

Univerzita Palackého v Olomouci
Přírodovědecká fakulta
Katedra experimentální fyziky

DIPLOMOVÁ PRÁCE

**Posouzení vlivu nežádoucích vibrací vzorku na
parametry spektra ve standardním transmisním
Mössbauerově spektrometru**



Autor:	Bc. Marek Jiruš
Studijní program:	N1701 Fyzika
Studijní obor:	1702T001 Aplikovaná fyzika
Forma studia:	Prezenční
Vedoucí práce:	Doc. RNDr. Jiří Pechoušek, Ph.D.
Termín odevzdání práce:	16.5.2016

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem předloženou diplomovou práci vypracoval samostatně pod vedením Doc. RNDr. Jiřího Pechouška, PhD. a že jsem použil zdrojů, které cituji a uvádím v seznamu použitých pramenů.

V Olomouci

.....

Poděkování

V úvodu práce chci poděkovat všem, bez jejichž pomoci a spolupráce bych nebyl schopen tuto práci zpracovat a dovést do zdárného konce.

V první řadě chci poděkovat svému vedoucímu práce Doc. RNDr. Jiřímu Pechouškovi, Ph.D., který mi umožnil pracovat na tomto tématu. Jeho odborná podpora, poskytnuté konzultace a pomoc při sestavování měřících soustav byly nedocenitelné. Bez jeho vstřícného a motivujícího přístupu bych nebyl schopen tuto diplomovou práci dokončit.

Dále chci poděkovat Mgr. Davidu Smrčkovi za jeho obětavost konzultovat se mnou záležitosti spjaté se simulacemi spekter a problém tvorby analytického předpisu hustoty pravděpodobnosti pro mechanické výchylky v programu Wolfram Mathematica. Jeho pomoc a připomínky byly důležité pro ověření teoretických předpokladů.

A v neposlední řadě bych chtěl poděkovat své rodině a přítelkyni Šárce. Jejich neustávající motivace, důvěra v mé schopnosti a láska mi dávaly sílu k tomu, abych šel za svými sny.

Všem výše jmenovaným jsem velice vděčný.

Bibliografická identifikace:

Jméno a příjmení autora: Bc. Marek Jiruš

Název práce: Posouzení vlivu nežádoucích vibrací vzorku na parametry spektra ve standardním transmisním Mössbauerově spektrometru

Typ práce: Magisterská

Pracoviště: Katedra experimentální fyziky

Vedoucí práce: Doc. RNDr. Jiří Pechoušek, Ph.D.

Rok obhajoby práce: 2016

Abstrakt:

Tato práce se soustřeďuje na pozorování vlivu mechanických vibrací vzorku na parametry a obecné vlastnosti spektra Mössbauerova spektrometru v transmisní geometrii. Kromě přímého vlivu vibrací na spektrum pozorujeme také možnosti odstranění vzniklých artefaktů, jako jsou například neobvyklá štěpení čar a parazitního rozšiřování spektrálních píků. V první části provádíme matematický popis rezonanční emisní absorpce gamma záření v závislosti na relativním pohybu zářiče a absorbéru. Vytvoříme matematický model pomocí kterého budeme vytvářet simulovaná spektra pro náš kalibrační vzorek ve formě fólie z $\text{NH}_4\text{Mg}^{57}\text{Fe}(\text{CN})_6$ při standardních laboratorních podmínkách. Se znalostí matematického modelu jsme provedli skutečná měření na spektrometru v transmisní geometrii, kde jsme pomocí indukčního lineárního aktuátoru připojeného ke vzorku zaváděli nucené mechanické vibrace různých parametrů. Při volbě typu mechanických výchylek se zohledňovala amplituda rychlosti, frekvence, spektrální složení a tvar vstupního signálu. Naměřená spektra jsme porovnali s teoretickými a diskutovali použitelnost matematického modelu. Druhá část práce se zaměřuje na digitální „post-processing“ se snahou odstranit zkreslení spekter, potenciálně vylepšit zatížená spektra a získat tak jejich přesnější specifické parametry při znalosti negativních vlivů jež ovlivňují měřicí soustavu. V závěru diskutujeme úspěšnost použité metody pro vylepšení spekter a budoucí aplikaci pro tvorbu automatizovaného systému pro provádění této úpravy.

Klíčová slova: Mössbauerova spektroskopie, transmisní geometrie, mechanické vibrace vzorku, hustota pravděpodobnosti vibrací, zatížené spektrum, vibrační modulace

Počet stran: 50

Počet příloh: 0

Jazyk: Český

Bibliographical identification:

Autor's first name and surname: Bc. Marek Jiruš

Title	Estimation of the spectrum quality affected by the external undesirable vibration forced on the sample under analysis in the transmission Mössbauer spectrometer
Type of thesis	Master
Department	Department of Experimental Physics
Supervisor	Doc. RNDr. Jiří Pechoušek, Ph.D.
The year of presentation	2016

Abstract:

This work is focused on observation of influence of mechanical vibrations of sample on parameters and general properties of spectrum in Mössbauer spectroscopy based in transmission geometry. Besides observing direct effect of vibrations on spectra, we also look for possibilities of removal of created artefacts, for example an unusual line splitting, and parasitic widening of spectral lines. In the first part of this work we carry out a mathematical description of resonant emission and absorption of gamma radiation with dependance on relative motion of absorber and emitter. We create a mathematical model which we use to simulate spectra for our calibration sample in the form of a thin $\text{NH}_4\text{Mg}^{57}\text{Fe}(\text{CN})_6$ film in standard laboratory conditions. With the knowledge of the mathematical model we performed real measurements with the spectrometer in transmission geometry where with the use of an induction linear actuator connected to the sample we induced forced mechanical vibrations of different parameters. When choosing the type of mechanical deviations we took into consideration amplitude of velocity, frequency, spectral composition and the shape of the input signal. We compared the spectra with the theoretically obtained and discussed the usability of the mathematical model. The second part of the work focuses on digital "post-processing" with the aim to remove distortion of spectra, potentially improve the negatively affected spectra and to acquire their more accurate specific parameters while knowing the specifics of the negative effects that influence the measurement system. In the conclusion we discuss the success of the method used to recover spectra and future applications for creation of an automated system for execution of this processing.

Keywords	Mössbauer spectroscopy, transmission geometry, mechanical vibrations of sample, probability density of vibrations, burdened spectrum, modulation via vibration
Number of pages	50
Number of appendices	0
Language	Czech

Obsah

1. Úvod.....	7
2. Teoretický rozbor a tvorba matematického modelu.....	9
2.1 Rezonanční emise a absorpce gamma-záření.....	9
2.2 Vliv dopplerovské modulace záření na pravděpodobnost pozorování rezonance.....	12
2.3 Kvantifikace rozšíření absorpční čáry v závislosti na vibracích vzorku.....	15
2.3.1 Charakter zaváděných mechanických vibrací.....	16
2.3.2 Míra zkreslení vibračně modulovaných spekter.....	17
2.4 Parametry měřicí soustavy a uměle indukovaných vibrací vzorku.....	19
3. Simulovaná spektra.....	20
3.1 Hustoty pravděpodobností mechanických vibrací.....	20
3.1.1 Deterministické signály.....	21
3.1.2 Bílý šum.....	23
3.2 Průběhy zatížených spekter.....	25
3.2.1 Teoreticky ideálně nezatížené spektrum.....	25
3.2.2 Dílčí zatížená spektra	26
4. Naměřená spektra kalibračního vzorku.....	29
4.1 Nezatížené vstupní spektrum.....	29
4.2 Vibračně modulovaná spektra.....	30
4.3 Míra shody teoretického modelu s reálným experimentem.....	41
5. Odstranění negativních modulačních procesů v reálných spektrech.....	44
6. Závěr.....	45
7. Diskuse.....	47
8. Seznam referencí.....	48
9. Seznam použitých veličin.....	49
10. Seznam použitých zkratk.....	50

1. Úvod

Materiálové vědy, obory a technologie s nimi spjaté, plnily vždy podstatnou roli při vývoji lidstva. Vždy byla vyvíjena snaha k tomu, aby byly objevovány nové, kvalitnější materiály, či alespoň se dosáhlo vylepšení určitých vlastností u těch již známých. Ruku v ruce s těmito vědami se tedy vyvíjely i metody, pomocí kterých se studují vlastnosti rozličných materiálů. V základním měřítku se jednalo o pozorování jednoduše měřitelných fyzikálních vlastností jako je tvrdost a drsnost, tepelné stability a jiných parametrů ovlivňujících obrábění nebo jejich samotnou výrobu. S rozvojem technologií již obyčejné makroskopické vlastnosti přestávaly být relevantní a použitelné v oborech, které se zaměřovaly na mikroelektroniku, chemii nebo dnes populární nanotechnologie a jejich případné enviromentální aplikace. S objevem jaderné fyziky, která se později stala základem pro zrod kvantové fyziky, se začaly vyvíjet měřicí metody, které pozorují vlastnosti a stavy hmoty samotné.

S metodami, kterými pozorujeme mikroskopické složení materiálů, jako jsou RTG difrakce na krystalických mřížkách nebo Ramanovy spektroskopie, či se sledováním atomů samotných v elektronové mikroskopii a mikroskopii atomárních sil, nebo také zjišťováním magnetických a chemických vlastností prvků v magnetometrii či Mössbauerovské spektroskopii, se začaly vyrábět mnohem kvalitnější, funkcionalizovanější a jasně definovanější struktury a látky. Nyní se nacházíme v době, kdy naše pozorování není omezené fyzickou realizací experimentu, ale fyzikálními hranicemi jevu, který využíváme k odhalení vlastností neznámého systému. Proto v určitých oblastech již není kladena snaha vyvinout novou přesnější metodu, ale zpřesnit a stabilizovat ty stávající. Jakmile se přesuneme od makroskopických rozměrů k mikroskopickým, začnou být dříve zanedbatelné vlivy, jako jsou tepelné fluktuace mřížek nebo jemné mechanické vibrace, natolik významné, že nám začnou negativně ovlivňovat pozorovaný systém a měřicí soustavu samotnou. Jedna z takto ovlivněných metod je i Mössbauerova spektroskopie, kterou se v této práci budeme zabývat.

Když v roce 1958 Rudolf Mössbauer objevil jev rezonanční emisní absorpce gamma záření, dal vzniknout metodě schopné měřit energii jaderných hladin s velkou rozlišovací schopností (relativní přesnost měření až 10^{-13}). Tato stěžejní hodnota je ovšem relevantní pouze v ideálních případech, kdy je Mössbauerův jev nejpravděpodobnější. Z modelu, který je použit pro popis tohoto fenoménu, jsou hlavními vstupními volitelnými parametry pro pozorování teplota absorberu, zvolená energie jaderného přechodu zářiče a relativní rychlost zářiče pro modulaci zmíněné energie. První ze zmíněných parametrů nám při velmi nízkých hodnotách buď umožňuje pozorovat speciálně tepelně zablokované systémy, což je velmi vhodné pokud se snažíme odhalit chování látek obvykle v oblasti nanomateriálů, nebo zvyšuje rozlišitelnost spekter díky stabilizaci krystalové mřížky a omezování odrazových energií. V takovém případě se můžeme při pozorování energií jaderných hladin spolehnout čistě jen na vlastnosti jaderných přechodů. Nicméně teplota jako taková je poměrně dobře stabilizovatelná veličina, obzvláště s použitím současné kryogenní techniky a typem pozorovaných látek majících dostatečně velké tepelné kapacity, aby vytvářely jistou „teplotní setrvačnost“, tudíž se obvykle nemůže stát, že by se nám během měření výrazně měnila rozlišovací schopnost. Volba energie zářiče nám nastavuje pozorovací parametry, podobně třeba jako čočka u mikroskopu, přičemž samotná z principu mění jen pozorovanou oblast elektromagnetického spektra, ale ne jeho rozlišitelnost. Relativní rychlost zářiče už tím, že se jedná o mechanicky regulovaný parametr, tak jednoduchou situaci neposkytuje.

Abychom dokázali vhodně pozorovat jaderné přechody pomocí Mössbauerovy spektroskopie bez toho, aniž bychom využívali synchrotronového záření, musíme využívat dopplerovské modulace zářiče k vytváření pseudo-spojitého záření. V počátcích této spektroskopické metody se využívala modulace konstantní rychlostí, která je z dnešního pohledu časově náročná a je omezena počtem realizovatelných rychlostí. Dnes se provádí modulace proměnou rychlostí, která je daná konstantním zrychlením. Tato metoda umožňuje vznik záření o rovnoměrné intenzitě v širším energetickém pásmu omezeném maximální a minimální rychlostí modulace. Tento model funguje spolehlivě pouze v případě, že máme jasně definovanou relativní rychlost mezi zářičem a absorberem. Tohoto ideálního faktu nelze nikdy dosáhnout a z praxe vyplývá, že nejistota v průběhu modulační rychlosti se projevuje na tvaru finálního spektra a může způsobovat jeho horší čitelnost [12]. Tento fenomén může nastávat v situaci, kdy výstupem posuvného zařízení zářiče není pohyb konstantního zrychlení nebo není-li absorber v klidu kvůli zaneseným vibracím z okolí, jako je například běžná činnost kolem zařízení nebo činnost vakuových sestav kryogenní techniky.

Cílem této práce je tedy pozorovat vliv parazitní modulace relativní rychlosti umělým zaváděním vibrací na vzorek. Zjistíme spektrum kalibračního vzorku bez zatížení vnějšími vibracemi a posléze budeme postupně zvyšovat míru negativního vlivu. Zjištěné experimentální výsledky porovnáme s vytvořeným matematickým modelem pro tento jev a pokusíme se kvantifikovat míru zkreslení spekter v závislosti na nejistotě modulační rychlosti způsobené rozličnými parametry mechanických vibrací vzorku. Při znalosti stejného matematického modelu poté provedeme zpětnou transformaci spektra, při které se pokusíme zkreslení a vzniklé artefakty ve spektru odstranit. Úspěšnost zvolené metody budeme diskutovat v závěru práce.

2. Teoretický rozbor a tvorba matematického modelu

Pro popis problematiky deformace spektra způsobené změnou původně deterministického relativního pohybu zářiče je nutné znát základní uspořádání experimentu Mössbauerovy spektroskopie v transmisní geometrii. Proto si v následujících kapitolách nastíníme jak Mössbauerovo spektrum vzniká, čím je podmíněno a jak jej lze modifikovat. Popis, který zde budeme uvádět, bude ve zjednodušené formě semiklasické podoby pro systém o jedné spektrální čáře.

2.1 Rezonanční emise a absorpce gamma-záření

Objev rezonanční emisní absorpce gamma záření se datuje do 50. let minulého století a až později se začala označovat po svém objeviteli Mössbauerova spektroskopie. Samotný jev potvrzuje kvantové vlastnosti krystalové mřížky a diskrétní energetické stavy částicových systémů, v tomto případě jádra atomu.

Každý diskrétní kvantový stav se projevuje specifickou energetickou hladinou, danou kvantovými čísly, která tento stav popisuje [1]. Této energie je třeba, pokud chceme částici dostat do tohoto vyššího kvantového stavu, případně je naopak vyzářena, pokud z tohoto stavu deexcituje na základní hladinu systému. Podstatným faktem je, že tato energie není diskrétní hodnotou, jak by mohlo vyplývat z partikulárního řešení Schrödingerovy rovnice [2], ale představuje distribuci nejpravděpodobnějších energií s jistou pološířkou Γ . Tato vlastnost přímo vyplývá z Heisenbergovy relace neurčitosti

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar, \quad (1)$$

kde ΔE je neurčitost energie, Δt je neurčitost času při měření energie E a h je Planckova konstanta. Neurčitost času Δt je řádově stejná jako střední doba života τ . Pokud náš experiment navržený k pozorování tohoto stavu zabere delší dobu než je τ , tak nejsme tento stav schopni pozorovat. Z aproximace $\Delta t \approx \tau$ získáme neurčitost energie $\Delta E = \Gamma$ jako

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}, \quad (2)$$

kde Γ je šířka energetické hladiny. Z rovnice (2) vyplývá jeden základní fakt, a to že vzhledem k nekonečné době životnosti základní energetické hladiny je tento stav stabilní, šířka této energetické hladiny je nulová a nabývá tedy jediné diskrétní hodnoty.

Problémem poločasu rozpadu excitovaných hladin a průběhem intenzity vyzářování energie jaderných přechodů se zabývali pánové Weisskopf a Wigner [3]. Zjistili, že pokud Γ představuje šířku spektrální čáry v polovině její intenzity, pak průběh distribuce vyzářovaných energií odpovídá Lorentzově, též Briet-Wignerově, křivce nabývající tvar

$$H(E) = \text{konst} \cdot \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (3)$$

kde E_0 je energie jaderné hladiny. Na tuto problematiku se můžeme dívat i klasicky. Budeme-li mít rozpadající se stav se střední dobou života $\tau = \hbar/\Gamma$, pak toto bude odpovídat exponenciálně utlumené vlně o střední frekvenci ω_0 s průběhem amplitudy

$$\psi(t) = \psi_0 e^{-i\omega_0 t} e^{-\Gamma t/2\hbar}, \quad (4)$$

kteřá je nulová pro záporné časy t . Intenzita této vlny je pak úměrná kvadrátu její amplitudy, tedy

$$I(t) \propto |\psi(t)|^2 = |\psi_0|^2 e^{-\Gamma t/\hbar} . \quad (5)$$

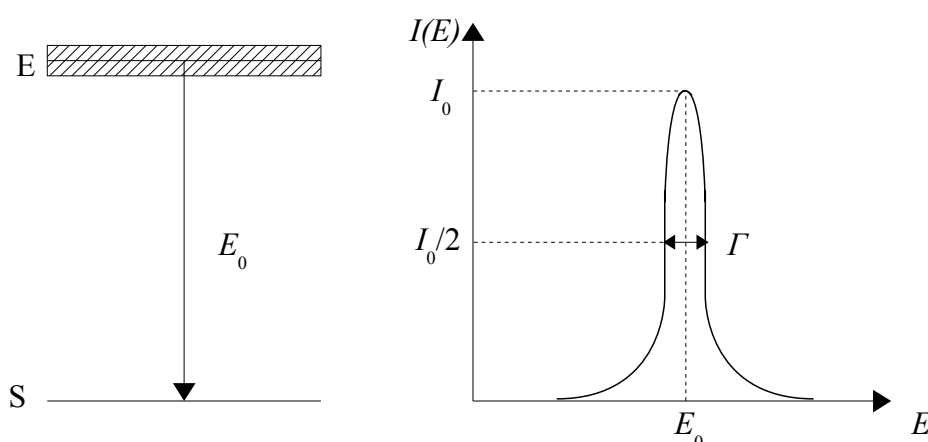
Tato vlna nicméně není monochromatická. Abychom získali distribuční funkci polychromatické vlny, musíme provést rozšíření funkce $\psi(t)$ a to

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Phi(\omega) e^{-i\omega t} . \quad (6)$$

Fourierovskou inverzí, dosazením rovnice (4) a provedení kvadrátu modulu získáme finální vztah pro distribuci intenzity ve frekvenčním spektru

$$I(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2\hbar)^2} , \quad (7)$$

který koinciduje s kvantově-mechanickým vztahem (3). Každý nestacionární stav tedy při přechodu na nižší stacionární stav vyzáří energii, která se bude mírně lišit od původní diskrétní hodnoty E_0 , a to v závislosti na šířce spektrální čáry (obrázek 1).



Obrázek 1: Příklad průběhu intenzity energie $I(E)$ při přechodu z excitované hladiny (E) na nižší stacionární (S). Šírka této intenzitní distribuce je pak Γ .

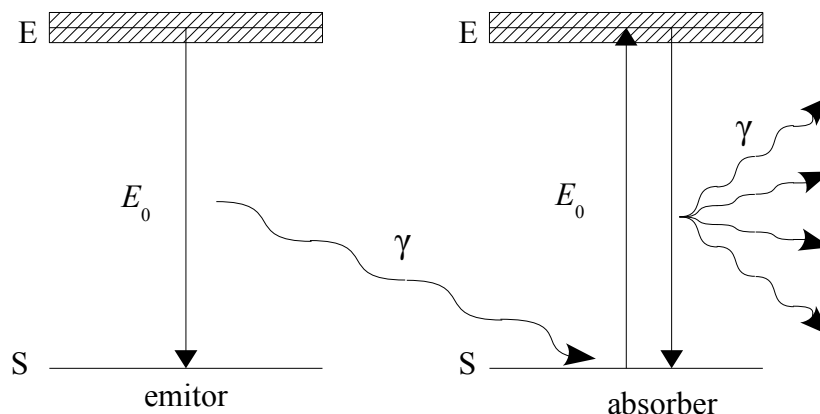
Do této chvíle jsme řešili jaderný přechod jako izolovaný případ závislý pouze na kvantových vlastnostech. Elektromagnetické interakce jsou zprostředkovávány fotony, které při emisi nebo absorpci nesou i hybnost. Jádru [4,5], které emituje foton nenulové hybnosti, musí na základě zákona zachování hybnosti získat stejnou hybnost, pouze opačného směru. Takto získá tzv. energii zpětného rázu danou jako

$$E_r = \frac{E_0^2}{2mc^2} , \quad (8)$$

kde E_0 je energie emitovaného záření, m je hmotnost emitujícího jádra a c je rychlost světla. Výsledná energie emitovaného záření bude tedy o tuto hodnotu menší - $E_E = E_0 - E_r$. Tato skutečnost způsobí posunutí emisní čáry $I(E)$ k nižším hodnotám [6]. Podobná situace nastane v případě absorpce - foton nesoucí hybnost se sráží s jádrem, předává mu svoji hybnost a začne se pohybovat ve směru šíření původního fotonu. Ve výsledku tento efekt způsobí posunutí absorpční čáry k vyšší energiím - $E_A = E_0 + E_r$. Takto se obvykle popisuje emise a absorpce gamma záření volným jádrem. [7] U volného jádra předpokládáme, že není vázané žádnými interakcemi na své okolí, což je samozřejmě pouze modelový předpoklad. Ve skutečnosti je jádro totiž součástí krystalické mřížky, případně nějaké kvazikrystalické soustavy. Vazba, která udržuje toto jádro v lokalizovanější podobě, způsobuje zvýšenou tuhost při zpětnoodrazových a srážkových

jevech, což způsobuje snížení energie zpětného rázu. Čím větší tuhost vazby jádra v mřížce dokážeme zajistit, tím více redukuje vzájemné rozposunutí emisní a absorpční čáry. Toho se dá obvykle docílit například snížením teploty.

