# B08 Mößbauerspektroskopie

# 1 Physikalische Grundlagen des Versuchs

# 1.1 $\gamma$ -Zerfall

Beim  $\gamma$ -Zerfall wird ein energiereiches Photon ( $\gamma$ -Quant) ausgesendet, wobei das aussendende Teilchen, welches sich zuvor in einem angeregten Zustand befand, in den Grundzustand übergeht. Ein  $\gamma$ -Quant wird ausgesendet, wenn ein angeregtes Elektron von einer äußeren Schale zurück auf eine weiter innen liegende Schale "springt", wobei es hierbei Energie in Form des  $\gamma$ -Quants abgibt. Atomkerne können auch angeregt sein und besitzen diskrete Energieniveaus, wobei sie unter Aussendung eines  $\gamma$ -Quants in den Grundzustand übergehen können.

# 1.2 Kernresonanz

Bei Kernresonanz an freien Atomen ist der Rückstoß (der aus der Impulserhaltung folgt) bei Emission und Absorption der Strahlungsquanten im Gegensatz zur Resonanzabsorption in der Atomhülle (Elektronen- $\gamma$ -Zerfall) nicht mehr zu vernachlässigen. Dies kann man durch den Vergleich eines <sup>57</sup>Fe-Kernes und einer Na-Atomhülle abschätzen, wobei man einen verschwindenden Impuls für den Stoß beim Na findet, da nicht direkt mit dem Kern sondern mit der Hülle gestoßen wird.

Bei der Emission eines  $\gamma$ -Quants bleibt ein Teil der Energie auf Grund der Impulserhaltung beim emittierenden Kern, somit besitzt das  $\gamma$ -Quant eine um  $E_R$  veringerte Energie (mit  $E_R = \frac{p^2}{2m} = \frac{E_0^2}{2mc^2}$ , mit  $E_0 = E_a - E_g$  der Übergangsenergie). Beim Absorptionsprozeß findet auch eine Energieübertragung von  $E_R$  an den absorbierenden Kern statt, so dass insgesamt  $2 \cdot E_R$  fehlen um die Resonanzbedingung zu erfüllen. Eine Überlappung der Linien, d.h. Beobachtung von Kernresonanzabsorption von  $\gamma$ -Strahlen in Gasen und Flüssigkeiten (also für freie Atome) ist praktisch nicht möglich, da die Werte, die man aus der Rückstoßenergie erhält, um einige Größenordnungen größer sind als die Werte aus der natürlichen Linienbreite.

Betrachten wir dahingegen einen Festkörper, besteht die Möglichkeit einer rückstoßfreien Absorption und Emission von  $\gamma$ -Quanten, diese nennt man Mößbauer-Effekt.

## 1.3 Mößbauer-Effekt

Der Mößbauer-Effekt tritt in einem Festkörper auf, wobei dort angeregte Atomkerne nicht frei beweglich sind und es daher zu rückstoßfreier Absorption und Emission von  $\gamma$ -Quanten kommen kann indem der Impuls vom gesamten Festkörper aufgenommen wird, wobei die Masse des Festkörpers sehr groß ist gegenüber der Masse eines Atoms. Die Aufnahme der Rückstoßenergie verteilt sich auf Translationsenergie des gesamten Festkörpers

und innere Energie, die z.B. zur Anregung von Phononen (Gitterschwingungen) genutzt wird. Die Translationsenergie ist auf Grund der enorm großen Masse des Festkörpers verschwindend klein (d.h. sehr viel kleiner als die natürliche Linienbreite  $\Gamma_0$ ), womit also rückstoßfreie Übergänge möglich werden, da die Emissions- und Absorptionslinie nicht mehr rückstoßverschoben sind und sich nun überlappen können. Die Bedingung für die rückstoßfreie Emission bzw. Absorption ist von Mößbauer gegeben durch:

$$\frac{E_0^2}{2mc^2} < k_B \theta$$

mit  $k_B$  der Boltzmannkonstante,  $\theta = \frac{h\nu_g}{k_B}$  der Debye-Temperatur und  $\nu_g$  der Grenzfrequenz (obere Grenze des Schwingungsspektrums eines Kristalls).

