gezeigt. Die restlichen Diagramme befinden sich im Anhang 8 .

Aus dem viel zu großen χ^2/ndf resultieren Überlegungen über Unregelmäßigkeiten in der Geschwindigkeit. Um diese Unregelmäßigkeiten betrachten zu können betrachtet man die Residuen der Linearen Regressionen. Diese sollten Gaußverteilt um 0 sein. Um die Residuen auf periodische Störungen zu untersuchen wurde eine Fouriertransformation durchgeführt.

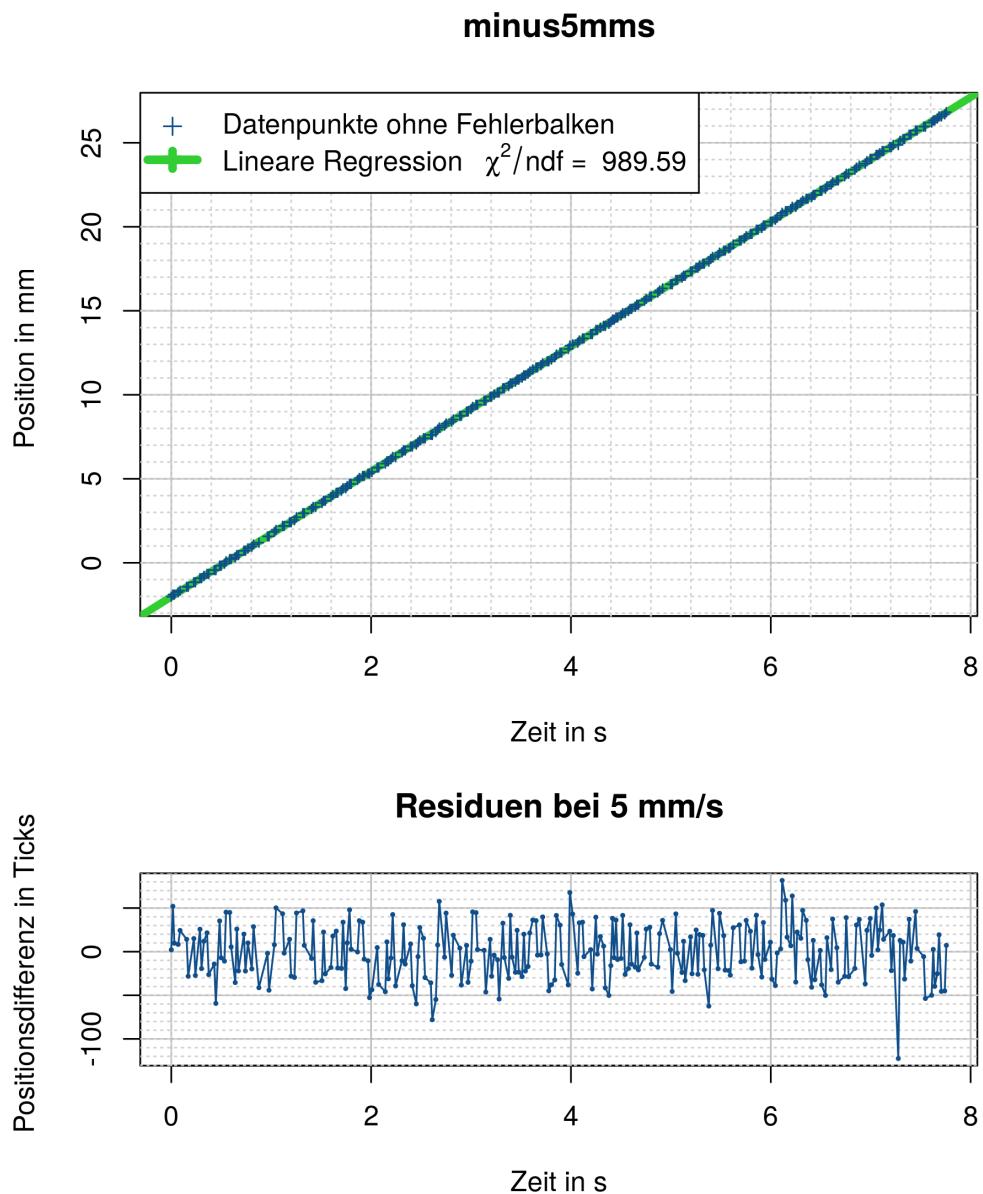


Abbildung 23: $x(t)$ - Diagramm zur Ermittlung der Absorbergeschwindigkeit: **oben:** Die verwendete Einstellung ist -5 mm/s . Die Fehlerbalken sind zu klein um sie zu sehen. Sie resultieren aus der Streuungsmessung bei still stehendem Absorber. **unten:** Die Residuen der Linearen Regression

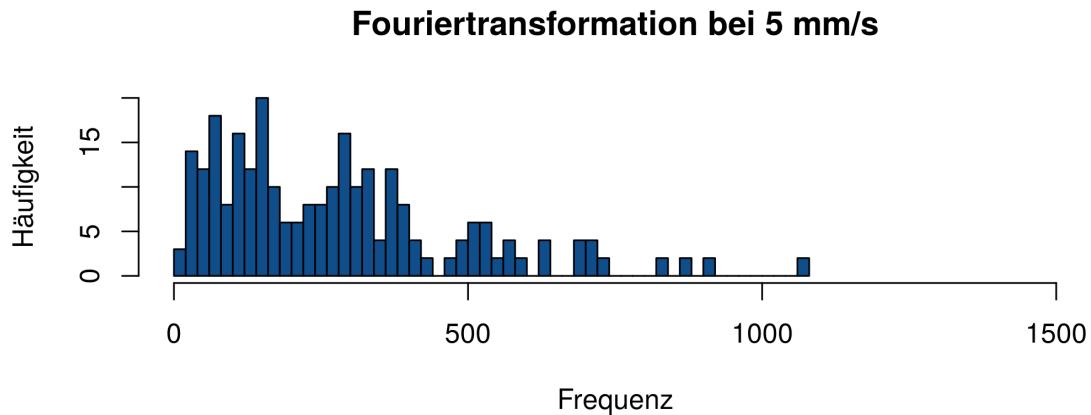


Abbildung 24: Fouriertransformation der Residuen: *Man erkennt deutliche Abweichungen von der erwarteten Form (Exponentialverteilung).*

Im Anhang 8 sind außerdem die entsprechenden Diagramme der 0.05 mm/s Messung zu finden.

Die gemessenen Geschwindigkeiten auf dem Schirm müssen nun mit simplen geometrischen Überlegungen in die Absorbergeschwindigkeit umgerechnet werden.

$$v_{\text{Absorber}} = \frac{v_{\text{Schirm}}}{2 \sin \theta}$$

$$\theta = \arctan \left(\frac{b}{a} \right)$$

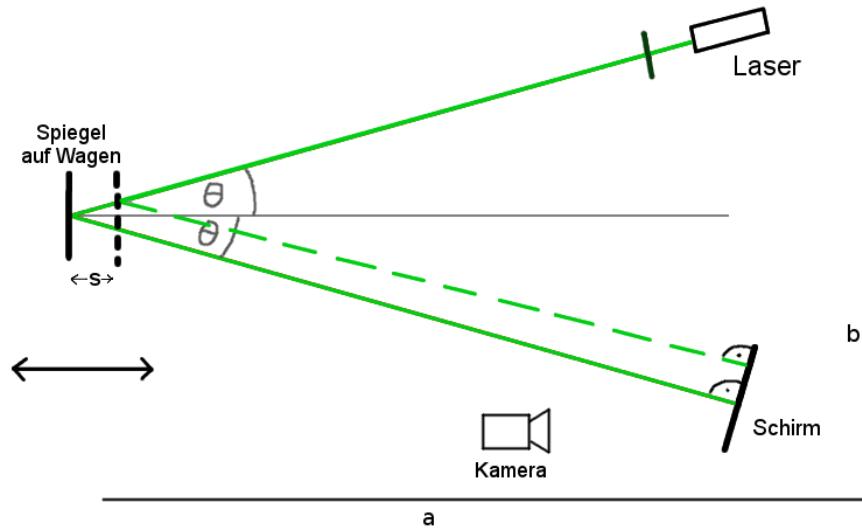


Abbildung 25: Zeichnung des Aufbaus: *mit Winkel θ , den Seitenlängen a, b und der zurückgelegten Strecke s*

$$\theta = (20.43 \pm 0.11)^\circ$$

Mit dem Geodreieck wurde $\theta = 21 \pm 1$ gemessen, was etwas ungenauer ist und daher nicht verwendet

wurde. Der Fehler s_θ wurde mit Gaußscher Fehlerfortpflanzung aus den Ablesefehlern

$$s_a = s_b = 0.1 \text{ cm}$$

berechnet. Somit ergeben sich die folgenden Geschwindigkeiten.

Geschwindigkeit im Programm [mm/s]	gemessene Geschwindigkeit [mm/s]
-0.05	-0.0523 ± 0.0003
-0.10	-0.1041 ± 0.0005
-0.15	-0.1562 ± 0.0008
-0.25	-0.2598 ± 0.0013
-0.50	-0.522 ± 0.003
-5.00	-5.34 ± 0.03
0.05	0.0517 ± 0.0003
0.10	0.1057 ± 0.0005
0.15	0.1560 ± 0.0008
0.25	0.2628 ± 0.0014
0.50	0.514 ± 0.003
5.00	5.29 ± 0.03

Die Geschwindigkeiten stimmen also bei Weitem nicht innerhalb von 3σ mit den angegebenen Werten überein.

7 Zusammenfassung und Diskussion

7.1 Energieeichung

Alle K_{α} -Linien bis auf Kupfer konnten identifiziert werden. Wie in [Anlt] erwähnt, ist die Kupferlinie schwer zu identifizieren. Die Gaußfits der K_{α} -Linien lieferten hohe reduzierte χ^2 -Werte, was heißt, dass das vorgegebene Modell (Gaußkurve) nicht gut zu den gegebenen Daten passt. Dies ist nicht weiter schlimm, da nur die Maxima bestimmt werden müssen und diese recht gut wiedergegeben werden. Die abgeschätzten Fehler der Maxima sind gut abgeschätzt, da – vorausgesetzt die Beziehung zwischen Channel und Energie ist wirklich linear – das reduzierte χ^2 der Eichgeraden ungefähr 1 ist. Durch die starke Korrelation der Eichparameter wird der Fehler auf die Channel-Energien akzeptabel klein, sodass sich die Identifikation ohne Probleme durchführen lässt. Der gesuchte 14.4 keV Peak findet sich bei einer Energie von.

$$E = (14.5 \pm 1.3) \text{ keV}$$

Die endliche Auflösung des MCA verursacht einen vernachlässigbar kleinen Fehler.

7.2 Comptonuntergrund

Der Doppelexponentialfit hat ein akzeptables reduziertes χ^2 von 2.59. Um das Modell realistischer zu gestalten müsste man einen dreifachen Exponentialfit verwenden, der aber bei gleicher Datenzahl ungenauere Parameter liefern würde, da die Anzahl der Freiheitsgrade sinkt. Außerdem sind die Massenabschwächungskoeffizienten des 122 keV-Peaks und des 136 keV-Peaks sehr ähnlich. Der Comptonuntergrund hat eine Rate von

$$A = (41.9 \pm 0.3) \text{ s}^{-1}$$

Der Fehler auf die Untergrundrate ist $< 1\%$ und somit eignet sich dieser Wert um ihn ohne großen Einfluss auf den Gesamtfehler vom Mößbauerspektrum abzuziehen.

7.3 Plexiglas

Aus dem erstellten Graphen kann man erkennen, dass die Absorption von Plexiglas für den Bereich des Mößbauerspektrums nicht geschwindigkeitsabhängig ist. Zudem wurde der Abschwächungskoeffizient zu

$$\mu = (1.3 \pm 0.3) \text{ cm}^{-1}$$

aus Literaturwerten durch Extrapolation bestimmt. Man kann sehen, dass der Einfluss einer 0.2cm dicken Platte nicht zu vernachlässigen ist, jedoch passt die Abschwächung nicht zu den gemessenen Daten. Da zu beobachten war, dass die Zählrate im Mößbauerspektrum über 2 Tage hinweg nicht zuverlässig reproduzierbar ist, ist dieses Ergebnis nicht verwunderlich. Die zwei zu vergleichenden Raten wurden nämlich an unterschiedlichen Tagen aufgenommen (Näheres in 7.5).

Da die Abschwächung nicht zu groß ist und Plexiglas nicht geschwindigkeitsabhängig absorbiert, kann die Abschwächung ignoriert werden.

7.4 Edelstahl

Wie in der Auswertung beschrieben, wurden drei unterschiedliche Fitfunktionen verwendet. Zum einen Gauß- und Lorentzfit und zum anderen eine Faltung aus Gauß- und Lorentz-Funktion: die Voigtfunktion. Der Voigtfit sollte theoretisch am besten zu den gegebenen Daten passen, da durch die natürliche Linienbreite (Lorentz), Absorberdicke (Gauß) und Motorbewegung (Gauß) eben diese Faltung entsteht. Am reduzierten χ^2 erkennt man aber, dass der Lorentzfit am besten und der gaußfit am schlechtesten passt.

$$\boxed{\chi^2_{red,Gauss} = 2.36}$$

$$\boxed{\chi^2_{red,Lorentz} = 1.65}$$

$$\boxed{\chi^2_{red,Voigt} = 2.25}$$

Es fällt weiterhin auf, dass das reduzierte χ^2 generell sehr hoch ist. Das mag daran liegen, dass das gemessene Mößbauerspektrum asymmetrisch an den flanken ist, was einen guten Fit erschwert und auch erklärt, warum der Voigtfit nicht am besten passt. Trotzdem wurde der Voigtfit für die weitere Auswertung verwendet.

Die Linienbreiten mit und ohne effektive Absorberdicke und die sich daraus ergebenden Größen sind:

	ohne T_A	mit T_A	Literaturwerte[Anlt]
Linienbreite $\Gamma [10^{-9}\text{eV}]$	7.3 ± 0.3	3.9 ± 0.2	4.7
Lebensdauer $\tau [\text{ns}]$	91 ± 4	168 ± 9	141
Halbwertszeit $T_{1/2} [\text{ns}]$	63 ± 3	117 ± 6	98

Man erkennt, dass die Daten ohne T_A überhaupt nicht mit den Literaturwerten übereinstimmen, da die Linienbreite viel zu groß ist ($\geq 4\sigma$). Die Daten mit T_A stimmen innerhalb von 3 bis 4σ mit den Literaturwerten überein. Die Korrektur durch T_A fiel hier wohl zu groß aus. Die generell schlechte Übereinstimmung kann damit zusammenhängen, dass die Fits nicht vollständig gelungen sind durch das asymmetrische Mößbauerspektrum. Man kann die Asymmetrie auch erkennen, wenn man die Residuen des Voigtfits betrachtet.

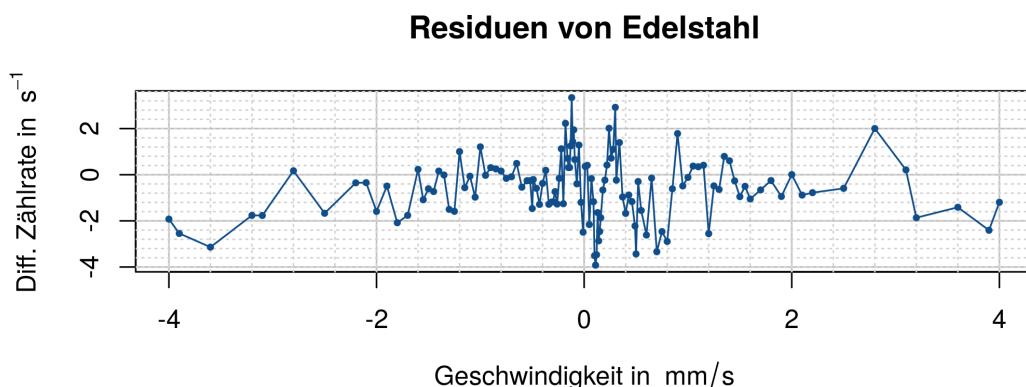


Abbildung 26: Residuen des Voigtfits beim 1-Linien-Absorber

Man kann nahe der Null deutliche Regelmäßigkeiten erkennen. Jedoch sollten die Residuen im Idealfall gaußverteilt sein.

Der Debye-Waller-Faktor der Quelle ergab sich aus Literaturangaben und der maximalen und minimalen Zählrate des Mößbauerspektrums:

$$f_Q = 0.50 \pm 0.06$$

Die Isomerieverschiebung zwischen Quelle und Absorber ist:

$$E_{iso,mes} = (-8.4 \pm 0.4) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

Aufgrund mangelnder Angaben über Quelle und Absorber ist kein Vergleich mit Literaturwerten möglich, jedoch könnte die Isomerieverschiebung durch die Asymmetrie des Mößbauer-Peaks systematisch verschoben sein. Trotzdem scheint eine Isomerieverschiebung im neV-Bereich realistisch zu sein.