Důvodem pro zmínění tohoto faktu je vysvětlení, proč za standardních podmínek Mössbauerův jev nemůžeme téměř pozorovat. Rezonanční emisní absorpce gamma záření nastává v případě, kdy je kvantum elektromagnetické energie vyzářené z emitoru pohlceno absorberem v takové podobě, že způsobí excitaci jádra do vyšší energetické hladiny a posléze deexcitace vyzářením dalšího kvanta elektromagnetické energie do libovolného bodu prostoru (obrázek 2). Toto odpovídá klasické představě rezonátoru, kdy systém má



Obrázek 2: Demonstrace rezonanční emisní absorpce gamma záření na jaderném přechodu o energii E_0 pro emitor i absorber.

největší odezvu v případě, že jej nutíme kmitat v jeho vlastní frekvenci. Takto bychom Mössbauerův jev mohli pozorovat například při použití dvou izotopicky identických jader. Pokud bychom detekovali dopadající záření z emitoru, zaregistrovali bychom jistou intenzitu I_E . Při vložení tenkého vzorku, který neobsahuje izotopy emitoru, do cesty záření bychom pozorovali pokles intenzity spjatý s absorpcí elektromagnetického záření v látce definovaný jako

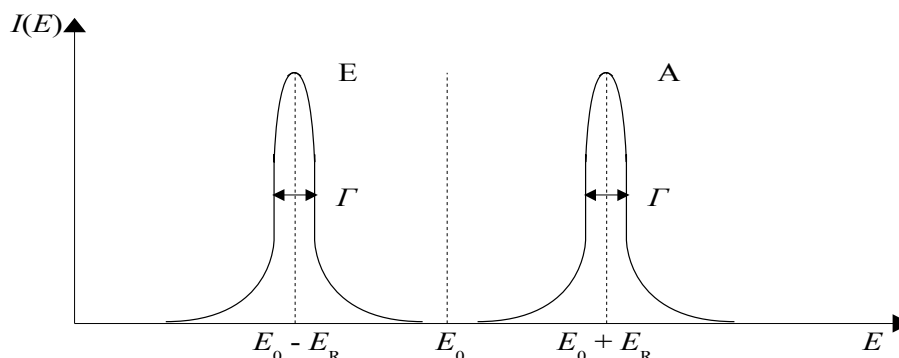
$$I = I_0 e^{-\mu_A d_A}, \quad (9)$$

kde μ_A je lineární absorpční koeficient absorberu a d_A je jeho tloušťka, a pro dostatečně tenký vzorek by byl málo významný. Pochopitelně tento jev nastává už v samotném zářiči, jelikož absorpce může nastat v jakékoliv látce a v jakékoliv její tloušťce. Dá se dokázat [10], že poměr dopadající intenzity záření na detektor a úhrnné intenzity zářiče je dán jako

$$\frac{I}{I_0} = \frac{1 - e^{-\mu_E d_E}}{\mu_E d_E} e^{-\mu_A d_A}, \quad (10)$$

kde μ_E je lineární absorpční koeficient emitoru a d_E je jeho tloušťka. Ze vztahu (10) je evidentní, že intenzita procházejícího záření klesá rychleji s tloušťkou a lineárním absorpčním koeficientem absorberu. Pokud zaručíme malou absorpci záření ve vzorku (je tenký a skládá se z lehkých atomů), budeme na detektoru pozorovat intenzitu blízkou se maximální intenzitě I_E . Tato situace odpovídá nerezonančnímu stavu látky – záření projde látkou téměř beze změny intenzity a směru záření. Opačná situace nastane pokud vzorek bude obsahovat izotopy mající jaderný přechod o energii E_0 . Excitace a následná deexcitace jádra bude odpovídat rezonančnímu stavu – záření změní směr, což lze pozorovat poklesem intenzity na detektoru. Pro toto pozorování jsme nicméně museli přijmout několik předpokladů v praxi těžko dosažitelných. Ten největší z nich předpokládá shodu emisní a absorpční čáry a navíc u izotopicky identických jader, což odpovídá situaci bezdrazových jevů, které můžeme maximálně omezit, ale nikdy dokonale redukovat,

jelikož i jádro v krystalické mřížce má jistou formu volnosti. To způsobuje vzájemné rozposunutí emisní absorpční čáry u jinak izotopicky shodných jader o energii zpětných rážů E_R (viz obrázek 3). Rovněž pozorování ve skutečné měřicí soustavě provádíme na vzorku, který se bude vždy lišit izotopickým složením, tudíž bude emisní a absorpční čára rozposunuta navíc o rozdíl energií jaderných přechodů emitoru a absorberu. Samotný Mössbauerův jev přímo závislý na překrytí emisní a absorpční čáry, jelikož tato skutečnost představuje rezonanční situaci, kdy je energie záření shodná s energií jaderného přechodu vzorku. Pro případ popsany na obrázku 3 je toto překrytí velmi minimální a Mössbauerův jev téměř nepozorujeme. Abychom zvýšili pravděpodobnost tohoto jevu, musíme vhodným způsobem uměle zvyšovat překrytí čar dodáním energie emitoru tak, abychom emisní čáru „přiblížili“ absorpční. Toho lze docílit prostou dopplerovskou modulací.



Obrázek 3: Rozposunutí emisní a absorpční čáry kvůli odrazovým jevům volných jader původně identických čar o energii E_0 .

2.2 Vliv dopplerovské modulace záření na pravděpodobnost pozorování rezonance

V předchozí kapitole bylo zmíněno, že pro pozorování dobře rozlišeného Mössbauerova jevu je nutné zvýšit pravděpodobnost rezonance mezi emitorem a absorberem dodáním energie záření. Při aplikaci Dopplerova jevu na zářič, např. zavedením jeho podélného pohybu ve směru šíření emise, lze měnit frekvenci záření (a tudíž i jeho energii) podobně jako je tomu v akustické oblasti [11]. Bude-li se emitor pohybovat rychlostí v vůči jinak nehybnému absorberu, pak se bude původní frekvence f_0 zářiče modulovat na novou frekvenci f vztahem

$$f = f_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \quad , \quad (11)$$

kde c je rychlost světla. Tento vztah platí úplně stejným způsobem pro energii emisního záření E vztahem

$$E = E_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \quad , \quad (12)$$

kde E_0 je energie jaderného přechodu. Takto pak můžeme měnit střed emisní čáry v závislosti na modulační rychlosti. Nahrazením energie jaderného přechodu ve vztahu (3) za nově modulovanou vztahem (12) získáme výraz pro modulovanou emisní čáru

$$H(E) = konst \cdot \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{\left[E - E_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \right]^2 + (\Gamma/2)^2} \quad . \quad (13)$$

Energetické posuny, kterých tímto způsobem můžeme dosáhnout, jsou velmi malé. Například pro ^{57}Fe v excitovaném stavu, který má žářivý přechod o energii 14,41 keV, dosáhneme modulace

$$\delta E = v [\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}] \cdot 48,06 \text{ neV} . \quad (14)$$

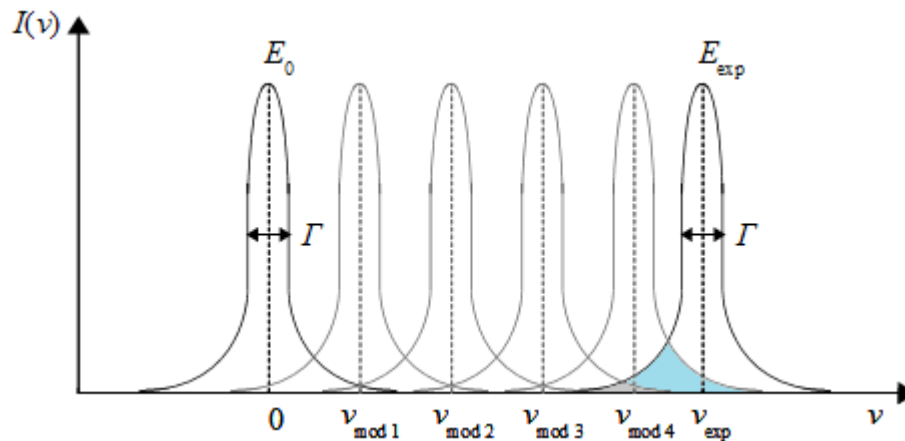
Jedná se o velmi jemné energetické změny, které budou závislé jen na rychlostní modulaci – způsobu jakým budeme zářičem pohybovat. V konečném důsledku jsme schopni pomocí vcelku jednoduše proveditelného mechanického pohybu provádět detekci rezonančního jevu s velkým rozlišením, což je výhodné, pokud chceme v jádrech pozorovat hyperjemné parametry, které se pohybují v rozmezí $10^{-7} - 10^{-4}$ eV. Vzhledem k tomu v jakých energetických oblastech se pohybujeme, je výhodné si přetypovat nezávislou proměnou v rovnici (13) tak, aby odpovídala rychlostnímu posunu podle výrazu (12) a původní modulační rychlost přeznačíme jako měnitelný parametr

$$H(v, v_{mod}) = konst \cdot \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{[E_0(1 + \frac{v}{c}) - E_0(1 + \frac{v_{mod}}{c})]^2 + (\Gamma/2)^2} , \quad (15)$$

který se úpravou zjednoduší na výraz

$$H(v, v_{mod}) = konst \cdot \frac{\Gamma}{2\pi} \frac{1}{(E_0 \frac{v - v_{mod}}{c})^2 + (\Gamma/2)^2} , \quad (16)$$

kde v je nezávislou proměnou výrazu a představuje energetické spektrum v rychlostních jednotkách a v_{mod} je modulační rychlost zářiče. Takto jsme schopni pozorovat libovolnou absorpční čáru energie E_{exp} , která se nachází v modulační vzdálenosti od původní neposunuté emisní čáry. [8,9] Reálně uskutečňujeme modulaci pohybovým zařízením, které je omezené maximální rychlostí $\pm v_0$ a tudíž nejsme schopni posouvat energii E_0 emisní čáry libovolně daleko od její původní polohy. Jelikož každou modulační rychlostí v_{mod} měníme překrytí emisních a absorpčních čar, měníme tedy i pravděpodobnost Mössbauerova jevu (viz obrázek 4). Každému bodu rychlostní osy přísluší numerická



Obrázek 4: Emisní čáry pro různé hodnoty modulační rychlosti v_{mod} s vyznačenými oblastmi překrytí s absorpční experimentální čarou o energii $E_{exp} > E_0$.

hodnota pravděpodobnosti Mössbauerova jevu, kterou registrujeme jako pokles intenzity záření, které dopadá na detektor. Kvůli zmíněné pravděpodobnosti je pozorování rezonanční emisní absorpce γ -záření statistickou záležitostí a pro každý rychlostní kanál musíme provádět dostatečně dlouhé měření, abychom získali spolehlivě velký statistický soubor ke vzájemnému rozlišení rezonančních a nerezonančních stavů interakce. To lze z

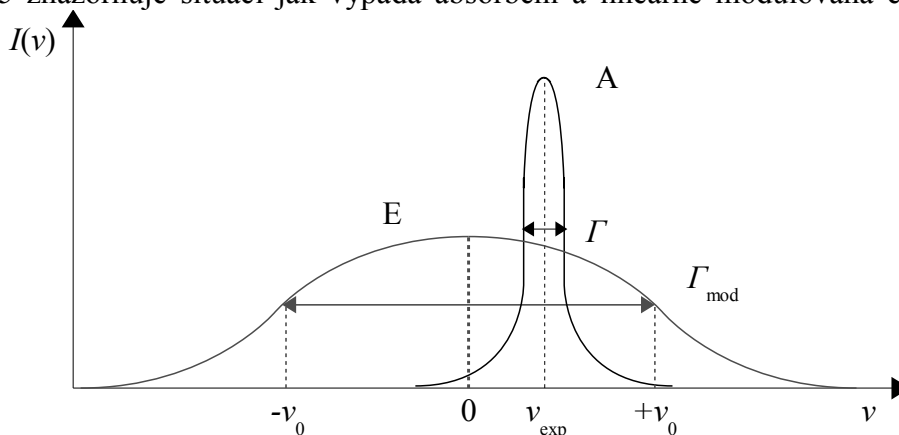
experimentálního hlediska provádět dvěma způsoby. Prvním z nich je metoda konstantní rychlosti. Pohybové zařízení zářiče nastavíme tak, aby se po nějakou omezenou dobu T_m pohyboval konstantní rychlostí $v_{mod\ i}$, což způsobí modulaci emisní čáry popsanou rovnicí (16). Měření v této sestavě budeme několikrát opakovat, dokud nebudeme mít dostatečný soubor hodnot. Vše se opakuje pro různé modulační rychlosti $v_{mod\ i}$, dokud nemáme velký soubor měření pro rovnoměrné a jemné rozložení hodnot $v = \{v_{mod\ i}\}$. Tento přístup je velmi časově náročný, jelikož vyžaduje několikanásobné měření pro dílčí modulační rychlosti a také musíme mít dostatečně velkou množinu modulačních rychlostí, abychom získali dobře rozlišené spektrum [16]. Proto je tato metoda velmi časově náročná a vyžaduje pravidelnou obsluhu měřicího zařízení. Z těchto důvodů se v dnešní době přistupuje k metodě konstantního zrychlení. Místo provádění diskrétní změny modulační rychlosti zvolíme spojitou lineární změnu a pro každý velmi malý kanál rychlostí Δv provedeme detekci záření. Pokud je tedy průběh modulační rychlosti lineární a omezený hodnotou $\pm v_0$, pak původní jednoduchá emisní čára popsaná vztahem (16), přechází na

$$H_{mod}(v) = \int_{-v_0}^{+v_0} H(v, v_{mod}) dv_{mod} . \quad (17)$$

Taková emisní čára má pak novou pološířku Γ_{mod} odpovídající délce intervalu

$$\Gamma_{mod} \propto \left\langle E_0 \left(1 - \frac{v_0}{c}\right); E_0 \left(1 + \frac{v_0}{c}\right) \right\rangle . \quad (18)$$

Obrázek 5 znázorňuje situaci jak vypadá absorpční a lineárně modulovaná emisní čára.



Obrázek 5: Lineárně modulovaná emisní čára spojitým intervalem rychlostí $\pm v_0$ a pozorovaná experimentální absorpční čára.

Takto jsme zajistili překryv obou čar, které původně byly vzájemně rozposunuty, a zvýšili tak pozorovatelnost Mössbauerova jevu. Předpokládejme, že pozorovanému vzorku náleží absorpční čára $G(\nu)$ a modulovanému zářiči náleží emisní čára $H_{mod}(\nu)$. Provedeme-li normalizaci obou spektrálních čar tak, aby platilo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\nu) d\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} H_{mod}(\nu) d\nu = 1 , \quad (19)$$

budou tyto normalizované funkce odpovídat hustotám pravděpodobnosti emise a absorpce a pravděpodobnostní Mössbauerovo spektrum pak bude úměrné

$$M(\nu) \propto G(\nu) \cdot H_{mod}(\nu) . \quad (20)$$

Toto bude platit ovšem pouze v případě, že máme lineární modulaci rychlosti. V následující kapitole tedy diskutujeme situaci, kdy tuto podmínku porušíme, například zavedením vibračního pohybu na vzorek.

2.3 Kvantifikace rozšíření absorpční čáry v závislosti na vibracích vzorku

V předchozí kapitole jsme odvodili tvar Mössbauerova spektra za předpokladu, že lineárně modulujeme rychlost a rovnoměrně tak měníme energii vyzářených fotonů. Takovou modulaci provádíme například pohybem, který odpovídá trojúhelníkovitému průběhu. Takový signál rychlosti je deterministický a pomocí dnešní PID regulace i snadno dosažitelný. Komplikovanější situace nastane v případě, když se skutečný průběh od toho ideálního liší. Modulace samotná totiž nezávisí jen na pohybu zářiče, ale i na pohybu samotného absorberu – záleží na superpozici obou pohybů. Pokud tedy i samotný pozorovaný vzorek vykonává nějaký nezanedbatelný pohyb, pak jeho průběh mění četnost dílčích rychlostí $v_{\text{mod } i}$ [12]. Definujme si $\alpha(t)$ jako časový průběh pohybu (dále jen vibrace) absorberu, který je v kladném směru s původní modulační rychlostí. Pokud je původní vibračně nezátížené spektrum pravděpodobností dané předpisem (20), pak vliv vibrací $\alpha(t)$ budeme pozorovat jako

$$M_{\text{dis}}(v) = \frac{1}{T} \int_0^T M(v - \alpha(t)) dt, \quad (21)$$

kde $M_{\text{dis}}(v)$ představuje vibračně zkreslené spektrum (od anglického distorted) a T je doba měření. Nyní předpokládejme, že vibrace $\alpha(t)$ jsou omezeným stacionárním procesem v oblasti $\pm v_{\text{vib}}$ a mají nulovou střední hodnotu. Tento předpoklad platí pro většinu standardních mechanických vibrací [14,15]. Dále předpokládejme, že je funkce $\alpha(t)$ spojitá a derivovatelná na jejím definičním oboru a že existuje spočetné množství bodů t_i takových, kde mezi body t_i a t_{i+1} má funkce $V = \alpha(t)$ svoji inverzi $t = \alpha^{-1}(V)$. Provedme derivaci této inverze a označme ji $f_i(V)$ danou předpisem

$$f_i(V) = \frac{d \alpha^{-1}(V)}{dV}. \quad (22)$$

Taková funkce je definovaná na intervalu $(\alpha(t_i), \alpha(t_{i+1}))$ a mimo něj je identicky nulová. Pomocí funkce $V = \alpha(t)$ a předchozího předpisu můžeme provést substituci vztahu (21)

$$M_{\text{dis}}(v) = \frac{1}{T} \left[\int_{\alpha(0)}^{\alpha(t_1)} M(v - V) f_1(V) dV + \dots + \int_{\alpha(t_i)}^{\alpha(t_{i+1})} M(v - V) f_i(V) dV + \dots \right]. \quad (23)$$

Jelikož jsme si zadefinovali, že jsou funkce $f_i(V)$ identicky nulové mimo jejich inverzní interval, lze vztah (23) zjednodušit na tvar [16,17]

$$M_{\text{dis}}(v) = \frac{1}{T} \int_{-v_{\text{vib}}}^{+v_{\text{vib}}} M(v - V) P(V) dV, \quad (24)$$

kde $P(V)$ je dána jako

$$P(V) = \frac{1}{T} \sum_i f_i(V) \quad (25)$$

a představuje normalizovanou hustotu pravděpodobnosti vibračních rychlostí (HPVR). Samotný vztah (24) pak představuje konvoluci původního spektra $M(v)$ a hustoty pravděpodobnosti vibračních rychlostí $P(v)$, což je nejdůležitější poznatek této kapitoly, díky kterému můžeme další analýzu problematiky zkreslení Mössbauerových spekter provádět pomocí Fourierových transformací [19].

Na základě předchozího zjištění označme výrazy FT $[M(v)]$, FT $[P(v)]$ a FT $[M_{\text{dis}}(v)]$ jako Fourierovy transformace příslušných funkcí $M(v)$, $P(v)$ a $M_{\text{dis}}(v)$.

Z konvolučního teoremu pak platí

$$FT [M_{\text{dis}}(v)] = FT [M(v)] \cdot FT [P(v)]. \quad (26)$$

Z této relace vyplývá několik závěrů. Za prvé jsme teoreticky schopni provést analýzu vibrací pokud máme změřené spektrum před zavedením nucených vibrací $M(v)$ a po zavedení vibrací $M_{\text{dis}}(v)$. Pak lze zjistit hustotu pravděpodobností mechanických vibrací vztahem

$$P(v) = FT^{-1} \left(\frac{FT[M_{\text{dis}}(v)]}{FT[M(v)]} \right). \quad (27)$$

Podobným postupem lze provést korekci zatíženého spektra $M_{\text{dis}}(v)$. Pokud víme jaké vibrace zatěžují absorber, ať už ze znalosti průběhu výchylek $\alpha(t)$ a následné transformace na HPVR nebo z měření histogramu pravděpodobností rychlostí, například laserovým výchylkoměrem, jsme schopni provést korekci podle vztahu

$$M(v) = FT^{-1} \left(\frac{FT[M_{\text{dis}}(v)]}{FT[P(v)]} \right). \quad (28)$$

V konečném důsledku jsme tedy teoreticky schopni provádět jemno-vibrační analýzu pomocí Mössbauerovy spektroskopie, kde vyžadujeme vstupní kalibrační spektrum bez vibrací a měřené spektrum, které je zatížené. Z praktického hlediska je pro nás ovšem významnější možnost provádět korekci spekter z měřících soustav u kterých nedokážeme plně potlačit nechtěné vibrace zanesené například kryogenními soustavami.

Do této chvíle jsme nebrali v úvahu, že statistický charakter registrovaných událostí na detektoru má Poissonovo rozdělení a tak každý rychlostní kanál detektoru je ovlivněn tzv. Poissonovými fluktuacemi [20]. Tyto odchylky zanášejí do spektra chybu podobnou bílému šumu. Vzhledem k tomu, že Fourierovská transformace Mössbauerovského spektra obsahuje nízkofrekvenční složky a pro vyšší frekvence je téměř nulová, je poměr signálu k šumu SNR pro vysokofrekvenční složky menší než nula [12]. Chceme-li tedy dosáhnout kvalitnější korekce, je vhodné použít na zmíněné transformace nízkofrekvenční propust. V našem případě se ale zabýváme pouze tvarem jednoduché singletní čáry, a proto pro jednoduchost budeme Poissonovy fluktuace zanedbávat. Touto konkrétní problematikou se hlouběji zabývá jiná práce [13].