# 1.4 Natürliche Linienbreite

Der Verlauf der Emissions- und Absorptionslinien ergibt sich nach Lorentz zu

$$I = \frac{I_0}{\left(E - E_\gamma\right)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}$$

wobei  $\Gamma$  die Halbwertsbreite (FWHM) ist. Die natürliche Linienbreite  $\Gamma_0$  ist die untere Grenze der möglichen Linienbreite, sie ist durch die Heisenbergsche Unschärferelation begrenzt:

$$\Gamma_0 \cdot \tau = \hbar$$

mit der mittleren Lebensdauer  $\tau$  eines angeregten Zustandes.

# 1.5 Debye-Waller-Faktor

Der Debye-Waller-Faktor gibt den Anteil der rückstoßfreien Emissionen/Absorptionen an und ist mit:

$$f_D \approx \exp\left[-\frac{E_R}{k_B \theta} \left(\frac{3}{2} + \frac{\pi^2 T^2}{\theta^2}\right)\right], \text{ für } T \le \theta$$

gegeben. In unserem Fall beträgt er  $f_D \approx 0,93$ . Die Debye-Temperatur ist materialabhängig und ist im Bezug auf den Mößbauereffekt ein Maß für die Bindungsfestigkeit, zudem kann man sie über die Temperaturabhängigkeit von  $\varepsilon$  (die Größe des Resonanzeffektes) bestimmen.

# 1.6 Zerfallsschema von <sup>57</sup>Co



Wir nutzen für den Versuch die 14.4 keV Strahlung der Einlinienquelle <sup>57</sup>CoRh (s. [4] S.70). Das <sup>57</sup>Co verringert durch einen EC (electron capture) bzw. K-Einfang seine Protonenzahl, da es ein Elektron aus der K-Schale "einfängt". Das angeregte Eisen geht dann unter Aussendung von  $\gamma$ -Quanten in den Grundzustand über, wobei der für uns interessante Übergang der Übergang mit der Emission der 14.4 keV Strahlung mit einer Halbwertszeit von 98 ns ist.

# 1.7 Isomerieverschiebung

Die Isomerieverschiebung  $\delta = \Delta E(A) - \Delta E(S) = E_A - E_0 - (E_S - E_0) = E_A - E_S$  tritt auf, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen im angeregten Zustand und im Grundzustand für Atome/Moleküle nicht identisch ist. Es findet durch die Monopolwechselwirkung zwischen den Atomkernen und Elektronen eine Energieänderung statt, wobei die Isomerieverschiebung durch:

$$\delta = \frac{2}{5}\pi Z e^2 \cdot \left\{ |\psi\left(0\right)|_A^2 - |\psi\left(0\right)|_S^2 \right\} \left( R_a^2 - R_g^2 \right)$$
(1)

gegeben ist. Wir können die Relation

$$\frac{E_D}{\delta} = \frac{E_S}{c} \tag{2}$$

zur Umrechnung der Geschwindigkeiten in Energien benutzen, mit (in unserem Fall)  $E_s = 14400 \, eV$  und c der Lichtgeschwindigkeit.

# 1.8 Quadrupolwechselwirkung

Die Quadrupolwechselwirkung wird durch ein inhomogenes elektrisches Feld am Kernort induziert, wobei diese zu einer Aufspaltung in  $I + \frac{1}{2}$  Subniveaus, mit dem Spin  $I > \frac{1}{2}$ führt. Für den einfachen Fall eines axialsymmetrischen Feldgefälles können wir schreiben:

$$E_Q = \frac{eqQ}{4I(2I-1)} \left[ 3m_I^2 - I(I+1) \right],$$

Für unseren Fall, d.h. für angeregtes <sup>57</sup>Fe folgt für die Größe der Quadrupolaufspaltung mit  $I = \frac{3}{2}$ , somit also  $m = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$ :

$$\Delta E_Q = E_Q \left(\frac{3}{2}; \pm \frac{3}{2}\right) - E_Q \left(\frac{3}{2}; \pm \frac{1}{2}\right) = \frac{eqQ}{2}.$$

#### 1.9 Magnetische Dipolwechselwirkung

Atomkerne können eine magnetische Wechselwirkung eingehen, was zu einer weiteren Aufspaltung führt, wenn sie ein magnetisches Dipolmoment  $\mu$  besitzen und gleichzeitig am Kernort ein Magnetfeld  $\vec{H}$  existiert. Es folgt hieraus die Hyperfeinaufspaltung in (2I + 1) Subniveaus. Die Energien der einzelnen Hyperfeinniveaus sind durch

$$E_M = -\mu_I H \frac{m_I}{I} \tag{3}$$

mit  $\mu_I = g_I \mu_N I$  dem kernmagnetischen Moment bestimmt. Aus der Quantenmechanik folgt die Regel, dass nur solche Übergänge erlaubt sind, die die folgenden Auswahlregeln erfüllen  $\Delta I = \pm 1$ ;  $\Delta m_I = 0$  oder  $\pm 1$ .

