

Physikalisches Praktikum für Fortgeschrittene

Heinrich-Buff-Ring 16, Raum 307

Spektroskopie mit einem Si-Halbleiterdetektor

Letzte Änderung: 12. Oktober 2023

In diesem Versuch werden die physikalischen Grundlagen der Elektronenspektroskopie mittels Si-Halbleiterdetektoren erarbeitet. Es werden β -Spektren verschiedener radioaktiver Präparate aufgenommen. Das Verhältnis vom K- zum LMN-Konversionskoeffizienten in ^{137}Cs wird bestimmt, und die maximale β -Energie wird mit Hilfe eines Fermi-Kurie-Plots ermittelt.

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbereitung	3
1.1	Literatur	3
1.2	Fragen	3
1.3	Aufgaben	3
2	Versuchsdurchführung	4
2.1	Geräteliste	4
2.2	Präparateliste	4
2.3	Einstellung der Elektronik für die β -Spektroskopie	4
2.4	Aufnahme der β -Spektren	4
3	Auswertung der Messungen	5
3.1	Energieeichung	5
3.1.1	Bestimmung der Peak-Lage mit Gauß-Fit	5
3.1.2	Energieeichung mit Geraden-Fit	5
3.1.3	Entfaltung des Beta-Spektrums	6
3.1.4	Energieverluste der Elektronen	6
3.2	Bestimmung der Multipolordnung des ^{137}Ba -662-keV-Überganges	7
3.2.1	Konversionselektronen	7
3.2.2	Aufgabe	8
3.2.3	Numerische Peakflächenbestimmung	8
	Form des Untergrunds	8
	Flächenbestimmung und Fehlerabschätzung	8
3.2.4	Flächenbestimmung durch Kurven-Fit	10
	Die Fit-Funktion	10
	Flächenberechnung	11

	Fehlerrechnung	13
3.3	Bestimmung der Beta-Endenergie von ^{137}Cs mittels Kurie-Plot	14
3.3.1	Der Kurie-Plot	14
3.3.2	Aufgabe	15
3.3.3	Fehlerrechnung	16
4	Hilfen bei der Auswertung	19
4.1	Wichtige Hinweise	19
4.2	Importieren der ASCII-Dateien	19
4.3	Auswertung mit dem MCA-Messprogramm	20
4.3.1	Peak-Fits	20
4.3.2	Cs-137 Multipolaritätsbestimmung	20
4.4	Auswertung mit Origin	20
4.4.1	Schnell-Kurs für Peak-Fits mit OriginPro 2023b	20
4.4.2	Installieren der Fitfunktionen und Fitter-Menü-Dateien	21
4.4.3	Energieeichung mit Origin	22
	Peak-Fits mit Sigmoid Untergrund	22
	Lineare Energieeichung	23
4.4.4	Bestimmung der Multipolordnung von Cs-137	23
	Flächentreuer Doppel-Peak-Fit	23
4.4.5	Cs-137 Kurie-Plot	24
4.5	Auswertung mit Excel	24
4.5.1	Energieeichung mit Excel	24
4.5.2	Kurie-Plot mit Excel	25
A	Niveauschemata	26
B	Verhältnisse von Konversionskoeffizienten	27
C	Fermi-Funktion	29
D	Bindungsenergien und Konversionskoeffizienten für ^{137}Cs und ^{207}Bi	31

1 Vorbereitung

1.1 Literatur

- K. S. Krane, *Introductory Nuclear Physics* (John Wiley, New York, 1988) Kapitel 9.
- T. Mayer-Kuckuk, *Physik der Atomkerne* (Teubner, Stuttgart, 1974).
- C. M. Lederer, J. M. Hollander, I. Perlman, *Table of Isotopes* (John Wiley, New York, 1967).
- F. Rösel, H. M. Fries, K. Alder und H. C. Pauli, *Internal Conversion Coefficients for all Atomic Shells*, Atomic and Nuclear Data Tables **21** (1978) 291–514.
- CRC Handbook of Chemistry and Physics (CRC Press, Boca Raton, Florida, 1998).
- B. Dzelepov, L. Zyrianova, Izd. Akad. Nauk. Moskau (1956).
- Handbücher der verwendeten elektronischen Geräte.
- WWW-Seite des Praktikums Atom- und Quantenphysik,
<http://www.uni-giessen.de/fbz/fb07/fachgebiete/physik/einrichtungen/ipi/ag/ag9/lehre/prak>
insbesondere „Anleitung zur Fehlerrechnung“.

1.2 Fragen

- Was sind Konversionselektronen? Wann werden sie emittiert?
- Was sind Augerelektronen?
- Wie ist der Konversionskoeffizient definiert?
- Welche Teilchen werden beim β -Zerfall aus einem Atomkern emittiert?
- Was ist ein Kurie-Plot?

1.3 Aufgaben

- Fertigen Sie ein Blockschaltbild der verwendeten Elektronik an.
- Führen Sie mit Hilfe der Konversionselektronen-Peaks eine lineare Energieeichung $E_\beta = a + bK$ durch und tragen Sie diese nach Abzug der Eichgeraden grafisch auf.
- Plotten Sie die gemessenen Spektren als Funktion der β -Energie.
- Bestimmen Sie über das Verhältnis der Konversionskoeffizienten die Multipolordnung des ^{137}Ba -662-keV-Überganges.
- Bestimmen Sie die Beta-Endenergie von ^{137}Cs mittels Kurie-Plot.

2 Versuchsdurchführung

2.1 Geräteliste

Bei der verwendeten Elektronik handelt es sich um sogenannte Nuclear-Instrument-Module (NIM). Sie sind in weiten Teilen der Strahlenmesstechnik Standard.

- 1 Si-Oberflächensperrschicht-Detektor (150 mm² aktive Fläche, 1.5 mm aktive Dicke) in lichtdichtem Gehäuse
- 1 Ladungsempfindlicher Vorverstärker FRIESEKE&HOEPFNER FHT 640 G
- 1 High Voltage Power Supply mit Vorverstärker Power Supply FRIESEKE&HOEPFNER FHN 1011 A
- 1 Spectroscopy Amplifier ORTEC 471
- 1 Analog Digital Converter NUCLEAR DATA 560
- 1 PC zur Spektrenaufnahme,
- 1 Oszilloskop.

2.2 Präparateliste

- ¹³⁷Cs, ²⁰⁷Pb.

2.3 Einstellung der Elektronik für die β -Spektroskopie

- Die Betriebsspannung für den Si-Halbleiter-Teilchendetektor beträgt +225V. Der Detektor ist lichtempfindlich, daher ist vor jedem Öffnen des lichtdichten Gehäuses die **Betriebsspannung auszuschalten!**
- Verbinden Sie den unipolaren Ausgang des Hauptverstärkers mit dem Signal-Eingang des ADC.
- Die Signalverstärkung ist am Hauptverstärker so einzustellen, dass die maximale Impulshöhe ungefähr 7 V beträgt.
- Als Puls-Shaping-Zeit des Hauptverstärkers ist 0.5 μ s einzustellen.
- Stellen Sie „Conversion Gain“ und „Group“ des ADC beide auf 1024 Kanäle.
- Kontrollieren Sie die Hauptverstärkersignale mit dem Oszilloskop.

2.4 Aufnahme der β -Spektren

Bei unveränderter Verstärkereinstellung werden nacheinander die Impulshöhenspektren der ²⁰⁷Pb und ¹³⁷Cs -Präparate mit Hilfe des PC-Systems und des Programmes **MCA** aufgenommen. Die Messzeiten sind, angepasst an die Aktivitäten der Präparate, so zu wählen, dass die Messungen eine ausreichende Statistik erreichen (ca. 20min).

3 Auswertung der Messungen

3.1 Energieeichung

3.1.1 Bestimmung der Peak-Lage mit Gauß-Fit

Verwenden Sie zur Energieeichung die vier Konversionslinien des ^{207}Bi . Die Peaks können zur Bestimmung ihrer Lage recht gut mit einer Gauß-Verteilung gefittet werden. Dabei stellt sich jedoch die Frage, mit welcher Wichtung der Fit durchzuführen ist. Zunächst scheint eine statistische Wichtung ($W = 1/\text{Kanalinhalte}$) angemessen, da die Kanalinhalt Poisson-verteilt sind. Dies hat allerdings zur Folge, dass der Untergrund, der unter Umständen alle möglichen Anteile (z.B. Compton-Kanten) von benachbarten Peaks enthält, erheblich stärker gewichtet wird als der Peak selber. Wir bevorzugen daher einen ungewichteten Fit zur Bestimmung der Peak-Lage.

Oft verwechselt:

Die Breite des Gauß-Peaks ist nicht die Standardabweichung der Peak-Lage!

Hinweis für Origin-Benutzer:

Der von ORIGIN angebotene Gauß-Fit kennt nur einen konstanten Untergrund. Dies entspricht nur unzureichend der tatsächlichen Spektrenform. Wir bieten deshalb auf der Praktikums-Internetseite (s. Abschnitt 1.1) unter den Namen `Gauss_Peak_1_Bg`, und `Gauss_Peak_2_Bg` ORIGIN-`fdf`-Dateien (Fit-Description-Files), für einen einfachen bzw. doppelten Gauß-Peak mit Sigmoid- (Schwanenhals) Untergrund an. Diese Dateien können Sie nach ORIGIN importieren (s. Abschnitt ??).

3.1.2 Energieeichung mit Geraden-Fit

Zur Energieeichung verwenden Sie die zuvor ermittelten Kanallagen der Peaks und die aus den Zerfallsschemata zu entnehmenden zugehörigen Energien abzüglich der Bindungsenergien (s. Anhang D) für einen linearen Fit. Für die Literaturwerte der Energien können wir die Fehler vernachlässigen. Die Peak-Lagen sind mit Fehlern behaftet, die uns der Gauß-Fit geliefert hat. Da die Fehler der Peak-Lagen sehr unterschiedlichen sein können, je nach dem wie gut die Peaks zu fitten sind, sollten wir für die Energieeichung einen gewichteten Fit verwenden. Um die Fehler berücksichtigen zu können, wählen wir die Peak-Lage K als abhängige Variable und die Energie als unabhängige.

$$K = a + bE \quad (1)$$

Da die Stützpunkte der Eichung weit vom Energienullpunkt entfernt sind, ist zu erwarten, dass die Geradenparameter stark korreliert sind und wir deshalb für eine korrekte Fehlerrechnung die Kovarianzen nicht vernachlässigen dürfen. Wir können dieses Problem umgehen, indem wir für den Fit den Energienullpunkt in den Schwerpunkt der Eichpunkte legen (siehe auch „Anleitung zur Fehlerrechnung“).

Zur Berücksichtigung einer Streuung der Messwerte, die den Fehlerbalken nicht entspricht, multiplizieren Sie die Fehler der Eichgeraden mit der Wurzel aus dem reduzierten χ^2 .

Stellen Sie die Eichpunkte nach Abzug der Eichgeraden mit Fehlerbalken grafisch dar (vgl. Abb. 1).

3.1.3 Entfaltung des Beta-Spektrums

Die folgenden Überlegungen werden zeigen, dass wir auf eine Entfaltung des Beta-Spektrums verzichten können.

Die Übertragung der Energieeichung mit diskreten Peaks auf das kontinuierliche Beta-Spektrum ist nicht ganz so trivial wie die Eichung von diskreten, unbekanntenen Peaks. Das gemessene Beta-Spektrum ist eine Faltung des kontinuierlichen Originalspektrums mit der Peak-Form, d.h. man muss es sich als eine Überlagerung von vielen Peaks endlicher Breite vorstellen. Dies hat natürlich Konsequenzen für die Energieeichung. Der theoretisch richtige Weg wäre, eine Entfaltung zu rechnen, um das Original-Beta-Spektrum wieder zu rekonstruieren. Dies ist allerdings ein ziemlich mühsames Unterfangen und funktioniert auch nicht immer zuverlässig.