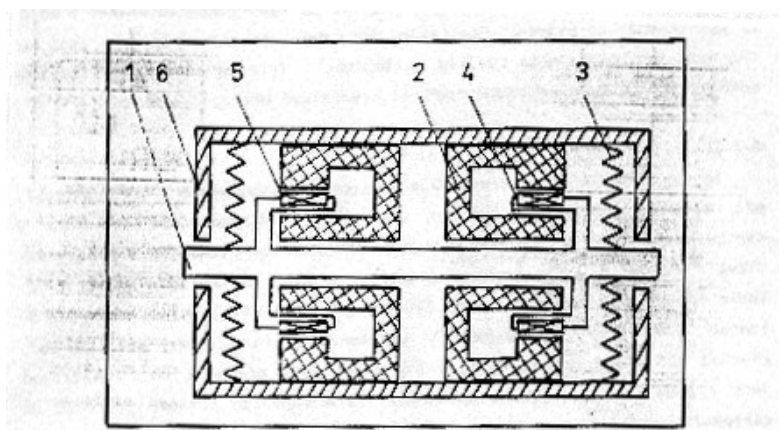
2.3.1 Charakter zaváděných mechanických vibrací

Pro zavádění nucených mechanických vibrací na vzorek jsme zvolili elektrodynamický vibrátor, schématicky znázorněný na obrázku 6, který jsme nosným ramenem připojili na absorber. Samotné vibrace jsme pak vyvolávali vstupním elektrickým signálem definovaných parametrů. Jelikož vstupní elektrický signál u posuvného zařízení ovlivňuje výchylku pohyblivé části a při modulaci je stěžejní rychlost probíhající výchylek, je signál modulační rychlosti $\alpha(t)$ úměrný k časové derivaci elektrického napětí vstupního signálu $u(t)$ -

$$\alpha(t) \propto \frac{du(t)}{dt}. \quad (29)$$

Omezený elektrický signál $u(t)$ způsobí omezenou výchylku y pohyblivé části, která je limitovaná maximální hodnotou y_0 . Jelikož je maximální výchylka elektrodynamického vibrátoru daná odezvou samotného zařízení, je vhodnější tento parametr měřit přímo, například laserovým výchylkoměrem. Pro vnášení mechanických vibrací budou pro nás podstatné následující parametry – maximální výchylka vibrací y_0 , jejich frekvence f a

spektrální složení signálu. V rámci posledního parametru se při našem pozorování budeme omezovat na následující případy: jednoduchý sinusový signál, superpozice dvou až tří sinusových signálů různé amplitudy a frekvence, obdélníkový signál, trojúhelníkový signál a „bílý“ šum reprezentovaný jako náhodná okamžitá výchylka omezená hodnotou $\pm y_0$.

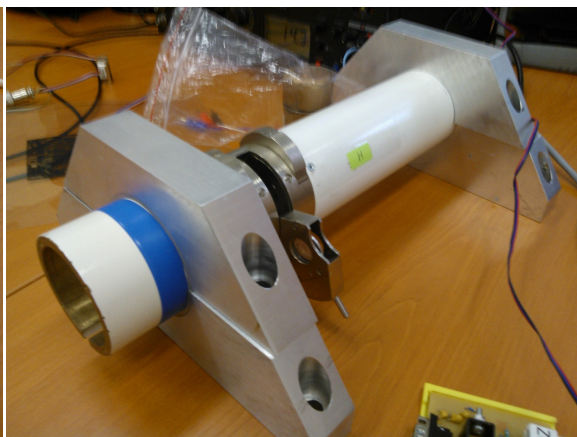


Obrázek 6: Schéma elektrodynamického vibrátoru: 1 - pohyblivá část, 2 - magnetické odstínění, 3 - pružina, 4 - zadávající cívka, 5 - měřicí cívka, 6 - pouzdro. Převzato z [7].

Geometrie měřicí soustavy se liší jen minimálně od klasického uspořádání transmisní Mössbauerovy spektroskopie, a to tím, že je držák vzorku připevněn k pohybovému zařízení (viz obrázek 7) a následně vložen do válce spektrometru (viz obrázek 8).



Obrázek 7: Držák vzorku připevněný na elektrodynamický vibrátor.



Obrázek 8: Tubus Mössbauerova spektrometru s otvorem pro vkládání vzorku.

2.3.2 Míra zkreslení vibračně modulovaných spekter

Pokud chceme parametricky popsat míru deformace spektra, můžeme na základě pravděpodobnostního charakteru vibrací využít nástrojů matematické statistiky. Hustotě pravděpodobnosti vibračních rychlostí můžeme tedy přisoudit takové parametry jako jsou rozptyl $D(V)$ a modus $\text{Mod}(V)$ [21]. Modulační rychlost V můžeme v závislosti na způsobu získání HPVR považovat za diskrétní náhodnou veličinu, pokud pravděpodobnost měříme a šířka čítacích kanálů ΔV je nezanedbatelně malá (nejde limitně k nule), nebo za spojitou náhodnou veličinu, pokud hustotu pravděpodobností odvodíme na základě matematického modelu (25). Jelikož pro potřeby modelu (26) potřebujeme spojitý průběh funkce $P(V)$, budeme diskrétní experimentálně zjištěné rozdělení pravděpodobností aproximovat spojitým rozdělením a rychlost V tedy považovat za spojitou veličinu.

Na základě konvoluční povahy zkreslení spekter, které nám HPVR způsobuje, bude disperze

$$D(V) = \int_{-\infty}^{+\infty} V^2 P(V) dV \quad (30)$$

představovat šířku modulace a bude přímo úměrně ovlivňovat šířku spektrálních čar v Mössbauerově spektru tak, že se bude přibližně o dvojnásobek této hodnoty rozšiřovat –

$$\Gamma_{dis} \sim \Gamma_A + 2D(V) \quad , \quad (31)$$

kde Γ_{dis} je šířka spektrální čáry v naměřeném Mössbauerově spektru a Γ_A je její původní šířka při nezátěžujících podmínkách.

Jako další popisný parametr můžeme zvolit modus rozdělení. Ten bude představovat nejpravděpodobnější vibrační rychlost v systému a je obvykle definován podmínkou

$$P(\hat{V}) \geq P(V), \quad \forall V \in \langle -v_0, +v_0 \rangle \quad . \quad (32)$$

Modus nám tedy bude v rozdělení pravděpodobností představovat globální maximum, které ve spektru způsobí vznik nového píku transmisního minima posunutého od toho původního o hodnotu $D(V)$. To vše v případě, že je modus rozdílný od střední hodnoty rozdělení. Navíc existují i taková rozdělení, u kterých je podmínka (32) splněna pro více rychlostí V – systém pak obsahuje více preferovaných rychlostí a na základě jejich počtu vzniká ekvivalentní počet nově vytvořených píků [22]. Vznik těchto nových artefaktů je podmíněn existencí několika lokálních maxim rozdělení $P(V)$ na jeho definičním intervalu $\langle -v_0, +v_0 \rangle$. V kapitole 3.1 si ukážeme, že taková rozdělení nejsou neobvyklá a uvedeme si jejich případy.

2.4 Parametry měřicí soustavy a uměle indukovaných vibrací vzorku

Pro samotné pozorování deformací spekter v závislosti na vibracích referenčního vzorku $\text{NH}_4\text{Mg}^{57}\text{Fe}(\text{CN})_6$ jsme provedli několik měření při různých vstupních parametrech. Přehled všech měření je uveden v tabulce 1. Výchylka y_0 představuje maximální výchylku vzorku z klidové polohy, kterou jsme registrovali laserovým úchylkoměrem. Ze všech měření uvedených v tabulce 1 jsme pro matematickou analýzu vybrali případy, které byly nejzajímavější nebo by mohly představovat typickou situaci u reálného experimentu.

Tabulka 1: Přehled realizovaných experimentů s parametry zaváděných vibrací.

Měření	Tvar signálu	y_0 [μm]	f [Hz]	Poznámka	Zahmuto v práci
W00056	Šum	5,0	---	Krátké měření	Ne
W00057	Šum	5,0	---		Ano
W00058	Sinus	8,0	10		Ano
W00059	Sinus	10,0	10		Ne
W00060	Sinus	12,0	10		Ano
W00061	Sinus	16,0	10		Ne
W00062	Sinus	18,5	10		Ano
W00080	Žádný	0,0	0	Kalibrační test	Ne
W00081	Sinus + Sinus	30,0	10 + 33		Ano
W00082	Sinus + Sinus	16,0	10 + 12		Ano
W00083	Šum	13,0	---		Ano
W00084	Sinus	12,0	12		Ano
W00085	Šum	12,0	---		Ne
W00086	Šum	10,0	---		Ano
W00087	Šum	7,5	---		Ano
W00089	Šum	4,5	---		Ne
W00090	Žádný	0,0	0	Krátké měření	Ne
W00091	Obdélník + šum	11,5	10	Krátké měření	Ne
W00092	Obdélník + šum	11,5	5		Ano
W00093	Obdélník	10,0	2		Ano
W00094	Obdélník	10,0	1		Ano
W00095	Žádný	0,0	0	Kalibrační test, dlouhé měření	Ano

Mimo jiné jsme provedli i experimenty v kolmé geometrii, kdy jsme vzorkem kmitali příčně na směr šíření záření. Pro minimální vliv této geometrie na tvar spekter, jsme se rozhodli výsledky měření nezahrnout do této práce. Důvody diskutujeme v závěru.

Tabulka 2: Přehled realizovaných experimentů pro kolmé vibrace.

Měření	Tvar signálu	U_0 [V]	f [Hz]	Poznámka	Zahmuto v práci
W00063	Šum	---	---	Kolmé vibrace, krátké měření	Ne
W00064	Šum	---	---	Kolmé vibrace	Ne
W00065	Sinus	0,1 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00066	Sinus	0,2 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00067	Sinus	0,3 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00068	Sinus	0,4 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00069	Sinus	0,5 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00070	Sinus	0,6 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00071	Sinus	0,7 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00072	Sinus	0,8 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00073	Sinus	0,75 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00074	Sinus + šum	0,1 V + 1,0 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00075	Sinus + šum	0,1 V + 0,1 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00076	Sinus + šum	0,8 V + 0,1 V	10	Kolmé vibrace	Ne
W00077	Sinus	0,8 V	20	Kolmé vibrace	Ne
W00078	Sinus	0,8 V	30	Kolmé vibrace	Ne

3. Simulovaná spektra

Pro účely simulací průběhů HPVR a Mössbauerových spekter zatížených zmíněnými hustotami pravděpodobností jsme využili programu Wolfram Mathematica 10.0 [23]. Ten nám umožnil efektivně vytvářet distribuční funkce a provádět přímé konvoluce funkcí bez toho, aniž bychom potřebovali Fourierova spektra funkcí jak je uvedeno ve vztahu (26), jelikož výpočetní funkce `Convolve[f[x], g[x], x, y]` dělá konvoluci

$$f(x)*g(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(y-x)dx \quad (33)$$

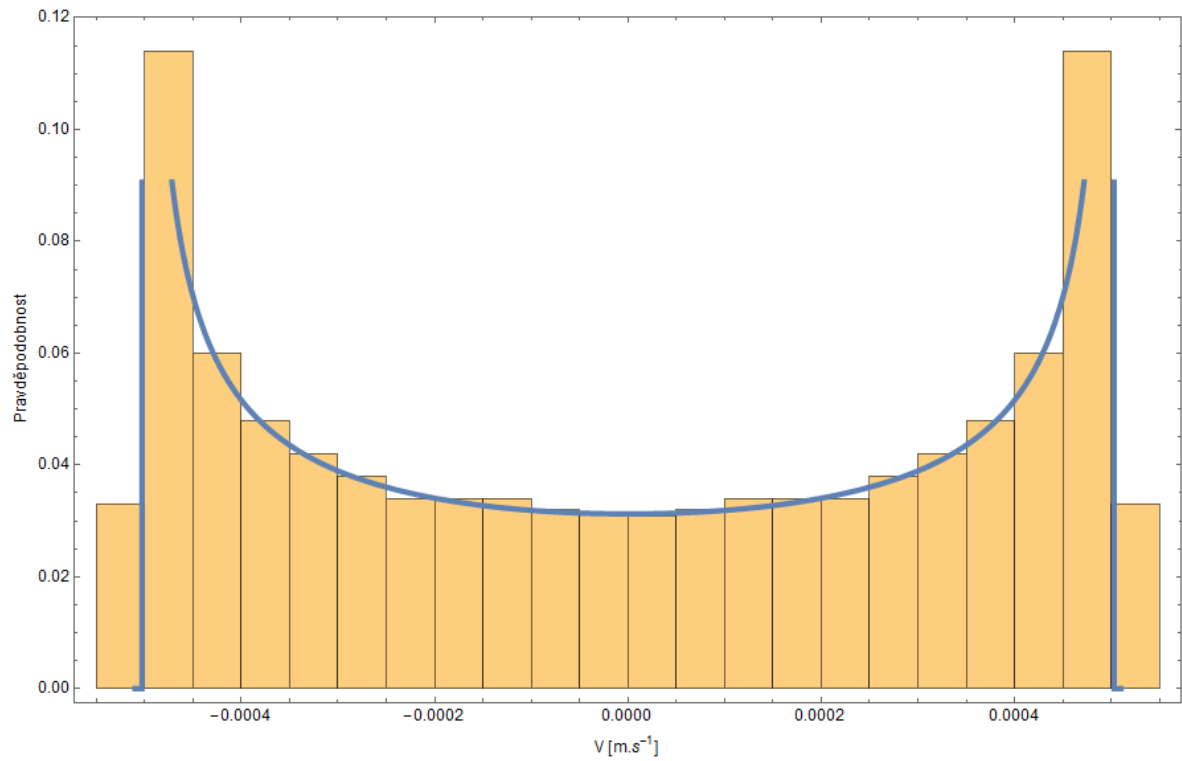
Pro tvorbu distribučních funkcí pravděpodobností vibračních rychlostí jsme využili matematického modelu (25), pomocí kterého generujeme spojité funkce. Pro názornost v grafech uvádíme i diskrétní interpretace HPVR, které bychom mohli získat například z přímého měření vibračních rychlostí. V programu mathematica jsme pro tento účel zvolili kombinaci výpočetních funkcí `Table[f[x], {x, i_min, i_max, di}]` a `Histogram[{x1, x2, ...}, bspec]`.

3.1 Hustoty pravděpodobností mechanických vibrací

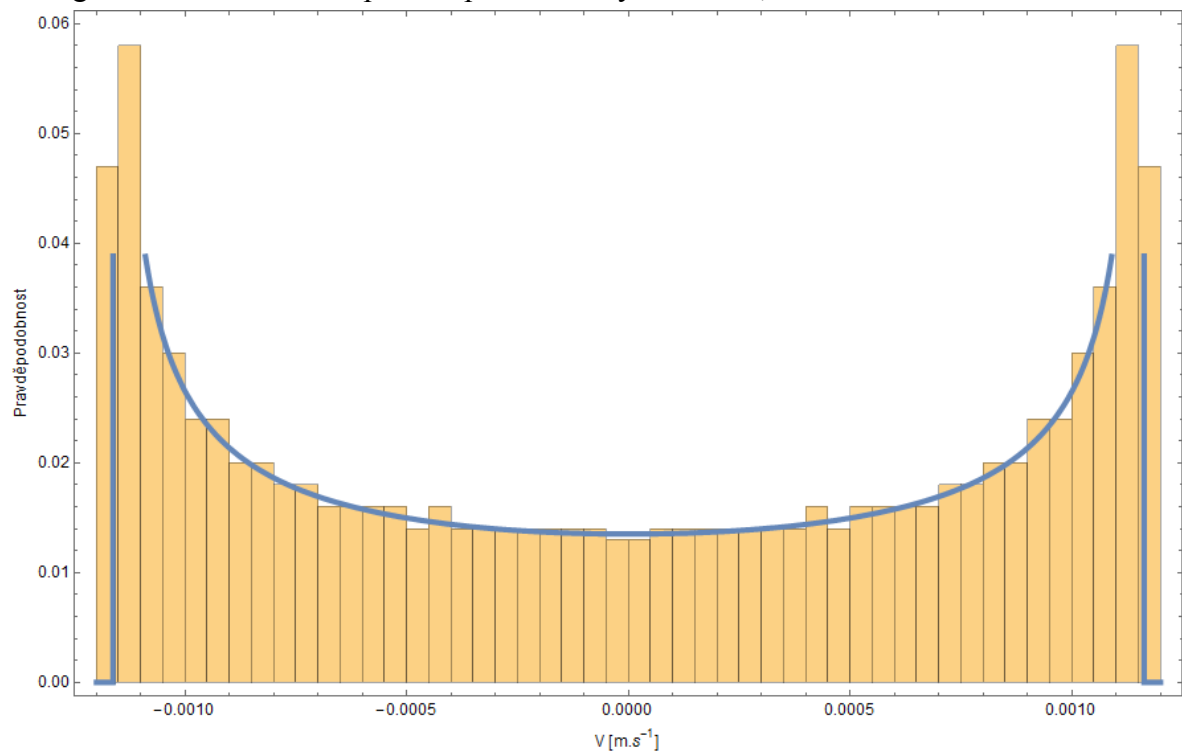
Samotné průběhy funkcí HPVR jsme rozdělili na dva hlavní typy – deterministické signály a bílý šum. První případ je pro analýzu a tvorbu finálních distribucí jednoznačnější, jelikož máme analytický předpis průběhu vibrací $V(t)$. Pro tento případ zvolíme postup daný matematickým modelem popsaný vztahem (25). Pro případ bílého šumu, který podle definice obsahuje všechny frekvenční složky napříč celým spektrem, předpokládáme, že výchylky mající charakter bílého šumu jsou omezené a distribucí odpovídají normálnímu Gaussovu rozdělení. Vibrační rychlosti jsou potom také omezené a budou odpovídat normálnímu rozdělení jisté šířky. V následujících kapitolách uvedeme několik příkladů dvou zmíněných typů HPVR.

3.1.1 Deterministické signály

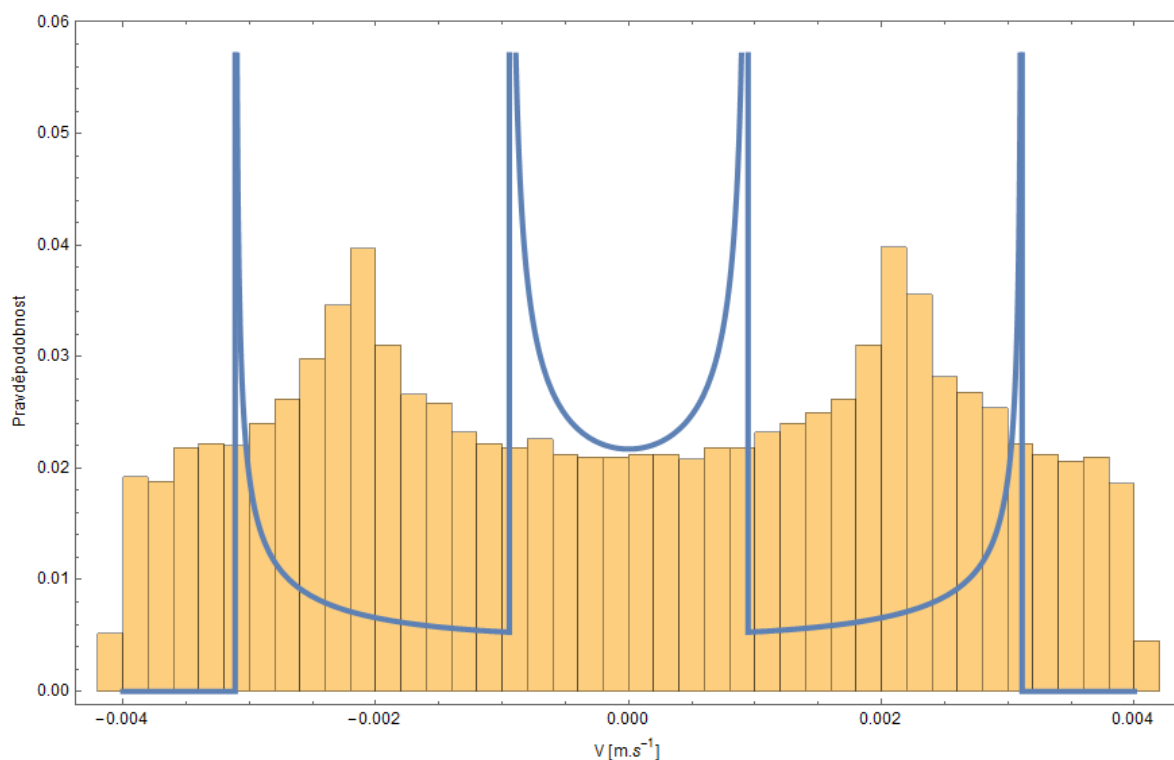
Pro případ deterministických signálů jsme si zvolili tři typy signálů – jednoduchý sinus, superpozice dvou sinů a obdélník. Průběhy jejich HPVR uvádíme v následujících grafech.