7.5 Natürliches Eisen

Der 6-fache Voigtfit liefert eine Funktion, die offensichtlich kein Mößbauerspektrum beschreibt. Es wurde deshalb der 6-fache Lorentzfit für die weitere Auswertung verwendet. Was genau die Voigtfunktion in eine solche Form bringt ist unklar, da es sich um eine numerische Näherung handelt. Die Isomerieverschiebung konnte durch die Symmetrische Hyperfeinaufspaltung leicht bestimmt werden. Die Fits lieferten alle $\chi^2/ndf \approx 1$ und beschreiben somit die Daten sehr gut.

$$E_{iso} = (-4.9 \pm 0.5) \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

$$E_{iso,lit} = -5.288 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$$

Durch den Hersteller der Quelle war ein Literaturwert von $v = 0.110 \text{ mm/s}$ angegeben, sodass dieser im Auswertungsteil in eine Energie umgerechnet wurde. Die Isomerieverschiebung stimmt innerhalb von einer Standardabweichung mit dem Literaturwert überein, hat jedoch einen relativen Fehler von $\approx 10\%$.

Für das magnetische Moment des angeregten Zustands ergaben sich drei Werte.

$$\mu_a = (-0.152 \pm 0.003)\mu_N \quad \mu_a = (-0.154 \pm 0.002)\mu_N \quad \mu_a = (-0.158 \pm 0.004)\mu_N$$

$$\mu_{a, lit} = (-0.15531 \pm 0.00004)\mu_N$$

Der Literaturwert stammt aus [Wei97] und die Messwerte stimmen innerhalb von 1σ mit ihm überein. Die relativen Fehler der magnetischen Momente sind sehr klein $< 3\%$ und ließen sich folglich gut bestimmen.

Die gemessenen Magnetfelder am Kernort wurden zu

$$B_{16} = (33.2 \pm 0.3)\text{T} \quad B_{25} = (32.9 \pm 0.2)\text{T} \quad B_{34} = (34.2 \pm 1.3)\text{T}$$

$$B_{lit} = (33.3 \pm 0.1)\text{T}$$

bestimmt. Diese Werte stimmen innerhalb von 1 bis 2σ mit dem Literaturwert [Wei97] überein. Durch die Gaußsche Fehlerfortpflanzung hat B_{34} einen sehr viel größeren Fehler als die anderen beiden Werte.

Für die Linienbreiten und den daraus resultierenden Größen wurden keine Literaturwerte gefunden. Es fällt jedoch auf, dass die einzelnen Lebensdauern sehr viel kürzer sind als die Lebensdauer des 1-Linienspektrums. Die Korrekturen durch die effektive Absorberdicke fallen sehr klein aus.

Auch für die DW-Faktoren der einzelnen Hyperfeinübergänge wurden keine Literaturangaben gefunden. Sie wirken aber plausibel und sind kleiner als der DW-Faktor des 1-Linien-Absorbers.

Es wurde nach zweitägiger Pause ein weiteres mal das Mößbauerspektrum von natürlichem Eisen aufgenommen. Dabei fiel auf, dass die Zählrate signifikant niedriger war. Zwar blieb die Form mit den 6 negativen Peaks vorhanden, doch diese Begebenheit ist Evidenz dafür, dass die Zählraten im Allgemeinen schwanken und somit nur vernünftige Daten entstehen, wenn die einzelnen Datensätze in einem möglichst kleinen Zeitraum aufgenommen werden. Zudem kann dieses Problem auch der Ursprung der Asymmetrie des Mößbauerspektrums sein.

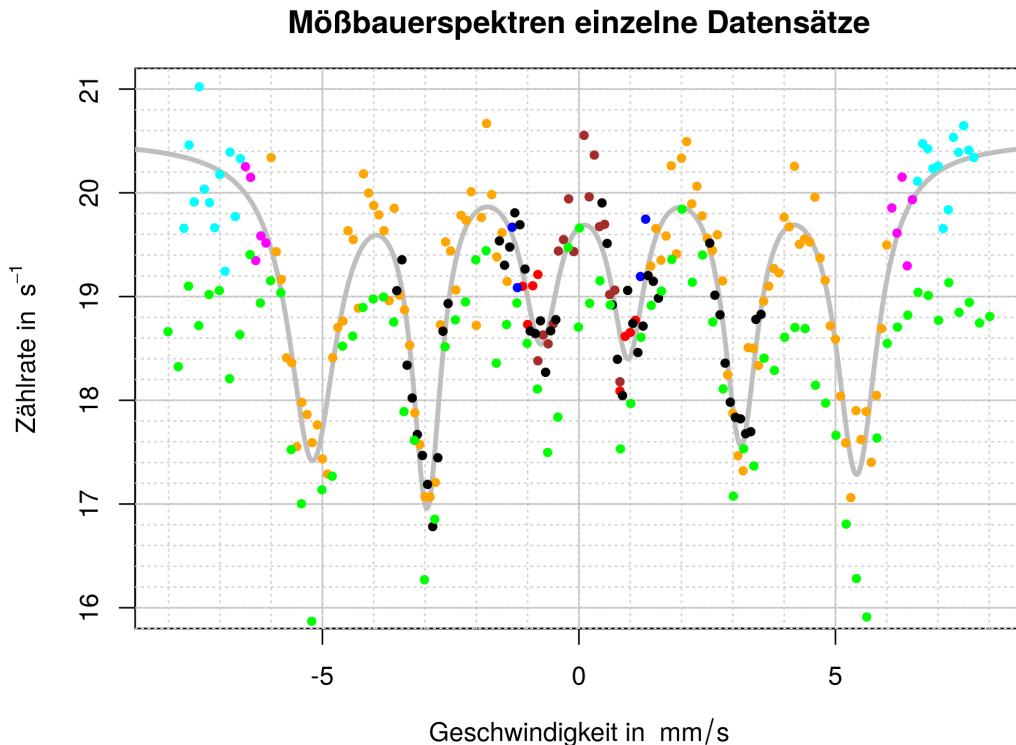


Abbildung 27: Alle Datensätze des Mößbauerspektrums von natürlichem Eisen: *Jeder Datensatz hat eine unterschiedliche Farbe. Der auffällige Datensatz mit einer generell zu kleinen Zählrate ist der grüne. Um die Form des Spektrums besser zu erkennen ist der 6-fache Lorentzfit in grau eingezeichnet.*

7.6 Geschwindigkeitsmessung

Die Geschwindigkeitsmessung wurde durchgeführt um zum Einen Abweichungen von der Eingestellten Geschwindigkeit zu beobachten und zum Anderen um Geschwindigkeitsschwankungen zu untersuchen.

Es fällt auf, dass alle gemessenen Geschwindigkeiten über den angegebenen Geschwindigkeiten liegen. Diese Erkenntnis würde systematische Abweichungen in der Isomerieverziehung erklären. Zudem

liegen manche gemessenen Geschwindigkeiten weiter von den angegebenen Geschwindigkeiten weg als andere. So erklärt sich auch das asymmetrische Mößbauerspektrum. Auch Schwankungen sind aufgefallen: Vor allem bei höheren Geschwindigkeiten erkennt man durch Fouriertransformation, dass die Residuen nicht Gaußverteilt sind (entspricht nach Fouriertransformation ungefähr exponentiellem Abfall). Es gibt Maxima bei mehreren Frequenzen. Dies spricht für regelmäßige Schwankungen, die die Form des Mößbauerspektrums beeinflussen können.

8 Anhang

8.1 Grafiken

8.1.1 Oszilloskop-Signale

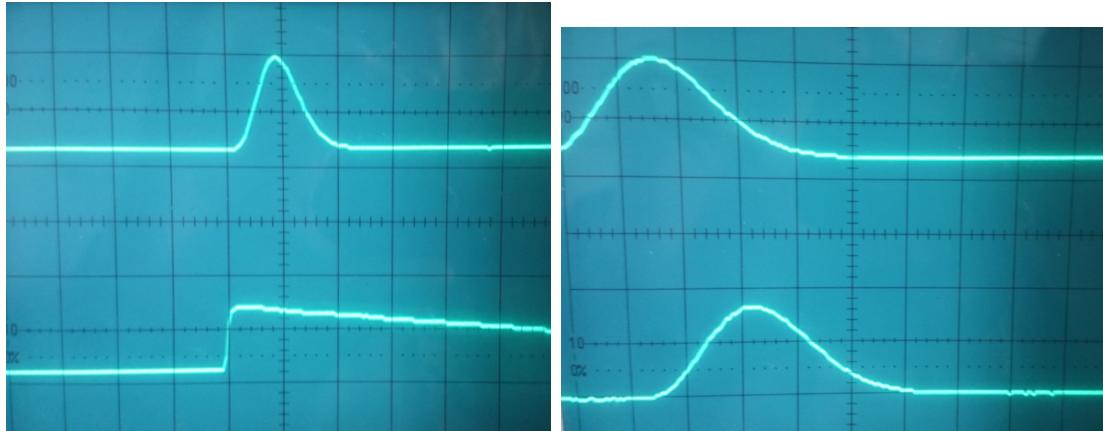


Abbildung 28: links: Signal des Vorverstärkers (unten) und das des Verstärkers (oben) rechts: Signal des Verstärkers vor (unten) und nach der Delay-Einheit (oben)

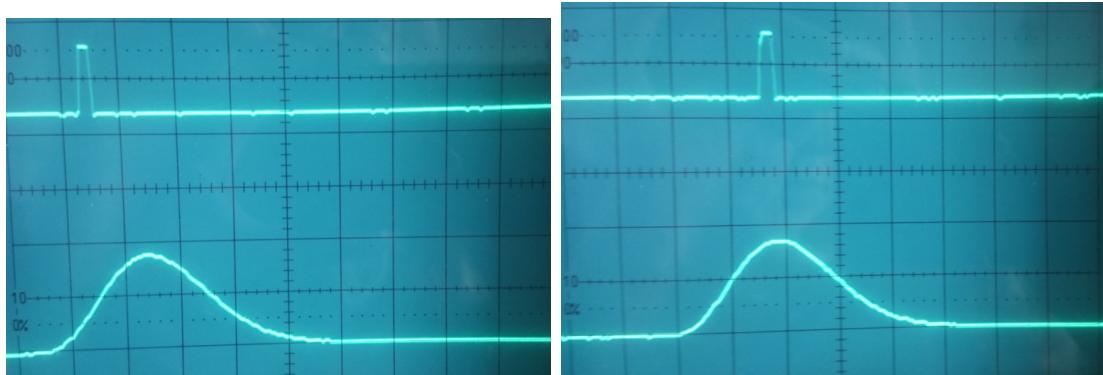


Abbildung 29: Signal des SCA und das des Verstärkers bei verschiedenen Einstellungen der Delay-Einheit