# 1.10 Gravitations-Rotverschiebung

Wenn Quanten gegen das Schwerefeld der Erde nach oben über eine Höhe h laufen, so erfahren sie eine relative Energieänderung  $\left(\frac{\Delta E}{E}\right) = \frac{gh}{c^2}$  (ca. 10<sup>-16</sup> pro Meter), diese kann durch die Hohe Auflösung der Mößbauerspektroskopie erfasst werden.

# 1.11 Thermische Rotverschiebung

Eine Temperaturerhöhung führt zu stärkeren Atomschwingungen bzw. mehr kinetischer Energie, wodurch die Linienbreite erhöht wird. Ein Temperaturunterschied zwischen Mößbauerquelle und -absorber führt zu einer thermischen Rotverschiebung, die Mößbauerspektroskopie ist in der Lage diese Energieverschiebung, die auf Terme der 2. Ordnung des Dopplereffektes beruht, zu erfassen. Diese hängt von der mittleren Geschwindigkeit  $\bar{v}^2$  der Gitteratome ab und ist mit:

$$\delta_{rot} = \frac{\bar{v}^2}{2c^2} E_{\gamma}$$

gegeben. Für Atome im Gitter folgt:

$$\delta_{rot} = -\frac{C_V T}{2Mc^2} E_{\gamma} \tag{4}$$

# 2 Versuchsaufbau und Messprinzip

## 2.1 Mößbauerquelle

Wir verwenden Kobalt in einer Rhodium-Matrix. Wir nutzen die 14.4 keV Linie, wobei auf Grund der relativ geringen Energie dieser Linie der Debye-Waller-Faktor bereits bei Raumtemperatur ausreichend groß ist. Als Absorber benutzen wir Eisenverbindungen, um die verschiedenen Verschiebungen beobachten zu können.

# 2.2 Geiger-Müller-Zählrohr

Das Geiger-Müller-Zählrohr dient für uns als Detektor, wobei dieses für die Detektion von  $\gamma$ -Strahlung normalerweise nicht geeignet ist. Jedoch folgt aus dem Impulsspektrum des  ${}^{57}$ Co, dass es die 14.4 keV-Linie am schärfsten erfassen kann. Beim GM-Zählrohr schlägt ein zu detektierendes Teilchen in ein Gas um dieses zu zünden. Nach der Zündung existiert eine Totzeit (~100 - 320  $\mu s$ ) während der keine weiteren Teilchen detektiert werden können. Das GM-Zählrohr kann keine Energien oder Impulse auflösen und dient allein um eine Anzahl zu messen.

# 2.3 Lautsprechersystem als Mößbauerquellenantrieb

Das Lautsprechersystem dient zum Antrieb der Mößbauerquelle, wobei diese mit verschiedenen Spannungsarten (z.B. sinus- oder sägezahnförmig) betrieben werden kann. Eine Spule dient zum Antrieb, während eine zweite zur Überprüfung der Geschwindigkeit genutzt werden kann.

# 2.4 Versuchsaufbau



# 2.5 Versuchsdurchführung

Wir nehmen Mößbauerspektren auf wobei wir Absorption erhalten wenn die Geschwindigkeit die jeweilige Verschiebung ausgleicht. Die Absorption führt zu einem Ausschlag nach unten auf unserem Detektor (der die einfallenden  $\gamma$ -Quanten zählt), da von der Absorberfolie, nachdem die Kerne die  $\gamma$ -Quanten absorbiert haben, eine ungerichtete Strahlung ausgeht und somit weniger Strahlung am Detektor ankommt.