Versuchen wir deshalb die Auswirkungen einer solchen Faltung abzuschätzen. Die Peak-Form nähern wir mit einer normierten (Fläche = 1) Gauß-Funktion $\exp(-x^2/w^2)/w\sqrt{\pi}$ an und falten damit ein kontinuierliches Spektrum $f(x)$.

$$F(x) = \frac{1}{w\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-(x-x')^2/w^2} dx' \quad (2)$$

Das Ergebnis lässt sich mit den Ableitungen $f^{(n)}(x) = d^n f/(dx)^n$ als Reihe darstellen:

$$F(x) = f(x) + w^2 \frac{f^{(2)}(x)}{1!4^1} + w^4 \frac{f^{(4)}(x)}{2!4^2} + \dots + w^{2n} \frac{f^{(2n)}(x)}{n!4^n} + \dots \quad (3)$$

Man erkennt sofort, dass eine Gerade durch diese Faltung reproduziert wird und ein quadratischer Anteil zu einer konstanten Verschiebung in y -Richtung führt.

Da das Beta-Spektrum im interessierenden Bereich (400–500 keV) nur eine geringe Abweichung von einer Geraden zeigt, können wir in einfachster Näherung auf eine Entfaltung verzichten. Für eine bessere Näherung würden wir an das Beta-Spektrum ein quadratisches Polynom anfitzen und aus dem quadratischen Term die konstante y -Korrektur errechnen. Diese hat zwar keine Auswirkung auf die Energieeichung, verschiebt aber beim Kurie-Plot den Schnittpunkt mit der x -Achse. Tatsächlich ist diese Korrektur allerdings gering ($\Delta y < 1$) im Vergleich zum Untergrundabzug.

3.1.4 Energieverluste der Elektronen

Die Elektronen verlieren bereits auf dem Weg vom Präparat zum Detektor Energie: Im Material des Präparates selbst, in dessen Abdeckung, in der Luft zwischen Präparat und Detektor und im Eintrittsfenster des Detektors. Während die beiden letzten Effekte durch die Eichung berücksichtigt werden, sind die beiden ersten individuelle Eigenschaften der beiden verwendeten Präparate, die wir möglicherweise nicht vernachlässigen dürfen. Vergleichen

Sie deshalb die Werte der ^{137}Cs -Messung mit der ^{207}Bi -Eichung (s. Abb. 1), um eine Korrektur zu ermitteln.

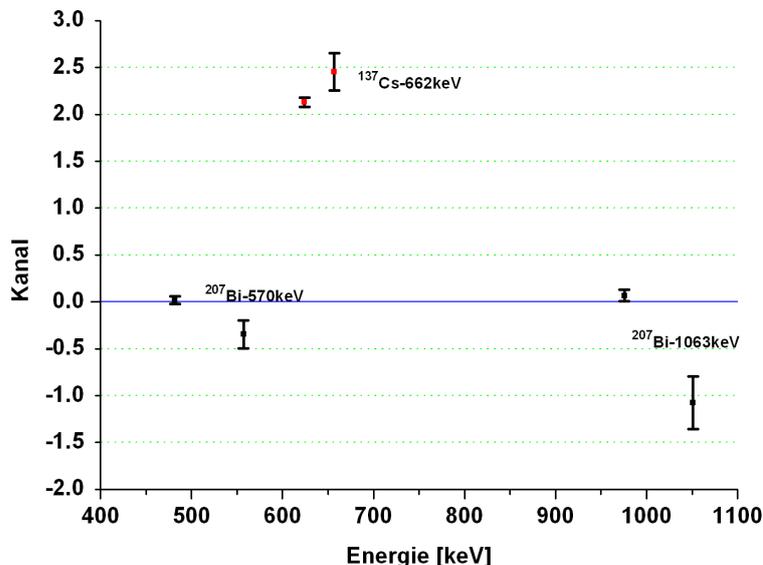


Abbildung 1: ^{137}Cs - im Vergleich mit ^{207}Bi -Energieeichung nach Abzug der Eichgeraden.

3.2 Bestimmung der Multipolordnung des ^{137}Ba -662-keV-Überganges

3.2.1 Konversionselektronen

Das Aussenden von Konversionselektronen ist ein Konkurrenzprozess zu einem γ -Übergang in einem Kern. Dabei wird die Zerfallsenergie direkt auf ein Elektron einer Schale übertragen, es geschieht also nicht über den Umweg eines Photoeffekts. Der Anteil der verschiedenen Elektronenschalen an der inneren Konversion ist unterschiedlich und abhängig von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen am Kernort. Der Konversionskoeffizient α ist das Verhältnis der Anzahl Konversionselektronen zu Gammaquanten:

$$\alpha_{\text{tot}} = \alpha_K + \alpha_L + \dots \quad (4)$$

Hierbei ist α_{tot} der totale Konversionskoeffizient und α_K, α_L sind die Konversionskoeffizienten der K-, L-Schale usw..

Je nach Übergang im Kern muss das Elektron mehr oder weniger Drehimpuls mitnehmen. Für einen Drehimpulsübertrag auf das Elektron ist jedoch ein gewisser Abstand des Elektrons zum Kernzentrum nötig. Dies führt zu einer Abhängigkeit der Konversionskoeffizienten vom Drehimpulsübertrag und lässt auf die Multipolordnung der Gammastrahlung schließen.

Für die Konversionskoeffizienten in Abhängigkeit von Kernladungszahl, Gammaenergie, Multipolarität und Elektronenschale gibt es tabellierte Rechnungen [Rösel et al. (1978)]. Die Messung solcher Konversionskoeffizienten ist allerdings nicht ganz trivial, da für Gammaquanten und Elektronen jeweils eine Absolutmessung notwendig ist. Wesentlich einfacher gestaltet

sich das Verfahren, wenn wir uns auf die Messung der Verhältnisse von Konversionskoeffizienten beschränken. Da die Energie der Konversionselektronen um die Bindungsenergie der Elektronen vermindert ist, können wir sie bei ausreichender Energieauflösung der Apparatur nach ihrer Schalenherkunft unterscheiden.

3.2.2 Aufgabe

Bestimmen Sie aus dem ^{137}Cs - und/oder ^{207}Bi -Spektrum die Flächeninhalte der Konversionselektronen-Peaks. Mit der Auflösung unserer Apparatur können wir nur die K-Elektronen als eigenen Peak sehen, alle anderen sind in dem zweiten Peak vereint. Bilden Sie das Flächenverhältnis $V = F_K/F_{\text{tot}-K} = \alpha_K/(\alpha_{\text{tot}} - \alpha_K)$ und versuchen Sie damit die Multipolarität des zugehörigen γ -Überganges mit Hilfe der Grafen in den Abbildungen 9 und 10 zu ermitteln. Führen Sie eine Fehlerrechnung durch.

3.2.3 Numerische Peakflächenbestimmung

Form des Untergrunds

Um die Flächen der Peaks bestimmen zu können, benötigen wir eine passende Vorstellung vom Verlauf des Untergrundes. Zu beiden Seiten des Doppel-Peaks ist der Untergrund näherungsweise horizontal. Dies lässt vermuten, dass der Untergrund durch die Konversionselektronen selber entsteht. Hätten wir eine deutlich bessere Auflösung, so dass die Peaks schmale Linien wären, so würden wir am Ort der Linien für den Untergrund einen Sprung erwarten. Es ist deshalb wohl keine schlechte Idee, den Beitrag $U(k)$ des Kanals k zum Untergrund $U(k-1)$ proportional (Proportionalitätskonstante A) zum Messwert $M(k)$ minus Untergrund $U(k)$ zu wählen:

$$\Delta U(k) = A[M(k) - U(k)] \quad (5)$$

$$U(k) = U(k+1) + \Delta U(k+1) \quad (6)$$

Eine solche rekursive Rechnung lässt sich bequem mit EXCEL durchführen. Den Startwert $U(k+n)$, kann man z.B. durch Mittelung einiger benachbarter Kanäle am oberen Ende erhalten. Das passende A findet man durch Probieren. Hierzu kann man einige benachbarte Kanäle am unteren Ende mitteln und den Untergrund an dieser Stelle mit dem Mittelwert vergleichen.

Flächenbestimmung und Fehlerabschätzung

Die Bestimmung der Flächen unter den Peaks ist dann nur noch ein Summieren der Messwerte im Bereich der Peaks und Abzug des zugehörigen Untergrundes. Allerdings ist insbesondere beim ^{137}Cs eine saubere Trennung der Peaks sehr schwierig. Das ^{207}Bi macht es uns da einfacher, da aufgrund der hohen Kernladungszahl die Peaks deutlicher getrennt sind.

Eine vollständige Fehlerrechnung ist mit diesem Verfahren der Flächenbestimmung nicht ganz einfach wenn nicht gar unmöglich. Insbesondere der Untergrund ist durch seine rekursive Formel der Fehlerrechnung nur schwer zugänglich.

Bei der Fehlerabschätzung müssen wir sowohl statistische Fehler berücksichtigen, die sich durch die Messwerte ergeben, als auch systematische Fehler, die eine Folge der Unsicherheit

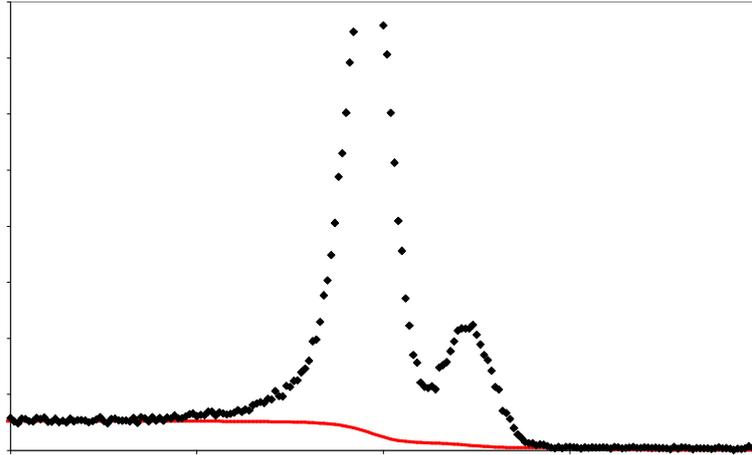


Abbildung 2: Numerisch ermittelter Untergrund (rote Linie).

bei der Peak-Trennung und der Untergrundbestimmung sind.

Wir müssen vier Beiträge zum Fehler ΔV des Flächenverhältnisses V berücksichtigen:

ΔV_{F_1} : statistischer Fehlerbeitrag der Fläche von Peak 1.

Dieser Beitrag ergibt sich durch Fehlerfortpflanzung aus der Beziehung

$$V = (F_1 - U_1)/(F_2 - U_2) \text{ zu}$$

$$\Delta V_{F_1} = V/(F_1 - U_1) \Delta F_1$$

mit dem statistischen Fehler

$$\Delta F_1 = \sqrt{F_1}$$

der Gesamtfläche F_1 (einschließlich Untergrund U_1) unter dem Peak 1.

ΔV_{F_2} : statistischer Fehlerbeitrag der Fläche von Peak 2.

Analog zu Peak 1:

$$\Delta V_{F_2} = V/(F_2 - U_2) \Delta F_2 \text{ mit}$$

$$\Delta F_2 = \sqrt{F_2}.$$

ΔV_u : Fehlerbeitrag durch den Untergrund.