8.1.2 K_{α} -Linien

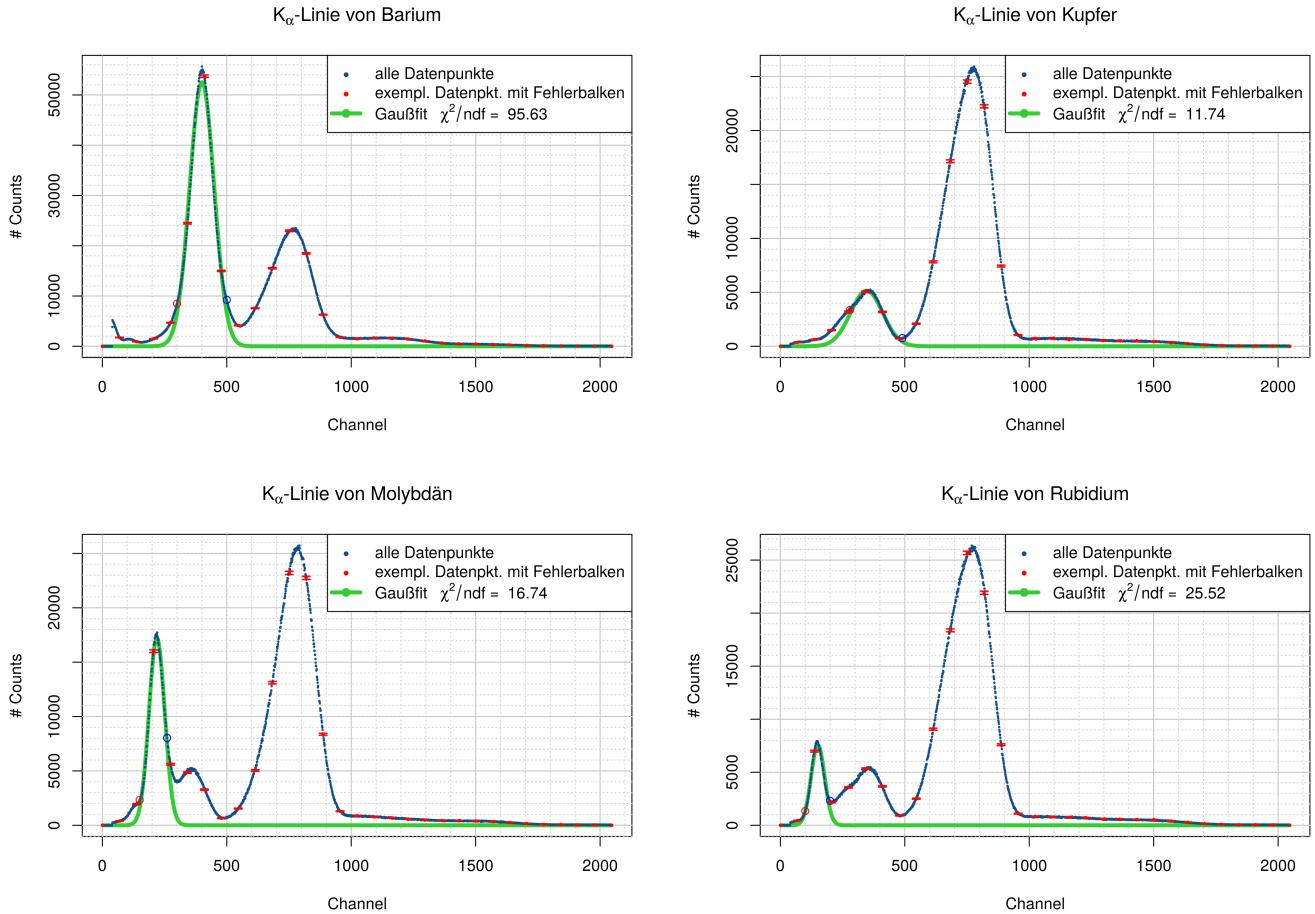


Abbildung 30: Gefittete K_{α} -Linien für die Energieeichung

8.1.3 Nahaufnahmen des 6-Linien-Mößbauer-Spektrums

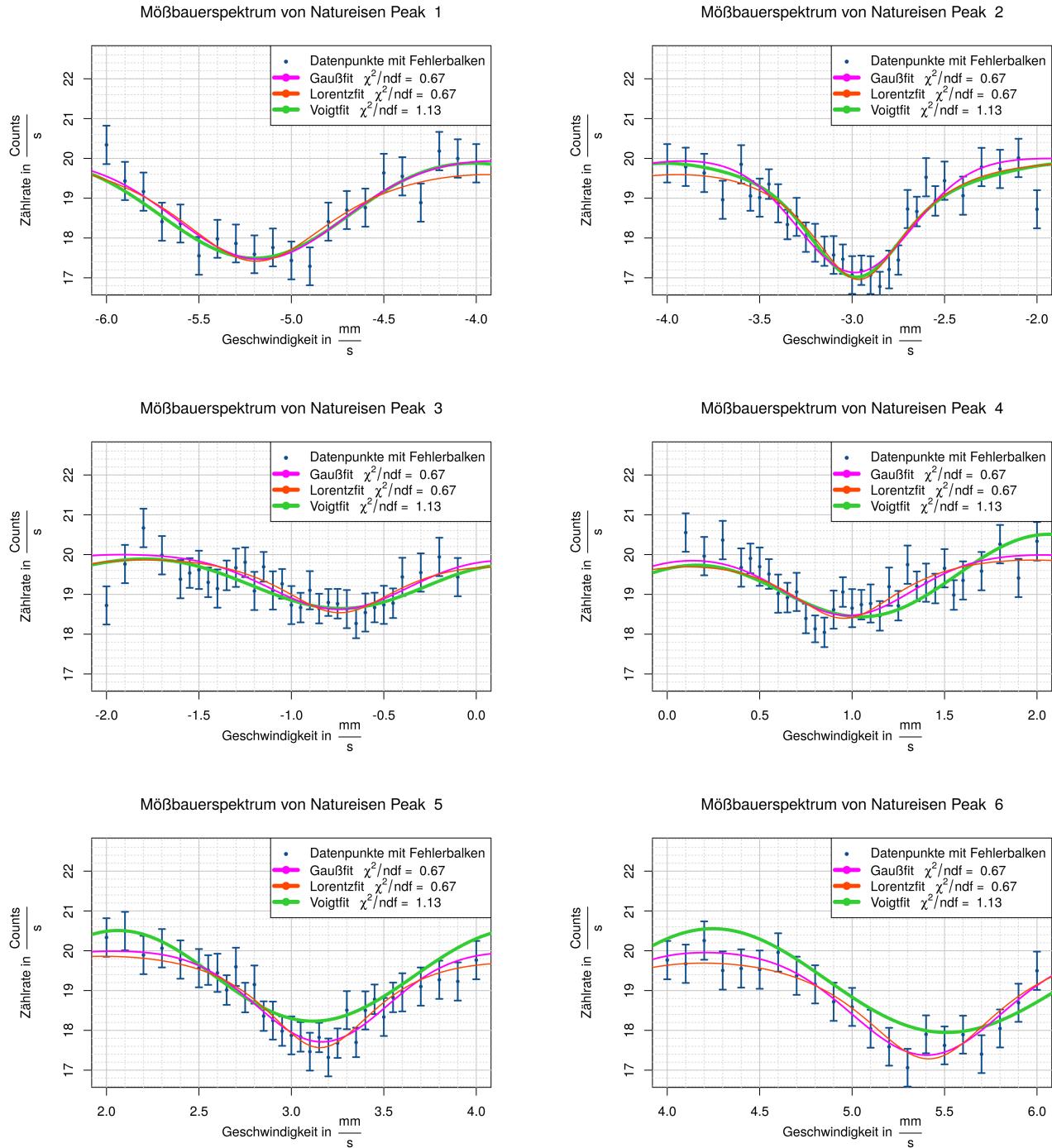


Abbildung 31: Nahaufnahmen der Mößbauerpeaks des 6-Linien-Spektrums

8.1.4 Geschwindigkeitsmessung

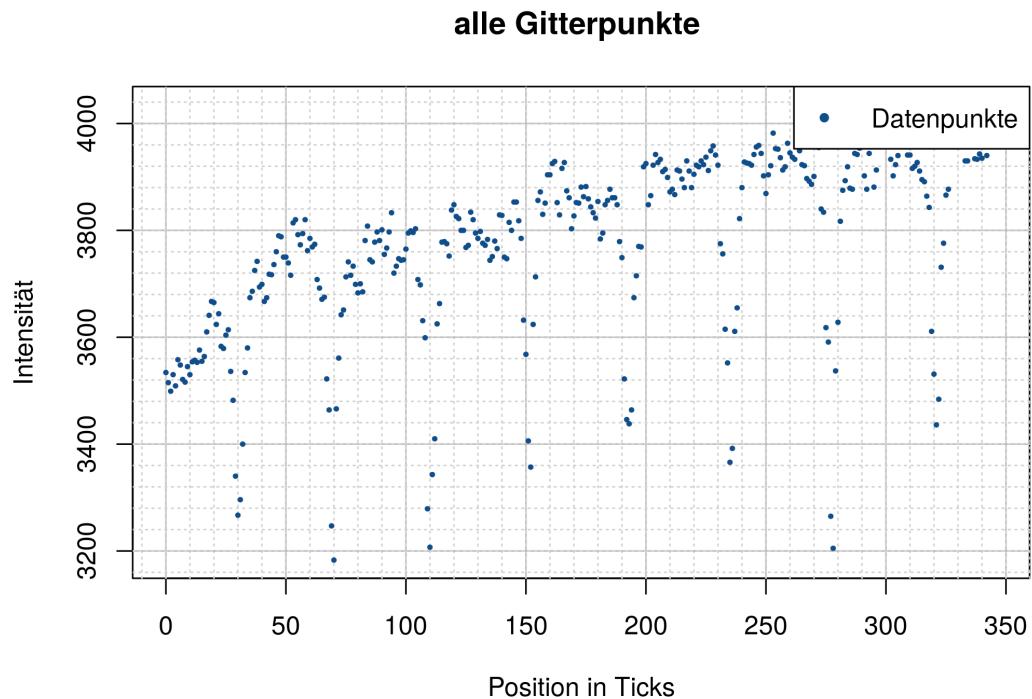
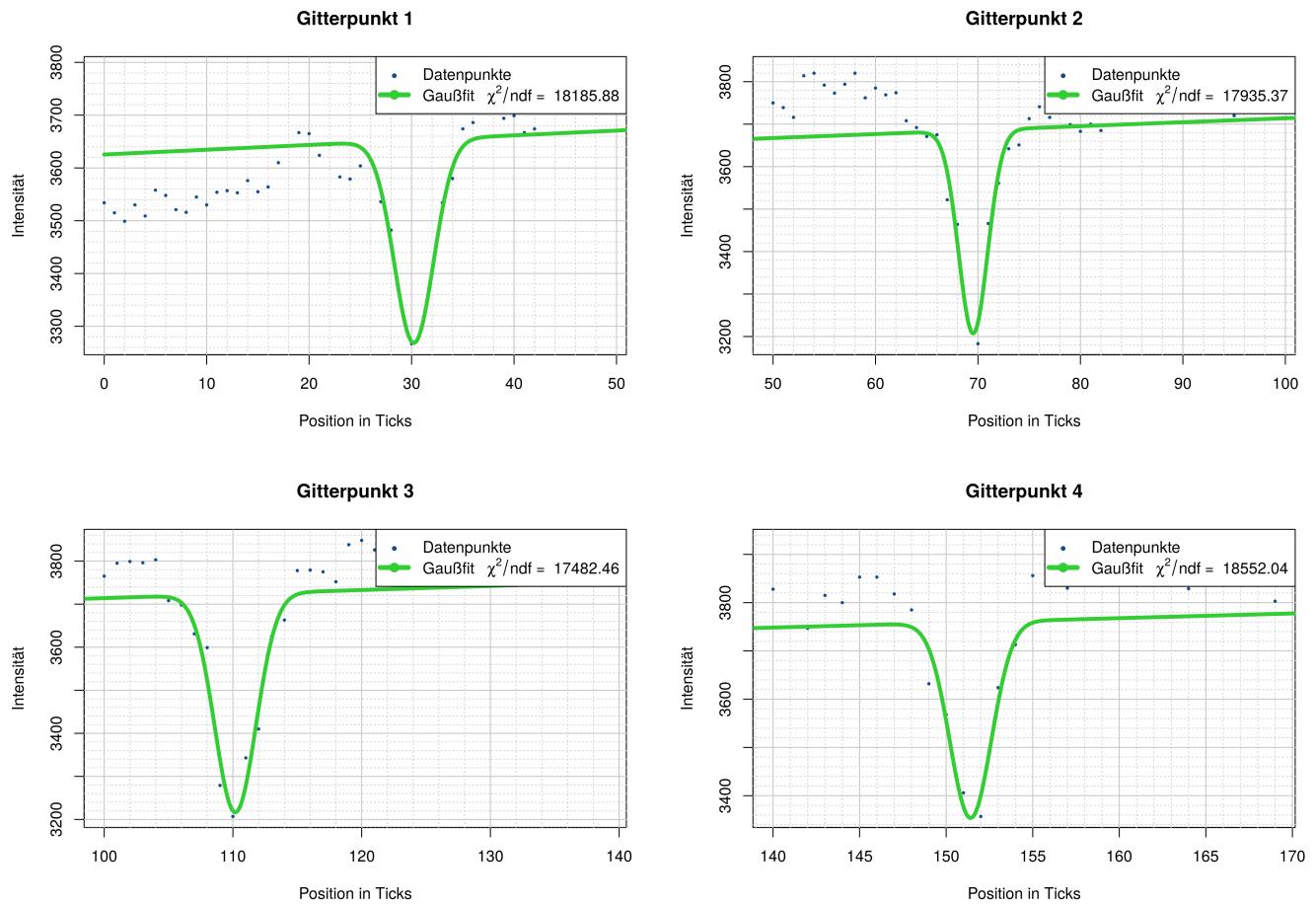


Abbildung 32: Intensitätsverteilung des Eichgitters im Überblick



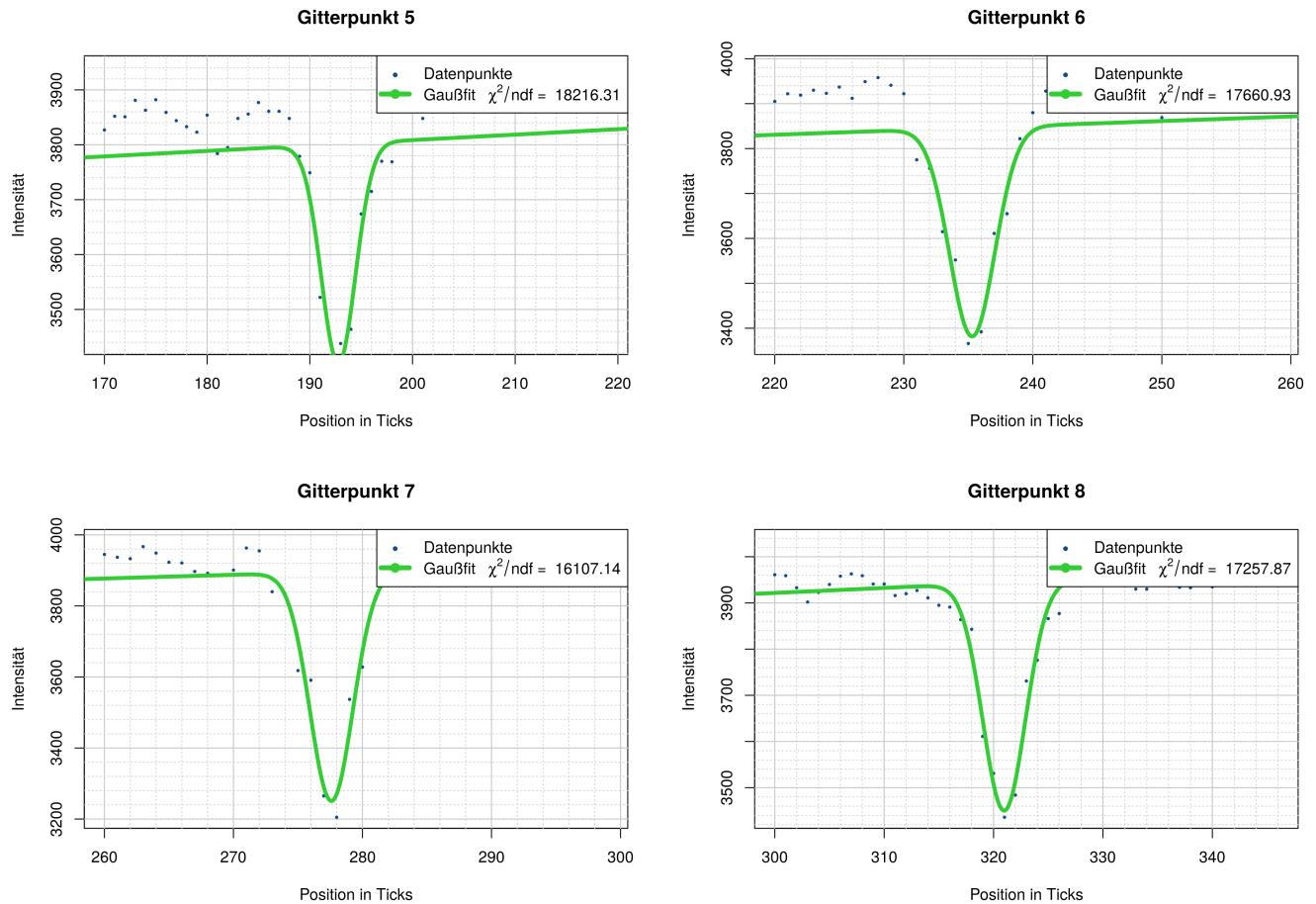
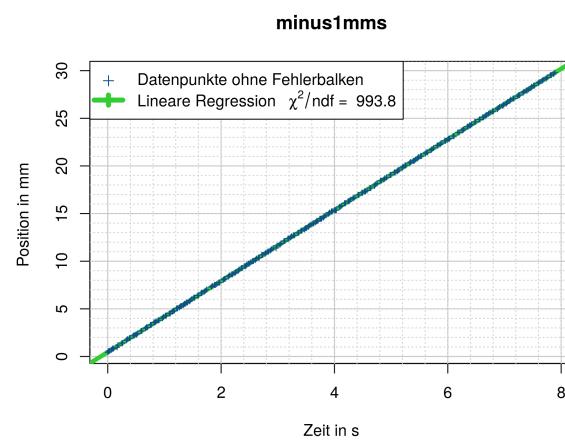
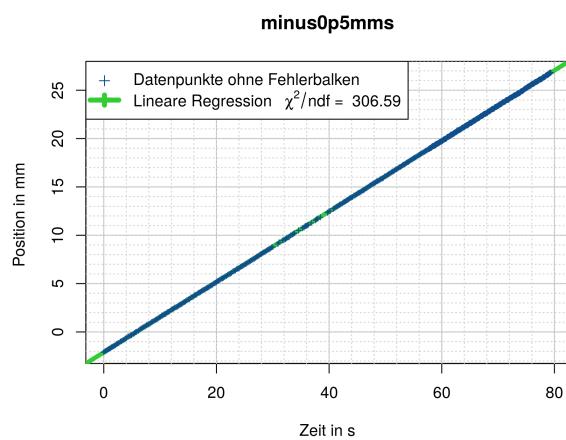
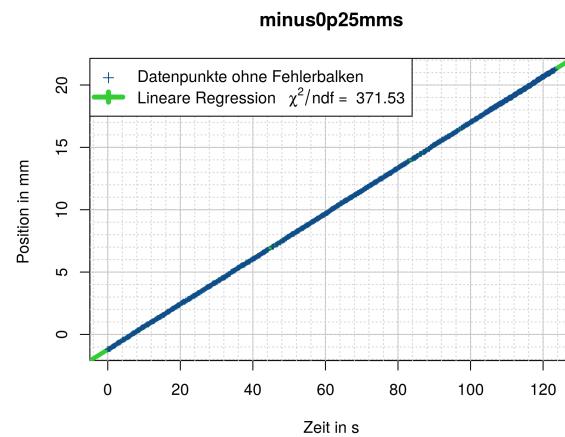
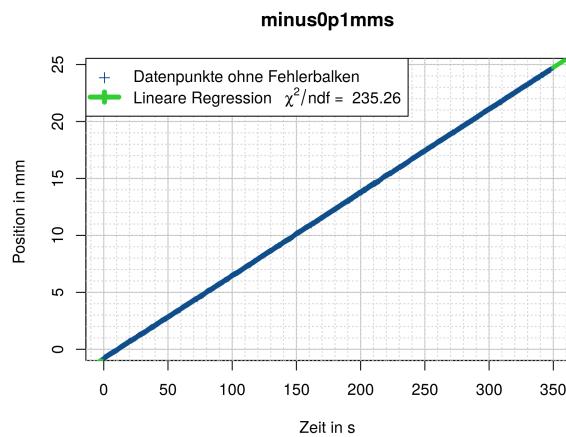
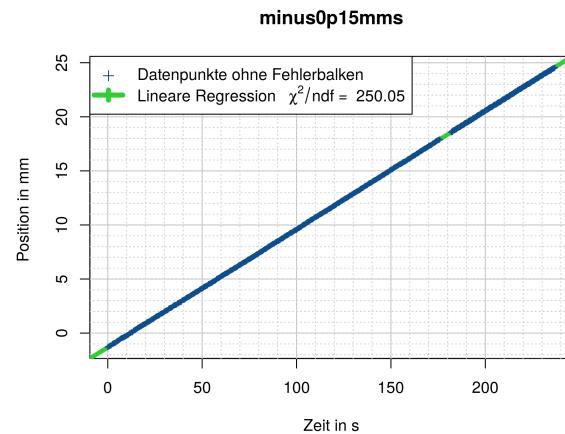
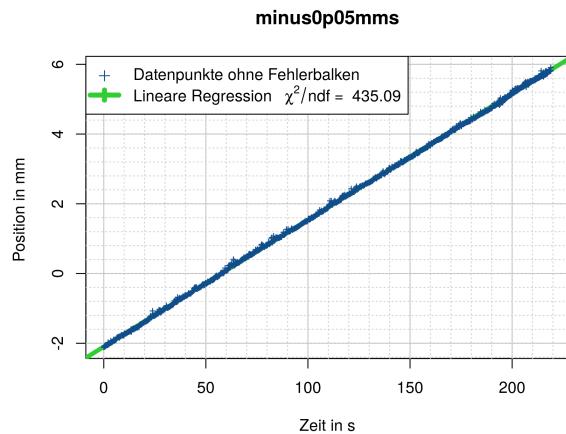
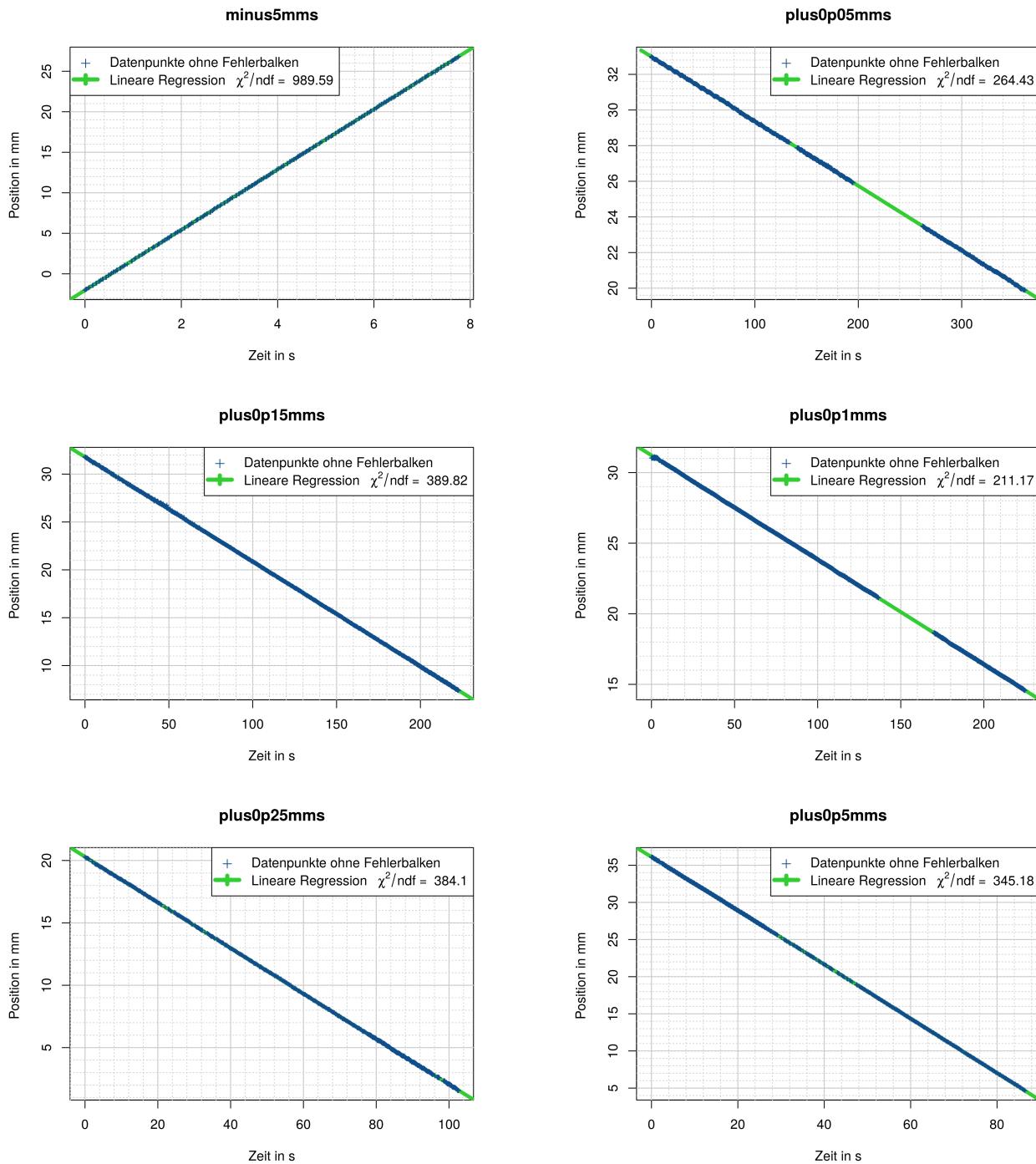


Abbildung 33: Fit der Intensitätspeaks auf dem Schirm zur Abstandseichung.