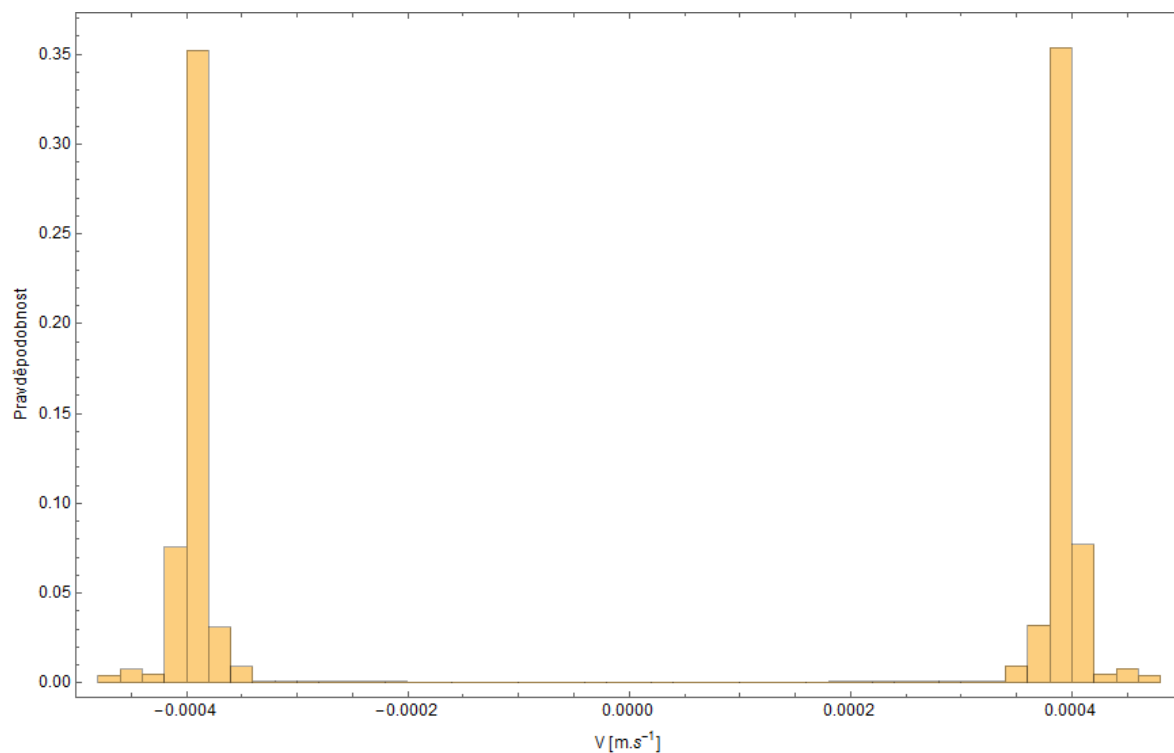
Graf 1: HPVR jednoduchého sinu podle parametrů experimentu W00058 (modře) s histogramem diskrétní interpretace pro rozsah rychlostí $\pm 0,00050 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



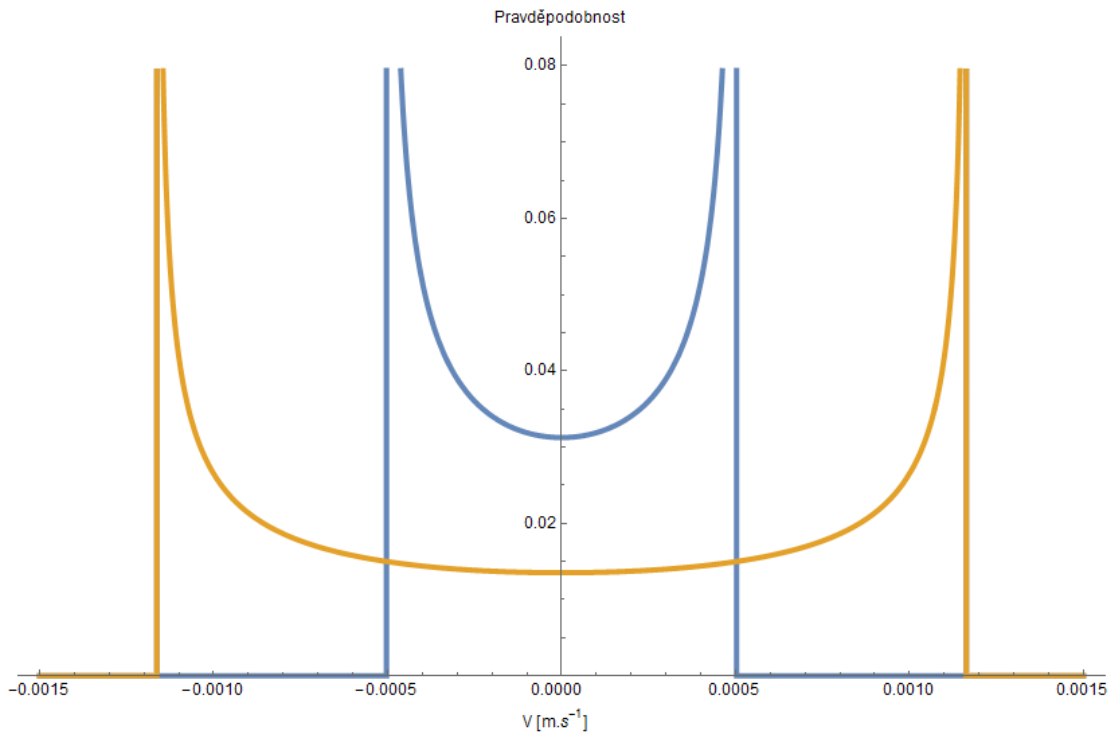
Graf 2: HPVR jednoduchého sinu podle parametrů experimentu W00062 (modře) s histogramem diskrétní interpretace pro rozsah rychlostí $\pm 0,00116 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



Graf 3:HPVR superpozice dvou sinů podle parametrů experimentu W00081 (modře) s histogramem diskrétní interpretace pro rozsah rychlostí $\pm 0,004 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Matematický model zde selhává.



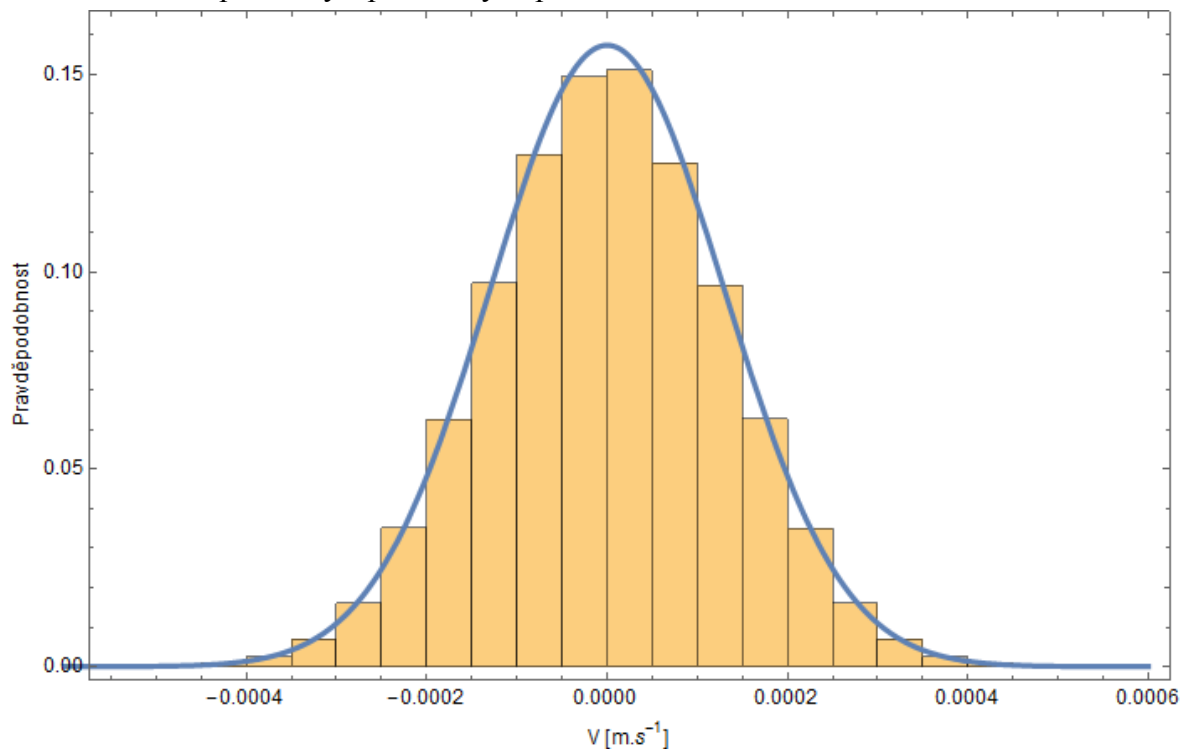
Graf 4: Histogram pravděpodobností vibračních rychlostí pro obdélník podle parametrů experimentu W00093 pro rozsah rychlostí $\pm 0,00043 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Matematický model zde neuvádíme, jelikož selhává a nepopisuje skutečnost.



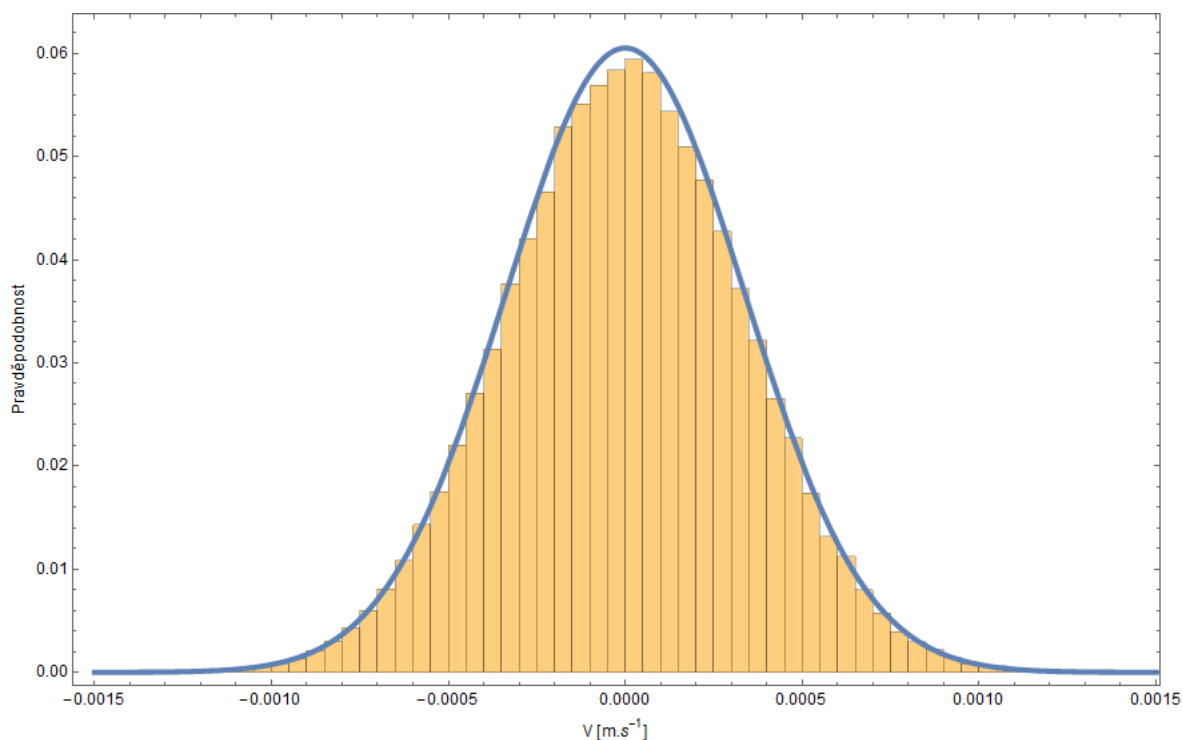
Graf 5: Porovnání průběhů analyticky vypočítaných HPVR pro sinus o amplitudě 8 μm (modře) a sinus o amplitudě 18,5 μm (oranžově).

3.1.2 Bílý šum

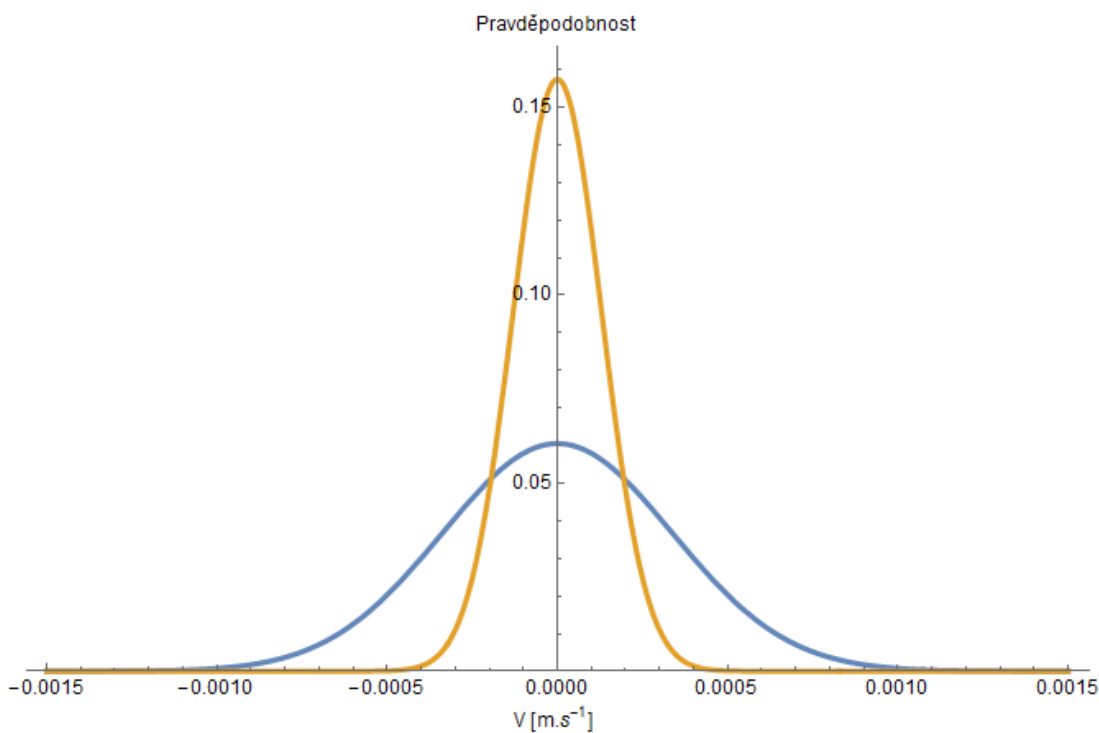
Jak již bylo řečeno, pravděpodobnostní distribuci vibračních rychlostí budeme přisuzovat normální Gaussovské rozdělení. K tomuto účelu jsme v programu Mathematica zvolili výpočetní funkci `NormalDistribution[μ , σ]`. V následujících grafech uvádíme HPVR pro šумы s parametry experimentů W00057 a W00083.



Graf 6: HPVR bílého šumu podle parametrů experimentu W00057 (modře) s histogramem diskrétní interpretace. Bílému šumu přisuzujeme normální distribuci o $\sigma = 0,00013 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.



Graf 7: HPVR bílého šumu podle parametrů experimentu W00083 (modře) s histogramem diskrétní interpretace. Bílému šumu přisuzujeme normální distribuci o $\sigma = 0,000338 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

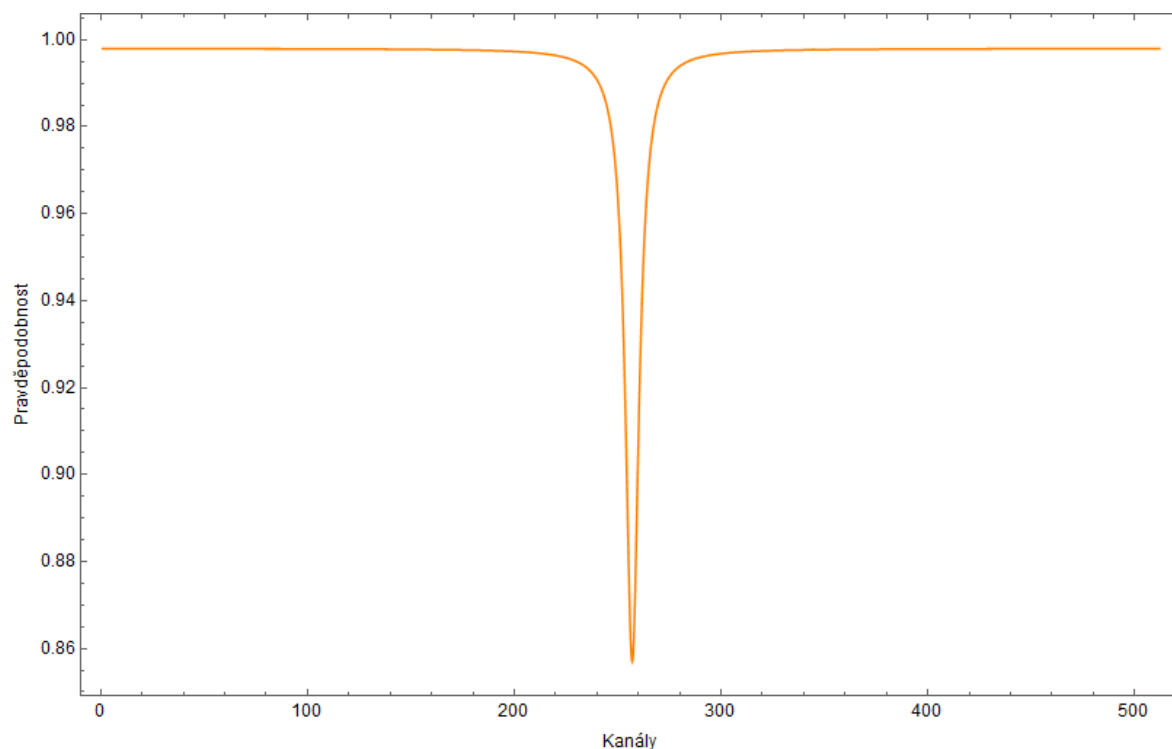


Graf 8: Porovnání analytických průběhů HPVR pro šum o amplitudě 18,5 μm (modře) a šum o amplitudě 5 μm (oranžově).

3.2 Průběhy zatížených spekter

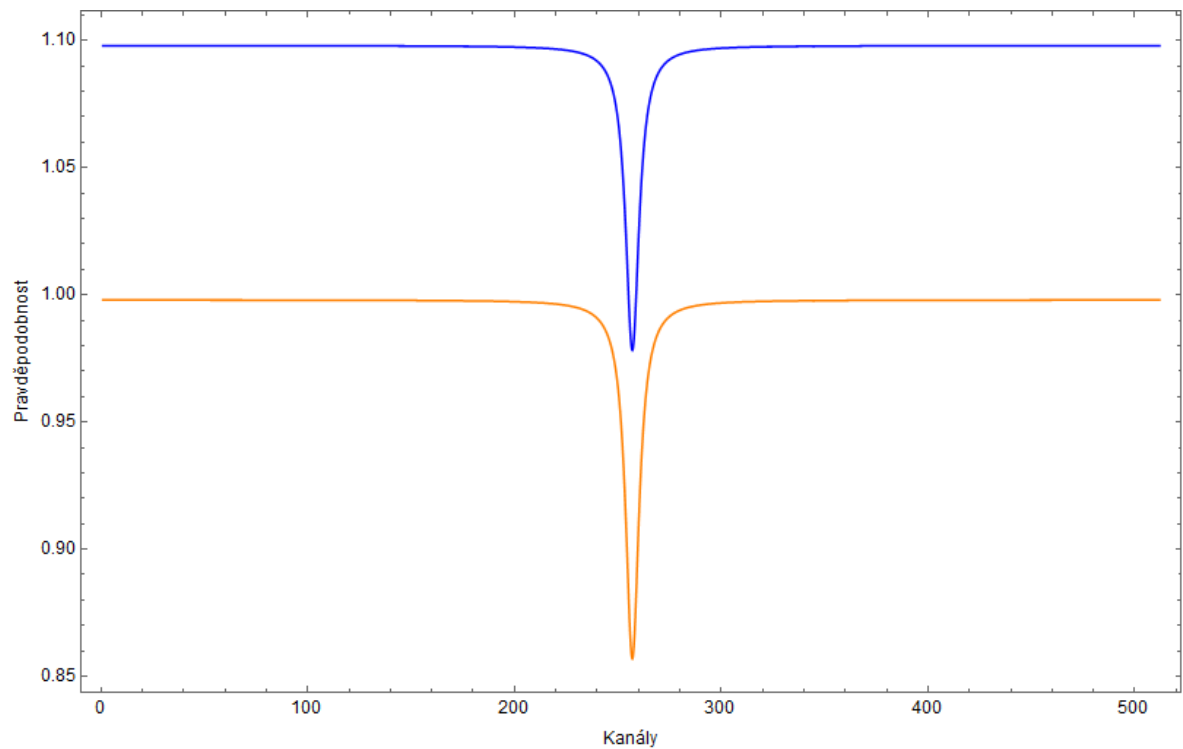
3.2.1 Teoreticky ideálně nezatížené spektrum

V programu Wolfram Mathematica jsme si vytvořili teoretický průběh Mössbauerova spektra tak, aby tvarem odpovídal vztahu (7). Transmisní minimum tohoto spektra jsme zkorigovali s intenzitou v referenčním měření W00095

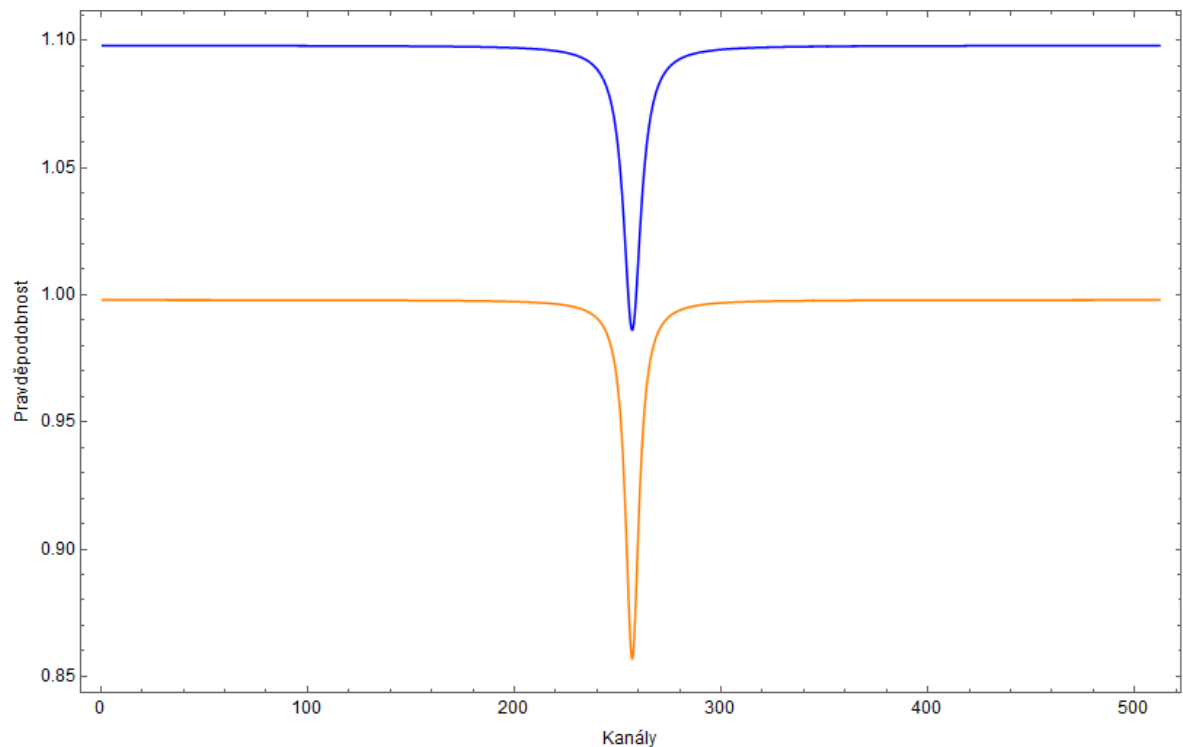


Graf 9: Simulované ideální spektrum mající tvar podle funkce (7), jehož intenzitu korigujeme tak, aby odpovídala kalibračnímu spektru v experimentu W00095.