Dieser Beitrag hat sowohl einen statistischen Anteil durch die beteiligten Messwerte als auch einen systematischen durch die Modellvorstellung des Untergrundes. Beides ist nicht recht in den Griff zu bekommen. Wir schlagen deshalb folgenden Weg vor: wenn Sie den Faktor A und den Startwert $U(n)$ in der Rekursionsformel für den Untergrund durch Mittelung einiger benachbarter Messwerte gefunden haben, so variieren Sie diese beiden Parameter in den Grenzen der Fehler der Mittelwerte und beobachten die Auswirkungen auf V .

ΔV_S : systematischer Fehlerbeitrag durch die Unsicherheit bei der Peak-Trennung.

Dies ist ein rein systematischer Fehler, dessen Beitrag wir nur abschätzen können durch Variieren der Trennlinie zwischen den Peaks in vernünftigen Grenzen und Beobachten der Auswirkungen auf V .

Alle vier Fehlerbeiträge nehmen wir, statistisch gesehen, als von einander unabhängig an

und addieren sie deshalb quadratisch:

$$(\Delta V)^2 = (\Delta V_{F1})^2 + (\Delta V_{F2})^2 + (\Delta V_U)^2 + (\Delta V_S)^2 \quad (7)$$

3.2.4 Flächenbestimmung durch Kurven-Fit

Die Fit-Funktion

Die Peaks der Konversionselektronen sind nicht symmetrisch, weshalb ein Fit mit Gauß-Funktionen zu keinem guten Ergebnis führt. Deutlich besser lässt sich die Peak-Form y_p durch das Produkt von zwei Sigmoide- (Schwanenhals-) Funktionen (S_1 , S_2) anpassen. Den Untergrund y_u nähern wir ebenfalls mit einer Sigmoide-Funktion (S_u) an:

$$S_1(x) = \frac{1}{1 + \exp[-(x - c)/w_1]} \quad S_2(x) = \frac{1}{1 + \exp[-(x - c)/w_2]} \quad (8)$$

$$S_u(x) = \frac{1}{1 + \exp[-2(x - c)/(w_1 + w_2)]} \quad (9)$$

$$y_p(x) = A_p S_1(x) [1 - S_2(x)] \quad (10)$$

$$y_u(x) = A_u [1 - S_u(x)] \quad (11)$$

$$A_p : \text{Peak-Amplitude} \quad (12)$$

$$A_u : \text{Untergrund-Amplitude} \quad (13)$$

$$c : \text{Zentrum} \quad (14)$$

$$w_1, w_2 : \text{Breiten} \quad (15)$$

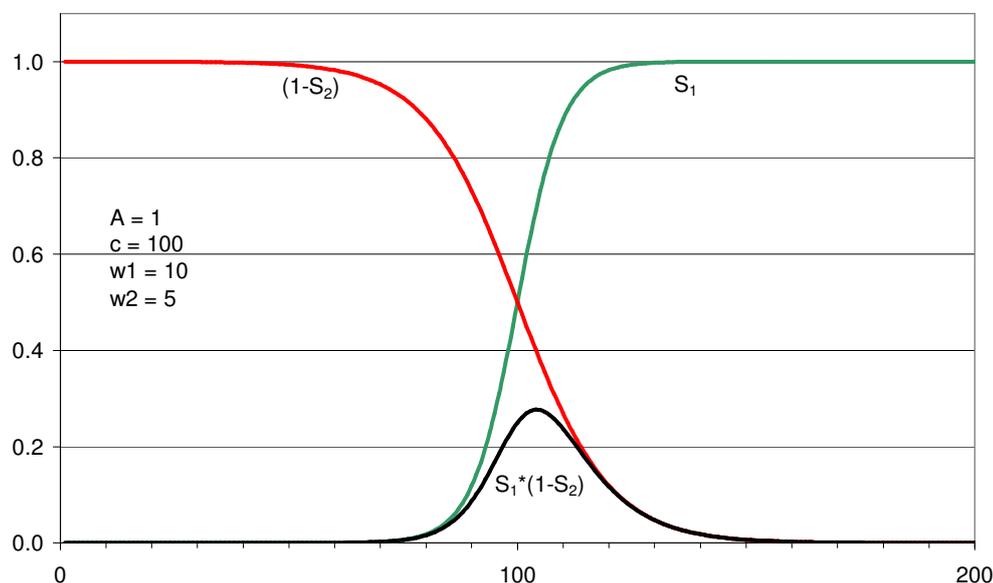


Abbildung 3: Asymmetrischer Peak als Produkt zweier Sigmoide-Funktionen.

Insgesamt sieht unsere Fit-Funktion (ORIGIN-Version) für einen Doppel-Peak mit Untergrund folgendermaßen aus:

Fit-Parameter:

$y_0, A_1, c_1, w_{11}, w_{12}, A_2, c_2, w_{21}, w_{22}, A_{34}$

Fit-Funktion:

```
double y1, y2, y3, y4;
double A3, A4, c3, c4, w3, w4;
A3 = A1 * A34; //Amplitude Untergrund Peak 1
A4 = A2 * A34; //Amplitude Untergrund Peak 2
c3 = c1; //Zentrum Untergrund Peak 1
c4 = c2; //Zentrum Untergrund Peak 2
w3 = (w11 + w12)/2; //Breite Untergrund Peak 1
w4 = (w21 + w22)/2; //Breite Untergrund Peak 2
y1 = A1*(1/(1+exp(-(x-c1)/w11)))*(1-1/(1+exp(-(x-c1)/w12))); //Peak 1
y2 = A2*(1/(1+exp(-(x-c2)/w21)))*(1-1/(1+exp(-(x-c2)/w22))); //Peak 2
y3 = A3*(1 - 1/(1+exp(-(x-c3)/w3))); //Untergrund Peak 1
y4 = A4*(1 - 1/(1+exp(-(x-c4)/w4))); //Untergrund Peak 2
y = y0 + y1 + y2 + y3 + y4;
```

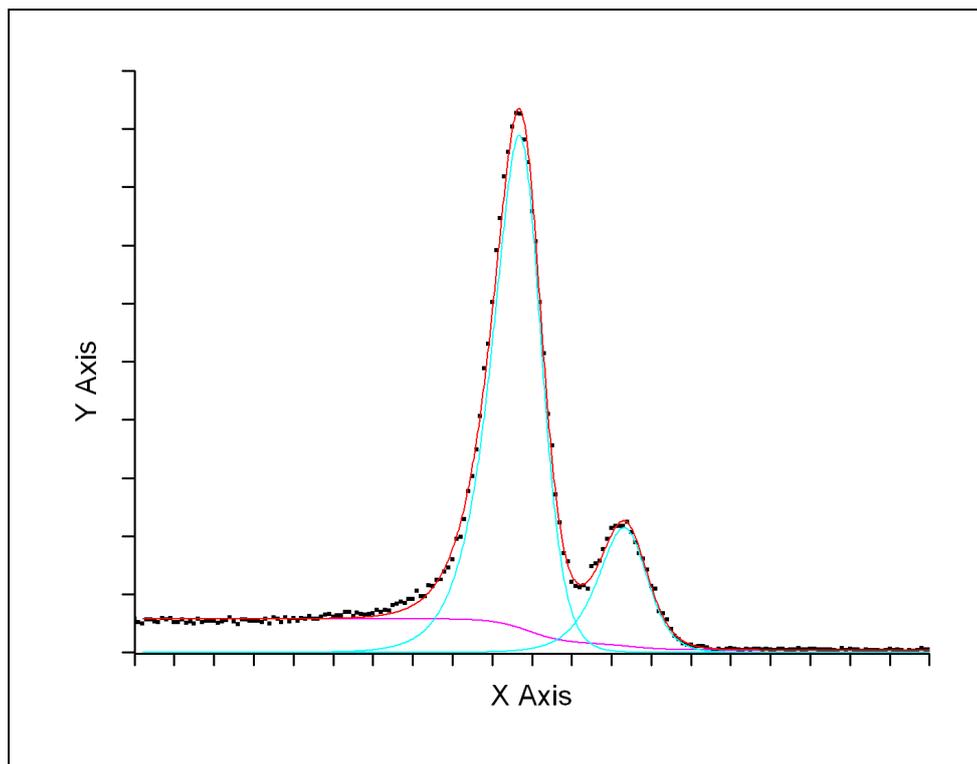


Abbildung 4: Mit Sigmoide-Funktionen gefitteter Doppel-Peak mit Untergrund.

Flächenberechnung

Für die exakte Berechnung der Peak-Flächen haben wir leider kein passendes Integral gefunden. Eine numerische Flächenberechnung aus den Fit-Parametern ist jedoch mit nur

geringem Programmieraufwand möglich, allerdings ist die zugehörige Fehlerrechnung recht unhandlich. Wir haben deshalb eine Näherungsformel erstellt, die in dem für uns interessanten Verhältnisbereich der Breiten w_1/w_2 sehr gute Ergebnisse liefert:

$$F = A \frac{w_1 + w_2}{2} (1 + K) \quad (16)$$

$$K = 0.32783 \left\{ 1 - \exp \left[-0.5 \left(\frac{\log(w_1/w_2)}{1.2604} \right)^2 \right] \right\} \quad (17)$$

Der etwas abenteuerlich anmutende Korrekturfaktor K ist eine über der $\log(w_1/w_2)$ -Achse an die numerisch ermittelten Korrekturwerte angefitzte Gauß-Kurve.

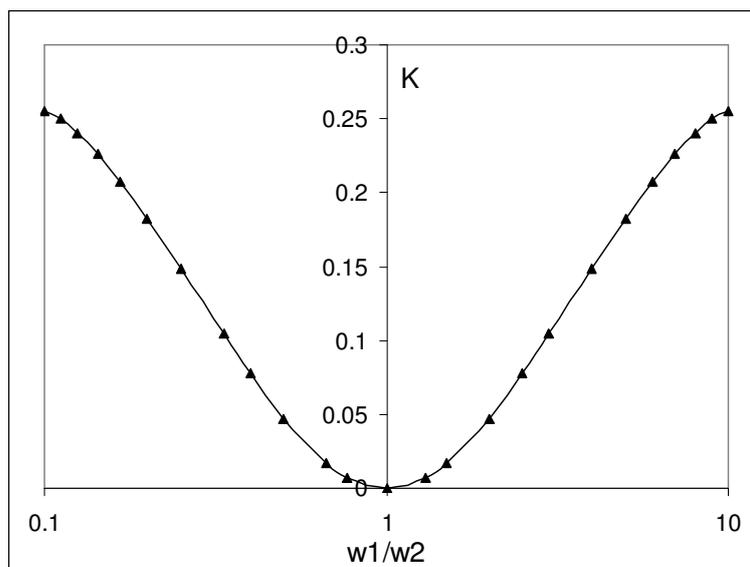


Abbildung 5: Numerisch ermittelte Korrektur K mit angefitzter Gauß-Kurve.

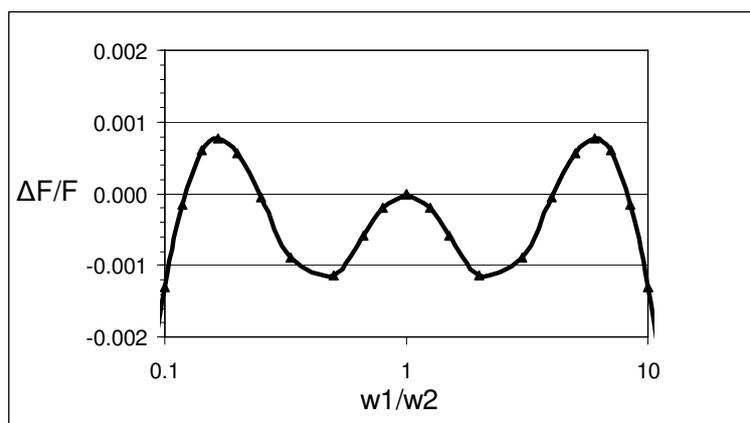


Abbildung 6: Relative Fehler der Näherungsformel (Gl. 16) für die Flächenberechnung.