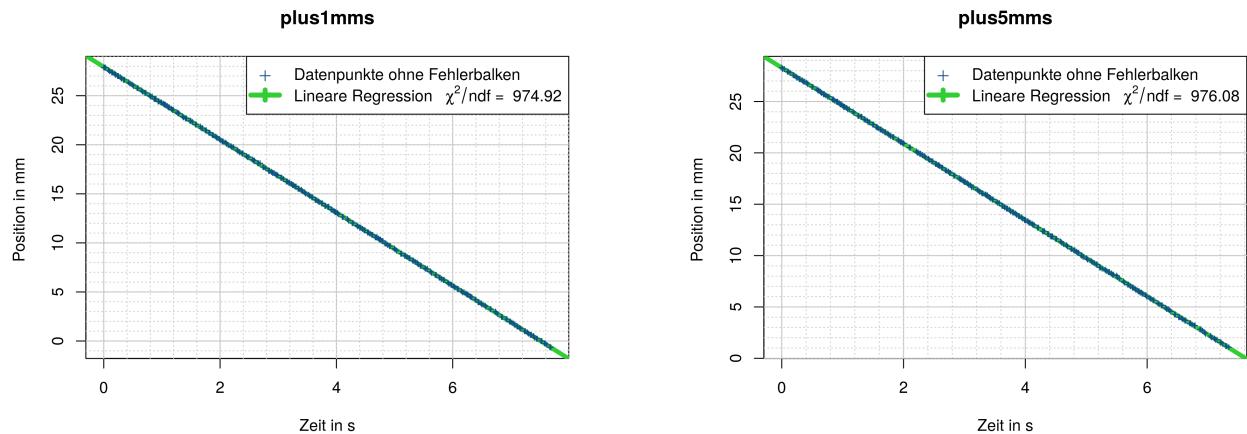


Abbildung 34: Strecke-Zeitdiagramme für alle Geschwindigkeitseinstellungen.

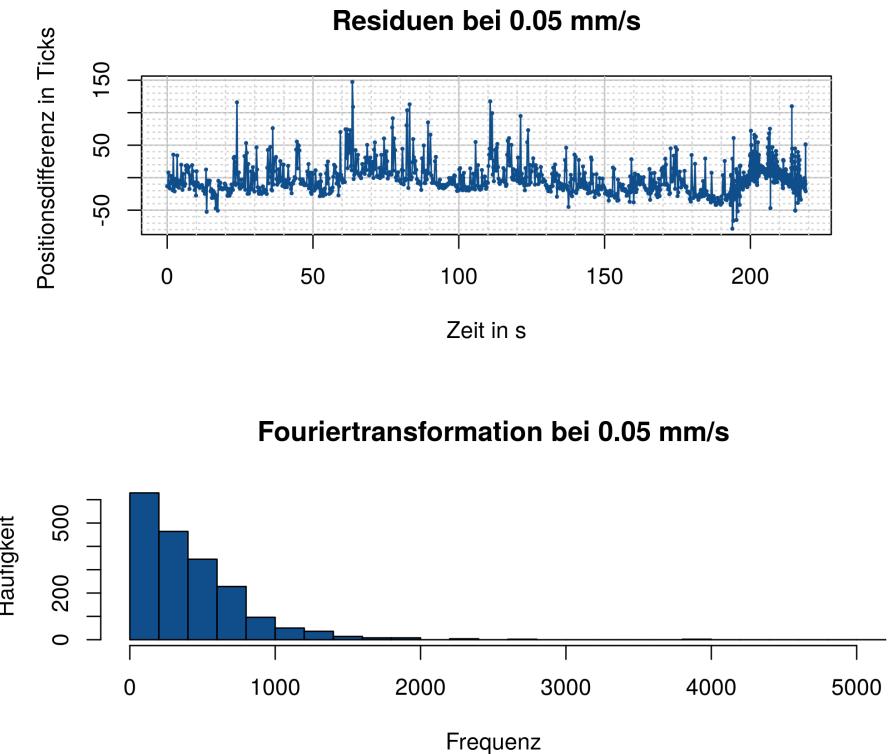


Abbildung 35: Fouriertransformation der Residuen der langsamsten Geschwindigkeitseinstellung

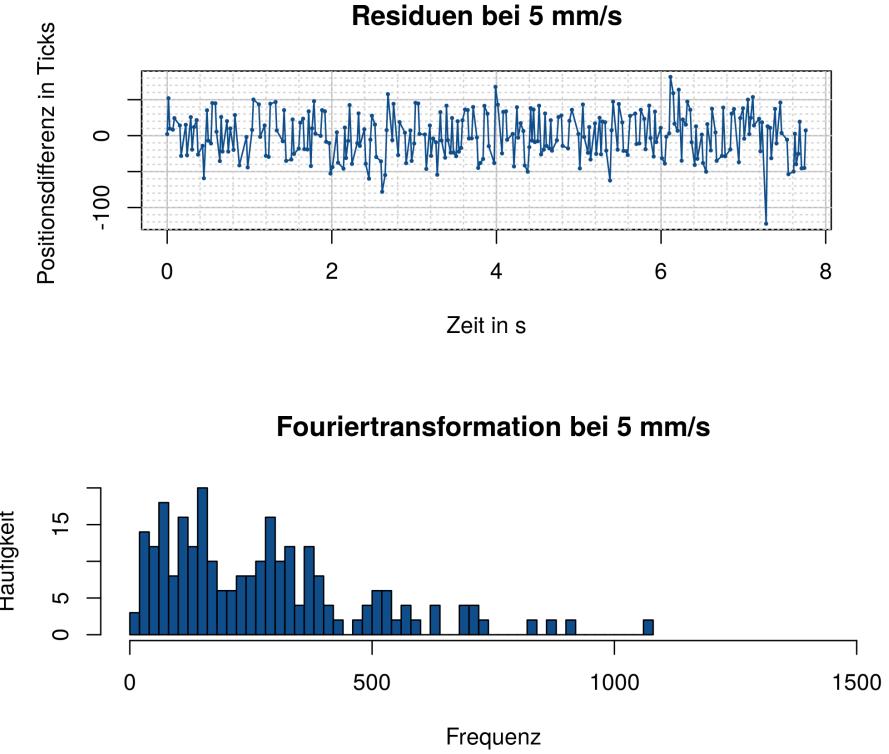


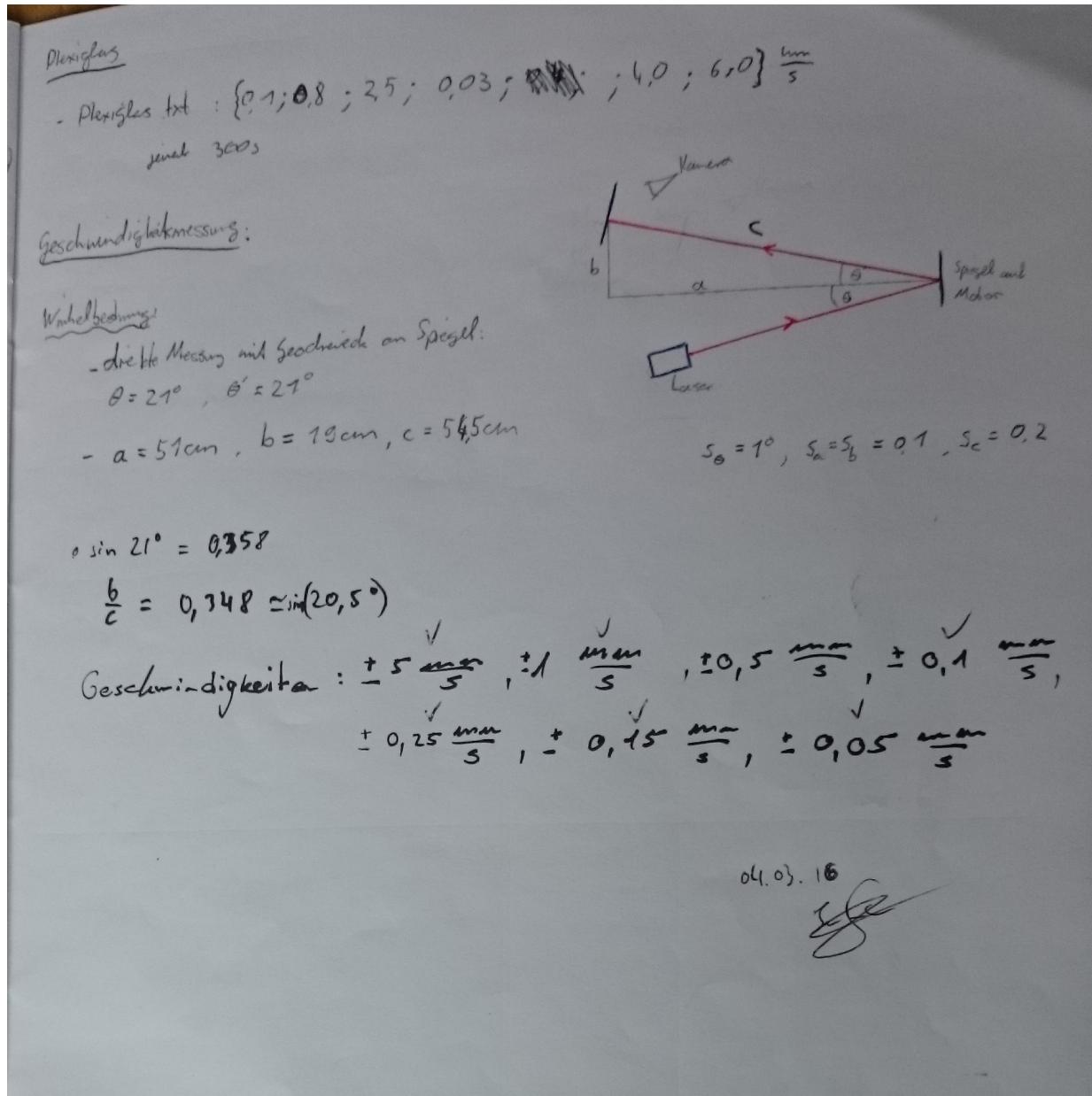
Abbildung 36: Fouriertransformation der Residuen der schnellsten Geschwindigkeitseinstellung

8.2 Laborheft

Mößbauer - Effekt		SCA	upper level: 1,3 lower level: 0,7		
Energie - Eichung		Delay: 3 μs Amplif: gain: 1,15 coarse gain: 50 shaping time: 2 μs			
- Tb. tka					
- Ba. tka					
- Ag. tka					
- Ho. tka					
- Rb. tka					
- Cu. tka					
→ jeweils 100 min gemessen					
- gesamtes Spektrum: Robalt. Lka					
<u>Compton-Untergrund</u> (jeweils 10,0 mm)		fehler auf Dicke: $s_d = 0,02 \text{ mm}$ (Einzelmessung)			
Data-Name 1 - tka	Abs - Dicke / mm	12,54			
Untergrund - 01	$3,10 + 3,99 + 3,99 + 1,16$	7,46	Untergrund - 19	0,21	0,21
Untergrund - 02	$3,10 + 3,99 + 3,09$	11,08	Untergrund - 20	0,21 + 0,21	1,21
Untergrund - 03	$3,99 + 3,99 + 2,00$	7,95	9,93	$1,46 + 0,21$	1,67
Untergrund - 04	$3,99 + 3,99 + 7,00$	8,98	Untergrund - 21	$7,95 + 0,21$	2,16
Untergrund - 05	$3,99 + 3,99$	7,98	Untergrund - 22		
Untergrund - 06	$3,09 + 3,70$	7,09	Untergrund - 23		
Untergrund - 07	$3,99 + 7,95$	5,94			
Untergrund - 08	$3,99 + 7,00$	4,99			
Untergrund - 09	3,99	3,89			
Untergrund - 10	$1,95 + 1,16$	3,41			
Untergrund - 11	$1,95 + 1,0$	2,95			
Untergrund - 12	2,51	2,51			
Untergrund - 13	1,85	1,95			
Untergrund - 14	1,46	1,16			
Untergrund - 15	1,00	1,00			
Untergrund - 16	$0,21 + 0,21 + 0,21 + 0,21$	0,87			
Untergrund - 17	$0,27 + 0,21 + 0,21$	0,66			
Untergrund - 18	$0,27 + 0,27$	0,45			

<u>Edelstahl-Messungen</u>				
Daten-Name	Messdauer pro Schritt / s	Start / $\frac{mm}{s}$	end / $\frac{mm}{s}$	step / $\frac{mm}{s}$
Edelstahl-01-fail	1500	0,1	1,5	0,1
Edelstahl-02	300	0,09	0,19	0,02
Edelstahl-03	300	0,11	0,20	0,02
Edelstahl-04	300	0,22	0,30	0,03
Edelstahl-05	300	0,31	0,43	0,03
Edelstahl-06	300	0,46	0,55	0,05
Edelstahl-07-fail	300	0,60	2,00	abgebrochen bei 105
Edelstahl-08	300	1,10	1,60	0,05
Edelstahl-09	300	1,70	2,10	0,10
Edelstahl-10				
Edelstahl-11	600	3,60	4,00	0,40

<u>Nahm Eisen-Messungen</u>				
Daten-Name	Messdauer pro Schritt / s	Start / $\frac{mm}{s}$	end / $\frac{mm}{s}$	step / $\frac{mm}{s}$
Eisen-01	400	0,10	0,80	0,1
Eisen-02	400	0,80	1,10	0,1
Eisen-03	600	1,20	1,30	0,1
Eisen-04	600	1,60	6,00	0,1
Eisen-05	400	6,10	6,50	0,1
Eisen-06	400	6,60	7,70	0,1
Eisen-07	1000	0,45	1,55	0,1
	1000	2,85	3,55	0,1
	1000	2,55	2,75	0,1
Eisen-08	600	0,01	8,01	0,2



8.3 Quelltext (R)

```

#KOVARIANZ: summary(fit)[6]
#COEFF+ERR: summary(fit)[11]
#DoF: summary(fit)[[4]][[2]]
#Residuen: summary(fit)[[2]]

library(tcltk)#install.packages('tcltk')
library(RcppFaddeeva)#install.packages('RcppFaddeeva')
library(minpack.lm)#install.packages('minpack.lm')
library(rootSolve)#install.packages('rootSolve')
library(Bessel)#install.packages('Bessel')

setwd('/home/moritz/')
graphics.off()

linevec=1:1000#Linien der Gitter
c_light=2.998*10^8#Lichtgeschwindigkeit
hbar=1.055*10^(-34)
e=1.602*10^(-19)
vcorr=1.0484
svcorr=0.0033

#IMPORT
#FITS
#EICHUNG
#UNTERGRUND
#MOESSBAUERSPEKTRUM 1 Linie
#MOESSBAUERSPEKTRUM 6 Linien
#MOTOR

#####
#####FUNCTIONS#####
#####FUNCTIONS#####

errbar <- function(x,y,xplus,xminus,lwd=2,add=TRUE,col='black',cex=1,pch=20){
  arrows(xminus, y, xplus, y, code=3, angle=90, length=2/50, col=col,lwd=lwd)
  points(x,y,col=col,cex=cex,pch=pch)
}

errbar <- function(x,y,yplus,yminus,lwd=2,add=TRUE,col='black',cex=1,pch=20){
  arrows(x, yminus, x, yplus, code=3, angle=90, length=2/50, col=col,lwd=lwd)
  points(x,y,col=col,cex=cex,pch=pch)
}

#grid + minor grid
gridfn <- function(){
  by=c((axTicks(1)[[2]] - axTicks(1)[[1]])/5, (axTicks(2)[[2]] - axTicks(2)[[1]])/5)
  start=c(axTicks(1)[[1]] - 5*by[1], axTicks(2)[[1]] - 5*by[2])
  end=c(start[1]+50*by[1],start[2]+50*by[2])
  abline(v=axTicks(1), col='grey')#Gitter
  abline(v=seq(from = start[1], to = end[1], by = by[1]), lty=3, col='lightgrey')#Gitter
  abline(h=axTicks(2), col='grey')#Gitter
  abline(h=seq(from = start[2], to = end[2], by = by[2]), lty=3, col='lightgrey')#Gitter
}

#####
#####IMPORT#####
#####IMPORT#####

#filename=tk_choose.files() #mehrere auswählen
filename=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/eichung', all.files =
  = FALSE, pattern = '.TKA', full.names=TRUE)
cobaltfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten', all.files =
  = FALSE, pattern = 'Cobalt.TKA', full.names=TRUE)
backfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/untergrund', all.files =
  = FALSE, pattern = '.TKA', full.names=TRUE)
moessfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/messung', all.files =
  = FALSE, pattern = 'Edelstahl_alles', full.names=TRUE)
moess6allfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/messung', all.files =
  = FALSE, pattern = 'Eisen_0', full.names=TRUE)
moessfile6=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/messung', all.files =
  = FALSE, pattern = 'Eisen_alles', full.names=TRUE)
gridfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/motor', all.files =
  = FALSE, pattern = 'gitter', full.names=TRUE)