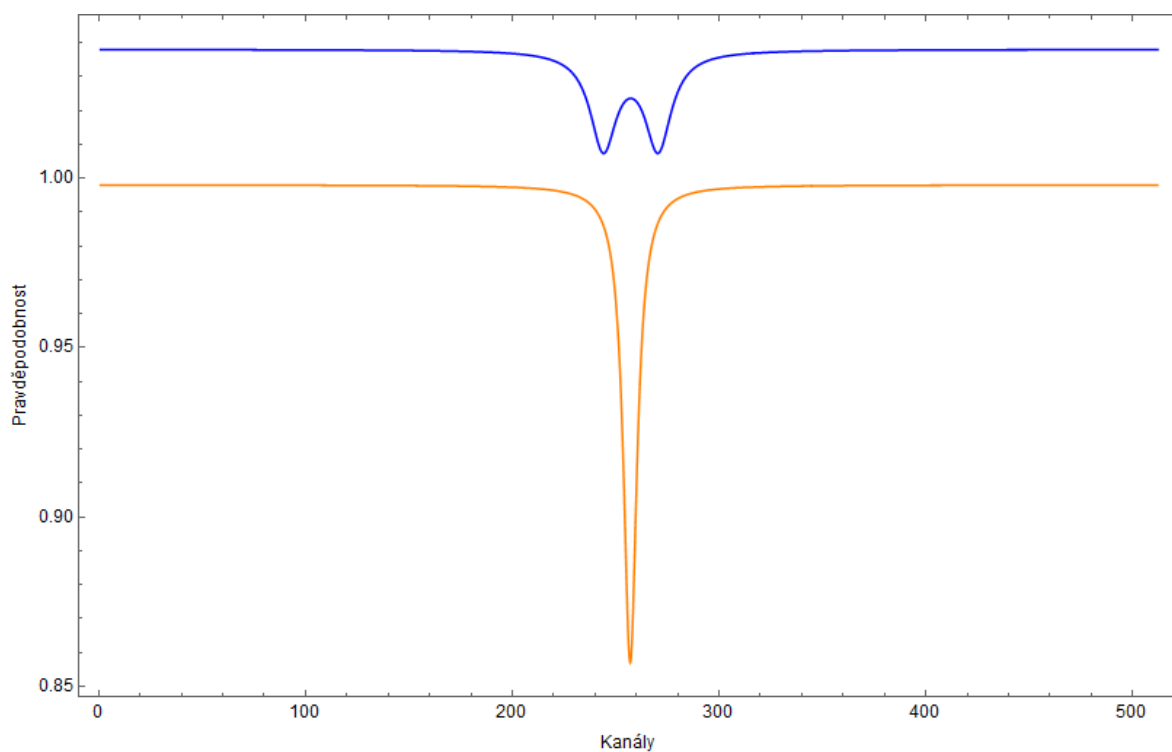
3.2.2 Dílčí zatížená spektra



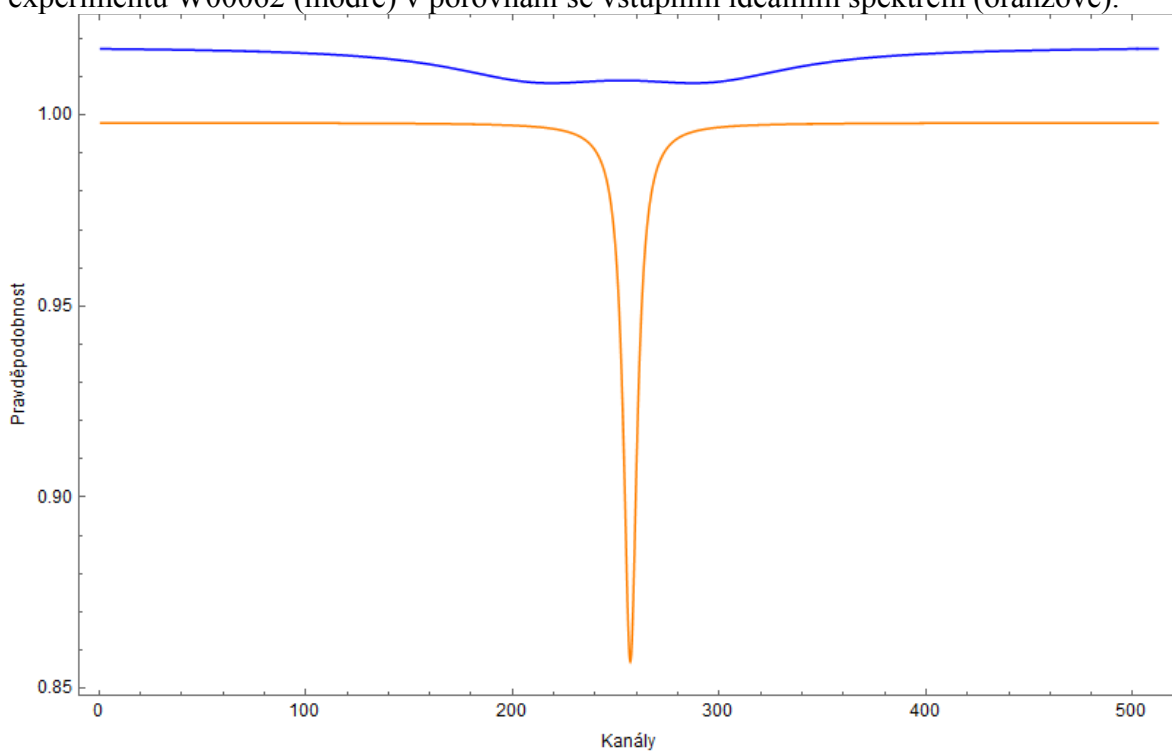
Graf 10: Deformované spektrum pomocí HPVR šumu podle parametrů experimentu W00057 (modře) v porovnání se vstupním ideálním spektrem (oranžově).



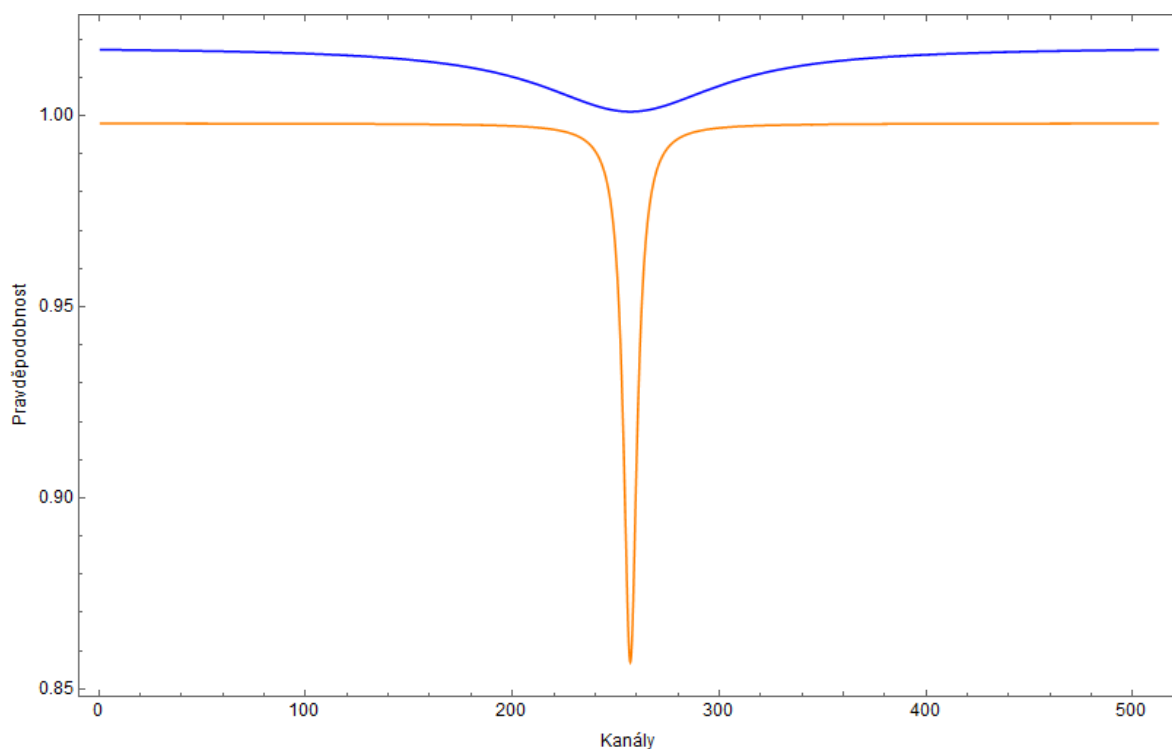
Graf 11: Deformované spektrum pomocí HPVR jednoduchého sinu podle parametrů experimentu W00058 (modře) v porovnání se vstupním ideálním spektrem (oranžově).



Graf 12: Deformované spektrum pomocí HPVR jednoduchého sinu podle parametrů experimentu W00062 (modře) v porovnání se vstupním ideálním spektrem (oranžově).



Graf 13: Deformované spektrum pomocí HPVR superpozice dvou sinů podle parametrů experimentu W00081 (modře) v porovnání se vstupním ideálním spektrem (oranžově).



Graf 14: Deformované spektrum pomocí HPVR šumu podle parametrů experimentu W00083 (modře) v porovnání se vstupním ideálním spektrem (oranžově).

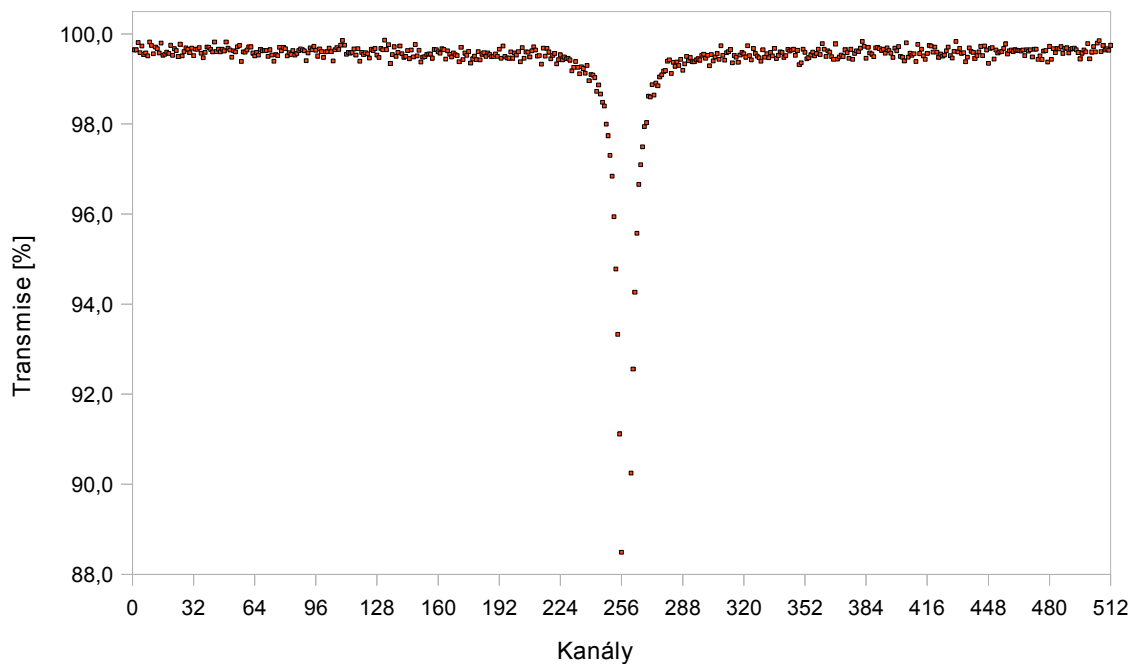
Se znalostí analytických průběhů HPVR, které jsme vyhodnocovali v kapitole 3.1, jsme provedli jejich konvoluce s teoretickým nezatíženým spektrem (graf 9). Výstupem tohoto procesu byly spektra mající širší spektrální čáry a kvůli tomu i menší transmisní minima. Můžeme vypočítat, že s rostoucí šířkou distribuce vibračních rychlostí roste i šířka deformované spektrální čáry. V případech, kdy jsou v průběhu HPVR upřednostňovány dvě rychlosti (sinové vibrace), můžeme dokonce sledovat vznik dvou transmisních píků na původně singletním systému. Tvar hustoty pravděpodobnosti vibračních rychlostí tedy přímo koresponduje s tvarem výsledného spektra.

4. Naměřená spektra kalibračního vzorku

V této kapitole uvádíme naměřená spektra z experimentů uvedených v tabulce 1. Vibračně zatížená spektra v grafech porovnáváme se vstupním nezatíženým spektrem. Pokud je transmisní intenzita některého ze zatížených spekter velmi malá v porovnání se vstupním spektrem, budeme tato spektra uvádět také samostatně pro lepší názornost tvaru.

4.1 Nezatížené vstupní spektrum

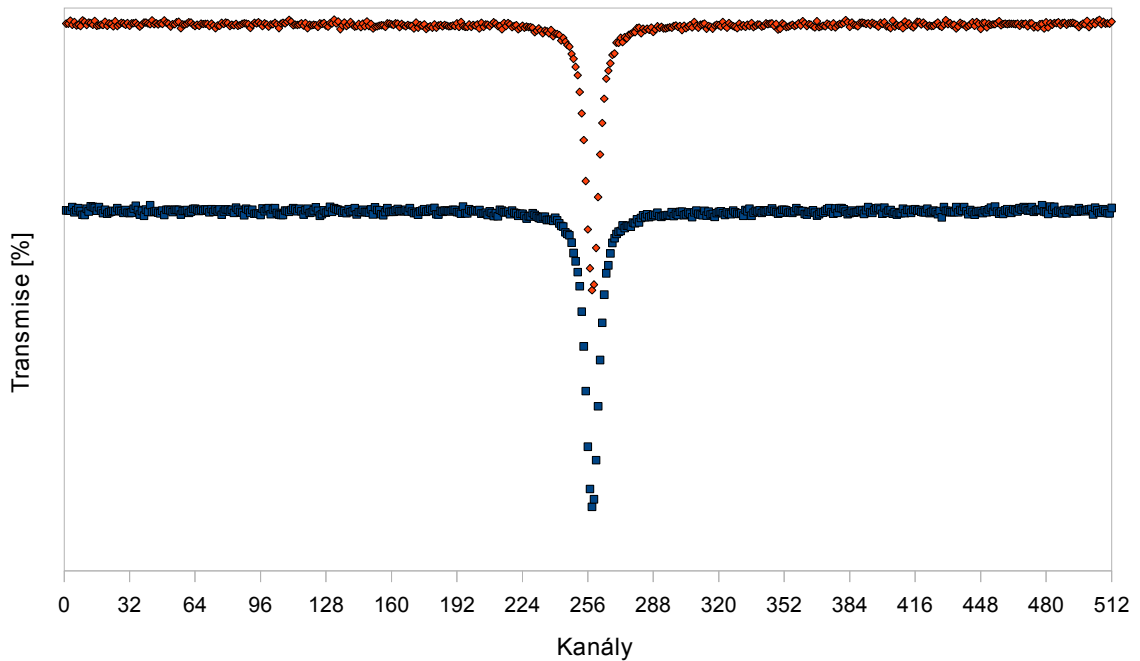
Abychom mohli pozorovat vliv vibrací na tvar spekter, museli jsme nejprve provést měření za pokud možno ideálně klidných podmínek. Výsledek tohoto experimentu je uveden v grafu 15 a dále nám slouží jako jistá forma kalibrace pro další experimenty.



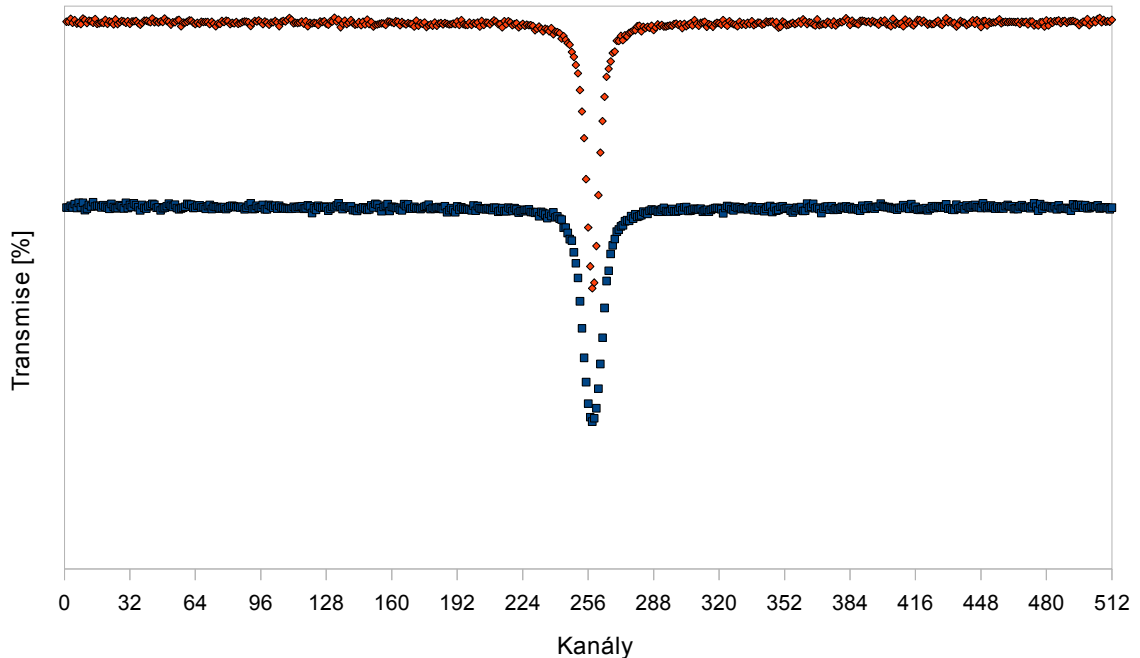
Graf 15: Výsledek experimentu W00095 při nezatížené soustavě.

4.2 Vibračně modulovaná spektra

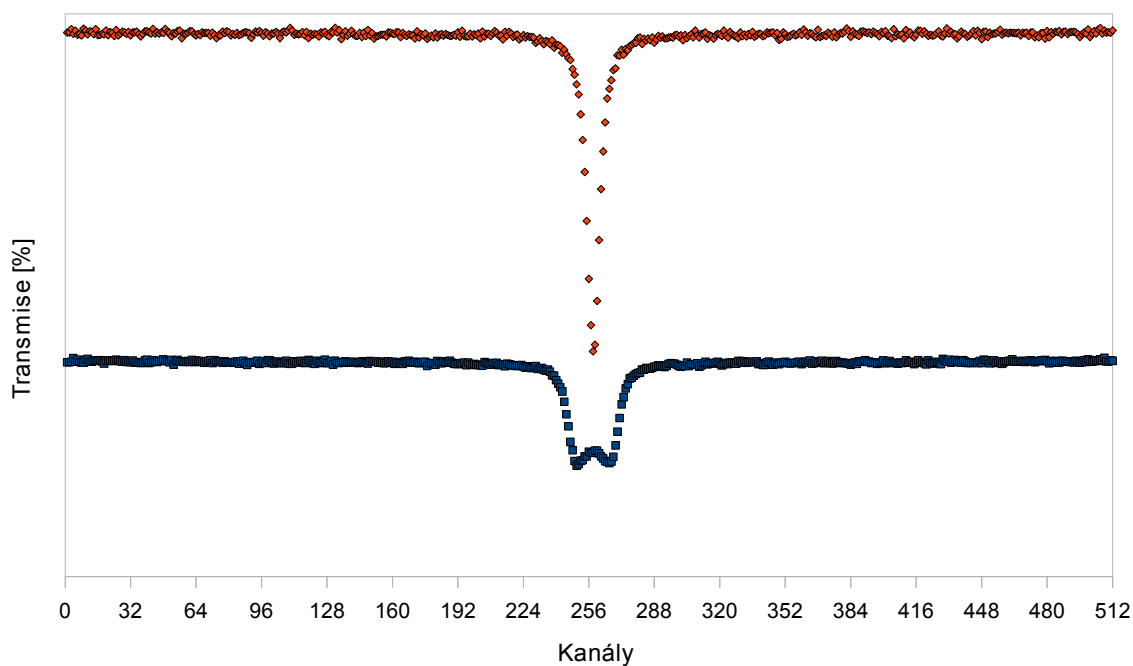
Výsledky modulačních experimentů porovnáváme se vstupním spektrem uvedeným v kapitole 4.1. Parametry měřicích soustav odpovídají údajům uvedeným v tabulce 1 v kapitole 2.4.