Fehlerrechnung

Diese Betrachtung setzt voraus, dass Sie mit den Grundzügen der Fehlerrechnung vertraut sind, so wie sie in unserer „Anleitung zur Fehlerrechnung“ (s. Abschnitt 1.1) ausgeführt sind.

Der Fit hat 10 freie Parameter $y_0, A_1, c_1, w_{11}, w_{12}, A_2, c_2, w_{21}, w_{22}, A_{34}$ die allerdings nicht alle in die Flächenverhältnissberechnung mit Hilfe der Näherungsformel eingehen:

$$F_1 = A_1 \frac{w_{11} + w_{12}}{2} (1 + K_1) \quad (18)$$

$$F_2 = A_2 \frac{w_{21} + w_{22}}{2} (1 + K_2) \quad (19)$$

$$V = \frac{F_1}{F_2} \quad (20)$$

Es ist zu erwarten, dass diese Parameter stark korreliert sind und wir deshalb bei der Fehlerrechnung die Kovarianzen nicht vernachlässigen dürfen. Insbesondere können z.B. die beiden Breiten eines Peaks gegensinnig variieren, mit nur einer geringen Auswirkung auf die Fläche. Das Vernachlässigen der Kovarianzen würde also zu einem deutlich zu großen Fehler führen. Eine ordentliche Fehlerrechnung ist aber kein wesentlich größerer Aufwand, wir müssen nur die Matrixmultiplikation

$$(\Delta V)^2 = \chi^2 \mathbf{T} \mathbf{C} \mathbf{T}^T \quad (21)$$

ausführen (EXCEL kann das), wobei C die 10×10 -Kovarianzmatrix ist, die uns das Fit-Programm (z.B. ORIGIN) als Ergebnis liefert, und T ist der Fehlertransformationsvektor, der lediglich die partiellen Ableitungen von V nach den Fit-Parametern enthält:

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \left(\frac{\partial V}{\partial y_0}, \frac{\partial V}{\partial A_1}, \frac{\partial V}{\partial c_1}, \frac{\partial V}{\partial w_{11}}, \frac{\partial V}{\partial w_{12}}, \frac{\partial V}{\partial A_2}, \frac{\partial V}{\partial c_2}, \frac{\partial V}{\partial w_{21}}, \frac{\partial V}{\partial w_{22}}, \frac{\partial V}{\partial A_{34}} \right) \\ &= \left(0, \frac{V}{A_1}, 0, \frac{V}{w_{11} + w_{12}}, \frac{V}{w_{11} + w_{12}}, -\frac{V}{A_2}, 0, \frac{V}{w_{21} + w_{22}}, \frac{V}{w_{21} + w_{22}}, 0 \right) \end{aligned} \quad (22)$$

K_1 und K_2 sind ebenfalls fehlerbehaftet, ihren Beitrag haben wir aber vernachlässigt, da sie nur Korrekturen sind.

Im Falle eines ungewichteten Fits müssen wir noch mit χ^2 (reduzierte Fehlerquadratsumme, ebenfalls ein Fit-Ergebnis) multiplizieren, um den Fehler von V zu erhalten. χ^2 enthält die tatsächliche Streuung der Messwerte um die Fit-Kurve.

In unserem Falle ist jedoch eher eine statistische Gewichtung angebracht, da die Messwerte statistischer Natur sind. Die Standardabweichung eines solchen Messwertes y ist dann $\Delta y = \sqrt{y}$, und die Wichtung deshalb $g = 1/(\Delta y)^2 = 1/y$. χ^2 enthält in diesem Falle die Streuung der Messwerte um die Fit-Kurve relativ zu den statistischen Schwankungen der Messwerte. χ^2 sollte deshalb ungefähr 1 sein, wenn die Fit-Funktion passend ist und die Anzahl der Messwerte nicht zu klein ist. Leider können wir nicht erwarten, dass unsere Fit-Funktion perfekt passt, und berücksichtigen dies bei der Fehlerrechnung, indem wir ebenfalls χ^2 als Faktor hinzunehmen.

Hinweis für Origin-Benutzer:

Auf unserer Internetseite (s. Abschnitt 1.1) steht Ihnen unter dem Namen `Sigmoid_Peak_2_Bg`

eine ORIGIN-`fdf`-Datei zur Verfügung mit der zuvor beschriebenen Fit-Funktion, einer automatischen Startwertbestimmung, der Berechnung des Peak-Flächenverhältnisses und der Fehlerrechnung dazu. Diese Datei können Sie nach ORIGIN importieren. (s. Abschnitt ??)

3.3 Bestimmung der Beta-Endenergie von ^{137}Cs mittels Kurie-Plot

3.3.1 Der Kurie-Plot

Fermis Theorie des Beta-Zerfalls (siehe [Krane, Meyer-Kuckuck]) liefert folgende Beziehung:

$$\sqrt{\frac{N(E_e)}{p_e^2 F(E_e, Z)}} = C (E_{\max} - E_e) |H_{fi}| \quad (23)$$

$$E_e : \text{ gemessene Elektronenenergie} \quad (24)$$

$$N(E_e) : \text{ Zählrate der Elektronen} \quad (25)$$

$$p_e(E_e) : \text{ Impuls des Elektrons} \quad (26)$$

$$F(E_e, Z) : \text{ Fermi-Funktion} \quad (27)$$

$$Z : \text{ Kernladungszahl} \quad (28)$$

$$C : \text{ Konstante} \quad (29)$$

$$E_{\max} : \text{ gesuchte Beta-Zerfallsenergie} \quad (30)$$

$$H_{fi} : \text{ Übergangsmatrixelement zwischen Anfangs- und Endzustand} \quad (31)$$

Wenn das *Matrixelement* H_{fi} konstant ist, so erhält man eine lineare Beziehung zwischen der Wurzel auf der linken Seite der Gleichung und der Elektronenenergie E_e mit einem Nulldurchgang bei der gesuchten Maximalenergie E_{\max} . Für viele Beta-Zerfälle trifft dies zu, man spricht dann von erlaubten Beta-Zerfällen. Diese Darstellungsweise ist deshalb eine bequeme Methode zur genauen Bestimmung von E_{\max} . Darüber hinaus ist dies ein Test für die Fermische Theorie des Beta-Zerfalls. Man nennt dieses Verfahren nach seinem Erfinder Kurie-Plot, gelegentlich auch Fermi-Plot oder Fermi-Kurie-Plot.

Die *Fermi-Funktion* $F(E_e, Z)$, berücksichtigt den Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung der Leptonen mit dem Kern: Während Elektronen von der Kernladung angezogen werden, wirkt auf Positronen eine abstoßende Kraft. Die Fermi-Funktion ist für die verschiedenen Kernladungszahlen tabelliert (s. Anhang C).

Nicht bei allen Beta-Zerfällen ist H_{fi} eine von Null verschiedene Konstante. Insbesondere wenn das Elektron einen Bahndrehimpuls mitnehmen muss, sind die Fermischen Näherungen nicht ausreichend. Dann müssen bei der Ebenenwellen-Entwicklung der Leptonen auch höhere Ordnungen berücksichtigt werden. Diese Korrekturen werden im *Shape-Faktor* $S(p_e, p_\nu)$ berücksichtigt. Dabei ist p_ν der Impuls des Neutrinos. Da die höheren Multipolordnungen deutlich reduzierte Übergangswahrscheinlichkeiten zur Folge haben, spricht man auch von verbotenen Übergängen:

$$\sqrt{\frac{N(E_e)}{p_e^2 F(E_e, Z) S(p_e, p_\nu)}} \propto (E_{\max} - E_e) \quad (32)$$

$$\text{erlaubter Übergang} : S = 1 \quad (33)$$

$$\text{einfach verbotener Übergang} : S = p_e^2 + p_\nu^2 \quad (34)$$

$$\text{zweifach verbotener Übergang} : S = p_e^4 + p_\nu^4 + \frac{10}{3} p_e^2 p_\nu^2 \quad (35)$$

$$\text{dreifach verbotener Übergang} : S = p_e^6 + p_\nu^6 + 7 p_e^2 p_\nu^2 (p_e^2 + p_\nu^2) \quad (36)$$

$$p_e = \frac{1}{c} \sqrt{(E_e + E_0)^2 - E_0^2} : \text{relativistischer Elektronenimpuls} \quad (37)$$

$$p_\nu = \frac{1}{c} (E_{\max} - E_e) : \text{relativistischer Neutrinoimpuls} \quad (38)$$

$$E_0 : \text{Ruhemasse des Elektrons (511 keV)} \quad (39)$$

$$E_e : \text{gemessene Elektronenenergie} \quad (40)$$

$$E_{\max} : \text{maximale Elektronenenergie} \quad (41)$$

$$c : \text{Lichtgeschwindigkeit} \quad (42)$$

3.3.2 Aufgabe

Bestimmen Sie mittels Kurie-Plot die Maximalenergie und den Verbotenhitsgrad des ^{137}Cs -Beta-Zerfalls.

Verwenden Sie die ^{207}Bi -Konversionslinien zur Energieeichung. Die Elektronen verlieren bereits im Präparat und dessen Abdeckung (wir können im Praktikum keine offenen Präparate verwenden) Energie. Wenn jedoch Schichtdicken und Abdeckungen nicht zu dick und bei beiden Präparaten nahezu gleich sind (und sie richtig herum vor den Detektor platziert werden!), so können wir diesen Effekt leicht berücksichtigen (s. Abschnitt 3.1.4). Vergessen Sie nicht, dass die Energie der Konversionselektronen um die Bindungsenergie vermindert ist (s. Anhang D).

Für den Kurie-Plot müssen Sie zunächst den zu den Konversionslinien gehörenden Untergrund abziehen. Der Untergrundes ist in guter Näherung horizontal, wie man in dem ^{207}Bi -Spektrum erkennen kann, da dieses keinen Beta-Anteil hat. Ferner ist noch der 1.176MeV Beta-Übergang (6.5%) des ^{137}Cs Überlagert, der jedoch nur bei einer längeren Messzeit berücksichtigt bzw. ausgewertet werden könnte.

Verwenden Sie für den Kurie-Plot Daten oberhalb von 400 keV bis maximal zu der Energie, bei der die Werte durch den Untergrundabzug negativ werden (ca. 500 keV).

Da wir für das Praktikum nicht beständig neue Präparate anschaffen können, dürfen Sie nicht erwarten, dass Sie es beim ^{137}Cs mit einem erlaubten Übergang zu tun haben, d.h. der Shape-Faktor wird von 1 verschieden sein. Ermitteln Sie den passenden Shape-Faktor für ^{137}Cs . Da Sie für die Berechnung des Neutrino-Impulses bereits die Maximalenergie E_{\max} des ^{137}Cs benötigen, müssen Sie zunächst von einem Schätzwert ausgehen (z.B. mit $S = 1$), um dann iterativ den richtigen Wert zu bestimmen.

Um das Ergebnis der Auswertung in sinnvoller Weise mit dem Literaturwert vergleichen zu können, benötigen Sie eine ordentliche Fehlerrechnung.