```

```

motorfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/motor', all.files
  = FALSE, pattern = 'mms', full.names=TRUE)
motorvarfile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/motor', all.files
  = FALSE, pattern = 'schwankung', full.names=TRUE)
plexifile=list.files(path='/home/moritz/Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/Rohdaten/plexi', all.files
  = FALSE, pattern = 'plexi', full.names=TRUE)

spec=list()#Eichspektren
sspec=list()
back=list()#Untergrund
sback=list()
back_time=list()
moess=list()#Moessbauerspektrum
smoess=list()
moess6=list()#Moessbauerspektrum 6 Linien
moess6all=list()
smoess6=list()
grid=list() #Motor Grid
motor=list()#Motor

i=1
for(name in filename){
  data = read.csv(name, sep = "", dec = ".", skip = 2, header = FALSE, as.is = TRUE)
  spec[[i]] = unlist(data)
  sspec[[i]] = sqrt(unlist(data))
  i=i+1
}
i=1
for(name in backfile){
  back[[i]] = unlist(read.csv(name, sep = "", dec = ".", skip = 2, header = FALSE, as.is = TRUE))
  sback[[i]] = sqrt(back[[i]])
  back_time[[i]] = unlist(read.csv(name, sep = "\t", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE))[[2]]
  i=i+1
}
i=1
for(name in motorfile){
  motor[[i]] = read.csv(name, sep = "", dec = ".", skip = 2, header = FALSE, as.is = TRUE)
  i=i+1
}
cobalt=unlist(read.csv(cobaltfile, sep = "", dec = ".", skip = 2, header = FALSE, as.is = TRUE))
scobalt=sqrt(unlist(read.csv(cobaltfile, sep = "", dec = ".", skip = 2, header = FALSE, as.is = TRUE)))
  )

moess=read.csv(moessfile, sep = "", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE)
moess6=read.csv(moessfile6, sep = "", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE)
i=1
for(name in moess6allfile){
  moess6all[[i]] = read.csv(name, sep = "", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE)
  i=i+1
}

grid=read.csv(gridfile, sep = "\t", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE, skip = 1)
motorvar=read.csv(motorvarfile, sep = "\t", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE, skip = 1)

pleximit=read.csv(plexifile[[1]], sep = "", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE)
plexiohne=read.csv(plexifile[[2]], sep = "", dec = ".", header = FALSE, as.is = TRUE)

#####
#####FITS#####
M=list(218,300,280,150,100,410)
N=list(360,500,490,260,200,670)

mu=list()
smu=list()

fit=list()

plotnames=list(expression(paste(K[alpha], '-Linie von Silber')), expression(paste(K[alpha], '-Linie von Barium')), expression(paste(K[alpha], '-Linie von Kupfer')), expression(paste(K[alpha], '-Linie von Molybdän')), expression(paste(K[alpha], '-Linie von Rubidium')), expression(paste(K[alpha], '-Linie von Terbium')))
```

```

i=1
for(name in filename){

  X=(M[[i]]:N[[i]])
  Y=spec[[i]][X]
  sY=sspec[[i]][X]
  wY=1/sY^2

  #Fit
  fit [[i]] = nlsLM(Y ~ (A/sqrt(2*pi*sig^2))*exp( -((X-mu)^2)/(2*sig^2)) , data = data.frame(X,Y) ,
    start = list(A=10000,mu=(N[[i]]+M[[i]])/2,sig=40),weights=wY)

  mu[[i]]=coef(fit [[i]]) [[2]]
  smu[[i]]=coef(fit [[i]]) [[3]]/4

  fitf = function(x){
    return(
      (coef(fit [[i]]) [[ "A" ]]/sqrt(2*pi*coef(fit [[i]]) [[ "sig" ]]^2))*exp( -((x-coef(fit [[i]]) [[ "mu" ]])^2)/(2*coef(fit [[i]]) [[ "sig" ]]^2)))
    )
  }

  png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/eich',i,'.png') , width=7, height=5,
    res=300, unit='in')#Bild exportieren
  plot(1:2046,spec [[i]],col='white',xlab='Channel',ylab='Counts',main=plotnames [[i]])#Plot öffnen
  gridfn()
  chi2=round(sum(summary(fit [[i]]) [[2]]^2)/summary(fit [[i]]) [[4]][[2]],2)
  legend('topright',c('alle Datenpunkte','exempl. Datenpkt. mit Fehlerbalken',as.expression(bquote(
    Gauß fit ~ chi^2/ndf ~ .(chi2))),lty=c(0,0,1),lwd=c(0,0,4),pch=c(20,20,20),col=c('
    dodgerblue4','red','limegreen'))#Legende

  curve(fitf , add = TRUE, col = "limegreen" , lwd = 4, lty = 1, from = 1, to = 2046, n=10000)

  points(1:2046,spec [[i]],pch=20, cex=0.3,col='dodgerblue4')#großer Plot
  points(M[[i]],spec [[i]][M[[i]]],col='red')
  points(N[[i]],spec [[i]][N[[i]]],col='blue')

  samples=round(seq(from=1,to=2046,length.out=31))
  errbar(samples,spec [[i]][samples] , spec [[i]][samples]+sspec [[i]][samples] , spec [[i]][samples]-
    sspec [[i]][samples] , col='red' , add = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)

  dev.off()

  i=i+1
}

energies=list(22.1,32.06,8.04,17.44,13.37,44.23)#aus Anleitung

#####
choice=c(1,2,4,5,6)
X=unlist(energies [choice])
Y=unlist(mu[choice])
sY=unlist(smu[choice])
wY=1/sY^2

fitlin = nlsLM(Y ~ m*X+c , data = data.frame(X,Y) , start = list(m=1,c=0),weights=wY)

fitf = function(x){
  return(
    coef(fitlin)[[ 'm']] *x+coef(fitlin)[[ 'c']]
  )
}
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/eichgerade.png') , width=7, height=5,
  res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(c(8,45),c(100,650),col='white',xlab='Energie in keV',ylab='Channel',main='Eichgerade')
gridfn()
curve(fitf , add = TRUE, col = "limegreen" , lwd = 4, lty = 1, from = 0, to = 700)

chi2=round( sum( summary(fitlin) [[2]]^2)/summary(fitlin) [[4]][[2]],2)
legend('topleft',c('Datenpunkte',as.expression(bquote('lineare Regression ohne Cu' ~ chi^2/ndf ~ .(chi2)))),lty=c(0,1),lwd=c(2,5),pch=c(4,4),col=c('dodgerblue4','limegreen'))#Legende

```

```

points(unlist(energies),unlist(mu),pch=4, lwd=2, cex=1,col='dodgerblue4')#gro ß er Plot
points(unlist(energies)[[3]],unlist(mu)[[3]],pch=4, lwd=2, cex=1,col='red')
errbar(unlist(energies),unlist(mu),unlist(mu)+unlist(smu), unlist(mu)-unlist(smu), col='dodgerblue4',
      , add = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)
errbar(unlist(energies)[[3]],unlist(mu)[[3]],unlist(mu)[[3]]+unlist(smu)[[3]], unlist(mu)[[3]]-
      unlist(smu)[[3]], col='red', add = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)

dev.off()

#Channel in keV
m=coef(fitlin)[[ 'm']]
c=coef(fitlin)[[ 'c']]
sm=(confint(fitlin)[3]-confint(fitlin)[1])/4
sc=(confint(fitlin)[4]-confint(fitlin)[2])/4

energy=((1:2046)-c)/m
senergy=sqrt((sc/m)^2+((energy-c)*sm/m^2)^2+2*(energy-c)*(-0.065)/m^3)
max=172
realmax=170

#Plotte Kobaltspektrum
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/cobalt.png'), width=7, height=5, res
      =300, unit='in')#Bild exportieren
plot(energy,cobalt,col='white',main='Spektrum von Kobalt-57',xlab='Energie in keV',ylab='Counts')
gridfn()

points(energy,cobalt,pch=20, cex=0.3,col='dodgerblue4')
points(energy[max],cobalt[max],col='red')
points(energy[realmax],cobalt[realmax],col='blue')

samples=round(seq(from=1,to=2046,length.out=31))
errbar(energy[samples],cobalt[samples], cobalt[samples]+scobalt[samples], cobalt[samples]-scobalt[
      samples], col='red', add = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)

legend('topleft',c('alle Datenpunkte','exempl. Datenpkt. mit Fehlerbalken'),lty=c(0,0),lwd=c(0,0),
      pch=c(20,20),col=c('dodgerblue4','red'))#Legende

dev.off()

#####
#####UNTERGRUND#####
back_sum=list()
sback_sum=list()
back_wid=c
(12.54,11.08,9.93,8.98,7.98,7.09,5.94,4.99,3.99,3.41,2.95,2.51,1.95,1.46,1,0.87,0.66,0.45,0.21,1.21,1.67,
sback_wid=sqrt(c(4,3,3,3,2,2,2,2,1,2,2,1,1,1,1,4,3,2,1,2,2,2,0))*0.02

for(i in 1:length(back)){
  back_sum[[i]]=sum(back[[i]])
  sback_sum[[i]]=sqrt(sum(sback[[i]]^2))
}
back_rate=unlist(back_sum)/unlist(back_time)
sback_rate=unlist(sback_sum)/unlist(back_time)

#FIT&PLOT

X=back_wid
Y=back_rate
sY=sback_rate
sX=sback_wid
wY=1/sY^2

#Fit
fitexp2 = nls(Y ~ A*exp(-a*X)+B*exp(-b*X), data = data.frame(X,Y), start = list(A=40,a=0.03,B=15,b
      =2), weights=wY)

fitf = function(x){
  return(
    coef(fitexp2)[[ 'A']] *exp(-coef(fitexp2)[[ 'a']] *x)+coef(fitexp2)[[ 'B']] *exp(-coef(fitexp2)[[ 'b']] *
      x)
  )
}

```

```

fitf1 = function(x){
  return(
    coef(fitexp2)[[ 'A']] *exp(-coef(fitexp2)[[ 'a']] *x)
  )
}
fitf2 = function(x){
  return(
    coef(fitexp2)[[ 'B']] *exp(-coef(fitexp2)[[ 'b']] *x)
  )
}

#Plot
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/untergrund.png'), width=7, height=5,
     res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(c(0,14),c(2,56),col='white',xlab='Dicke in mm',ylab=expression('Zählrate in ' ~ s^{-1}),main='
Comptonuntergrund')#Plot öffnen
gridfn()
chi2=round(sum(summary(fitexp2)[[2]]^2)/summary(fitexp2)[[4]][[2]],2)
legend('topright',c('alle Datenpunkte mit Fehlerbalken',as.expression(bquote('doppelter exp-Fit' ~
chi^2/ndf~' = ' ~ .(chi2))),'1. Komponente des exp-Fits','2. Komponente des exp-Fits'),lty=c
(0,1,1,1),lwd=c(0,5,2,2),pch=c(20,20,20,20),col=c('dodgerblue4','limegreen','orangered','purple
'))#Legende

curve(fitf, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = -2, to = 50, n=10000)
curve(fitf1, add = TRUE, col = "orangered", lwd = 2, lty = 1, from = -2, to = 50, n=10000)
curve(fitf2, add = TRUE, col = "purple", lwd = 2, lty = 1, from = -2, to = 50, n=10000)

points(back_wid,back_rate,pch=20, cex=0.3,col='dodgerblue4')#großer Plot

errbar(back_wid, back_rate, back_rate+sback_rate, back_rate-sback_rate, col='dodgerblue4', add =
TRUE, cex=0.3, lwd=1.5)
errbarh(back_wid, back_rate, back_wid+sback_wid, back_wid-sback_wid, col='dodgerblue4', add=TRUE,
cex=0.3, lwd=1.5)

dev.off()

untergrund=coef(fitexp2)[[ 'A']]
suntergrund=(confint(fitexp2)[[5]] - confint(fitexp2)[[1]])/4

#####
#####MOESSBAUERSPEKTRUM#####
#####Edelstahl

moess_rate=moess$V3*1000/moess$V2-coef(fitexp2)[[ 'A']]
smoess_rate=sqrt((sqrt(moess$V3)*1000/moess$V2)^2+((confint(fitexp2)[[5]] - confint(fitexp2)[[1]])/4)^2)
moess_velo=moess$V1
moess_time=moess$V2

##Binning
i=1
moess_velo_bin=c()
moess_rate_bin=c()
smoess_rate_bin=c()
vvec=(-500:500)/100
for(v in vvec){
  if(v %in% moess_velo){
    pos=which(moess_velo==v)
    moess_velo_bin[[i]]=v
    moess_rate_bin[[i]]=(1/length(pos))*sum(moess_rate[pos])
    smoess_rate_bin[[i]]=sqrt(sum(smoess_rate[pos]^2))*(1/length(pos))
    i=i+1
    pos=c()
  }
}

##Fit
X=moess_velo_bin
Y=moess_rate_bin
sY=smoess_rate_bin
wY=1/sY^2

```

```

fitgauss = nlsLM(Y ~ -A*Gauss(X, mu, sig )+C, data = data.frame(X,Y), start = list(A=6.7,mu=.19,sig
= .27,C=20.53),weights=wY)
fitlorentz = nlsLM(Y ~ -A*Lorentz(X, mu,B)+C, data = data.frame(X,Y), start = list(A=7.44,B=.6,mu
= 0.19,C=20.35),weights=wY)
fitvoigt = nlsLM(Y ~ -A*Voigt(X, mu, sig ,B)+C, start=list(A=7.377,B=.30264,mu=0.1745,sig=0.00005,C
= 21.05), data = data.frame(X,Y), weights=wY,control = list(ftol=10^-20,ptol=10^-20,gtol=10^-20))
A1=coef(fitgauss)[[ 'A']]
mu1=coef(fitgauss)[[ 'mu']]
sig1=coef(fitgauss)[[ 'sig']]
C1=coef(fitgauss)[[ 'C']]
fitf1 = function(x){
  return(
    -A1*Gauss(x,mu1,sig1)+C1
  )
}

A2=coef(fitlorentz)[[ 'A']]
B2=coef(fitlorentz)[[ 'B']]
mu2=coef(fitlorentz)[[ 'mu']]
C2=coef(fitlorentz)[[ 'C']]
fitf2 = function(x){
  return(
    -A2*Lorentz(x,mu2,B2)+C2
  )
}

A3=coef(fitvoigt)[[ 'A']]
B3=coef(fitvoigt)[[ 'B']]
mu3=coef(fitvoigt)[[ 'mu']]
sig3=coef(fitvoigt)[[ 'sig']]
C3=coef(fitvoigt)[[ 'C']]
fitf3 = function(x){
  return(
    -A3*Voigt(x,mu3,sig3 ,B3)+C3
  )
}

##Plot
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/moess1.png'), width=7, height=5, res
=300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
plot(moess_velo_bin,moess_rate_bin,col='white',xlab=expression('Geschwindigkeit_{in} \sim \frac{mm}{s}'),ylab=expression('Z\u00e4hlrate_{in} \sim \frac{Counts}{s}'),main='M\u00f6ssbauerspektrum von Edelstahl',ylim=c(12,26.5))#Plot \u00f6ffnen
gridfn()

points(moess_velo_bin,moess_rate_bin,pch=20, cex=0.7,col='dodgerblue4')#gro\u00dfer Plot
errbar(moess_velo_bin,moess_rate_bin, moess_rate_bin+smoess_rate_bin, moess_rate_bin-smoess_rate_bin
, col='dodgerblue4', add = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)

curve(fitf3 , add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = -5, to = 5, n=10000)
curve(fitf1 , add = TRUE, col = "magenta", lwd = 2, lty = 1, from = -5, to = 5, n=10000)
curve(fitf2 , add = TRUE, col = "orangered", lwd = 1.5, lty = 1, from = -5, to = 5, n=10000)

chi1=round(sum(summary(fitgauss)[[2]]^2)/summary(fitgauss)[[4]][[2]],2)
chi2=round(sum(summary(fitlorentz)[[2]]^2)/summary(fitlorentz)[[4]][[2]],2)
chi3=round(sum(summary(fitvoigt)[[2]]^2)/summary(fitlorentz)[[4]][[2]],2)

legend('topleft',c('alle Datenpunkte mit Fehlerbalken',as.expression(bquote('Gau\u00d6 fit' ~ chi^2/ndf
~'=' ~ .(chi1))), as.expression(bquote('Lorentzfit' ~ chi^2/ndf ~'=' ~ .(chi2))), as.
expression(bquote('Voigtfit' ~ chi^2/ndf ~'=' ~ .(chi3))),lty=c(0,1,1,1),lwd=c(0,5,5,5),
pch=c(20,20,20,20),col=c('dodgerblue4','magenta','orangered','limegreen'))#Legende

dev.off()

##Vergr\u00f6\u00dferung
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/moess1_zoom.png'), width=7, height=5,
res=300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
plot(moess_velo_bin,moess_rate_bin,xlim=c(-.5,.8),ylim=c(12.5,23.5),col='white',xlab=expression(
'Geschwindigkeit_{in} \sim mm/s'),ylab=expression('Z\u00e4hlrate_{in} \sim s^{-1}'),main='M\u00f6ssbauerspektrum
von Edelstahl')#Plot \u00f6ffnen
gridfn()