# 3 Auswertung

Die Fehlerberechnung erfolgt unter Berücksichtigung des statistischen Fehlers, der durch das Programm ausgegeben wird, dem Fehler der maximalen Geschwindigkeit und dem Fehler des Antriebes, der sich durch den Fehler in der Spannung, der sich aus dem Oszillographenbild ablesen lässt, ergibt.

a)

Die Quadrupolaufspaltung wurde zur Eichung der Geschwindigkeitsskala verwendet, wobei wir als Quadrupolaufspaltung  $E_Q = (1,7034 \pm 0,0140) \frac{mm}{s}$  finden konnten. Für die Isomerieverschiebung ergab sich ein Wert von  $\delta = -(0,3735 \pm 0,0031) \frac{mm}{s}$ , wobei wir über (2):

$$E_D = \frac{\delta}{c} E_{S,A} = \delta \cdot 4.8 \cdot 10^4 \, neV$$

den Wert in eV berechnen können  $E_D = -(17, 93 \pm 0, 15)$  neV, dieser ist wie erwartet negativ, daher muss das Vorzeichen der Geschwindigkeit beim Start positiv sein. Die Eichung wurde mit Hilfe eines Programmes durchgeführt, wobei dieses einen Fit für den erwarteten Verlauf an die Messung gelegt hat. Der Fehler der aus diesem resultierte war im Vergleich mit der Geschwindigkeitsmodulation, die aus der Schwankung der Spannung resultierte, vernachlässigbar. Wie man am Oszilloskop erkennen konnte, ergab sich ein gewisses Rauschen, wobei wir einen relativen Fehler von  $\delta U = \frac{U_{Antrieb}}{\Delta U} = 5, 6 \cdot 10^{-3}$ erhalten haben. Für den Eichfaktor erhalten wir:

$$\frac{v_{eich}}{V_{eff}} = (0,04027 \pm 0,00033) \frac{\frac{mm}{s}}{mV}$$

wobei sich die maximale Geschwindigkeit mit  $v_{max} = (2,022 \pm 0,012) \frac{mm}{s}$  ergab.

### b1)

Es wird die Isomerieverschiebung und die Quadrupolaufspaltung von zwei- und dreiwertigem Eisen bestimmt. Als maximale Geschwindigkeit erhalten wir  $v_{max} = (4,060 \pm 0,036) \frac{mm}{s}$ . Der Fehler aus dem Antrieb ergibt sich mit  $\delta U = 3,58 \cdot 10^{-3}$ .

Element	$\Delta E_Q$ in $\frac{mm}{s}$	$\delta$ in $\frac{mm}{s}$	$\Delta E_Q$ in $neV$	$\delta$ in $neV$
$\mathrm{Fe}^{2+}$	$(2,914\pm 0,029)$	$(1, 156 \pm 0, 012)$	$(139, 9 \pm 1, 4)$	$(55, 49 \pm 0, 54)$
$\mathrm{Fe}^{3+}$	$(0, 6287 \pm 0, 0083)$	$(0, 3024 \pm 0, 0045)$	$(30, 18 \pm 0, 40)$	$(14, 52 \pm 0, 22)$

Für die Aufspaltungen ergeben sich

Für die Isomerieverschiebung zwischen  $Fe^{2+}$  und  $Fe^{3+}$  folgt somit:

$$\delta_{Fe2+} - \delta_{Fe3+} = (0,854 \pm 0,013) \frac{mm}{s} = (40,99 \pm 0,63) \ neV = (6,57 \pm 0,11) \cdot 10^{-20} \frac{g \ cm^2}{s^2}$$

b3)

Die Isomerieverschiebung ist definiert durch (1) mit  $(R_a^2 - R_g^2) = -0,0081 fm^2 = 8,1 \cdot 10^{-29} cm^2$ . Wir können umstellen um die Differenz der Elektronendichten am Kernort zwischen Fe<sup>2+</sup> und Fe<sup>3+</sup> zu erhalten:

$$\rho_{\mathrm{Fe}^{2+}} - \rho_{\mathrm{Fe}^{3+}} = \left\{ |\psi\left(0\right)|_{A}^{2} - |\psi\left(0\right)|_{S}^{2} \right\} = \frac{5\delta}{2\pi Z e^{2} \left(R_{a}^{2} - R_{g}^{2}\right)}$$