Tipp:

Folgende Vorgehensweise hat sich als recht praktikabel erwiesen. Legen Sie sowohl einen linearen als auch einen quadratischen Fit (z.B. Excel Trendlinien) in die Messwerte (s. Abb. 7). Für den Shape-Faktor $S=1$ werden diese Trends deutlich differieren wobei der quadratische Trend bereits eine recht gute Anpassung an die Messwerte darstellt und deshalb schon einen gut brauchbaren Wert für die Endenergie liefert, um S für die höheren Verbotenhitsgrade rechnen zu können. Für den passenden Shape-Faktor sollten sich lineare und quadratische Trendlinie nicht mehr sichtbar unterscheiden.

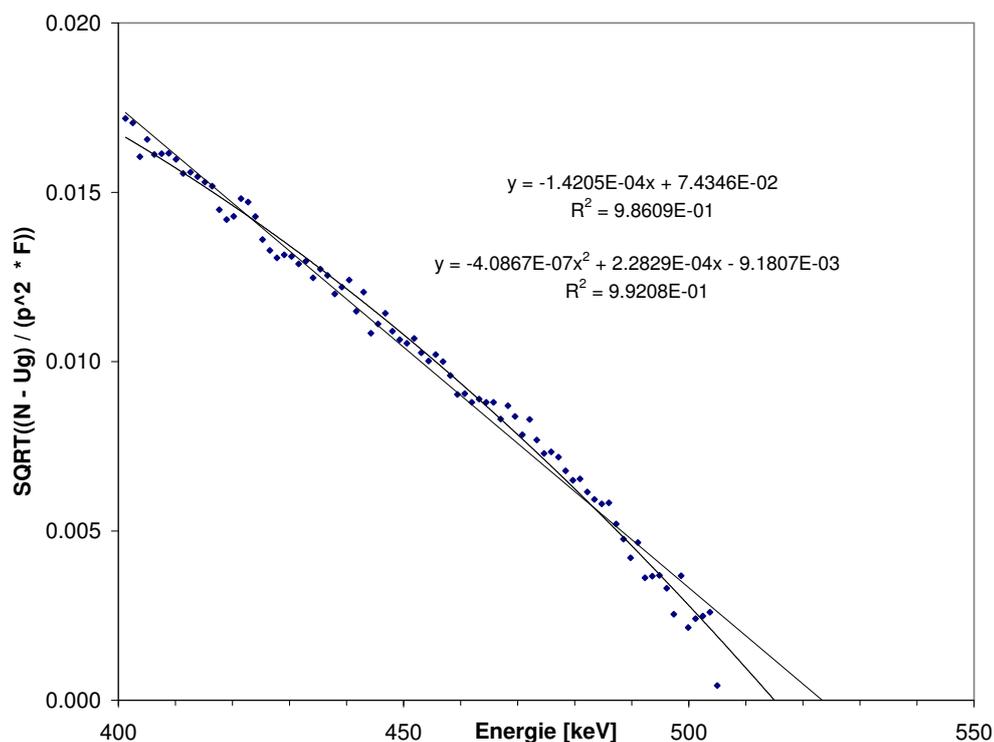


Abbildung 7: Kurie-Plot für Shape-Faktor $S=1$ mit linearer und quadratischer Trendlinie.

3.3.3 Fehlerrechnung

Diese kurze Anleitung setzt voraus, dass Sie mit den Grundzügen der Fehlerrechnung vertraut sind, so wie sie in unserer „Anleitung zur Fehlerrechnung“ (s.o. WWW-Seite des Praktikums) ausgeführt sind.

Zur Bestimmung der Maximalenergie E_{\max} mittels Kurie-Plot fittet man eine Gerade $Y(E)$ an die Kurie-Plot-Daten Y_i und errechnet daraus den Schnittpunkt mit der Energieachse E :

$$Y_i = \sqrt{\frac{Z_i(E_i) - Ug}{p_e^2(E_i) F(E_i) S(p_e(E_i), p_\nu(E_i))}} \quad (43)$$

$$Y(E) = a_K + b_K E \quad Y = 0 \rightarrow E_{\max} = -a_K/b_K \quad (44)$$

Der Fehler von E_{\max} ergibt sich durch Fehlerfortpflanzung aus den E_i , Z_i , Ug , p_e^2 , F und S . Dies mit der Gaußschen Fehlerfortpflanzung zu rechnen ist schon wegen der zu berücksichtigenden Kovarianzen recht umständlich. Im Folgenden wird gezeigt wie man mit einem vertretbaren Aufwand trotzdem eine brauchbaren Fehlerabschätzung durchführen kann.

- $\Delta E_i \rightarrow \Delta E_{\max}^{(E)}$:

Die Fehler Δa_E und Δb_E der Energieeichung $E = a_E + b_E K$ geben einen Beitrag über alle beteiligten Parameter und machen die normale Fehlerrechnung ziemlich unhandlich. Ihre Auswirkung auf das Endergebnis können wir jedoch leicht ermitteln indem wir jeweils a_E und b_E mit ihren Fehlern variieren und die Auswirkungen auf das Endergebnis $\Delta E_{\max}^{(a_E)}$ bzw. $\Delta E_{\max}^{(b_E)}$ beobachten. Ein solches Vorgehen liefert genau betrachtet sogar die besseren Ergebnisse, da die normale Fehlerrechnung nur von linearen Abhängigkeiten ausgeht.

Wir gehen davon aus, dass Sie dafür gesorgt haben, dass a_E und b_E statistisch unabhängig sind und addieren die Fehler quadratisch:

$$\Delta E_{\max}^{(E)} = \sqrt{\Delta E_{\max}^{(a_E)^2} + \Delta E_{\max}^{(b_E)^2}} \quad (45)$$

- $\Delta Ug \rightarrow \Delta E_{\max}^{(U)}$:

Der Untergrund Ug ist ein Mittelwert über einen geeigneten Bereich von n Z_i -Werten mit der Varianz V und dem Fehler ΔUg :

$$Ug = \frac{\sum_j Z_j}{n} \quad V = \frac{\sum_j (Z_j - Ug)^2}{n} \quad \Delta Ug = \sqrt{\frac{V}{n}} \quad (46)$$

Da der Beitrag des Untergrundes zu allen Y_i der gleiche ist, dürfen wir die Kovarianzen nicht vernachlässigen. Wir wählen deshalb ebenfalls den bequemen Weg und werden in der Rechnung für die Endenergie den Untergrund Ug um ΔUg variieren und damit dessen Auswirkung $\Delta E_{\max}^{(U)}$ auf das Endergebnis ermitteln.

- $\Delta p_e \rightarrow \Delta E_{\max}^{(p)} = 0$:

Die p_e^2 sind fehlerbehaftet durch die Unsicherheit der Eichung von Kanalnummer K nach Energie E .

$$E_e = a_E + b_E K \quad (47)$$

$$p_e^2 = (E_e^2 + 2E_e E_0)/c^2 \quad (48)$$

Diesen Beitrag haben wir aber bereits in $\Delta E_{\max}^{(E)}$ berücksichtigt.

- $\Delta F \rightarrow \Delta E_{\max}^{(F)} = 0$:

Die Werte der Femi-Funktion $F(E_i, Z)$ sind Ergebnisse von theoretischen Rechnungen und wir haben keine Fehlerangaben dazu. Eine Fehlerrechnung hat aber gezeigt, dass ein 10%-Fehler von $F(E_i, Z)$ nur mit etwa 1 eV zum Gesamtfehler beitragen würde.

- $\Delta S \rightarrow \Delta E_{\max}^{(S)} = 0$:

Die Fehler des Shaping-Faktors $S(p_e(E_i), p_\nu(E_i))$ resultieren im Wesentlichen ebenfalls aus den Fehlern der Energieeichung, die wir schon berücksichtigt haben.

- ΔZ_i :

Die Z_i sind als Zählergebnisse mit statistischen Fehlern behaftet, die sich zu den zugehörigen Y_i fortpflanzen.

$$\Delta Z_i = \sqrt{Z_i} \quad (49)$$

$$\Delta Y_{iZ} = \frac{\partial Y_i}{\partial Z_i} \Delta Z_i = \frac{1}{2 Y_i p_e^2 F S} \Delta Z_i \quad (50)$$

Da die Z_i statistisch unabhängige Messergebnisse sind, brauchen wir keine Kovarianzen der Y_i zu berücksichtigen. Für das weitere Vorgehen bieten sich zwei Möglichkeiten an:

Fit mit Wichtung:

Die Gewichte g_i der Y_i für den Kurie-Plot-Fit können wir direkt angeben:

$$g_i = \frac{1}{(\Delta Y_{iZ})^2} \quad (51)$$

Mit dieser Wichtung berechnet uns der Kurie-Plot-Fit $Y = a_K + b_K E$ die gewünschte Fehlerfortpflanzung der ΔY_{iZ} nach den Δa_K und Δb_K . Um zusätzlich systematische Abweichungen von der Fit-Geraden zu berücksichtigen sollten Δa_K und Δb_K noch mit der Wurzel aus dem reduzierten Chi-Quadrat multipliziert werden (für neuere Origin Versionen ist dies die Voreinstellung).

Fit ohne Wichtung:

Alternativ können wir einen ungewichteten Fit durchführen ($g_i = 1$). Dann berechnet der Fit-Algorithmus die Fehler der Δa_K und Δb_K aus der Streuung der Y_i . Bei der großen Anzahl von Messpunkten, mit der wir arbeiten, sollten wir für beide Wege etwa gleiche Ergebnisse erhalten.

Wenn wir, wie zuvor beschrieben, den Kurie-Plot mithilfe der Excel-Trendlinie durchführen, so hat der Fit ohne Wichtung den beachtlichen Vorteil, dass wir durch die RGP-Funktion von Excel (Matrix-Funktion!) direkten Zugang zu den Fit-Parametern mit Fehlern haben und sofort weiterrechnen können.

Bitte beachten:

Wegen des großen Abstandes unserer Werte vom Energienullpunkt erhalten wir Geradenparameter a_K und b_K , die wir auf keinen Fall mehr als statistisch unabhängig ansehen können (siehe „Anleitung zur Fehlerrechnung“). Tatsächlich würde uns die Standardfehlerrechnung mit Vernachlässigung der Kovarianzen einen um etwa eine Größenordnung zu großen Fehler liefern. Wir können dies vermeiden, indem wir den Energienullpunkt vor dem Fit in den Schwerpunkt unserer Messwerte legen. Dann können wir den Fehlerbeitrag zur Maximalenergie $\Delta E_{\max}^{(K)}$ mit der üblichen Fehlerfortpflanzungsformel aus den Fehlern der Geradenparameter Δa_K und Δb_K berechnen:

$$E_{\max} = -a_K/b_K \quad (52)$$

$$\Delta E_{\max}^{(K)} = \sqrt{\left(\frac{\partial E_{\max}}{\partial a_K} \Delta a_K\right)^2 + \left(\frac{\partial E_{\max}}{\partial b_K} \Delta b_K\right)^2} = \sqrt{\left(\frac{-1}{b_K} \Delta a_K\right)^2 + \left(\frac{a_K}{b_K^2} \Delta b_K\right)^2} \quad (53)$$

- $\Delta E_{\max}^{(V)}$:
Schließlich müssen wir noch berücksichtigen, dass uns die Korrektur der unterschiedlichen Energieverluste in den Präparaten (siehe Abschnitt 3.1.4) sicher nicht vollständig gelingt, weshalb wir noch einen systematischen Fehler $\Delta E_{\max}^{(V)}$ angeben, den wir abschätzen müssen.