```

```

points(moess_velo_bin, moess_rate_bin, pch=20, cex=0.7, col='dodgerblue4')#gro ß er Plot
errbar(moess_velo_bin, moess_rate_bin, moess_rate_bin+smoess_rate_bin, moess_rate_bin-smoess_rate_bin
      , col='dodgerblue4', add = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)

curve(fitf3, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = -5, to = 5, n=10000)
curve(fitf1, add = TRUE, col = "magenta", lwd = 2, lty = 1, from = -5, to = 5, n=10000)
curve(fitf2, add = TRUE, col = "orangered", lwd = 1.5, lty = 1, from = -5, to = 5, n=10000)

chi1=round(sum(summary(fitgauss)[[2]]^2)/summary(fitgauss)[[4]][[2]],2)
chi2=round(sum(summary(fitlorentz)[[2]]^2)/summary(fitlorentz)[[4]][[2]],2)
chi3=round(sum(summary(fitvoigt)[[2]]^2)/summary(fitlorentz)[[4]][[2]],2)

legend('topright',c('Datenpunkte mit Fehlerbalken',as.expression(bquote('Gauß fit' ~ chi^2/ndf~'~' ~ .(chi1))), as.expression(bquote('Lorentzfit' ~ chi^2/ndf~'~' ~ .(chi2))), as.expression(bquote('Voigtfit' ~ chi^2/ndf~'~' ~ .(chi3))), ),lty=c(0,1,1,1),lwd=c(0.5,5,5),pch=c(20,20,20,20),col=c('dodgerblue4','magenta','orangered','limegreen'))#Legende

dev.off()

##Residuen
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/moess_res.png'), width=7, height=3, res
      =300, unit='in')#Bild exportieren
plot(moess_velo_bin,summary(fitvoigt)[[2]],col='white',xlab=expression('Geschwindigkeit in' ~ mm/s)
      ,ylab=expression('Diff. Zählerate in' ~ s^-1),main='Residuen von Edelstahl')
gridfn()
points(moess_velo_bin,summary(fitvoigt)[[2]],pch=20, cex=0.7,col='dodgerblue4')#gro ß er Plot
lines(moess_velo_bin,summary(fitvoigt)[[2]],lwd=1.1,col='dodgerblue4')

dev.off()
##Linienbreite

gamma=coef(fitvoigt)[[2]]*14.4128/(2*c_light)#in eV *1000/1000
sgamma=summary(fitvoigt)[[11]][[7]]*14.4128/(2*c_light)

t12=log(2)*hbar/(gamma*e)
st12=t12*sgamma/gamma

##Isomerieverschiebung

iso=coef(fitvoigt)[[3]]*14.4128/(c_light)
siso=summary(fitvoigt)[[11]][[8]]*14.4128/(c_light)

##Absorberdicke

fa=0.8#DW-Faktor
n=0.7*8.3313*10^22#Teilchendichte in cm^-3-> Wiki
sn=0.05*8.489*10^22
beta=0.022#Isotopanteil
alpha=8.44#interne Konversionskoeff. -> A.H. Muir Jr. et. al. 1963
salpha=0.50
d=25*10^-4#in cm
I_ex=3/2#Kernspin angeregt
I_gr=1/2#Kernspin Grundzust.

s0=2*pi*(hbar*c_light/(14.4128*1000*e))^2*((2*I_ex+1)/(2*I_gr+1))*(1/(1+alpha))*100^2#
      Wirkungsquerschnitt in cm^-2
ss0=s0*salpha/(1+alpha)

T_abs=fa*n*beta*s0*d
sT_abs=T_abs*sqrt((ss0/s0)^2+(sn/n)^2)

W=2*1.8 #2*1.86#aus Diagramm ablesen
sW=2*(1.92-1.79)/2

gamma_alt=gamma*2/W#Alternative
sgamma_alt=gamma_alt*sqrt((sW/W)^2+(sgamma/gamma)^2)

t12_alt=log(2)*hbar/(gamma_alt*e)
st12_alt=t12_alt*sgamma_alt/gamma_alt

##DW-Faktor ->Wegener: Der mö ß bauereffekt ...

```

```

Z_infty=coef(fitlorentz)[[4]]
sZ_infty=diff(confint(fitlorentz)[c(4,8)])/4
Z_0=-coef(fitlorentz)[[1]]/(pi*coef(fitlorentz)[[2]])+coef(fitlorentz)[[4]]
sZ_0=sqrt(((Z_0-coef(fitlorentz)[[4]])*sqrt((diff(confint(fitlorentz)[c(1,5)])/(4*coef(fitlorentz)[[1]]))^2+(diff(confint(fitlorentz)[c(2,6)]/(4*coef(fitlorentz)[[2]]))^2))^2+(diff(confint(fitlorentz)[c(4,8)]/4)^2)^2)
A = 1 - (Z_0/Z_infty)
sA = (Z_0/Z_infty) * sqrt((sZ_0/Z_0)^2 + (sZ_infty/Z_infty)^2)

B=Re(1-exp(-T_abs/2)*BesselJ(1i * T_abs/2,0))
dB_dx <- function(x){-(1/2) * exp(-x/2) * (BesselJ(1i * x/2,0) + 1i * BesselJ(1i * x/2,1))}
sB=Re(sqrt(dB_dx(T_abs)^2*sT_abs^2))

fq=Re(A/B)
sfq=sqrt((sA/A)^2+(sB/B)^2)

#Natureisen

moess6_rate=moess6$V3*1000/moess6$V2-coef(fitexp2)[[ 'A' ]]
smoess6_rate=sqrt((sqrt(moess6$V3)*1000/moess6$V2)^2+((confint(fitexp2)[[5]]-confint(fitexp2)[[1]])/4)^2)
moess6_velo=moess6$V1
moess6_time=moess6$V2

moess6all_rate=list()
smoess6all_rate=list()
moess6all_velo=list()
moess6all_time=list()

for(i in 1:8){
  moess6all_rate[[i]]=moess6all[[i]]$V3*1000/moess6all[[i]]$V2-coef(fitexp2)[[ 'A' ]]
  smoess6all_rate[[i]]=sqrt((sqrt(moess6all[[i]]$V3)*1000/moess6all[[i]]$V2)^2+((confint(fitexp2)[[5]]-confint(fitexp2)[[1]])/4)^2)
  moess6all_velo[[i]]=moess6all[[i]]$V1
  moess6all_time[[i]]=moess6all[[i]]$V2
}

##Binning
i=1
moess6_velo_bin=c()
moess6_rate_bin=c()
smoess6_rate_bin=c()
vvec=(-1000:1000)/100
for(v in vvec){
  #print(v)
  #print(v %in% moess_velo)
  if(v %in% moess6_velo){
    pos=which(moess6_velo==v)
    moess6_velo_bin[[i]]=v
    moess6_rate_bin[[i]]=(1/length(pos))*sum(moess6_rate[pos])
    smoess6_rate_bin[[i]]=sqrt(sum(smoess6_rate[pos]^2))*(1/length(pos))
    i=i+1
    #print(i)
    pos=c()
  }
}

##Fit

X=moess6_velo_bin
Y=moess6_rate_bin
sY=smoess6_rate_bin
wY=1/sY^2

gauss6_expr=as.formula(Y ~ -A1*Gauss(X,mu1,sig1)-A2*Gauss(X,mu2,sig2)-A3*Gauss(X,mu3,sig3)-A4*Gauss(X,mu4,sig4)-A5*Gauss(X,mu5,sig5)-A6*Gauss(X,mu6,sig6)+C)
lorentz6_expr=as.formula(Y ~ -A1*Lorentz(X,mu1,B1)-A2*Lorentz(X,mu2,B2)-A3*Lorentz(X,mu3,B3)-A4*Lorentz(X,mu4,B4)-A5*Lorentz(X,mu5,B5)-A6*Lorentz(X,mu6,B6)+C)

```

```

voigr6_expr=as.formula(Y ~ -A1*Voigt(X, mu1, sig1, B1)-A2*Voigt(X, mu2, sig2, B2)-A3*Voigt(X, mu3, sig3, B3)-
A4*Voigt(X, mu4, sig4, B4)-A5*Voigt(X, mu5, sig5, B5)-A6*Voigt(X, mu6, sig6, B6)+C)

gauss6_start=list(A1=3,A2=3,A3=3,A4=3,A5=3,A6=3,mu1=-5, mu2=-3, mu3=-1, mu4=1, mu5=3, mu6=5, sig1=.15, sig2=.15, sig3=.15, sig4=.15, sig5=.15, sig6=.15, C=21)
lorentz6_start=list(A1=3,A2=3,A3=3,A4=3,A5=3,A6=3,mu1=-5, mu2=-3, mu3=-1, mu4=1, mu5=3, mu6=5, B1=.15, B2=.15, B3=.15, B4=.15, B5=.15, B6=.15, C=21)
voigt6_start=list(A1=2.981, A2=3.359, A3=1.508, A4=1.109, A5=3.026, A6=3.383, mu1=-5.18, mu2=-2.99, mu3=-.78, mu4=.90, mu5=3.17, mu6=5.42, sig1=.459, sig2=.001, sig3=.368, sig4=.286, sig5=.00004, sig6=.336, B1=.15, B2=.15, B3=.15, B4=.15, B5=.15, B6=.15, C=21)

fitgauss6 = nlsLM(gauss6_expr, data = data.frame(X,Y), start = gauss6_start, weights=wY)
fitlorentz6 = nlsLM(lorentz6_expr, data = data.frame(X,Y), start = lorentz6_start, weights=wY)
fitvoigt6 = nlsLM(voigr6_expr, data = data.frame(X,Y), start=voigt6_start, weights=wY, control = list(ftol=10^-30, ptol=10^-30, gtol=10^-30, maxiter=50))

A1=coef(fitgauss6)[1:6]
mul=coef(fitgauss6)[7:12]
sig1=coef(fitgauss6)[13:18]
C1=coef(fitgauss6)[19]
fitf1 = function(x){
  out=0
  for(i in 1:6){
    out=out+(-A1[[i]]*Gauss(x, mu1[[i]], sig1[[i]]))
  }
  out=out+C1
  return(out)
}

A2=coef(fitlorentz6)[1:6]
mu2=coef(fitlorentz6)[7:12]
B2=coef(fitlorentz6)[13:18]
C2=coef(fitlorentz6)[19]
fitf2 = function(x){
  out=0
  for(i in 1:6){
    out=out+(-A2[[i]]*Lorentz(x, mu2[[i]], B2[[i]]))
  }
  out=out+C2
  return(out)
}

A3=coef(fitvoigt6)[1:6]
mu3=coef(fitvoigt6)[7:12]
sig3=coef(fitvoigt6)[13:18]
B3=coef(fitvoigt6)[19:24]
C3=coef(fitvoigt6)[25]
fitf3 = function(x){
  out=0
  for(i in 1:6){
    out=out+(-A3[[i]]*Voigt(x, mu3[[i]], sig3[[i]], B3[[i]]))
  }
  out=out+C3
  return(out)
}

##Plot
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/moess6.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(4, 4.5, 3, 2))
plot(moess6.velo_bin, moess6.rate_bin, col='white', xlab=expression('Geschwindigkeit_{in} \sim mm/s'), ylab=expression('Z\u00e4hlrate_{in} \sim s^{-1}'), main='M\u00f6 \u00d6 bauerspektrum_{von} Natureisen', ylim=c(16.8, 23.4))# Plot \u00f6ffnen
gridfn()
points(moess6.velo_bin, moess6.rate_bin, pch=20, cex=0.4, col='dodgerblue4')#gro \u00d6 er Plot
errbar(moess6.velo_bin, moess6.rate_bin, moess6.rate_bin+smoess6.rate_bin, moess6.rate_bin-smoess6.rate_bin, col='dodgerblue4', add=TRUE, cex=0.4, lwd=1.5)

curve(fitf3, add=TRUE, col="limegreen", lwd=4, lty=1, from=-20, to=20, n=10000)
curve(fitf1, add=TRUE, col="magenta", lwd=2, lty=1, from=-20, to=20, n=10000)
curve(fitf2, add=TRUE, col="orangered", lwd=1.5, lty=1, from=-20, to=20, n=10000)

chi1=round(sum(summary(fitgauss6)[[2]]^2)/summary(fitgauss6)[[4]][[2]], 2)

```

```

chi2=round(sum(summary(fitlorentz6)[[2]]^2)/summary(fitlorentz6)[[4]][[2]],2)
chi3=round(sum(summary(fitvoigt6)[[2]]^2)/summary(fitlorentz6)[[4]][[2]],2)

legend('topleft',c('alle Datenpunkte mit Fehlerbalken',as.expression(bquote('Gauß fit' ~ chi^2/ndf ~ ' = ' ~ .(chi1))), as.expression(bquote('Lorentzfit' ~ chi^2/ndf ~ ' = ' ~ .(chi2))), as.expression(bquote('Voigtfit' ~ chi^2/ndf ~ ' = ' ~ .(chi3))), lty=c(0,1,1,1),lwd=c(0,4,4,4), pch=c(20,20,20,20),col=c('dodgerblue4','magenta','orangered','limegreen'))#Legende

dev.off()

#Vergrößerte Plots
fenster=list(c(-6,-4),c(-4,-2),c(-2,0),c(0,2),c(2,4),c(4,6))

for(i in 1:6){
  png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/moess6_',i,'.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
  par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+1)
  plot(moess6_velo_bin,moess6_rate_bin,xlim=c(fenster[[i]][[1]],fenster[[i]][[2]]),ylim=c(16.8,22.6),
    col='white',xlab=expression('Geschwindigkeit' ~ frac(mm,s)),ylab=expression('Zählrate' ~ frac(Counts,s)),main=as.expression(bquote('Mößbauerspektrum von Natureisen Peak' ~ .(i))) )#Plot öffnen
  gridfn()
}

points(moess6_velo_bin,moess6_rate_bin,pch=20, cex=0.7,col='dodgerblue4')#großer Plot
errbar(moess6_velo_bin,moess6_rate_bin, moess6_rate_bin+smoess6_rate_bin, moess6_rate_bin-smoess6_rate_bin, col='dodgerblue4', add=TRUE, cex=0.5, lwd=2)

curve(fitf3, add=TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = -10, to = 10, n=10000)
curve(fitf1, add=TRUE, col = "magenta", lwd = 2, lty = 1, from = -10, to = 10, n=10000)
curve(fitf2, add=TRUE, col = "orangered", lwd = 1.5, lty = 1, from = -10, to = 10, n=10000)

chi1=round(sum(summary(fitgauss6)[[2]]^2)/summary(fitgauss6)[[4]][[2]],2)
chi2=round(sum(summary(fitlorentz6)[[2]]^2)/summary(fitlorentz6)[[4]][[2]],2)
chi3=round(sum(summary(fitvoigt6)[[2]]^2)/summary(fitlorentz6)[[4]][[2]],2)

legend('topright',c('Datenpunkte mit Fehlerbalken',as.expression(bquote('Gauß fit' ~ chi^2/ndf ~ ' = ' ~ .(chi1))), as.expression(bquote('Lorentzfit' ~ chi^2/ndf ~ ' = ' ~ .(chi2))), as.expression(bquote('Voigtfit' ~ chi^2/ndf ~ ' = ' ~ .(chi3))), lty=c(0,1,1,1),lwd=c(0,5,5,5), pch=c(20,20,20,20),col=c('dodgerblue4','magenta','orangered','limegreen'))#Legende

dev.off()
}

## Datensätze
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/moess6all.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(4, 4.5, 3, 2))
plot(moess6all_velo[[8]],moess6all_rate[[8]],col='white',xlab=expression('Geschwindigkeit' ~ mm/s),ylab=expression('Zählrate' ~ s^{-1}),main='Mößbauerspektren einzelne Datensätze',ylim=c(16,21))#Plot öffnen
gridfn()

color=list('brown','red','blue','orange','magenta','cyan','black','green')
curve(fitf2, add=TRUE, col = "grey", lwd = 3, lty = 1, from = -10, to = 10, n=10000)

for(i in 1:8){
  points(moess6all_velo[[i]],moess6all_rate[[i]],pch=20, cex=1,col=color[[i]])#großer Plot
}
dev.off()

##Energien
energies6=14.4128 * coef(fitlorentz6)[7:12] / c_light
senergies6=14.4128 * summary(fitlorentz6)[[11]][26:31] / c_light

##Isomerieverschiebung
iso6=c()
siso6=c()

iso6[1]=14.4128 * mean(coef(fitlorentz6)[c(9,10)]) / c_light
iso6[2]=14.4128 * mean(coef(fitlorentz6)[c(8,11)]) / c_light
iso6[3]=14.4128 * mean(coef(fitlorentz6)[c(7,12)]) / c_light