Wir benutzen das cgs-System, wie im Praktikumsskript vorgeschlagen, damit ergibt sich die Elementarladung zu  $e = 4,8032 \cdot 10^{-10} \frac{g^{\frac{1}{2}} cm^{\frac{3}{2}}}{s}$ . Hieraus ergibt sich ein Wert von

$$\Delta \rho = \rho_{\mathrm{Fe}^{2+}} - \rho_{\mathrm{Fe}^{3+}} = -(1,076 \pm 0,019) \cdot 10^{26} \frac{1}{cm^3}$$

Da das Ergebnis negativ ist, muss die Elektronendichte am Kernort des  $\text{Fe}^{3+}$  größer sein als beim  $\text{Fe}^{2+}$ . Um dies zu begründen, betrachten wir zuerst die Elektronenkonfigurationen ([1] S. 684):

Elektronen- konfiguration	Ion	Besetzung der d-Orbitale im oktaedrischen Ligandenfeld	Elektronen- zustand	Zahl ungepaarter Elektronen	Komplex
d <sup>5</sup>	Mn <sup>2</sup> *,Fe <sup>3+</sup>		high-spin	5	[Mn (H <sub>2</sub> 0) <sub>6</sub> ] <sup>2+</sup> [Fe (H <sub>2</sub> 0) <sub>6</sub> ] <sup>3+</sup>
			low - spin		[Fe (CN) <sub>6</sub> ] <sup>3-</sup>
d <sup>6</sup>	Fe <sup>2+</sup> ,Co <sup>3+</sup> Pt <sup>4+</sup>		high-spin	4	[Co F <sub>6</sub> ] <sup>3-</sup>
Did d			low - spin	0	[Fe(CN) <sub>6</sub> ] <sup>4-</sup>

Auf Grund der Liganden  $H_2O$  und  $SO_4^{2-}$ , die schwache Liganden sind, erhalten wir für beide Eisenkomplexe einen Highspin-Komplex (blau umrandet). Wir besitzen zudem als Valenzelektronen nur Elektronen aus dem d-Orbital. Da jedoch nur s-Orbital Elektronen eine nicht-verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Kern besitzen und die s-Orbital Elektronenanzahl bei Fe<sup>3+</sup> und Fe<sup>2+</sup> identisch sind, muss der verursachende Effekt indirekt sein. D.h. die Abschirmung wird durch das weitere Elektron im d-Orbital bei Fe<sup>2+</sup> erhöht, womit die Elektronen eine kleinere positive Ladung im Kern "sehen" und somit schwächer angezogen werden, was zu einer kleineren Elektronendichte im Kern führt.

b2)

# b4)

Die Quadrupolaufspaltung in Fe<sup>2+</sup> ist ca. 4,6 mal stärker als bei Fe<sup>3+</sup>. Dies muss aus dem unterschiedlichen elektrischen Feldgradienten q folgen, die aus der unterschiedlichen Elektronenkonfigurationen resultieren.

Wie aus dem Bild der Elektronenkonfiguration zu erkennen ist, sind alle Orbitale beim  $Fe^{3+}$  einfach besetzt, somit gleichen sich die *m*-Quantenzahlen gerade aus. Wir erhalten also eine relativ "kugelsymmetrische" Verteilung der Ladung. Im Gegensatz hierzu besitzt  $Fe^{2+}$  ein doppelt besetztes d-Orbital, womit hierdurch die Ladung stark asymmetrisch verteilt ist, was zu einer großen Quadrupolaufspaltung führt.

# c1)

Wir betrachten die Dipolwechselwirkung und Isomerieverschiebung an einer 90% ig dotierten <sup>57</sup>Fe-Folie. Als maximale Geschwindigkeit erhalten wir  $v_{max} = (9, 291 \pm 0, 077) \frac{mm}{s}$ . Für den Fehler des Antriebes finden wir  $\delta U = 5 \cdot 10^{-3}$ .