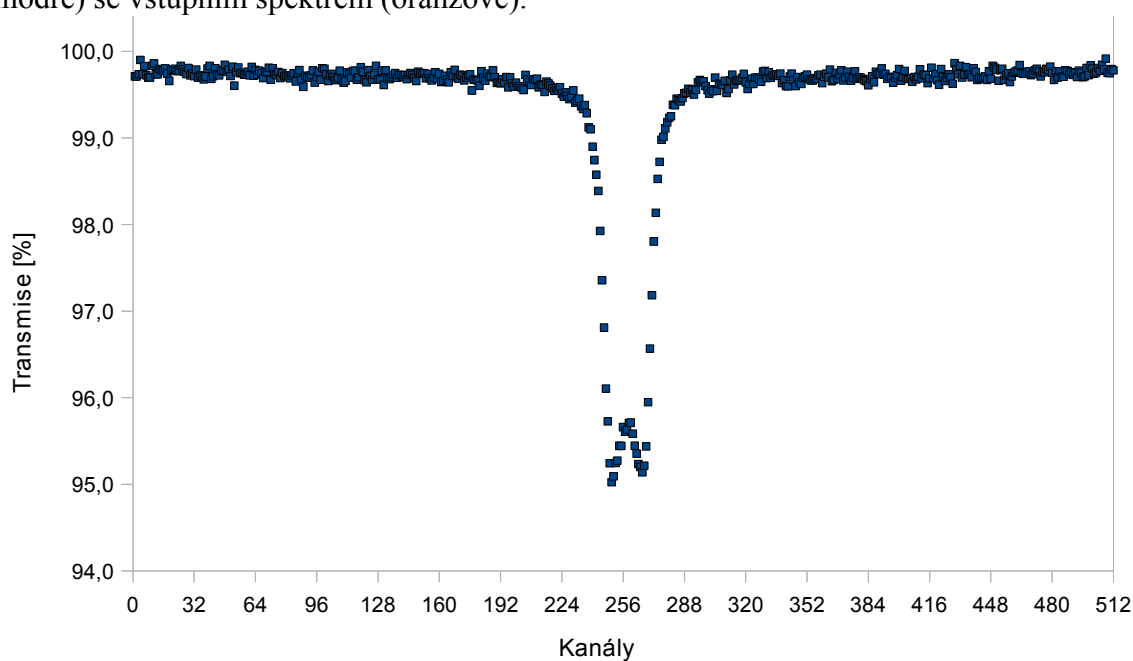
Graf 16: Porovnání experimentu W00057 se šumovou modulací o amplitudě 5 μm (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



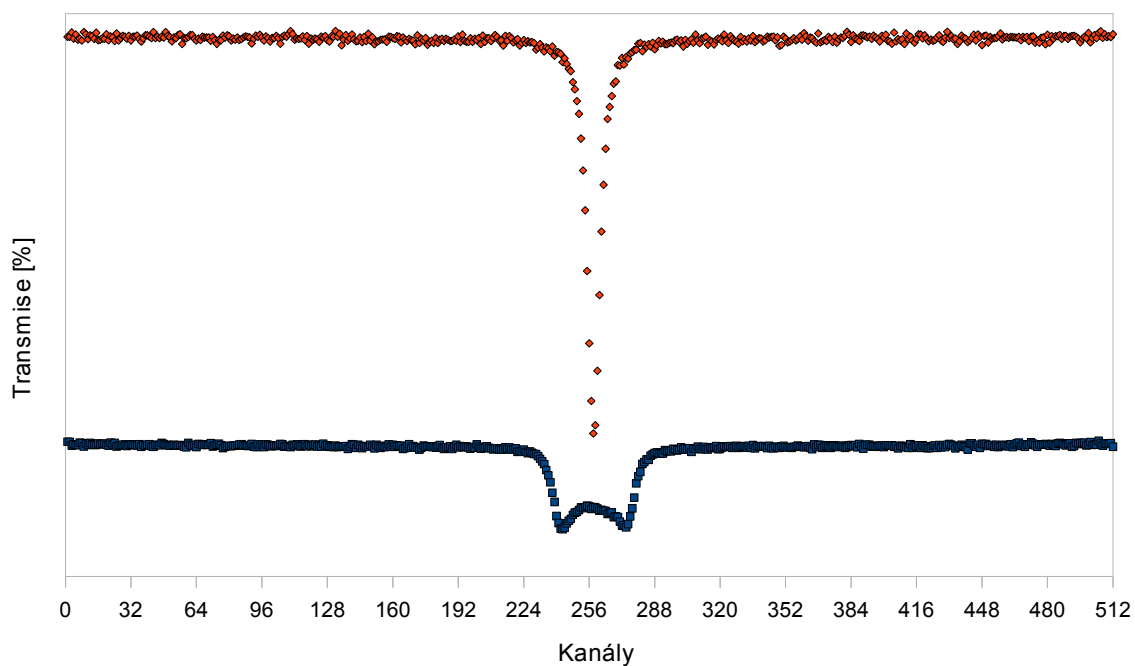
Graf 17: Porovnání experimentu W00058 se sinovou modulací o amplitudě 8 μm (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



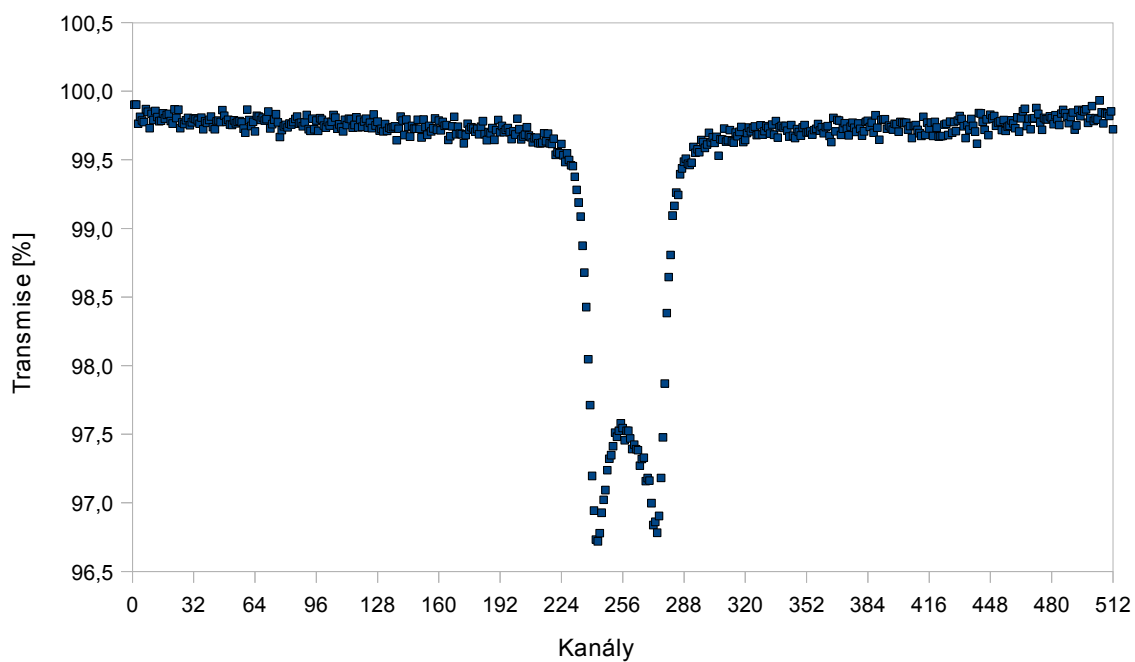
Graf 18: Porovnání experimentu W00060 se sinovou modulací o amplitudě $12\ \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



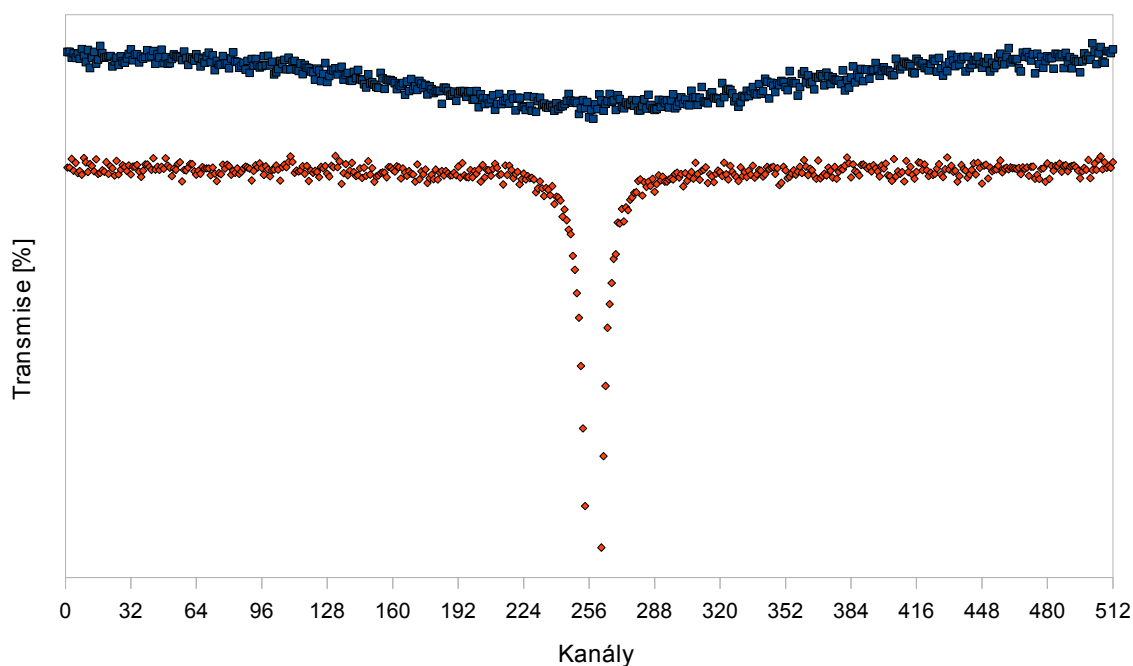
Graf 19: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00060 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



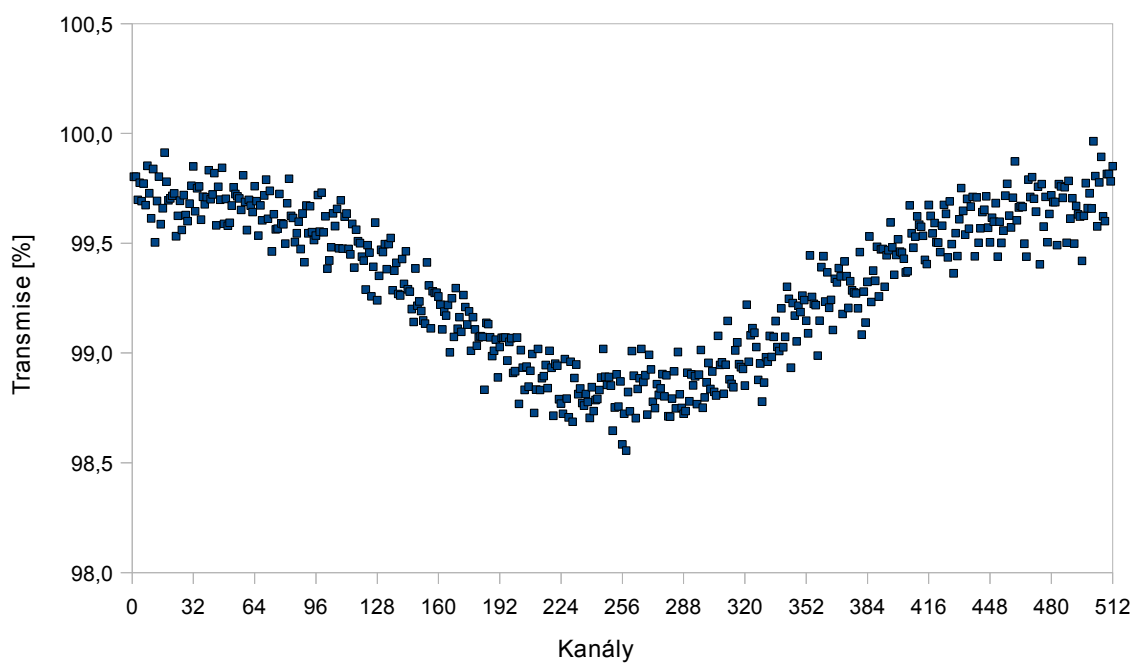
Graf 20: Porovnání experimentu W00062 se sinovou modulací o amplitudě $18,5 \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



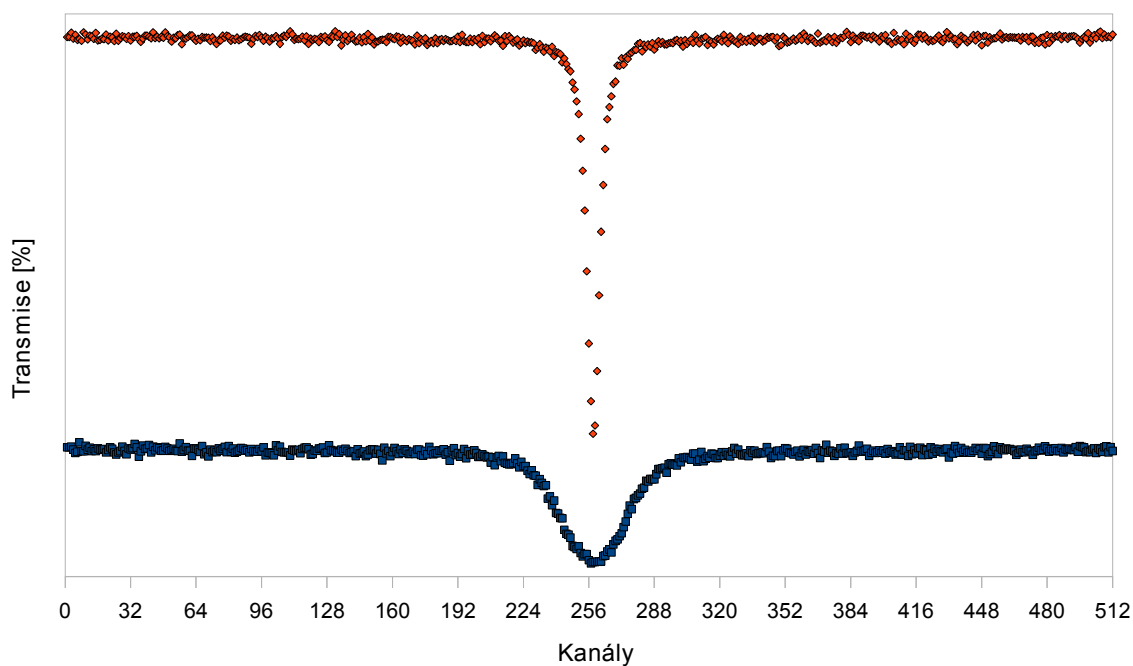
Graf 21: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00062 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



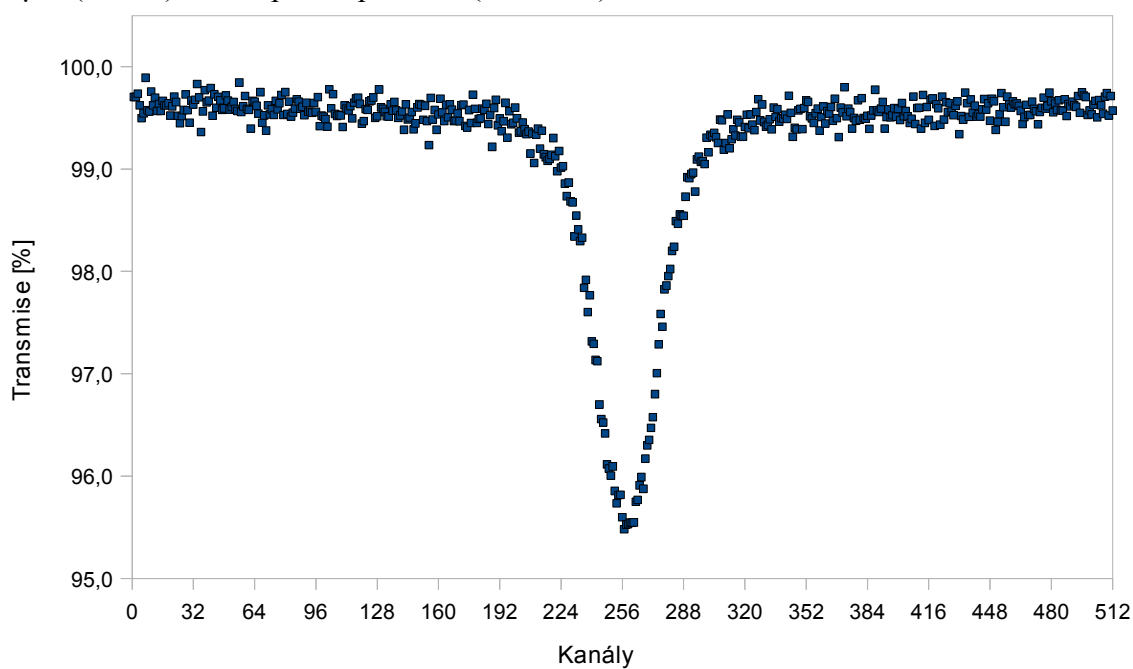
Graf 22: Porovnání experimentu W00081 s modulací dvou sinů o celkové amplitudě 30 μm (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



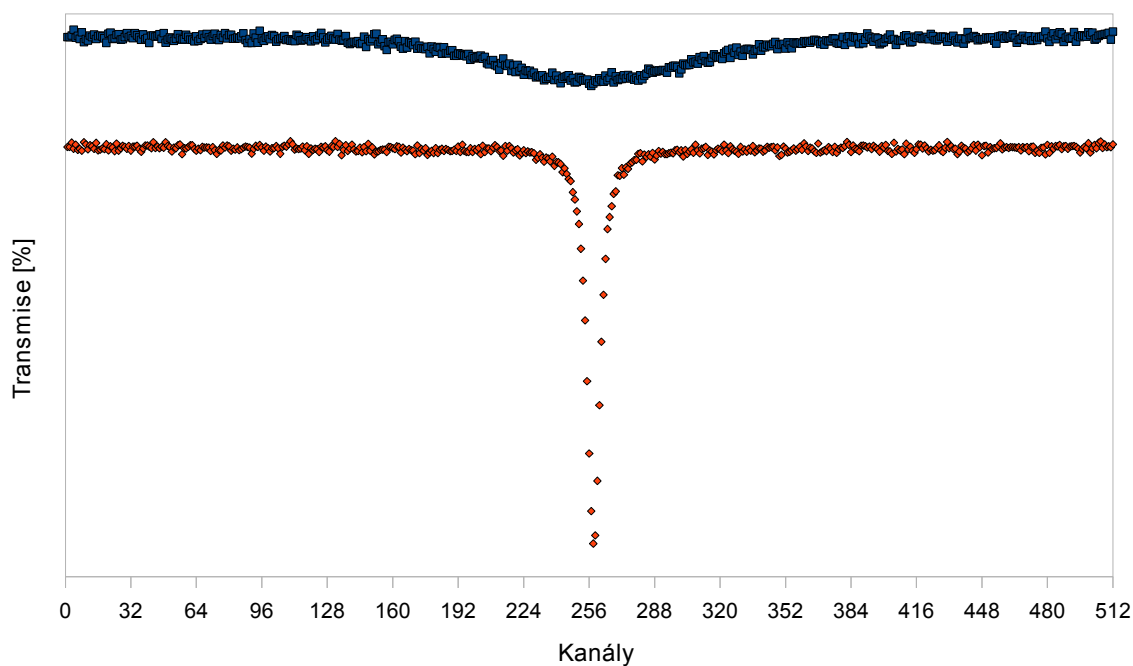
Graf 23: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00081 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



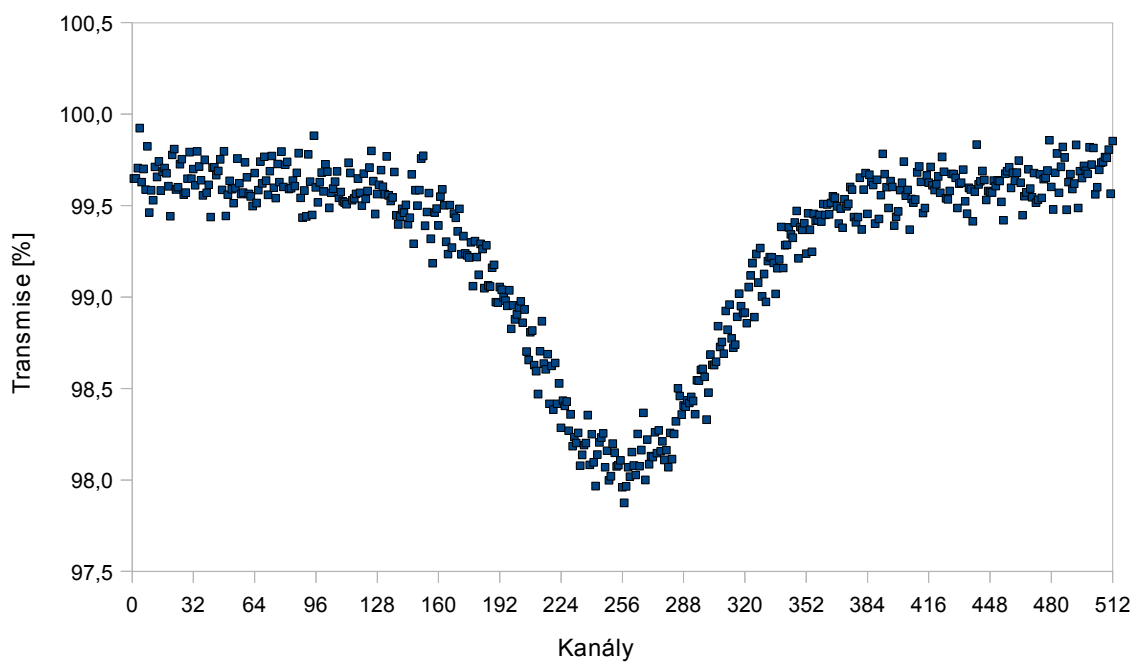
Graf 24: Porovnání experimentu W00082 s modulací dvou sinů o celkové amplitudě 16 μm (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