```

```

siso6[1]=14.4128 * sqrt(summary(fitlorentz6)[[11]][[28]]^2+summary(fitlorentz6)[[11]][[29]]^2)/(2*c_
light)
siso6[2]=14.4128 * sqrt(summary(fitlorentz6)[[11]][[27]]^2+summary(fitlorentz6)[[11]][[30]]^2)/(2*c_
light)
siso6[3]=14.4128 * sqrt(summary(fitlorentz6)[[11]][[26]]^2+summary(fitlorentz6)[[11]][[31]]^2)/(2*c_
light)

iso6_mean=weighted.mean(iso6,1/siso6^2)
siso6_mean=sqrt(1/sum(1/siso6^2))

##Hyperfein

hyper6=(energies6-is06_mean)
shyper6=sqrt(senergies6^2+siso6_mean^2)

mug=0.09044
mua=c()
smua=c()

p=hyper6[[2]]/hyper6[[3]]
sp=p*sqrt((shyper6[[2]]/hyper6[[2]])^2+(shyper6[[3]]/hyper6[[3]])^2)
q=hyper6[[5]]/hyper6[[4]]
sq=q*sqrt((shyper6[[5]]/hyper6[[5]])^2+(shyper6[[4]]/hyper6[[4]])^2)
mua[1]=3*mug*((1-p)/(1+p))
mua[2]=3*mug*((1-q)/(1+q))
smua[1]=6*mug*sp/(p+1)^2
smua[2]=6*mug*sq/(q+1)^2

p=hyper6[[1]]/hyper6[[3]]
sp=p*sqrt((shyper6[[1]]/hyper6[[1]])^2+(shyper6[[3]]/hyper6[[3]])^2)
q=hyper6[[6]]/hyper6[[4]]
sq=q*sqrt((shyper6[[6]]/hyper6[[6]])^2+(shyper6[[4]]/hyper6[[4]])^2)
mua[3]=mug*((1-p)/(1+p/3))
mua[4]=mug*((1-q)/(1+q/3))
smua[3]=12*mug*sp/(p+3)^2
smua[4]=12*mug*sq/(q+3)^2

p=hyper6[[1]]/hyper6[[2]]
sp=p*sqrt((shyper6[[1]]/hyper6[[1]])^2+(shyper6[[2]]/hyper6[[2]])^2)
q=hyper6[[6]]/hyper6[[5]]
sq=q*sqrt((shyper6[[6]]/hyper6[[6]])^2+(shyper6[[5]]/hyper6[[5]])^2)
mua[5]=mug*((p-1)/(p/3-1))
mua[6]=mug*((q-1)/(q/3-1))
smua[5]=6*mug*sp/(p-3)^2
smua[6]=6*mug*sq/(q-3)^2

mug=0.09044*1.0545718 * 10^-34/(2*1.6726219 * 10^-27)
mua=mua*1.0545718 * 10^-34/(2*1.6726219 * 10^-27)
smua=smua*1.0545718 * 10^-34/(2*1.6726219 * 10^-27)

B=c()
sB=c()
B[1]=hyper6[[1]]/(mean(mua[1:2])-mug)
B[2]=-hyper6[[6]]/(mean(mua[1:2])-mug)
B[3]=hyper6[[2]]/(mean(mua[3:4])/3-mug)
B[4]=-hyper6[[5]]/(mean(mua[3:4])/3-mug)
B[5]=-hyper6[[3]]/(mean(mua[5:6])/3+mug)
B[6]=hyper6[[4]]/(mean(mua[5:6])/3+mug)
sB[1]=B[1]*sqrt((shyper6[[1]]/hyper6[[1]])^2+((sqrt(sum(smua[1:2]^2))/2)/(mean(mua[1:2])-mug))^2)
sB[2]=B[2]*sqrt((shyper6[[6]]/hyper6[[6]])^2+((sqrt(sum(smua[1:2]^2))/2)/(mean(mua[1:2])-mug))^2)
sB[3]=B[3]*sqrt((shyper6[[2]]/hyper6[[2]])^2+((sqrt(sum(smua[3:4]^2))/6)/(mean(mua[3:4])/3-mug))^2)
sB[4]=B[4]*sqrt((shyper6[[5]]/hyper6[[5]])^2+((sqrt(sum(smua[3:4]^2))/6)/(-mean(mua[3:4])/3+mug))^2)
sB[5]=B[5]*sqrt((shyper6[[3]]/hyper6[[3]])^2+((sqrt(sum(smua[5:6]^2))/6)/(mean(mua[5:6])/3+mug))^2)
sB[6]=B[6]*sqrt((shyper6[[4]]/hyper6[[4]])^2+((sqrt(sum(smua[5:6]^2))/6)/(mean(mua[5:6])/3+mug))^2)

##Linienbreite

gamma6=coef(fitlorentz6)[13:18]*14.4128/(2*c_light)#in eV *1000/1000
sgamma6=summary(fitlorentz6)[[11]][32:37]*14.4128/(2*c_light)

```

```

t12_6=log(2)*hbar/(gamma6*e)
st12_6=t12_6*sgamma6/gamma6

##Absorberdicke

fa=0.8#DW-Faktor
n=0.98*8.489*10^22#Teilchendichte in cm^-3-> Wiki
sn=0.02*8.489*10^22
beta=0.022#Isotopanteil
alpha=8.44#interne Konversionskoeff. -> A.H. Muir Jr. et al. 1963
salpha=0.50
d=25*10^-4#in cm
I_ex=3/2#Kernspin angeregt
I_gr=1/2#Kernspin Grundzust.

amp=c(3,2,1,1,2,3)/12

s0_6=2*pi*(hbar*c_light/(14.4128*1000*e))^2*((2*I_ex+1)/(2*I_gr+1))*(1/(1+alpha))*100^2*amp#
      Wirkungsquerschnitt in cm^2

ss0_6=s0_6*salpha*amp/(1+alpha)

T6_abs=fa*n*beta*s0_6*d
sT6_abs=T6_abs*sqrt((ss0_6/s0_6)^2+(sn/n)^2)

W6=2*c(1.05,1.03,1.01,1.01,1.03,1.05)#aus Diagramm ablesen
sW6=2*c(0.03,0.03,0.03,0.03,0.03,0.03)

gamma6_alt=gamma6*2/W6#Alternative
sgamma6_alt=gamma6_alt*sqrt((sW6/W6)^2+(sgamma6/gamma6)^2)

t12_6_alt=log(2)*hbar/(gamma6_alt*e)
st12_6_alt=t12_6_alt*sgamma6_alt/gamma6_alt

realamp=summary(fitlorentz6)[[1]][1:6]/summary(fitlorentz6)[[1]][3]
srealamp=realamp*sqrt((summary(fitlorentz6)[[1]][20:25] / summary(fitlorentz6)[[1]][1:6])^2 + (summary(fitlorentz6)[[1]][22] / summary(fitlorentz6)[[1]][3])^2)

##DW-Faktor -> Wegener: Der mö β bauereffekt ...

Z6_infty=coef(fitlorentz6)[[19]]
sZ6_infty=summary(fitlorentz6)[[1]][[38]]
Z6_0=fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][7:12])
sZ6_0=c(sqrt(var(fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][7]+fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][26]*rnorm(10000))))),sqrt(var(fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][8]+fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][27]*rnorm(10000))))),sqrt(var(fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][9]+fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][28]*rnorm(10000))))),sqrt(var(fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][10]+fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][29]*rnorm(10000))))),sqrt(var(fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][11]+fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][30]*rnorm(10000))))),sqrt(var(fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][12]+fitf2(summary(fitlorentz6)[[1]][31]*rnorm(10000)))))))

A6 = 1 - (Z6_0/Z6_infty)
sA6 = (Z6_0/Z6_infty) * sqrt((sZ6_0/Z6_0)^2 + (sZ6_infty/Z6_infty)^2)

B6=Re(1-exp(-T6_abs/2)*BesselJ(1i * T6_abs/2,0))
dB_dx <- function(x){-(1/2) * exp(-x/2) * (BesselJ(1i * x/2,0) + 1i * BesselJ(1i * x/2,1))}
sB6=Re(sqrt(dB_dx(T6_abs)^2*sT6_abs^2))

fq6=Re(A6/B6)
sfq6=sqrt((sA6/A6)^2+(sB6/B6)^2)

#####
graphics.off()

X=unlist(grid$V1)
Y=unlist(grid$V2)

choice=list(1:50,51:100,101:140,141:170,171:220,221:260,261:300,301:347)
mw=list(30,75,110,152,192,235,275,325)

fitgauss_grid=list()

for(i in 1:8){


```

```

gauss_grid_expr=as.formula(Y ~ -A1*Gauss(X,mul,sig1)+D*X+E )
gauss_grid_start=list(A1=1839,mul=mw[[ i ]],sig1=1.9,D=5,E=3625)
fitgauss_grid[[ i ]] = nlsLM(gauss_grid_expr, data = data.frame(X[ choice [[ i ]]] ,Y[ choice [[ i ]]] ) ,
start = gauss_grid_start)

fitf = function(x){
  return(
    -coef(fitgauss_grid[[ i ]])[[ 'A1' ]]*Gauss(x,coef(fitgauss_grid[[ i ]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[ i ]])[[ 'sig1' ]])+coef(fitgauss_grid[[ i ]])[[ 'D' ]]*x+coef(fitgauss_grid[[ i ]])[[ 'E' ]]
  )
}

png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/gitter_',i,'.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(X[ choice [[ i ]]] ,Y[ choice [[ i ]]] ,col='white',xlab=expression('Position\u00d7in\u00d7Ticks'),ylab=expression('Intensit\u00e4t'),main=paste0('Gitterpunkt\u00d7',i))#Plot \u00f6ffnen
gridfn()

points(grid$V1[ choice [[ i ]]] ,grid$V2[ choice [[ i ]]] ,pch=20, cex=0.5,col='dodgerblue4')#gro \u00d6 er Plot
curve(fitf, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = 0, to = 400, n=10000)

chi1=round(sum(summary(fitgauss_grid[[ i ]])[[2]]^2)/summary(fitgauss_grid[[ i ]])[[4]][[2]],2)
legend('topright',c('Datenpunkte',as.expression(bquote('Gau \u00d6 fit\u00d7' ~ chi^2/ndf~'=\u00d7' ~ .(chi1))),lty=c(1,1),lwd=c(0,5),pch=c(20,20),col=c('dodgerblue4','limegreen'))#Legende

dev.off()

png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/gitter_all.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(X,Y,col='white',xlab=expression('Position\u00d7in\u00d7Ticks'),ylab=expression('Intensit\u00e4t'),main=paste0('alle\u00d7Gitterpunkte\u00d7'))#Plot \u00f6ffnen
gridfn()

points(X,Y,pch=20, cex=0.5,col='dodgerblue4')#gro \u00d6 er Plot
legend('topright',c('Datenpunkte'),lty=c(0),lwd=c(1),pch=c(20),col=c('dodgerblue4'))#Legende
dev.off()

#Gitter

gridat=c(coef(fitgauss_grid[[1]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[2]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[3]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[4]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[5]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[6]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[7]])[[ 'mul' ]],coef(fitgauss_grid[[8]])[[ 'mul' ]])
sgridat=c(summary(fitgauss_grid[[1]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[2]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[3]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[4]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[5]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[6]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[7]])[[11]][[8]],summary(fitgauss_grid[[8]])[[11]][[8]])
griddiff=diff(gridat)
sgriddiff=c(sqrt(sum(sgridat[1:2]^2)), sqrt(sum(sgridat[2:3]^2)), sqrt(sum(sgridat[3:4]^2)), sqrt(sum(sgridat[4:5]^2)), sqrt(sum(sgridat[5:6]^2)), sqrt(sum(sgridat[6:7]^2)), sqrt(sum(sgridat[7:8]^2)))
griddiffat=c(sum(gridat[1:2])/2,sum(gridat[2:3])/2,sum(gridat[3:4])/2,sum(gridat[4:5])/2,sum(gridat[5:6])/2,sum(gridat[6:7])/2,sum(gridat[7:8])/2)

png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/griddiff.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(griddiffat,griddiff,col='white',xlab=expression('Position\u00d7in\u00d7Ticks'),ylab=expression('Ticks/(0.5\u00d7cm)'),main='Abst\u00e4nde\u00d7der\u00d7Gitterlinien',ylim=c(38,44))#Plot \u00f6ffnen
gridfn()

points(griddiffat,griddiff,pch=20, cex=0.5,col='dodgerblue4')#gro \u00d6 er Plot
errbar(griddiffat,griddiff, griddiff+sgriddiff, griddiff-sgriddiff, col='dodgerblue4', add = TRUE, cex=0.5, lwd=2)
curve(fitf, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = 0, to = 400, n=10000)

legend('topleft',c('Datenpunkte\u00d7mit\u00d7Fehlerbalken'),lty=c(0),lwd=c(1),pch=c(20),col=c('dodgerblue4'))#Legende

dev.off()

```

```

#Anpassung

position=c(((1:8)/2-.5)*10) #in mm

fittick=nlsm(position ~ a*gridat^2+b*gridat+c, data = data.frame(gridat, position), start=list(a=0,b=-1,c=0))

fitfanpassung <- function(x){
  return(
    coef(fittick)[[ 'a' ]]*x^2+coef(fittick)[[ 'b' ]]*x+coef(fittick)[[ 'c' ]]
  )
}

png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/gridfit.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(gridat, position, col='white', xlab=expression('Position in Ticks'), ylab=expression('Position in mm'), main='Gitterlinienpositionen')#Plot öffnen
gridfn()

curve(fitfanpassung, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4, lty = 1, from = 0, to = 1000, n=10000)
points(gridat, position, pch=20, cex=0.5,col='dodgerblue4')#großer Plot

legend('topleft',c('Datenpunkte','quadratischer Fit'),lty=c(0,1),lwd=c(0,4),pch=c(20,20),col=c('dodgerblue4','limegreen'))#Legende

dev.off()

#Geschwindigkeiten

motorerr=sqrt(var(motorvar$V2))
v=c()
sv=c()

fitmotor=list()

for(i in 1:14){
  t=(motor[[i]]$V1-min(motor[[i]]$V1))/1000
  X=fitfanpassung(motor[[i]]$V3)
  SX=abs((2*coef(fittick)[[ 'a' ]]*X+coef(fittick)[[ 'b' ]])*motorerr)
  wX=1/SX^2

  fitmotor[[i]]=nlsm(X ~ a*t^2+v*t+x_0, data = data.frame(t,X), start = list(v=1,x_0=0,a=0), weights = wX)
  v[i]=summary(fitmotor[[i]])[[1]][[1]]
  sv[i]=summary(fitmotor[[i]])[[1]][[3]]
  fitf <- function(x){
    return(
      coef(fitmotor[[i]])[[ 'v' ]]*x+coef(fitmotor[[i]])[[ 'x_0' ]]+coef(fitmotor[[i]])[[ 'a' ]]*x^2
    )
  }
  plotgridv=list( (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*5, (linevec-50)*2.5, (linevec-50)*.25, (linevec-50)*.25, (linevec-50)*10,(linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*5, (linevec-50)*5, (linevec-50)*.5, (linevec-50)*.5 )
  plotgridh=list( (linevec-50)*2, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*5, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*5, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10, (linevec-50)*10 )
  lim=list(c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),0,max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),150*min(X)/150,max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),100*min(X)/100,max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)), c(min(t),max(t),min(X),max(X)))
  legendpos=list('topleft','topleft','topleft','topleft','topleft','topleft','topleft','topright','topright','topright','topright','topright','topright','topright')

  png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/motor_',i,'.png'), width=7, height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
  par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
  plot(t,X,col='white',xlab=expression('Zeit in s'),ylab=expression('Position in mm'),main=basename(motorfile[[i]]),xlim=lim[[i]][1:2], ylim=lim[[i]][3:4])#Plot öffnen
  gridfn()

  curve(fitf, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4.5, lty = 1, from = -10, to = 1000, n=10000)
}