	- 71-	r o
Shift	Geschwindigkeit in $\frac{mm}{s}$	Energieverschiebung in $neV$
$E_1$	$-(5,430\pm0,046)$	$-(260, 6 \pm 2, 3)$
$E_2$	$-(3,193\pm0,027)$	$-(153,3\pm 1,3)$
$E_3$	$-(0,9546\pm0,0084)$	$-(45,82\pm0,41)$
$E_4$	$(0,7148\pm0,0063)$	$(34, 31 \pm 0, 31)$
$E_5$	$(2,965\pm 0,025)$	$(142, 3 \pm 1, 2)$
$E_6$	$(5,212\pm0,044)$	$(250, 2 \pm 2, 2)$

Wir finden die 6 Hyperfeinniveau Aufspaltungen

Diese entsprechen den Übergängen vom angeregten Zustand  $I = j_a = \frac{3}{2}$  zum Grundzustand  $I = j_g = \frac{1}{2}$  in der folgenden Graphik ([4] S. 92), wobei die Übergänge durch die Auswahlregeln der Quantenmechanik ( $\Delta I = \pm 1$ ;  $\Delta m_I = 0$  oder  $\pm 1$ ) limitiert sind.



Die Isomerieverschiebung zwischen Quelle und Absorber lässt sich zu  $\delta = -(0, 1142 \pm 0, 0020) \frac{mm}{s} = -(5, 48 \pm 0, 10) neV$  bestimmen. Hieraus folgt, da  $\delta$  negativ ist und wir diesen negativen Wert der mittleren quadratischen Kernradien zwischen

angeregtem Zustand und Grundzustand mit Hilfe von (1) verrechnen, dass die Elektronendichte bei den Absorberkernen größer ist als an den Kernen der Quelle, da das Ergebnis einen positiven Wert liefert, wobei somit also  $\rho_A - \rho_S > 0$ .

c2)

Es ist aus dem bekannten magnetischen Moment im Grundzustand ( $\mu_g = +0,0905 \cdot \mu_N$ [3], bzw.  $\mu_g = 0,0903 \pm 0,0007$  [4]) das magnetische Moment im angeregten Zustand von <sup>57</sup>Fe zu berechnen.

Wir können (3) benutzen und die Energiedifferenz zwischen zwei benachbarten Niveaus m und m-1 als:

$$\Delta E = -\frac{\mu_I H}{I}$$

darstellen. Wir finden für die Aufspaltungen des angeregten Zustandes bzw. des Grundzustandes (s. Abbildung):

$$\Delta E_a = -\frac{\mu_a H}{\frac{3}{2}} = E_1 - E_2 = E_2 - E_3 = E_4 - E_5 = E_5 - E_6$$
  
$$\Delta E_g = -\frac{\mu_g H}{\frac{1}{2}} = E_4 - E_2 = E_5 - E_3$$

Dies können wir umschreiben, um das magnetische Moment im angeregten Zustand zu erhalten:

$$\mu_a = 3\mu_g \frac{\Delta E_a}{\Delta E_g}.\tag{5}$$

Wir können die gewichteten Mittelwerte für  $\Delta E_a$  und  $\Delta E_g$  berechnen und erhalten:

$$\Delta E_a = -(2,244 \pm 0,059) \frac{mm}{s} = -(107,7 \pm 2,9) \ neV$$
  
$$\Delta E_g = (3,914 \pm 0,029) \frac{mm}{s} = (187,9 \pm 1,4) \ neV$$

Diese können wir nun in (5) einsetzen und wir erhalten für das magnetische Moment im angeregten Zustand:

$$\mu_a = -(0, 1557 \pm 0, 0043) \cdot \mu_N$$

Aus [4] finden wir als Literaturwert (S. 144)  $\mu_a = -(0, 153 \pm 0, 004) \cdot \mu_N$ , welcher mit unserem Wert übereinstimmt.

c3)

Es ist das magnetische Hyperfeinfeld am Kernort bei Zimmertemperatur zu bestimmen und die Größe sowie die Beiträge zum Hyperfeinfeld zu diskutieren.