Aufgrund der vorangegangenen Betrachtungen vernachlässigen wir die Fehler von p_e^2 , F und S und beschränken uns auf die Fehler $\Delta E_{\max}^{(K)}$, $\Delta E_{\max}^{(E)}$, $\Delta E_{\max}^{(U)}$ und $\Delta E_{\max}^{(V)}$. Da diese Fehler statistisch unabhängig von einander sind, müssen wir sie quadratisch addieren, um den Gesamtfehler ΔE_{\max} für die Maximalenergie zu erhalten:

$$\Delta E_{\max} = \sqrt{(\Delta E_{\max}^{(K)})^2 + (\Delta E_{\max}^{(E)})^2 + (\Delta E_{\max}^{(U)})^2 + (\Delta E_{\max}^{(V)})^2} \quad (54)$$

4 Hilfen bei der Auswertung

4.1 Wichtige Hinweise

- Die Messungen werden mit hoher Genauigkeit durchgeführt. Deshalb ist es notwendig die nachfolgenden Rechnungen mit ausreichend vielen Dezimalstellen durchzuführen um ein brauchbares Ergebnis zu erhalten. Verwenden Sie, wenn immer möglich, mindestens 6 Dezimalstellen!
- Der Residuen-Plot dient dazu, Fehler in der Kanal/Energie-Tabelle der Energieeichung aufzuspüren. Falls Sie Ausreißer haben, suchen Sie nach Tippfehlern, Zahlendrehern usw...

4.2 Importieren der ASCII-Dateien

Die ASCII-Dateien mit Ihren Messdaten haben als Dezimaltrennzeichen einen Punkt und kein Komma. Wenn Ihr Origin oder Excel ein Komma erwartet, müssen Sie folgende Einstellungen vornehmen sonst werden Ihre Spektren recht merkwürdig aussehen.

- Origin auf Dezimalpunkt umstellen und Daten importieren:
In der leeren Tabelle A(x) markieren
Daten → Aus Datei importieren →
Import Assistent → Datentyp: ASCII → Datenquelle: suchen →
weiter → ... → weiter →
Numerisches Trennzeichen: 1,000.00 → fertig
- Excel auf Dezimalpunkt umstellen:
Datei → Optionen → Erweitert →
Trennz. vom... , Häkchen weg → beide Trennzeichen ändern → OK
- Excel Daten importieren:
Daten → Aus Text → Ba-133.dat → importieren →
weiter → Leerzeichen markieren, weiter → fertig stellen

Vergessen Sie am Ende nicht die Änderungen wieder rückgängig zu machen!

4.3 Auswertung mit dem MCA-Messprogramm

Wenn Sie diese Möglichkeit nutzen möchten, erhalten Sie eine Einführung vor Ort.

4.3.1 Peak-Fits

Das MCA-Programm bietet Ihnen im Anschluss an Ihre Messungen eine recht elegante Möglichkeit zur Ermittlung der Peak-Positionen durch einen Gauß-Fit mit Untergrund.

4.3.2 Cs-137 Multipolaritätsbestimmung

Für die Bestimmung des Flächenverhältnisses der Konversionselektronenanteile von Cs137 bietet MCA ein Fit-Programm an, das die Peaks und den Untergrund durch Sigmoid-Funktionen anpasst (s. Abschnitt3.2).

4.4 Auswertung mit Origin

4.4.1 Schnell-Kurs für Peak-Fits mit OriginPro 2023b

Origin bietet Ihnen vielfältige Möglichkeiten zum Fitten von Peaks in Ihren Spektren wozu aber einige Übung im Umgang mit Origin notwendig ist. Der folgende Schnellkurs im Peak-Fitten mit Origin kann Ihnen vielleicht dabei helfen.

Standard-Gauß-Fit

Erstellen Sie eine Punkt-Grafik für Bi207.

Bilden Sie einen Ausschnitt mit der Lupe+ von dem vorderen Doppel-Peak.

Setzen Sie einen Datenbereich mit dem Doppelpfeil-Symbol:

positionieren Sie die Marker mit der Maus in einigem Abstand von den Peaks, bestätigen Sie mit der Leertaste.

Analyse → Anpassen → nicht linearer Fit → Dialog öffnen

Einstellungen → Funktionsauswahl

Kategorie: Peak Functions

Funktion: Gauss

Einstellungen → Datenauswahl

Gewichtungen: keine Gewichtung

Fit bis konvergiert (Symbolleiste unten, rechts)

Doppel-Gauß-Fit

Der Fitter hat nur den größten der beiden Peaks angepasst. Den zweiten Peak können wir mit in den Fit einschließen durch folgende Einstellungen:

Einstellungen → Erweitert →

Kopien →

Anzahl der Kopien: 1

Einstellungen der Peaksuche →

Origin bietet mehrere Möglichkeiten, um Peaks zu finden.

Die Vorbelegung ist für gut ausgeprägte Peaks gedacht.

Für unsere ausgeprägten Peaks verwenden wir folgende

Suchmethode Peak: Lokales Maximum

Peakrichtung: positiv
individuelle Kurve: ja
kumulative Kurve: ja
Eigenschaften → Zusammenfassung des Fits → Chi Quadr. red.: ja
Fit bis konvergiert (Symbolleiste unten, rechts)
Fertig (Symbolleiste unten, rechts)

Bevor Sie einen neuen Fit beginnen, müssen Sie den aktuellen löschen, über das Fit-Symbol links oben in der Grafik. Über das gleiche Symbol können Sie aber auch Ihren Fit nochmals bearbeiten.

Damit Sie dieses Konfigurieren des Fitters nicht immer wiederholen müssen, können Sie alle Menüeinstellungen über 'Dialogdesign' (ganz oben rechtes Dreieck) unter einem Name aufheben und für den nächsten Fit an der gleichen Stelle wieder finden.

4.4.2 Installieren der Fitfunktionen und Fitter-Menü-Dateien

Für Ihre Auswertungen mit Origin stellen wir Ihnen einige problemorientierte Fit-Funktionen zur Verfügung und dazu passend Fitter-Menü-Dateien, die die notwendigen Parameter im Fitter-Menü einstellen.

Die zu installierenden Dateien können Sie über die Praktikums-Internet-Seite herunterladen.

Um eine gewünschte Fit-Funktion zu aktivieren, wählen Sie über 'Dialogdesign' im Fitter-Menü (ganz oben, rechtes Dreieck) die zugehörige Datei.

Die Wichtungsmethode zum Fit lässt sich leider auf diese Weise nicht einstellen und muss in einem eigenen Schritt erfolgen. Die Vorbelegung ist oft nicht gut geeignet:

Einstellungen → Datenauswahl
Gewichtungen: (z.B. keine Gewichtung)

Installieren der Fit-Funktionen (.fdf):

Hilfsmittel → Fitfunktionen verwalten →
Neue Kategorie: Praktikum
Hinzufügen: (GaussPeak_SigmoidBg_o2023b)
Hinzufügen: (Cs137_Multipol_o2023b)

Kopieren der Fitter-Menü-Dateien (.ois):

0-FitNL-Gauss1Peak_SigmoidBg.ois
0-FitNL-Gauss2Peaks_SigmoidBg.ois
0-FitNL-Cs137_Multipol.ois

nach:

Hilfe → Ordner öffnen → Anwender Ordner →
Themes → AnalysisAndReportTable

Anm.: Die Konstante TEST in den Fitfunktionen erlaubt für Testzwecke die grafische Ausgabe des Untergrundes:

TEST = 0: Ausgabe von Peak plus sigmoidalem plus konstantem Untergrund (Default).
TEST > 0: Ausgabe von TEST * (sigmoidalem plus konstantem Untergrund).

4.4.3 Energieeichung mit Origin

Peak-Fits mit Sigmoid Untergrund

Die Bestimmung der Peak-Positionen kann mittels Gauß-Fit erfolgen. Der Origin-Gauß-Fit hat jedoch den gravierenden Nachteil, dass er nur einen konstanten Untergrund kennt. Tatsächlich erzeugt aber jeder Peak einen eigenen Untergrund. Wir berücksichtigen dies, durch einen zusätzlichen Sigmoid-Untergrund, der den Zuwachs unter dem Peak in etwa nachbildet. Sie aktivieren diese Fits über 'Dialogdesign' im Fitter-Menü (ganz oben, rechtes Dreieck).

- **Single-Gauß-Fit mit Sigmoid Untergrund**

Dazu aktivieren Sie folgenden Menüpunkt:

Gauss1Peak_SigmoidBg

Damit werden die folgende Fitter-Parameter eingestellt:

Einstellungen → Funktionsauswahl

Kategorie: Praktikum

Funktion: GaussPeak_SigmoidBg_o2023b

Einstellungen → Erweitert →

Kopien →

Anzahl der Kopien: 0

Einstellungen der Peaksuche →

Suchmethode Peak: Lokales Maximum

Peakrichtung: positiv

Eigenschaften → Zusammenfassung des Fits → Chi Quadr. red.: ja

- **Doppel-Gauß-Fit mit Sigmoid Untergrund**

Dazu aktivieren Sie folgenden Menüpunkt:

Gauss2Peaks_SigmoidBg

Damit werden die folgende Fitter-Parameter eingestellt:

Einstellungen → Funktionsauswahl

Kategorie: Praktikum

Funktion: GaussPeak_SigmoidBg_o2023b

Einstellungen → Erweitert →

Kopien →

Anzahl der Kopien: 1

Einstellungen der Peaksuche →

Suchmethode Peak: Lokales Maximum

Peakrichtung: positiv

individuelle Kurve: ja

kumulative Kurve: ja

Eigenschaften → Zusammenfassung des Fits → Chi Quadr. red.: ja

!!! Die Wichtung müssen Sie allerdings noch selber einstellen:

Einstellungen → Datenauswahl

Gewichtungen: keine Gewichtung

Sie können, falls notwendig, die Einstellungen anpassen. Dies betrifft insbesondere die 'Suchmethode Peak'.

Lineare Energieeichung

Tragen Sie in die Spalten der Origin-Tabelle in folgender Reihenfolge ein:

Kanalnummer (X), Kanalinkalt (Y) und dessen Fehler (ΔY).

ΔY muss als Y-Fehler mittels 'Setzen Als' gekennzeichnet werden.

Erstellen Sie mit diesen Daten eine Punkt-Grafik.

Starten Sie den Fitter:

Analyse → Anpassen → Linearer Fit → Dialog öffnen

Wie zuvor (s. Abschnitt 3.1.2) bereits gezeigt, können wir in den nachfolgenden Fehlerrechnungen die Kovarianzen der Geradenparameter nicht vernachlässigen. Indem wir den X-Nullpunkt in den Schwerpunkt der Daten legen, lassen wir sie jedoch verschwinden. Wenn Sie mit der Kovarianzmatrix weiterrechnen wollen, dann müssen Sie dies im Fitter-Menü noch angeben:

Eigenschaften → Kovarianzmatrix: ja

Die weiteren Dialogparameter sind bereits passend, so dass Sie mit *OK* den Fit starten können. Das Ergebnis wird in die Grafik ausgegeben. Die Kovarianzmatrix finden Sie unter:

Book... → FitLinear...

4.4.4 Bestimmung der Multipolordnung von Cs-137

Flächentreuer Doppel-Peak-Fit

Zur Bestimmung der Multipolordnung benötigen wir das Flächenverhältnis der beiden Konversionselektronenpeaks. Da diese Peaks keine Gauß-Verteilung haben, führt ein Gauß-Fit nur zu einem mäßigen Ergebnis. Wir haben deshalb mit recht gutem Erfolg die Flanken der Peaks durch Sigmoid-Funktionen nachgebildet (s. Abschnitt 3.2.4). Zusätzlich berechnet dieser Fit die Flächen der Peaks und deren Verhältnis:

Erstellen Sie eine Punkt-Grafik für Cs137.

