

Fortgeschrittenenpraktikum – Vorbereitung

# Mößbauerspektroskopie

Erik Streb\*

4. Mai 2007

Betreuer: Dr. West

## 1 Einleitung

Unter dem nach seinem Entdecker Rudolf Mößbauer (Nobelpreis 1961) benannten Effekt versteht man die quasi rückstoßfreie Emission bzw. Absorption eines Gamma-Quants durch einen Atomkern. Dies ist möglich durch Einbinden des Kerns in ein Kristallgitter, der durch seine große Masse dem  $\gamma$ -Quant kaum Energie entzieht. Durch Kombination von Emission und Absorption lässt sich eine extrem empfindliche Messmethode für geringe Energieänderungen im Spektrum eines Kerns realisieren. Im Versuch soll genau diese Leistungsfähigkeit demonstriert werden. Außerdem sollen exemplarisch einige typische Mößbauerspektren erstellt werden.

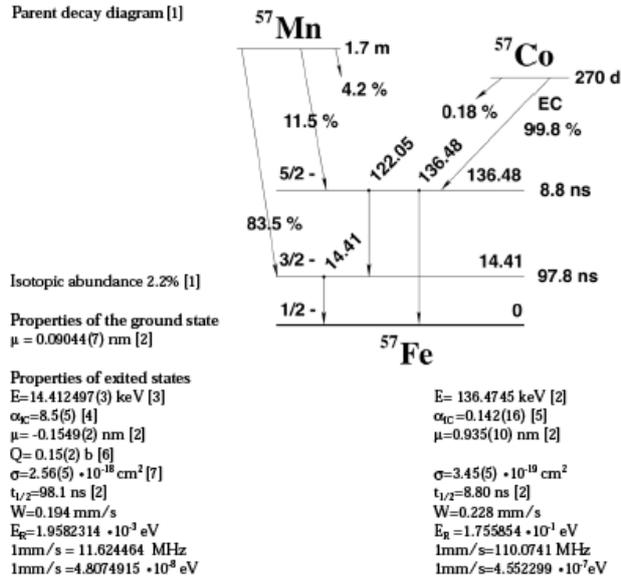
## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Kernresonanzabsorption

Bei der Kernresonanzabsorption bestehen Quelle und Absorber aus dem selben Isotop. Der relevante Übergang besteht hierbei zwischen zwei Energieniveaus des nuklearen Grund bzw. angeregten Zustands ( $E_g$  bzw.  $E_a$ ). In der Quelle wird das Isotop (z.B.  $^{57}\text{Fe}$ , angeregt durch zerfallendes  $^{57}\text{Co}$ , siehe Abbildung 1) angeregt und relaxiert anschließend unter Aussendung hochenergetischer  $\gamma$ -Strahlung der Frequenz  $\hbar\omega = E_a - E_g$  in den Grundzustand. Die Absorberkerne werden, bei vorliegender Resonanz, in den angeregten Zustand  $E_a$  versetzt. Daher sollte beim Aufbau zur Transmissionspektroskopie in Strahlrichtung der Quelle von einem geeigneten Detektor bei der Resonanzfrequenz des Absorbers ein Intensitätsabfall gemessen werden.

---

\*E-Mail: mail@erikstreb.de



Isomer shifts for Fe in different host matrices (mm/s)[8]

V	Cr	Fe	Nb	Ta	Mo	Rh	Pd	Cu	Ir	Pt	Ag	Au
-0.157(1)	-0.1473(3)	0	0.001(1)	0.046(1)	0.0470(15)	0.1090(3)	0.1684(4)	0.2268(5)	0.2310(5)	0.3437(6)	0.499(2)	0.641(1)

Abbildung 1: Zerfallsschema von  $^{57}\text{Co}$  zu  $^{57}\text{Fe}$

## 2.2 Natürliche Linienbreite

Aufgrund der Energie-Zeit-Unschärferelation  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$  entspricht der Zeit  $\tau$ , die für die Entwicklung eines instabilen Niveaus charakteristisch ist, eine Energieunschärfe

$$\Delta E \approx \frac{\hbar}{\tau} \quad (1)$$

Die Energie eines instabilen Niveaus kann also nicht mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden, sondern höchstens mit einer Unschärfe  $\Delta E$ . Diese nennt man die *natürliche Linienbreite* des betrachteten Niveaus.