Wir betrachten  $\Delta E_g = -\frac{\mu_g H}{\frac{1}{2}}$  und stellen nach H um, um dass Hyperfeinfeld am Kernort bei Zimmertemperatur zu erhalten:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\Delta E_g}{\mu_g}.$$

Wir nutzen unser in c2) bei Zimmertemperatur ermitteltes  $\Delta E_g$  und das gegebene  $\mu_g$  und erhalten für den Betrag von H:

$$H = (32, 92 \pm 0, 24) T.$$

Das Feld ist somit sehr groß, da in der angewandten Physik normalerweise nur Magnetfelder mit wenigen oder sogar unter einem Tesla verwendet werden. Das Magnetfeld wird durch folgende Beiträge erzeugt:

- 1. Die 4s-Elektronen sind durch Austauschwechselwirkung mit den 3d-Elektronen polarisiert.
- 2. Die 3d-Elektronen erzeugen neben der makroskopischen Magnetisierung auch diese mikroskopische.
- 3. Mit "Core-Polarisation" bezeichnet man Rumpfelektronen (der vollbesetzten Schalen), die polarisiert wurden, diese treten in diesem Fall durch die Polarisierung durch orientierte 3d-Elektronen auf. Sie bilden für unseren Fall den dominierenden Beitrag.
- 4. Nachbaratome können auf Grund ihres Dipolmomentes einen Einfluss auf das Magnetfeld haben, wobei dieser im Vergleich zu dem beobachteten Feld (H = 33, 0T)mit einem maximalen Beitrag von 0, 7T gering ausfällt. Er kommt bei uns durch die nicht perfekte symmetrische Struktur der Probe vor.

### c4)

Es ist das Hyperfeinfeld für die Temperatur T = 0 zu extrapolieren, wobei die Annahme gemacht werden soll, dass das Hyperfeinfeld proportional zur Magnetisierung sei.

Aus [2] erhalten wir

$$\Delta M = M(0) - M(T) = M(0) A T^{\frac{3}{2}}$$

mit der Konstanten A, die für Eisen mit  $A = (3, 4 \pm 0, 2) \cdot 10^{-6} K^{-\frac{3}{2}}$  gegeben ist. Wir können umstellen und erhalten:

$$M\left(0\right) = \frac{M\left(T\right)}{\left(1 - AT^{\frac{3}{2}}\right)}.$$

Wir können nun mit der Annahme  $H^{\sim}M$  unser H(T = 293, 15 K) einsetzen und erhalten:

$$H(0) = (33, 5 \pm 2, 0) T.$$

Leider ist der Fehler von A zu groß als das man einen wirklichen Unterschied zwischen den Feldern bei Zimmertemperatur und 0 K erkennen könnte, wobei der Wert ein wenig größer ist.

# d)

Es ist eine Messung der thermischen Rotverschiebung durchzuführen und mit dem Dulong-Petit'schem Gesetz zu vergleichen. Wir erhalten eine maximale Geschwindigkeit von  $v_{max} = (0,829 \pm 0,014) \frac{mm}{s}$ . Für den Fehler des Antriebes finden wir  $\delta U = 2, 1 \cdot 10^{-2}$ . Wir gehen von einem Fehler in der Temperatur von  $\Delta T = \pm 2 K$  aus. Für die Isomerieverschiebung erhalten wir

i di die isometieversemebung ernatien wit					
Temperatur in $K$	$\delta$ in $\frac{mm}{s}$	$\delta$ in $neV$			
293, 15	$-(0,1393\pm0,0049)$	$-(6,69\pm0,24)$			
77	$-(0,0840 \pm 0,0048)$	$-(4,03\pm0,23)$			

Wir berechnen die Differenz der Isomerieverschiebung der beiden Messungen (293, 15 K) bzw. 77 K) und identifizieren diese mit der thermischen Rotverschiebung:

$$\delta_{exp} = \delta (77 K) - \delta (293, 15 K) = (0,0554 \pm 0,0068) \frac{mm}{s} = (2,66 \pm 0,33) \ neV.$$

Um den theoretischen Vergleichswert zu berechnen, betrachten wir (4) unter Berücksichtigung von Dulong-Petit ( $C_V = 3R$ ):

$$\delta_{rot} = \delta \left(77\,K\right) - \delta \left(293,15\,K\right) = -\frac{3RT}{2Mc^2} E_{\gamma} = \left(7,57\pm0,07\right)\,neV = \left(0,1576\pm0,0015\right)\,\frac{mm}{s}$$

Der Vergleich zeigt, dass die Werte nicht vergleichbar sind, die Dulong-Petit Regel kann hier keine Anwendung finden, da das Experiment dem theoretischen Wert widerspricht. Die Annahme, die mit der Regel gemacht wurde ist also anscheinend für tiefe Temperaturen nicht mehr gültig.