Bilden Sie einen Ausschnitt mit der Lupe+ von dem Doppel-Peak.

Setzen Sie einen Datenbereich mit dem Doppelpfeil-Symbol:

positionieren Sie die Marker mit der Maus in einigem Abstand von den Peaks mit ausreichend horizontalem Untergrund,

bestätigen Sie mit der Leertaste.

Analyse → Anpassen → nicht linearer Fit → Dialog öffnen

Aktivieren Sie nun die Fitter-Parameter über 'Dialogdesign' im Fitter-Menü (ganz oben, rechtes Dreieck) über folgenden Menüpunkt:

Sigmoid2Peaks_SigmoidBg

Damit werden die folgende Fitter-Parameter eingestellt:

Einstellungen → Funktionsauswahl

Kategorie: Praktikum

Funktion: Sigmoid2Peaks_SigmoidBg_o2023b

Einstellungen → Erweitert →

Kopien →

Anzahl der Kopien: 0

Einstellungen der Peaksuche →

Suchmethode Peak: Lokales Maximum
Peakrichtung: positiv
Eigenschaften → Zusammenfassung des Fits → Chi Quadr. red.: ja

!!! Die Wichtung müssen Sie allerdings noch selber einstellen:

Einstellungen → Datenauswahl
Gewichtungen: Statistisch

Das Ergebnis der Flächenbechnung wird im Script-Fenster ausgegeben. Die Fehlerangabe enthält $\sqrt{\chi^2}$ als Faktor.

Anm: Die Konstante TEST erlaubt das Zeichnen der einzelnen Kurvenanteile mit der Kurvensimulationsfunktion:

TEST=0: komplette Kurve
TEST=1: nur Peak 1
TEST=2: nur Peak 2
TEST=3: nur Untergrund

Für den Fit muss TEST null sein.

4.4.5 Cs-137 Kurie-Plot

Für die Bestimmung des Flächenverhältnisses der Konversionselektronenanteile von Cs137 bietet MCA ein Fit-Programm an, das die Peaks und den Untergrund durch Sigmoid-Funktionen anpasst (s. Abschnitt3.2).

Der Fit wird mit statistischer Gewichtung durchgeführt, d.h. die Gewichtung ist $1/y$. Für $y = 0$ hat ORIGIN dann folgerichtig ein Problem, das Sie zur Zeit nur durch geeignete Wahl des Fit-Bereiches vermeiden können.

Das Ergebnis der Flächenbechnung wird im Script-Fenster ausgegeben. Die Fehlerangabe enthält $\sqrt{\chi^2}$ als Faktor.

Die Konstante TEST muss für den Fit null sein. Sie erlaubt das Zeichnen der einzelnen Kurvenanteile mit der Kurvensimulationsfunktion:

TEST=0: komplette Kurve
TEST=1: nur Peak 1
TEST=2: nur Peak 2
TEST=3: nur Untergrund

4.5 Auswertung mit Excel

4.5.1 Energieeichung mit Excel

Excel bietet mit der Trend-Funktion die Möglichkeit für einen Least-Square-Fit der Eichpunkte:

Erstellen Sie eine Energie/Kanal-Grafik der Eichwerte
Aktivieren Sie die Grafik
Aktivieren Sie rechts oben an der Grafik das '+'

Wählen Sie 'Trendlinie' → 'weitere Optionen'
→ 'linear' und 'Formel .. anzeigen'

Excel schreibt die Ergebnisformel in die Grafik, allerdings mit zu wenig Dezimalstellen für unsere weitere Auswertung.

Trend-Parameter auf 6 Dezimale einstellen:

rechte Maustaste auf Trend-Formel
→ Trendlinienbeschriftung formatieren
→ Rubrik: Zahl → Dezimalstellen: 6

Leider gibt Excel die Fehler der Fit-Parameter, die für die weitere Auswertung benötigt werden, nicht mit aus. Diese kann man sich jedoch mit Hilfe der RGP-Funktion besorgen, die die Fit-Parameter mit Fehlern in eine Matrix ausgibt:

Markieren Sie ein 4 * 4 Feld
Eingabe: =RGB(Feld-y; Feld-x; ;1)
Abschließen mit STRG+UMSCHALT+ENTER (Matrix-Funktion!)

Da unsere Messwerte durchaus unterschiedliche Fehler aufweisen, ist die 'Trendlinie' von Excel nur zweite Wahl, denn wir sollten eigentlich einen gewichteten Fit für die Eichgerade durchführen. In der '*Anleitung zur Fehlerrechnung*' (s.h. Internetseite des Versuchs) ist beschrieben wie man dies mit Excel rechnen kann. Eine '*Excel-Datei zur Energieeichung*' kann dabei als Starthilfe dienen.

4.5.2 Kurie-Plot mit Excel

A Niveauschemata

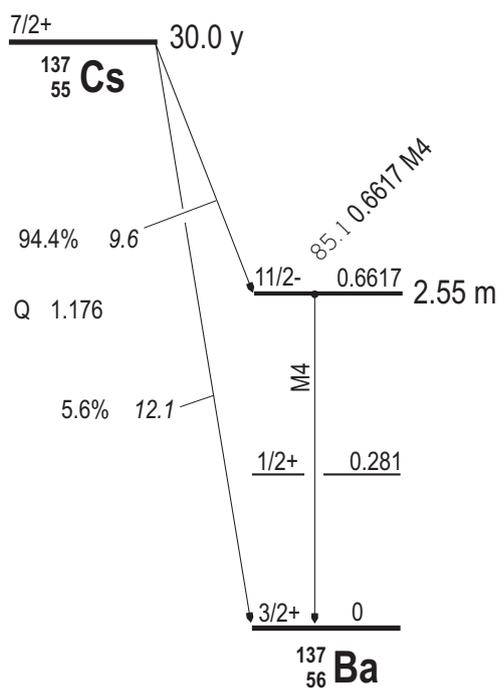


Abbildung 8: Niveauschema zum ^{137}Cs -Präparat.

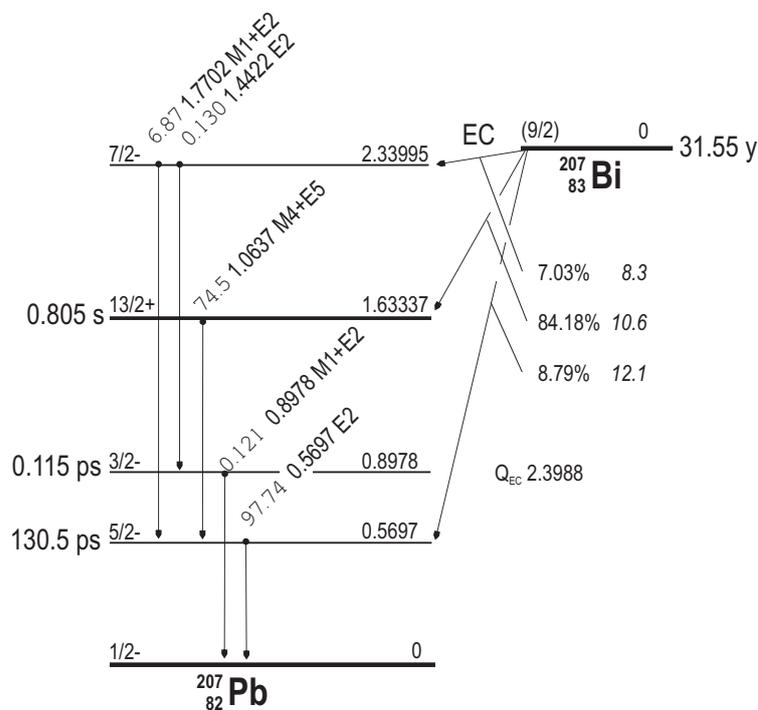


Abbildung 9: Niveauschema zum ^{207}Bi -Präparat.

B Verhältnisse von Konversionskoeffizienten

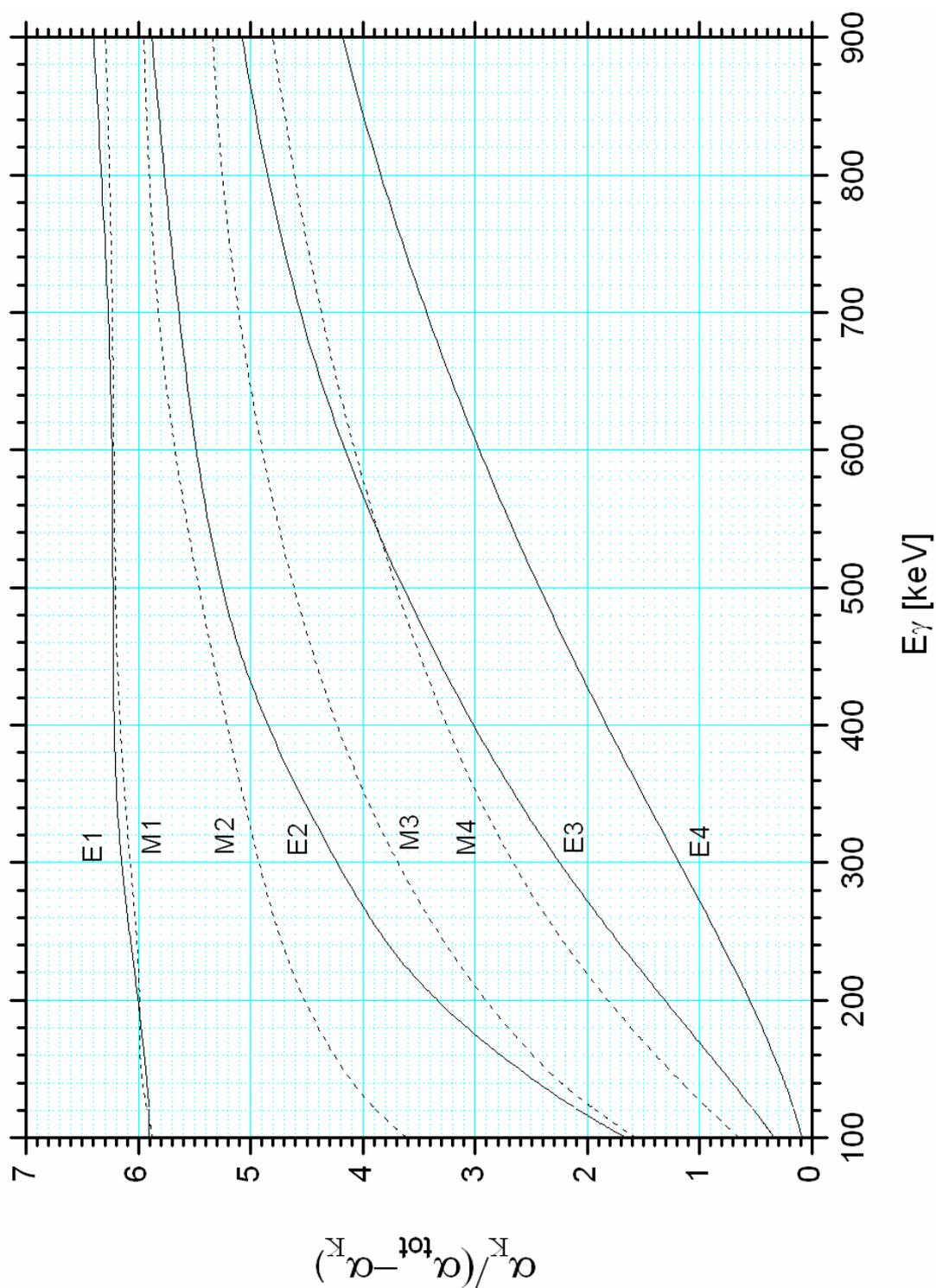


Abbildung 10: Verhältnisse der Konversionskoeffizienten für $Z = 56$ (^{137}Ba) mit α_{tot} und α_K aus Rösel et al. (1978).