Wenn man kann die Zustände als einen gedämpften harmonischen Oszillator annähert, erhält man für die Intensität der Spektrallinien eine Cauchy-Verteilung (auch bekannt als Lorentz-Kurve):

$$I(E) = \frac{1}{(E - E_0)^2 + \left(\frac{\hbar}{2\tau}\right)^2} \quad (2)$$

wobei  $E_0$  die Grundzustandsenergie bezeichnet, die hier das Zentrum der Verteilung ist.

Außerdem kommt es durch thermische Bewegung der Atome zu einer Dopplerverbreiterung, die hier nicht weiter diskutiert wird.

## 2.3 Debye-Waller-Faktor

Der Debye-Waller-Faktor beschreibt den Anteil der Absorption von  $\gamma$ -Quanten, der praktisch „rückstoßfrei“, d. h. ohne Frequenzverschiebung erfolgt, weil der Kristall aufgrund

seiner großen Masse als Ganzes den Rückstoß aufnimmt – es entsteht also kein Phonon. Dies ist vergleichbar mit einem Ball, der auf eine harte Wand trifft.

Mit der Debyeschen Näherung für niedrige Temperaturen ( $T < \Theta$ ) gilt:

$$f(T) = \exp \left[ -\frac{E_R}{k_B \Theta} \left( \frac{3}{2} + \frac{\pi^2 T^2}{\Theta^2} \right) \right] \quad (3)$$

Man sieht, dass dieser Anteil mit abnehmender Temperatur (und für große Debyetemperaturen  $\Theta$ ) steigt: Je kälter, desto härter ist der Kristall.

## 2.4 Aufspaltungen

Als Hyperfeinaufspaltung bezeichnet man die über die Feinstruktur hinausgehende, auf der Kern-Hülle-Wechselwirkung beruhende Linienaufspaltung.

### 2.4.1 Magnetische Dipolwechselwirkung

Diese Aufspaltung ergibt sich aus den unterschiedlichen Ausrichtungen des Kerndipolmoments  $\vec{\mu}_I$  in dem durch die Hüllenelektronen erzeugten Magnetfeld am Kernort  $\vec{B}_J$ . Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{F}$  des Atoms ist somit gequantelt:

$$|\vec{F}| = \sqrt{F(F+1)}\hbar \quad (4)$$

Daraus ergibt sich eine Wechselwirkungsenergie von

$$E_m = -\vec{\mu}_I \vec{B}_J \quad (5)$$

### 2.4.2 Quadrupolaufspaltung

Ist der Kern nicht exakt kugelsymmetrisch kann er ein Quadrupolmoment  $Q$  innerhalb eines elektrostatischen Feldes besitzen. Durch das Feld der Elektronenhülle kann eine Quadrupolaufspaltung beobachtet werden. Die Aufspaltung errechnet sich mit

$$\Delta E_Q = E_q \left( I = \frac{3}{2}, m_I = \pm \frac{3}{2} \right) - E_q \left( I = \frac{3}{2}, m_I = \pm \frac{1}{2} \right) = \frac{eqQ}{2} \quad (6)$$

### 2.4.3 Isomeriewerschiebung

Durch verschiedene Ausdehnungen des Kerns ändert sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen innerhalb des Kerns. Dadurch sind für den Kern unterschiedliche elektrische Felder wahrnehmbar. Da angeregte Kerne und Kerne im Grundzustand unterschiedliche Durchmesser haben, können wir eine Verschiebung der Kernniveaus beim Mößbauerübergang, die sogenannte Isomeriewerschiebung, beobachten. Die Isomeriewerschiebung  $\delta$  wird bestimmt durch

$$\delta = \Delta E_A \Delta E_S = \frac{2\pi}{5} Z e^2 \left( |\Psi_A(0)|^2 - |\Psi_S(0)|^2 \right) (R_a^2 - R_g^2) \quad (7)$$