# 4 Diskussion

Die Mößbauerspektroskopie ermöglicht die Untersuchung und Erforschung der Struktur der Atome. Die Genauigkeit der Messungen ist mit der Möglichkeit neV aufzulösen sehr präzise. Der Fehler der Messung kann bei den meisten Versuchsreihen gering gehalten

werden, da für die meisten Experimente die Temperatur als nahezu konstant angesehen werden kann und diese daher einen geringen Einfluss hat. Der Fehler, der aus Erschütterungen folgen könnte, wurde nicht berücksichtigt, da der Einfluss als vernachlässigbar eingestuft wird. Ein Fehler durch mangelnde Statistik wurde durch lange Messungen ausgeschlossen.

Für die einzelnen Versuchsabschnitte lässt sich festhalten:

## a)

Die Eichmessung lief ca. 2 - 2 1/2 Stunden, womit die Genauigkeit der folgenden Messungen durch einen relativ kleinen Fehler der Maximalgeschwindigkeit ( $\delta v_{max} = 8, 2 \cdot 10^{-3}$ , d.h. unter 1%) garantiert werden konnte.

### b)

Der Fehler für diese Aufgabe konnte auf ein erträgliches Maß von ca. 1,5-2% gebracht werden. Interessant ist, dass man die Struktur des angeregten mit der des Grundzustandes bzw. Fe<sup>2+</sup> mit Fe<sup>3+</sup> vergleichen kann und so mit Hilfe von anderen Messungen die Elektronenkonfiguration bzw. Struktur der Ionen bestimmen bzw. verifizieren kann. So helfen verschiedene Messmethoden das Verständnis der Natur zu verbessern. Zudem konnte auf Grund der Quadrupolaufspaltung, die bei Fe<sup>2+</sup> viel größer als bei Fe<sup>3+</sup> ist, gezeigt werden, dass die Elektronenverteilung beim Fe<sup>2+</sup> viel asymmetrischer als beim Fe<sup>3+</sup> sein muss.

## c)

Der Fehler fällt hier unter 1% für die einzelnen Shifts und ca. mit 1,5% für die Isomerieverschiebung aus, wobei hier gesagt werden muss, dass der Fehler der Isomerieverschiebung mit relativen Fehlern und nicht mit absoluten Fehlern berechnet wurde, wobei eine Rechnung mit absoluten Fehlern einen sehr großen Fehler von über 60% geliefert hätte. Zu erwähnen ist auch die auffallend große Stärke des Hyperfeinfeldes am Kernort, welches hauptsächlich durch den "Core-Polarisation" Effekt beeinflusst wird. Die Extrapolation des Hyperfeinfeldes auf T = 0 zeigt keinen großen Unterschied in der Stärke des Feldes und durch den großen Fehler von der Materialkonstanten A ist ein sinnvoller Vergleich der Werte auch nicht möglich.

## d)

Die thermische Rotverschiebung kann experimentell in der gleichen Größenordnung wie die Theorie diese voraussagt gemessen werden, wobei die Messfehler ein wenig größer ausfallen (ca. 3,5-6%). Jedoch stimmt die Theorie mit der Messung nicht überein, da das erwartete Fehlerintervall bei weitem überschritten wird. Die Messung zeigt ca. einen Faktor 3 Unterschied zu der Theorie. Qualitativ wurde somit eine Rotverschiebung festgestellt, wobei eine quantitative Theorie nicht unter Berücksichtigung von Dulong-Petit Verwendung finden sollte, sondern einen anderen Ansatz suchen sollte. Weitere Messungen könnten evtl. den Faktor 3 bestätigen, der den Unterschied zwischen Theorie und Messung ausmacht, wobei dieser evtl. über f die Freiheitsgrade (die bei tiefen Temperaturen zum Teil "eingefroren" sind) ins Spiel gebracht werden könnte.

# 5 Quellen

- [1] Riedel, Anorganische Chemie, 6. Auflage
- [2] Ch. Kittel, Einführung in die Festkörperphysik, 14. ü. u. erw. Auflage
- [3] Praktikumsskript (Fortgeschrittenenpraktikum)
- [4] Horst Wegener, Der Mössbauereffekt und seine Anwendung in Physik und Chemie, 2.erw. Auflage

# 6 Messprotokoll