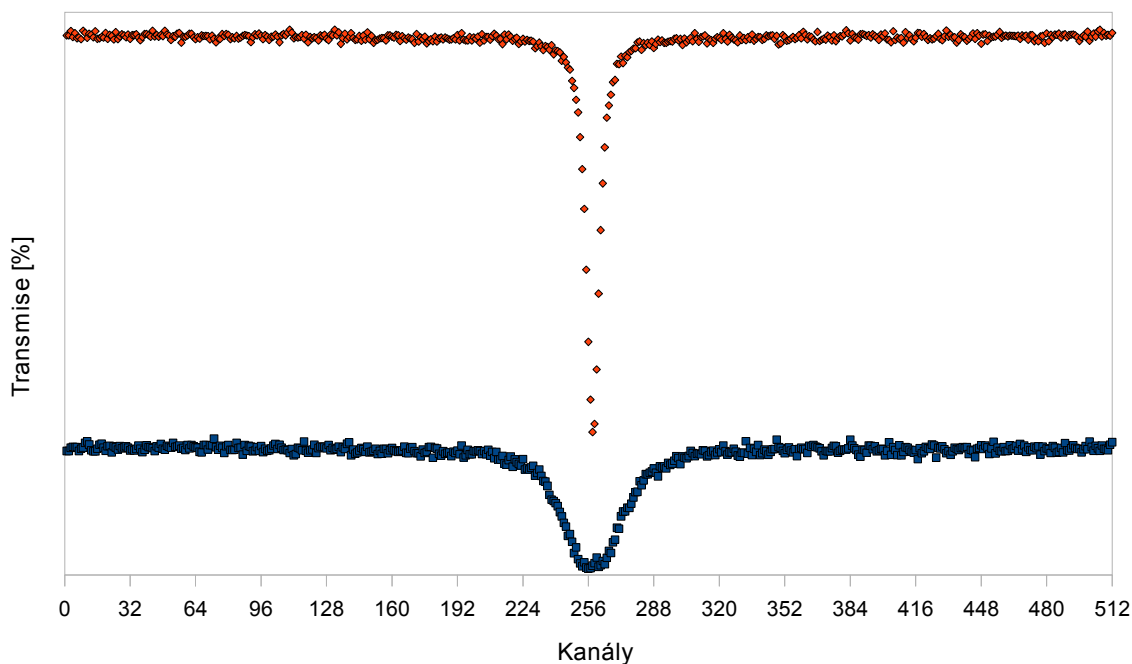
Graf 25: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00082 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



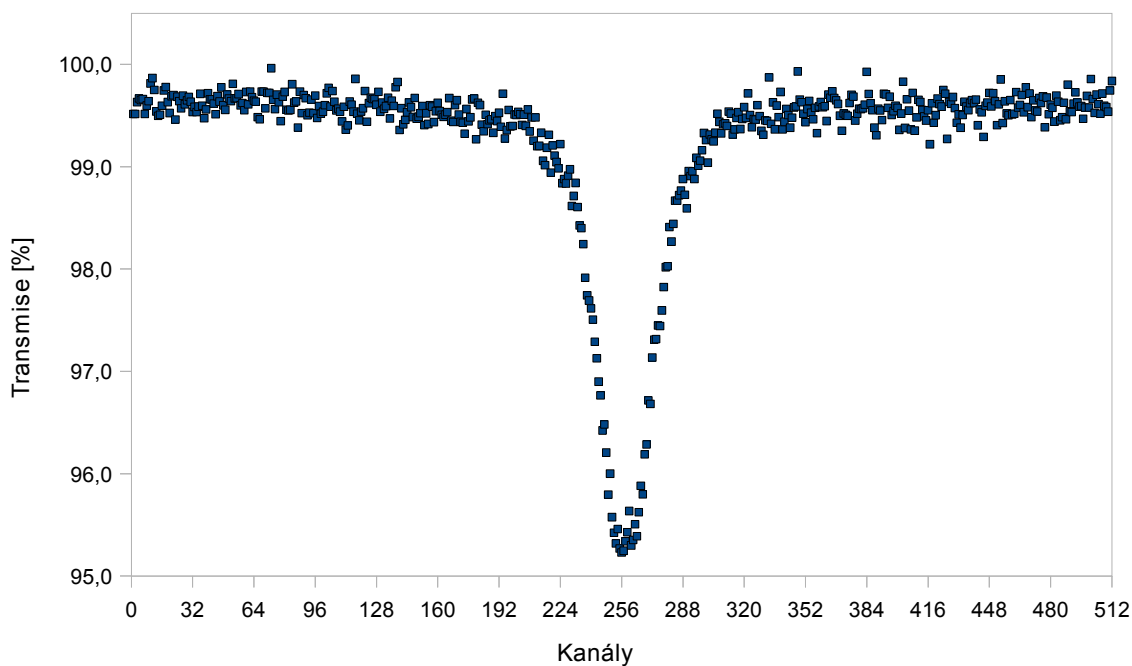
Graf 26: Porovnání experimentu W00083 se šumovou modulací o amplitudě $13 \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



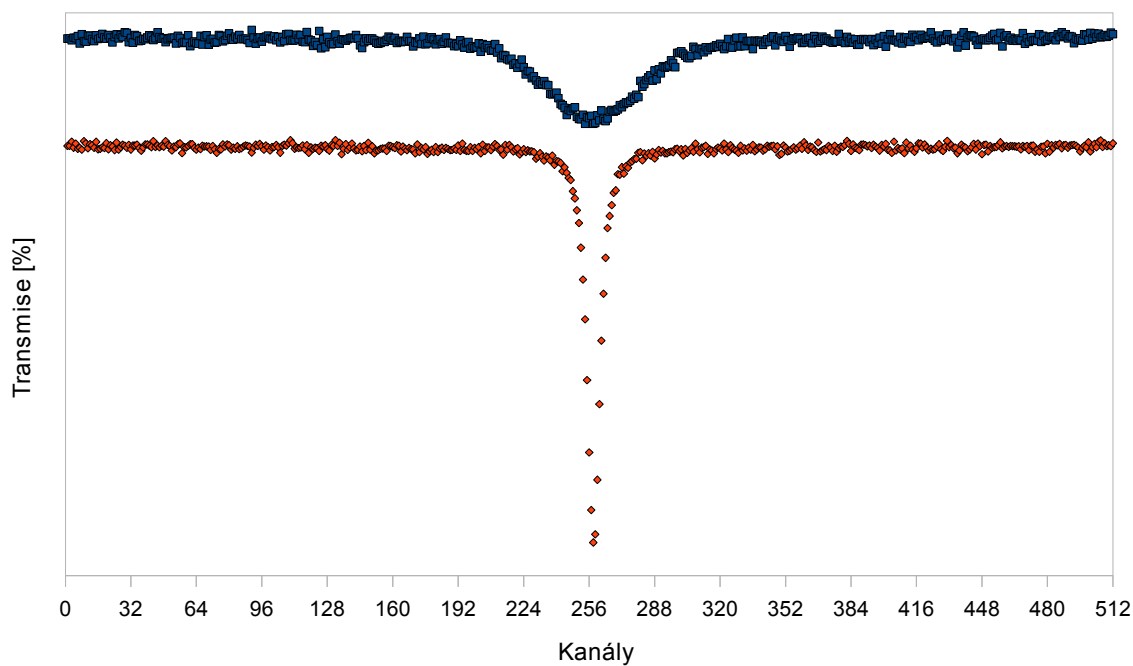
Graf 27: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00083 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



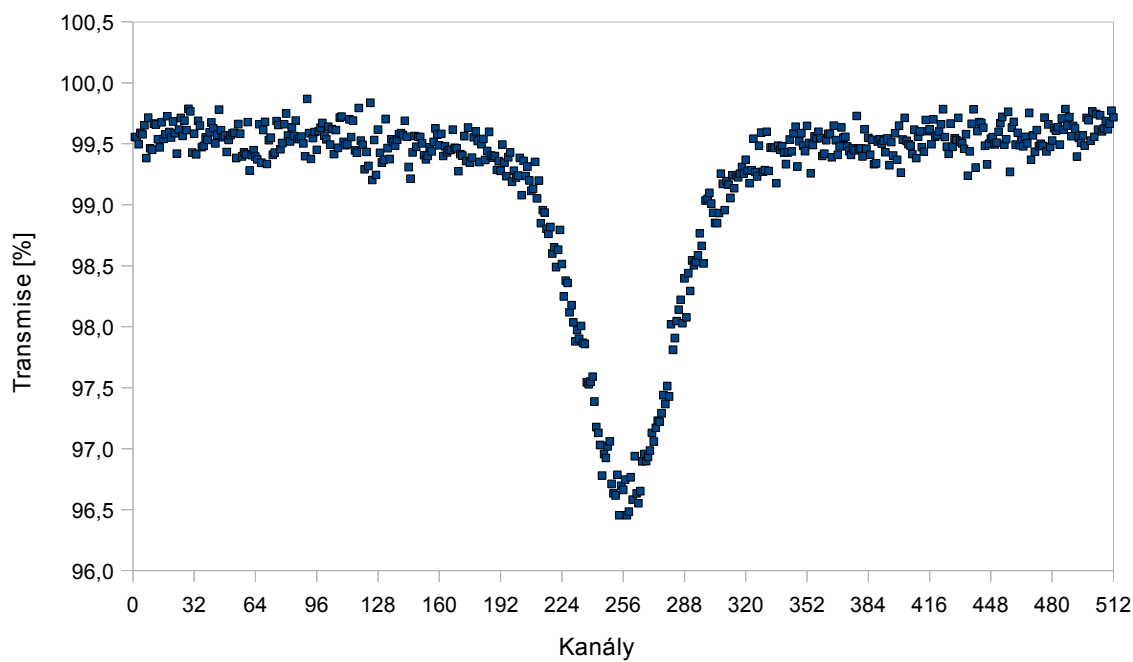
Graf 28: Porovnání experimentu W00084 se sinovou modulací o amplitudě $12\ \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



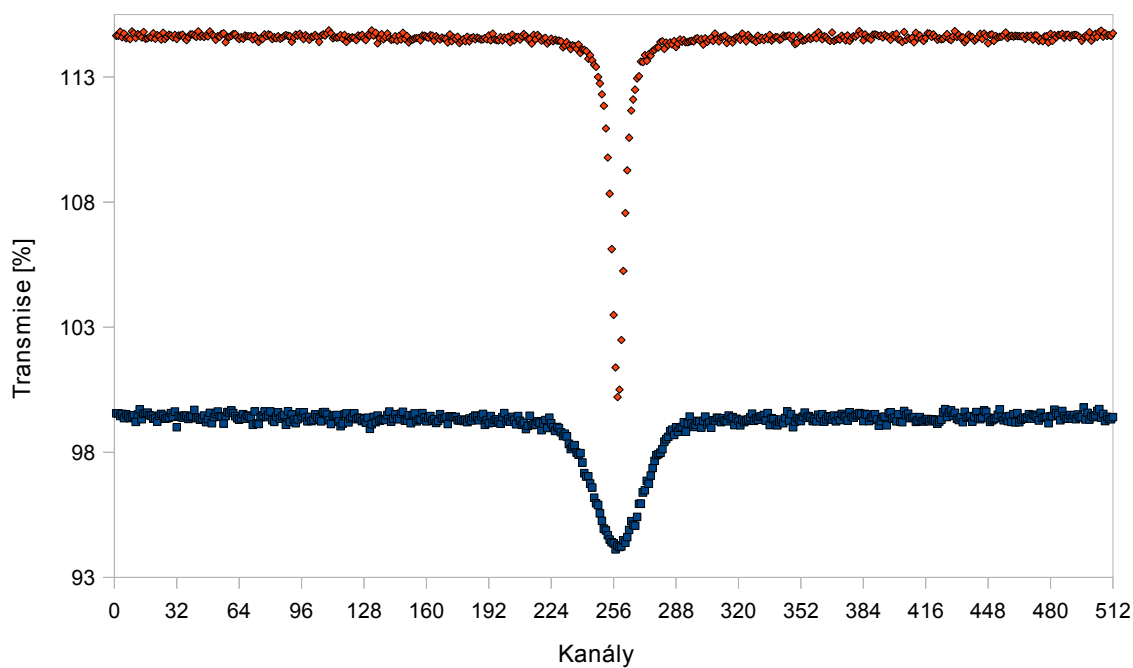
Graf 29: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00084 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



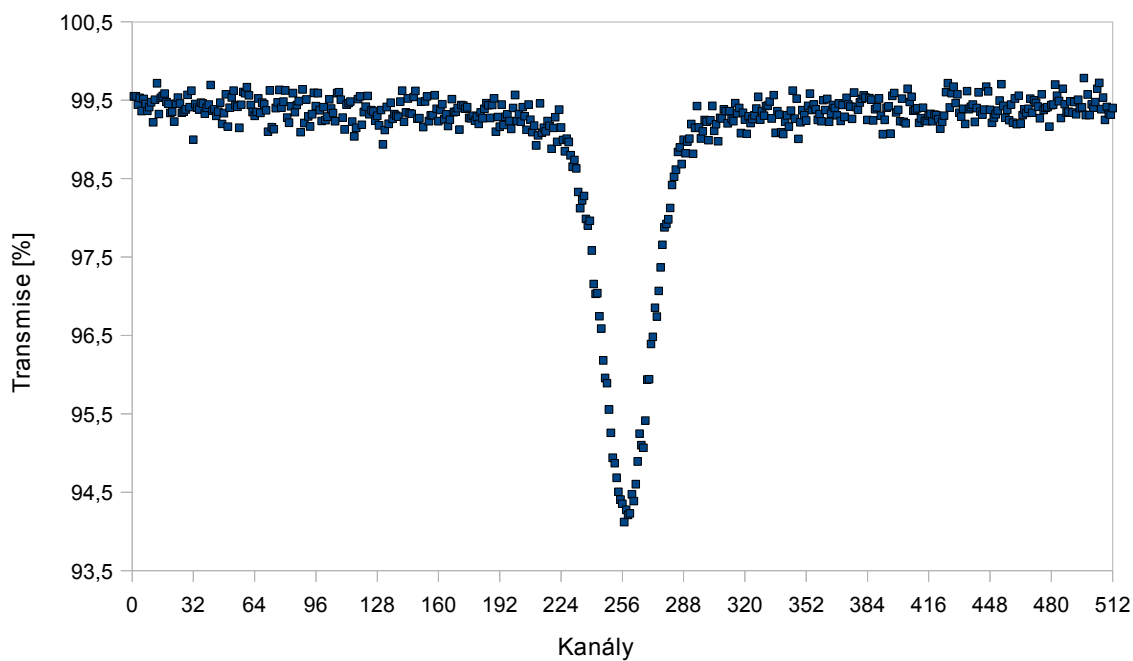
Graf 30: Porovnání experimentu W00086 se šumovou modulací o amplitudě $10\ \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



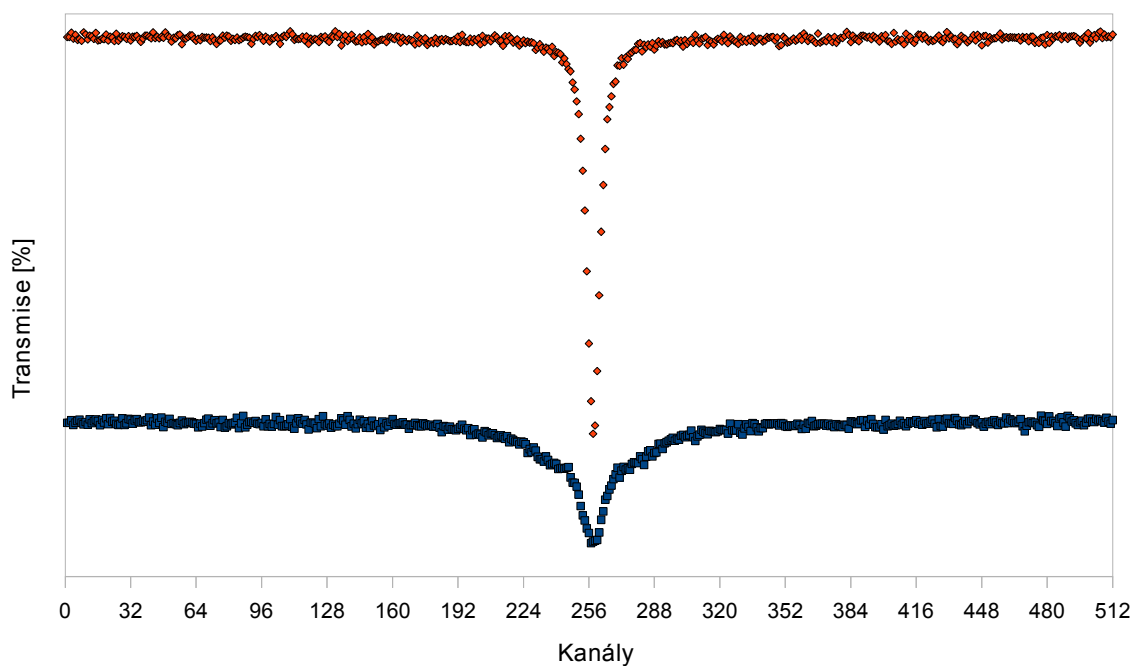
Graf 31: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00086 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



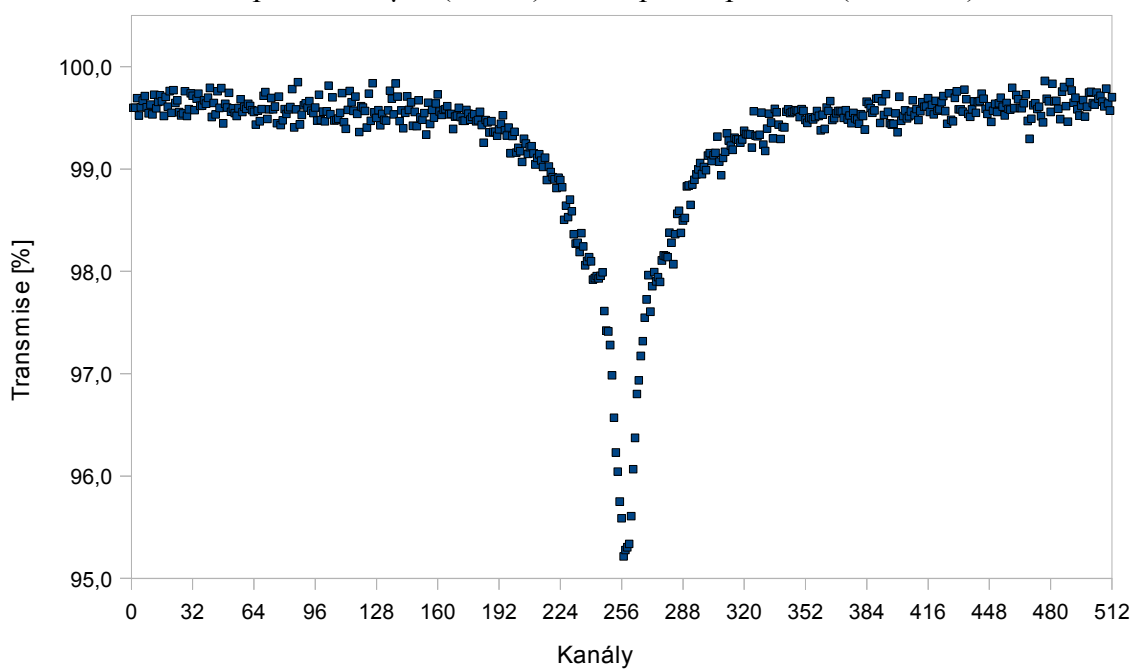
Graf 32: Porovnání experimentu W00087 se šumovou modulací o amplitudě $7,5 \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



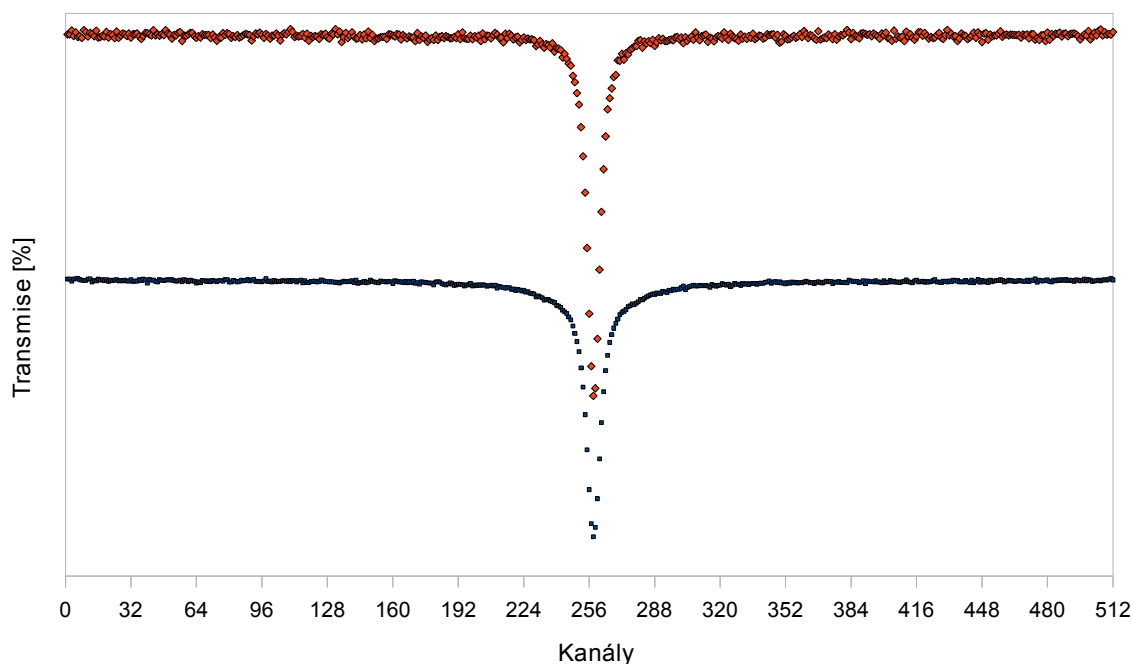
Graf 33: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00087 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