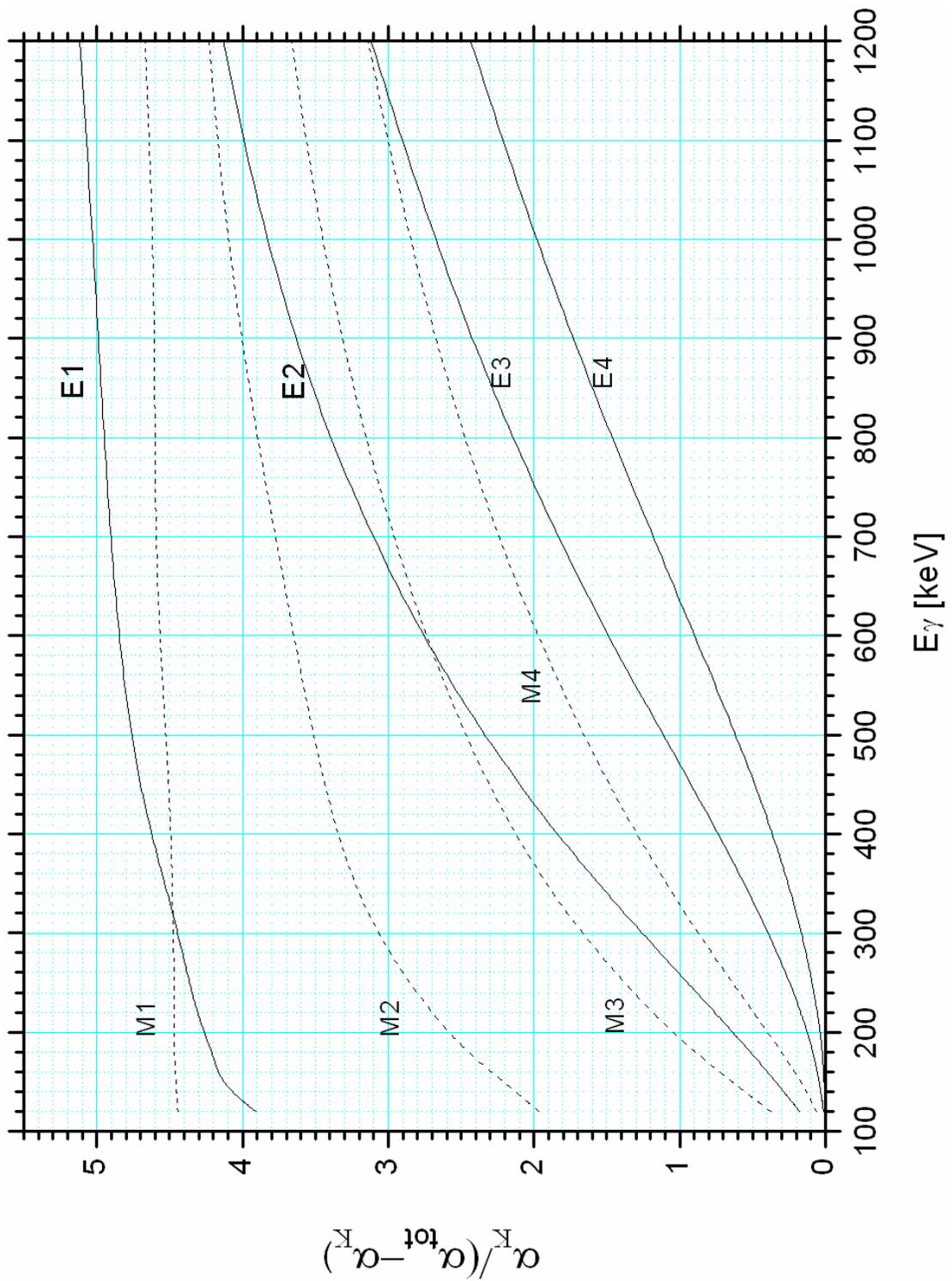


Abbildung 11: Verhältnisse der Konversionskoeffizienten für $Z = 82$ (^{207}Pb) mit α_{tot} und α_K aus Rösler et al. (1978).

C Fermi-Funktion

Tabelle 1: Die Fermifunktion $F(E, Z)$ für $Z = 56$ [Dzelepov & Zyrianova (1956)]

E (keV)	$F(E, Z)$	E (keV)	$F(E, Z)$	E (keV)	$F(E, Z)$
1	101.00	60	13.90	340	7.26
2	71.50	65	13.42	360	7.14
3	58.40	70	12.99	380	7.04
4	50.70	75	12.61	400	6.94
5	45.40	80	12.27	450	6.72
6	41.5	85	11.96	500	6.54
7	38.5	90	11.68	550	6.38
8	36.0	95	11.42	600	6.25
9	34.0	100	10.76	650	6.13
10	32.3	110	10.56	700	6.03
12	29.57	120	10.39	750	5.93
14	27.44	130	10.07	800	5.85
16	25.73	140	9.79	850	5.77
18	24.32	150	9.54	900	5.70
20	23.12	160	9.31	950	5.63
22	22.09	170	9.11	1000	5.50
24	21.20	180	8.92	1100	5.45
26	20.42	190	8.75	1200	5.35
28	19.72	200	8.60	1300	5.26
30	19.08	220	8.32	1400	5.17
35	17.76	240	8.08	1500	5.09
40	16.69	260	7.86	1600	5.02
45	15.82	280	7.70	1700	4.96
50	15.09	300	7.54	1800	4.89
55	14.45	320	7.39	1900	4.83

Wir haben diese Tabelle für den Energiebereich von 100 keV bis 600 keV durch einen Fit in die folgende analytische Form gebracht:

$$F(E, Z = 56) = 5.5179 + 9.47486e^{-E/62.8391 \text{ keV}} + 5.12357e^{-E/308.704 \text{ keV}} \quad (55)$$

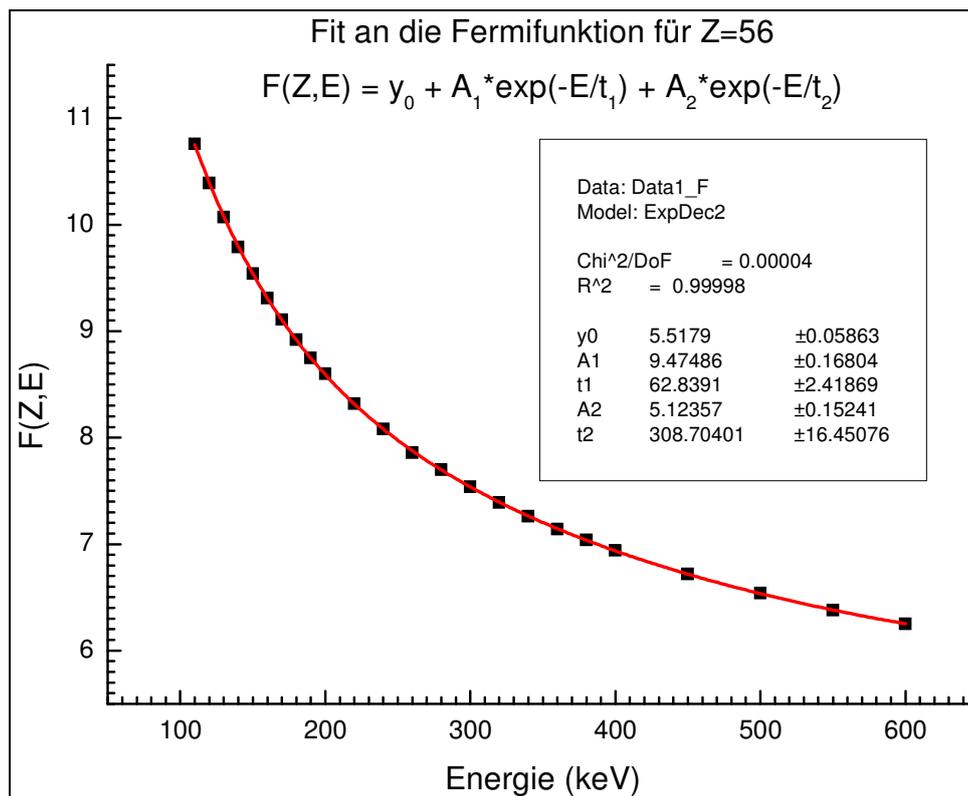


Abbildung 12: Fit (Gl. 55) der in Tab. 1 tabellierten Fermi-Funktion $F(E, Z)$ für $Z = 56$.

D Bindungsenergien und Konversionskoeffizienten für ^{137}Cs und ^{207}Bi

Bei der Auswertung der gemessenen Elektronenspektren ist zu berücksichtigen, dass die Konversionselektronen der höheren Schalen L, M, N, ... von unserer Apparatur nicht mehr getrennt werden können, sondern in einem Peak vereint sind. Für diesen Peak müssen Sie deshalb einen über alle beteiligten Schalen gemittelten Wert als Energie nehmen.

Mit $\text{LMN}_{\text{mittel}}$ haben wir ein mit den Konversionskoeffizienten gewichtetes Mittel der Bindungsenergien für die wesentlichen Beiträge der höheren Schalen berechnet.

Die Konversionskoeffizienten wurden der Tabellierung von Rösel et al. (1978) entnommen und die Bindungsenergien dem CRC Handbook of Chemistry and Physics.

Tabelle 2: Bindungsenergien in Barium und Konversionskoeffizienten für den ^{137}Ba 661.66-keV-M4-Übergang

Schale	Bindungsenergie	Konv. Koeffizient
K	37.440 keV	0.09221
L _I	5.989 keV	0.01336
L _{II}	5.626 keV	0.00190
L _{III}	5.249 keV	0.00158
M _I	1.239 keV	0.00281
M _{II}	1.137 keV	0.00043
M _{III}	1.062 keV	0.00037
N _I	0.253 keV	0.00064
N _{II}	0.192 keV	0.00009
N _{III}	0.180 keV	0.00008
$\text{LMN}_{\text{mittel}}$	4.867 keV	

Tabelle 3: Bindungsenergien in Blei und Konversionskoeffizienten für den ^{207}Pb 569.70-keV-E2-Übergang

Schale	Bindungsenergie	Konv. Koeffizient
K	88.010 keV	0.01609
L _I	15.861 keV	0.00237
L _{II}	15.200 keV	0.00158
L _{III}	13.035 keV	0.00055
M _I	3.851 keV	0.00055
M _{II}	3.554 keV	0.00041
M _{III}	3.066 keV	0.00015
N _I	0.894 keV	0.00014
N _{II}	0.764 keV	0.00011
N _{III}	0.645 keV	0.00004
LMN _{mittel}	12.389 keV	

Tabelle 4: Bindungsenergien in Blei und Konversionskoeffizienten für den ^{207}Pb 1063.66-keV-M4-Übergang

Schale	Bindungsenergie	Konv. Koeffizient
K	88.010 keV	0.09279
L _I	15.861 keV	0.01902
L _{II}	15.200 keV	0.00378
L _{III}	13.035 keV	0.00174
M _I	3.851 keV	0.00459
M _{II}	3.554 keV	0.00100
M _{III}	3.066 keV	0.00049
N _I	0.894 keV	0.00121
N _{II}	0.764 keV	0.00026
N _{III}	0.645 keV	0.00013
LMN _{mittel}	12.599 keV	