```

```

points(t,X,pch=3, cex=0.5,col='dodgerblue4')#gro ß er Plot
#errbar(t,X,X+sX,X-sX, col='dodgerblue4', add = TRUE, cex=0.5, lwd=1)

chi1=round(sum(summary(fitmotor [[ i ]]) [[2]]^2)/summary(fitmotor [[ i ]]) [[4]][[2]],2)

legend(legendpos [[ i ]],c ('Datenpunkte ohne Fehlerbalken',as.expression(bquote('Lineare Regression' ~ chi^2/ndf ~ .(chi1))),lty=c(0,1),lwd=c(1,5),pch=c(3,3),col=c('dodgerblue4','limegreen'))#Legende

dev.off()
}

#Residuen
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/motor_resid_slow.png'), width=7, height =3, res=300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
plot((motor [[1]] $V1-min(motor [[1]] $V1))/1000,summary(fitmotor [[1]]) [[2]],col='white',xlab=expression('Zeit in s'),ylab=expression('Positionsdifferenz in Ticks'),main='Residuen bei 0.05 mm/s')#Plot öffnen
gridfn()

points((motor [[1]] $V1-min(motor [[1]] $V1))/1000,summary(fitmotor [[1]]) [[2]],pch=20, cex=0.4,col='dodgerblue4')
lines((motor [[1]] $V1-min(motor [[1]] $V1))/1000,summary(fitmotor [[1]]) [[2]],lwd=1.1, col='dodgerblue4')
dev.off()
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/motor_resid_fast.png'), width=7, height =3, res=300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
plot((motor [[7]] $V1-min(motor [[7]] $V1))/1000,summary(fitmotor [[7]]) [[2]],col='white',xlab=expression('Zeit in s'),ylab=expression('Positionsdifferenz in Ticks'),main='Residuen bei 5 mm/s')#Plot öffnen
gridfn()

points((motor [[7]] $V1-min(motor [[7]] $V1))/1000,summary(fitmotor [[7]]) [[2]],pch=20, cex=0.4,col='dodgerblue4')
lines((motor [[7]] $V1-min(motor [[7]] $V1))/1000,summary(fitmotor [[7]]) [[2]],lwd=1.1, col='dodgerblue4')
dev.off()

#FFT
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/motor_fft_slow.png'), width=7, height =3, res=300, unit='in')#Bild exportieren
hist(abs(Re(fft(summary(fitmotor [[1]]) [[2]]))),40,xlim=c(0,5000), main='Fouriertransformation bei 0.05 mm/s', col='dodgerblue4', xlab='Frequenz', ylab='Häufigkeit')
dev.off()
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/motor_fft_fast.png'), width=7, height =3, res=300, unit='in')#Bild exportieren
hist(abs(Re(fft(summary(fitmotor [[7]]) [[2]]))),40,xlim=c(0,1500), main='Fouriertransformation bei 5 mm/s', col='dodgerblue4', xlab='Frequenz', ylab='Häufigkeit')
dev.off()

a=51
sa=.1
b=19
sb=.1

theta=atan(b/a)
#theta=2*pi/180
sttheta=sqrt( ((b/(b^2+a^2))*sa)^2 + ((a/(a^2+b^2))*sb)^2 )

v_real=v/(2*sin(theta))
sv_real=sqrt( (v*cos(theta)*sttheta/(cos(2*theta)-1))^2 + (sv/(2*sin(theta)))^2 )
vang=c(-0.05,-0.15,-0.1,-0.25,-0.5,-5,0.05,0.15,0.1,0.25,0.5,5,5)

#Plexiglas

plexi_rate=pleximit$V3*1000/pleximit$V2-coef(fitexp2)[[ 'A']]
splexi_rate=sqrt((sqrt(pleximit$V3)*1000/pleximit$V2)^2+((confint(fitexp2)[[5]] - confint(fitexp2)[[1]])/4)^2)
plexi_velo=pleximit$V1

```

```

plexi_time=pleximit$V2

plexiohne_rate=plexiohne$V3*1000/plexiohne$V2-coef(fitexp2)[[ 'A']]
splexiohne_rate=sqrt((sqrt(plexiohne$V3)*1000/plexiohne$V2)^2+((confint(fitexp2)[[5]]-confint(
    fitexp2)[[1]])/4)^2)
plexiohne_velo=plexiohne$V1
plexiohne_time=plexiohne$V2

png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/plexi.png'), width=7, height=5, res
    =300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
plot(plexi_velo, plexi_rate, col='white', xlab=expression('Geschwindigkeit_{in} \sim mm/s'), ylab=expression(
    'Z\u00e4hlrate_{in} \sim s^{-1}'), main='Plexiglas als Absorber', ylim=c(40,80))#Plot \u00f6ffnen
gridfn()

points(plexi_velo, plexi_rate, pch=20, cex=0.7, col='dodgerblue4')#gro \beta er Plot
errbar(plexi_velo, plexi_rate, plexi_rate+splexi_rate, plexi_rate-splexi_rate, col='dodgerblue4', add
    = TRUE, cex=0.5, lwd=1.5)

legend('topleft',c('alle Datenpunkte mit Fehlerbalken'),lty=c(0),lwd=c(1),pch=c(20),col=c(
    'dodgerblue4'))#Legende

dev.off()
wohne=1/splexiohne_rate^2
w=1/splexi_rate^2

ohne=weighted.mean(plexiohne_rate, wohne)
mit=weighted.mean(plexi_rate, w)

sohne=sqrt(1/sum(wohne))
smit=sqrt(1/sum(w))

abschw=c(6.49,3.36,1.1,0.57)
ener=c(8,10,15,20)

fitabschw=nlsLM(abschw ~ A*exp(-B*ener)+C, data= data.frame(ener,abschw), start=list(A=111,B=.36,C
    =.5))
fitf <- function(x){
  return(
    coef(fitabschw)[[ 'A']] *exp(-coef(fitabschw)[[ 'B']] *x)+coef(fitabschw)[[ 'C']])
}

#Extrapolation
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/figures/extra.png'), width=7, height=5, res
    =300, unit='in')#Bild exportieren
par("mar" = c(5, 5.5, 4, 4)+.1)
plot(ener,abschw,col='white', xlab=expression('Energie_{in} keV'), ylab=expression('Absch\u00e4
    chungskoeffizient_{in} \sim cm^2/g'), main='Extrapolation des Abschw\u00e4chungskoeffizienten')#Plot \u00f6
    ffnen
gridfn()

curve(fitf, add = TRUE, col = "limegreen", lwd = 4.5, lty = 1, from = -10, to = 1000, n=10000)
points(ener,abschw,pch=3, cex=1,col='dodgerblue4')#gro \beta er Plot

legend('topright',c('Daten aus Literatur','lokale Extrapolation'),lty=c(0,1),lwd=c(1,4),pch=c(3,3),
    col=c('dodgerblue4','limegreen'))

dev.off()

absch=fitf(14.4)

#Korrektur

X=vang
Y=v_real/vang
sY=sv_real/vang
wY=1/sY^2

fitconst=nlsLM(Y ~ 0*X+C, data=data.frame(X,Y), start=list(C=1.04))
faktor=coef(fitconst)[[ 'C']] #weighted.mean(Y,wY)
sfaktor=summary(fitconst)[[1]][[2]] #1/sqrt(sum(wY))

```

```
png(file = paste0('Dropbox/Praktika/FP/II/Moessbauer/presentation/figures/const.png'), width=7,
     height=5, res=300, unit='in')#Bild exportieren
plot(X,Y,col='white',xlab='gemessenes v in mm/s',ylab=as.expression(bquote(v[gem]/v[ang] )),ylim=c(1.02,1.09))
gridfn()
errbar(X,Y,Y+sY,Y-sY,col='dodgerblue4')
const <- function(x){return(0*x+faktor)}
sconst1 <- function(x){return(0*x+faktor-sfaktor)}
sconst2 <- function(x){return(0*x+faktor+sfaktor)}
curve(const,from=-10,to=10,n=100,add=TRUE,col='limegreen',lwd=2)
curve(sconst1,from=-10,to=10,n=100,add=TRUE,col='limegreen',lty=2,lwd=2)
curve(sconst2,from=-10,to=10,n=100,add=TRUE,col='limegreen',lty=2,lwd=2)

legend('topright',c('Daten mit Fehlerbalken',as.expression(bquote('konstanter Fit f(x)= ~ .(round(faktor,3)) ~ + ~ .(round(sfaktor,3)) )))),lty=c(0,1),lwd=c(1,4),pch=c(20,20),col=c('dodgerblue4','limegreen'))
dev.off()
```

Abbildungsverzeichnis

1	Zerfallsschema von ^{57}Co [Anlt]	3
2	Dopplerverbreiterung der Emissionsenergie führt zu Überlapp mit Absorptionspeak und damit zu Resonanzabsorption bei Raumtemperatur[Jak15]	5
3	Die Energie der Photonen kann durch Geschwindigkeitsvariation der Quelle verändert werden[Jak15]	5
4	oben: Durch Bewegung der Quelle kann die Photonenergie von $E_0 - E_R$ auf $E_0 + E_R$ verschoben werden, was genau der Energie entspricht, die beim Absorber benötigt wird um (trotz Rückstoßenergie) den Übergang anzuregen. unten: Die hinter dem Absorber gemessene Transmission hat bei der Resonanzgeschwindigkeit v_{res} ein Minimum. Bei Rückstoßfreier Emission/Absorption in Festkörpern sollte diese Geschwindigkeit bei $v_{res} = 0$ liegen, da E_R vernachlässigbar ist[Jak15]	6
5	oben: Vergleich Frequenzverteilung bei Einstein (links) und Debye (rechts) unten: Energieverteilung im Festkörper beim Einstein-Modell (links) und in der Realität (durch Debye gut beschrieben, rechts)[Jak15]	8
6	Debye-Waller-Faktor für Eisen und Rhenium: Man erkennt deutlich dass der Debye-Waller-Faktor für ^{57}Fe bis über Raumtemperatur hinaus kaum absinkt. Es eignet sich also gut dazu, den Versuch ungekühlt durchzuführen.[May94]	9
7	Hyperfeinaufspaltung von Eisen-57: Rechts ist die Hyperfeinaufspaltung mit ihren 6 Übergängen zu sehen. Zudem sind auch die elektrische Quadrupolaufspaltung und die Isomerieverziehung zu erkennen. Die Quadrupolaufspaltung wird in diesem Versuch nicht untersucht. Sie tritt bei deformierten Kernen mit nicht verschwindendem Quadrupolmoment und einer asymmetrischen Elektronenhülle, die einen Feldgradienten erzeugt, auf. Dies ist häufig in komplexen Eisenverbindungen (z.B. Borazit) zu finden. Im Spektrum wären hierbei 2 Peaks zu erkennen.[May94]	10
8	Aufbau eines Szintillators: Bandstruktur[4]	11
9	Funktionsweise eines Photomultipliers: Die einkommenden Photonen treffen auf eine Photokathodenschicht, aus der sie Elektronen herausschlagen. Diese werden über eine Kaskade von Dynoden beschleunigt und damit vermehrt. Bei der Anode kommen somit genügend Elektronen (Anzahl proportional zur Photonenergie) an, um einen messbaren Strompuls zu erzeugen.[1]	11
10	Versuchsaufbau zur Untersuchung des Mößbauereffekts: Das vom Szintillator aufgenommene und durch Photomultiplier, Vorverstärker und Verstärker verstärkte Signal wird einerseits über einen SCA, andererseits direkt über eine Delay-Einheit an ein Linear Gate und von dort aus an den MCA, welcher mit dem Computer verbunden ist, weitergeleitet.[Anlt]	12
11	Aufbau der Geschwindigkeitsmessung mit Hilfe eines Lasers: Der Laserstrahl ist mit rot eingezzeichnet. Kurz nach dem Laser sind Abschwächungsplatten aufgebaut, damit die Kamera nicht übersättigt ist und erfolgreiche Gaußfits gewährleistet sind.	13
12	Das Röntgenspektrum von Silber mit der K_α -Linie: Die beiden Kreise (rot und blau) zeigen den Bereich, der zum Fitten benutzt wurde.	16
13	Eichgerade: Der Channelwert von Kupfer passte nicht zur der sich andeutenden Geraden und wurde, wie in [Anlt] beschrieben, weggelassen.	18
14	Kobaltspektrum: Der rote Kreis zeigt das Maximum im von uns gefundenen 14.4 keV Peak. Der blau Kreis zeigt, wo bei dieser Eichung 14.4 keV liegen. Die Channel unterliegen wieder einer Poissonverteilung.	19

15	Comptonuntergrund: <i>Die erste Komponente des Fits beschreibt den Comptonuntergrund. Die zweite Komponente des Fits beschreibt die Abschwächung der 14.4 keV Photonen. Die Fehlerbalken in x-Richtung sind die abgeschätzten Messfehler auf die Plattendicke. Die Fehlerbalken in y-Richtung entspringen wieder der poissonverteilten Zählereignisse.</i>	20
16	Extrapolation: <i>Um 14.4 keV herum verhält sich der Abschwächungskoeffizient ungefähr exponentiell.</i>	21
17	Der Plexiglasabsorber: <i>Es kann keine Abhängigkeit von der Geschwindigkeit festgestellt werden. Die Abschwächung des Mößbauerspektrum um eine konstante Zählrate durch das Plexiglas sorgt also nicht für eine Verzerrung des Spektrums.</i>	22
18	Mößbauerspektrum von Edelstahl: <i>Der obere Graph zeigt das Mößbauerspektrum mit allen Datenpunkten. Der untere Graph zeigt das Spektrum vergrößert um das Minimum an.</i>	24
19	Linienverbreiterung von Edelstahl in Abhängigkeit von der effektiven Absorberdicke [Fra62]	26
20	Mößbauerspektrum von natürlichem Eisen: <i>Im Anhang 8 findet man alle Minima vergrößert dargestellt.</i>	28
21	Gitterlinienpositionen: <i>Auf der y-Achse ist die Strahlposition in mm angegeben, auf der x-Achse die entsprechende Pixelposition.</i>	33
22	Gitterliniendifferenzen: <i>Auf der y-Achse ist die Strahlposition in mm angegeben, auf der x-Achse die entsprechende Pixelposition.</i>	34
23	x(t)- Diagramm zur Ermittlung der Absorbergeschwindigkeit: oben: <i>Die verwendete Einstellung ist -5 mm/s. Die Fehlerbalken sind zu klein um sie zu sehen. Sie resultieren aus der Streuungsmessung bei still stehendem Absorber.</i> unten: <i>Die Residuen der Linearen Regression</i>	35
24	Fouriertransformation der Residuen: <i>Man erkennt deutliche Abweichungen von der erwarteten Form (Exponentialverteilung).</i>	36
25	Zeichnung des Aufbaus: <i>mit Winkel θ, den Seitenlängen a, b und der zurückgelegten Strecke s</i>	36
26	Residuen des Voigfits beim 1-Linien-Absorber	39
27	Alle Datensätze des Mößbauerspektrums von natürlichem Eisen: <i>Jeder Datensatz hat eine unterschiedliche Farbe. Der auffällige Datensatz mit einer generell zu kleinen Zählrate ist der grüne. Um die Form des Spektrums besser zu erkennen ist der 6-fache Lorentzfit in grau eingezeichnet.</i>	41
28	links: <i>Signal des Vorverstärkers (unten) und das des Verstärkers (oben) rechts: Signal des Verstärkers vor (unten) und nach der Delay-Einheit (oben)</i>	43
29	<i>Signal des SCA und das des Verstärkers bei verschiedenen Einstellungen der Delay-Einheit</i>	43
30	<i>Gefittete K_{α}-Linien für die Energieeichung</i>	44
31	<i>Nahaufnahmen der Mößbauerpeaks des 6-Linien-Spektrums</i>	45
32	<i>Intensitätsverteilung des Eichgitters im Überblick</i>	46
33	<i>Fit der Intensitätspeaks auf dem Schirm zur Abstandseichung.</i>	47
34	<i>Strecke-Zeitdiagramme für alle Geschwindigkeitseinstellungen.</i>	50
35	<i>Fouriertransformation der Residuen der langsamsten Geschwindigkeitseinstellung</i>	51
36	<i>Fouriertransformation der Residuen der schnellsten Geschwindigkeitseinstellung</i>	51

Literatur

- [Anlt] A.Zwerger (2007), S.Winkelmann (1/2011), M.Köhli (2/2011), *Versuchsanleitung FP II Mößbauer-Effekt*, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i.Br.
- [Jak15] K. Jakobs, R. Gugel, L.Diehl, *Experimentalphysik V - Kern- und Teilchenphysik Skript*, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i.Br., 14. Februar 2015
- [Lan97] U. Landgraf, *Eichspektrum der Americium-Quelle*, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg i.Br., 21. Februar 1997
- [1] *Praktikum im DESY Zeuthen* https://www-zeuthen.desy.de/exp/physik_begreifen/chris/Photomultiplier.html, Stand: 27.09.15
- [May94] T.Mayer-Kuckuk *Kernphysik*, Teubner-Verlag, Stuttgart, 6.Auflage 1994
- [Cra46] H. Cramér, *Mathematical Methods of Statistics*, Princeton, 1946
- [Mui63] A.H. Muir Jr. et al., *Internal Conversion Coefficient of 14.4 keV Fe 57 Transition*, North American Aviation Science Center, 1963
- [Fra62] H. Frauenfelder et al., *Transmission and Line Broadening in the Mossbauer Effect II*, University o/Illinois, 1962
- [2] Mark Winter, University of Sheffield, www.webelements.com/iron/, Stand:29.02.2016 18:17 Uhr
- [3] The National Institute of Standards and Technology (NIST), <http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/ComTab/pmma.html>, Stand:04.03.2016 18:08 Uhr
- [Weg66] H. Wegener, *Der Mössbauer-Effekt und seine Anwendungen in Physik und Chemie*, Mannheim, 1966
- [4] Tobias Kotyk, *Versuche zur Radioaktivität im Physikalischen Fortgeschrittenen Praktikum an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg*, Institut für Mathematik und Physik, Albert-Ludwigs-universität, 2011
- [Wei97] G.Schatz,A.Weidinger, *Nukleare Festkörperphysik*, Universität Konstanz,H ahn-Meitner-Institut Berlin, 1997, 3.Auflage
- [5] http://www.baunetzwissen.de/dl/134812/eigenschaften_kunststoffe.pdf, Stand: 11.03.16
- [Gr71] N.N.Greenwood, T.C.Gibb *Mössbauer Spectroscopy*, Chapman and Hall Ltd, London, 1971