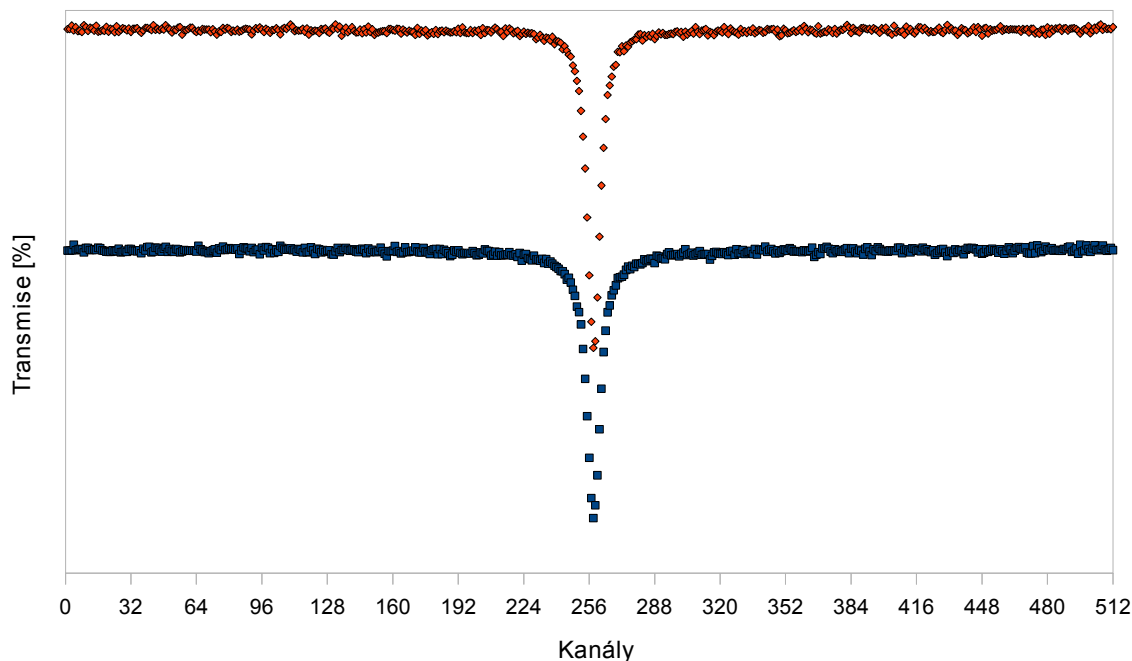
Graf 34: Porovnání experimentu W00092 s obdélníkovou modulací kombinovanou se šumem o celkové amplitudě $13 \mu\text{m}$ (modře) se vstupním spektrem (oranžově).



Graf 35: Samostatně uvedené spektrum experimentu W00092 pro lepší ukázkou tvaru a relativních intenzit.



Graf 36: Porovnání experimentu W00093 s obdélníkovou modulací o amplitudě $10 \mu\text{m}$ a frekvenci 2 Hz (modře) se vstupním spektrem (oranžově).

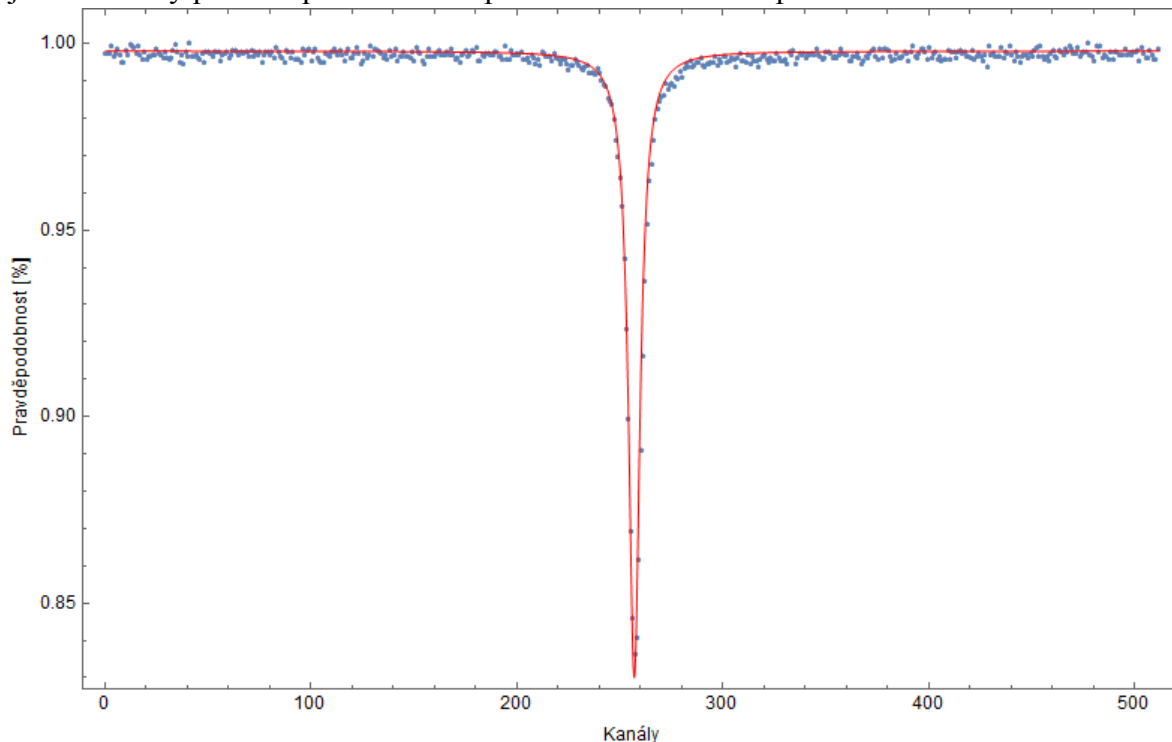


Graf 37: Porovnání experimentu W00094 s obdélníkovou modulací o amplitudě $13 \mu\text{m}$ a frekvenci 1 Hz (modře) se vstupním spektrem (oranžově).

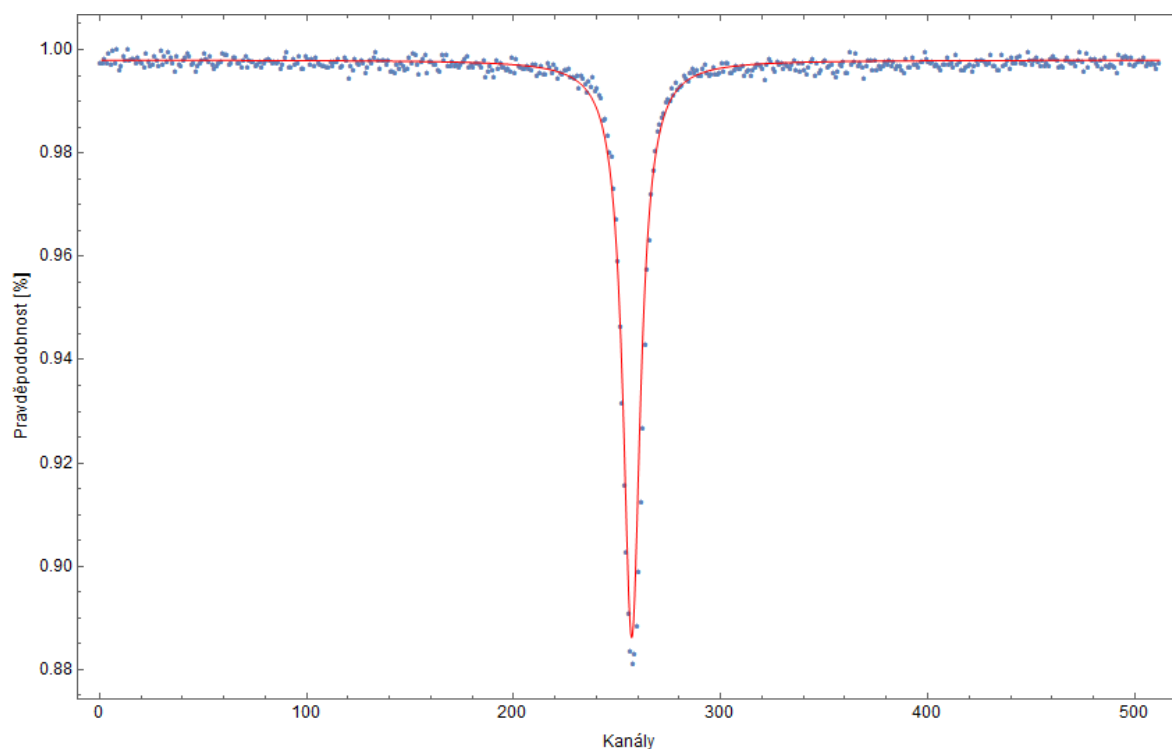
Vzorek v měřící sestavě Mössbauerova spektrometru jsme cíleně zatěžovali mechanickými vibracemi rozličných parametrů. Při porovnání s referenčním nezatíženým spektrem (graf 15) můžeme sledovat, že tento proces způsobuje distorze spekter – rozšíření a „štěpení“ spektrálních čár. V experimentech, kde byly mechanické vibrace opravdu významné, došlo k natolik velkému rozšíření čar, že v porovnání s referenčním spektrem není téměř možné rozlišit původní absorpční pík od nerezonančních stavů. Z těchto důvodů jsme tato deformovaná spektra uvedli v samostatných grafech, abychom mohli pozorovat tvar jejich distorzí. Nejistota relativní modulační rychlosti je tedy významným činitelem zhoršení čitelnosti spekter.

4.3 Míra shody teoretického modelu s reálným experimentem

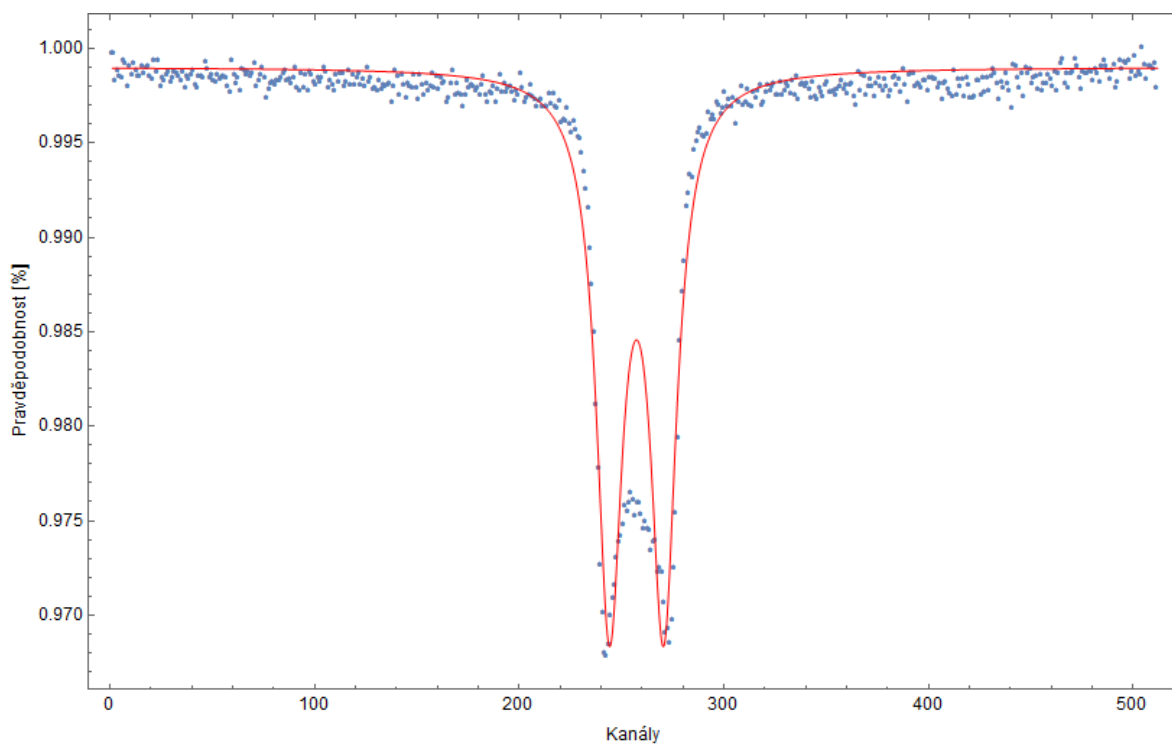
Pro stanovení míry, na kolik se nám teoreticky vymodelovaná deformovaná spektra shodují s reálným experimentem, uvádíme grafy, které obsahují průběhy z experimentální části 3.2 i výsledky měření z kapitoly 4.1. Porovnání provádíme jen pro případy, kde máme jak teoretický průběh spektra tak i experimentálně získaná spektra.



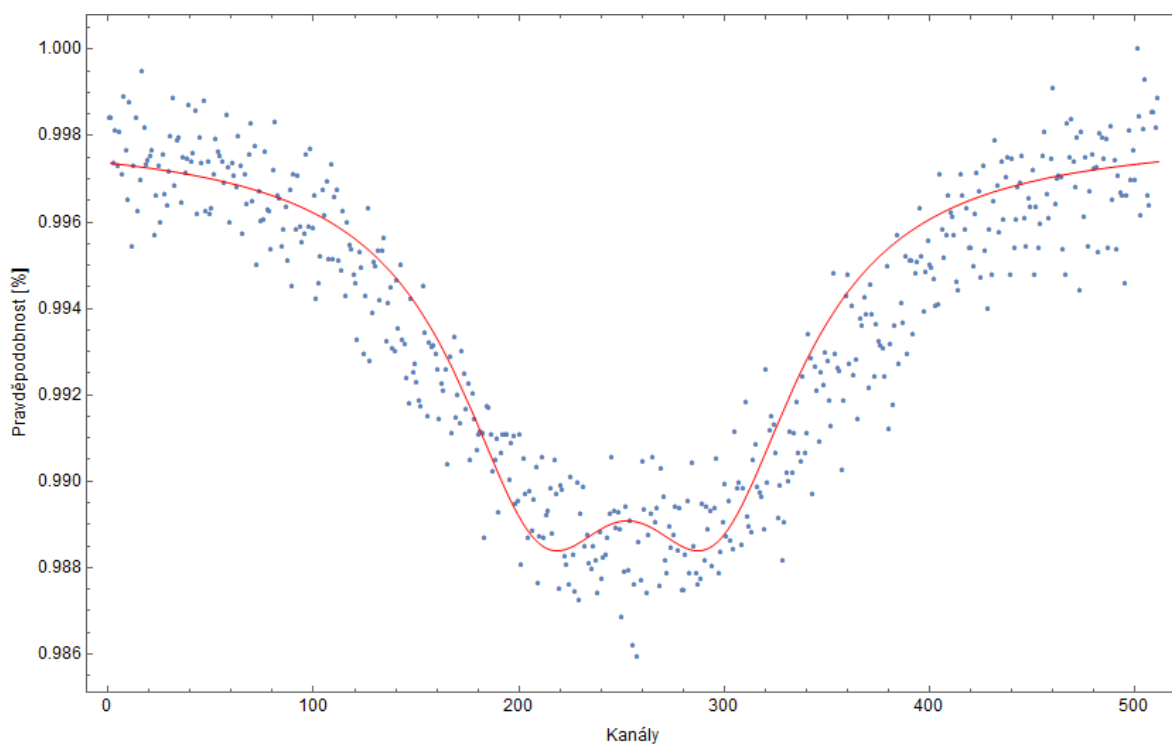
Graf 38: Porovnání výsledků experimentu W00057 s jeho teoretickým modelem.



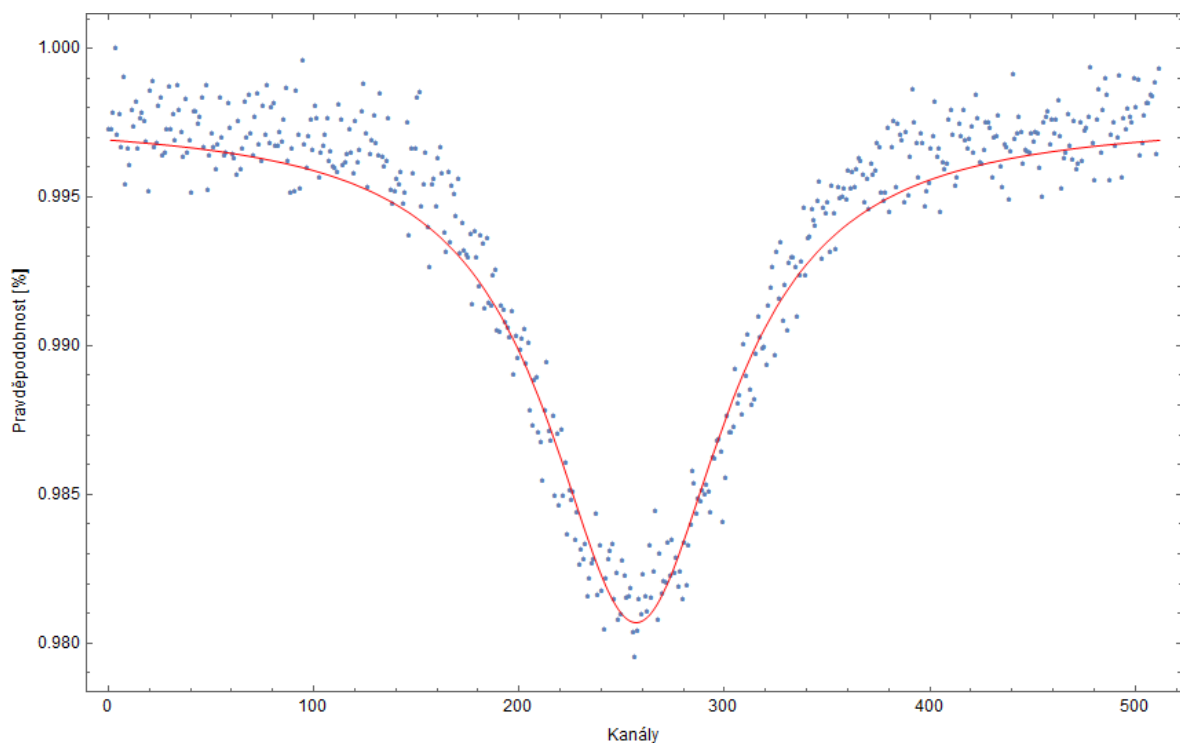
Graf 39: Porovnání výsledků experimentu W00058 s jeho teoretickým modelem.



Graf 40: Porovnání výsledků experimentu W0062 s jeho teoretickým modelem.



Graf 41: Porovnání výsledků experimentu W0081 s jeho teoretickým modelem.



Graf 42: Porovnání výsledků experimentu W00083 s jeho teoretickým modelem.

V případech, kde jsme měli teoreticky modelovaná spektra i experimentální měření, jsme provedli porovnání výsledků. Na grafech 38 až 42 můžeme vidět, že se nám teoretický model ve velké míře shoduje s naměřenými daty. Pro šumové modulace je tato shoda největší, jelikož jejich HPVR má úzkou distribuci a jasně definovaný analytický předpis. V případě modulace superpozicí dvou sinů nám model částečně selhal a v jistých částech spektra se neshodoval s experimentálními výsledky. Tato chyba mohla být pravděpodobně způsobena chybným průběhem HPVR, která následně vytvářela špatnou konvoluci. Ovšem v ostatních případech, kde nám průběh HPVR odpovídal diskrétní interpretaci vibračních pravděpodobností, jsme dosáhli dobré shody modelu s experimentem.

5. Odstranění negativních modulačních procesů v reálných spektrech

Při používání teoretického modelu pro tvorbu simulovaných spekter jsme dosáhli relativně uspokojivého výsledku. Průběhy spekter odpovídají tvaru experimentálně zjištěných výsledků. Pokud máme tedy známý a jednoduchý systém, který úmyslně zatěžujeme zaváděním vibrací na vzorek, jsme teoreticky schopni předpovědět velikost distorze spektra. Nicméně opačný proces, kdy se snažíme rozluštit zatížené spektrum neznámých parametrů za předpokladu, že známe charakter vnášených chyb, je o poznání komplikovanější. Pro potřeby modelu (26) je třeba znát Fourierovu transformaci analyticky popsaného průběhu spektra. Zde ovšem narážíme na problém jak dostatečně spolehlivě popsat charakter modulačně zkresleného spektra pomocí jednoznačně definované funkce. Zmíněný postup jsme se snažili aplikovat v programu Wolfram Mathematica 10.0, ale zjištěný výsledek tohoto numerického procesu nebylo možné interpretovat. V případech, kdy jsme dosáhli analytického výsledku, měla zjištěná funkce $M(V)$ průběh neodpovídající představám Mössbauerova spektra. V ostatních případech program nedokázal ke zmíněnému výsledku ani dospět. Z tohoto důvodu se touto problematikou nebudeme zabývat, jelikož jsme nedokázali vytvořit spolehlivý výpočetní model pro řešení problému (28). Možnou teoretickou cestou pro dosažení spolehlivé přesnosti při obnově zatíženého spektra je přechod k diskretním veličinám. Při využití diskretní Fourierovy transformace bychom mohli přímo nakládat s daty Mössbauerova spektra, které má diskretní formu, a s daty diskretního měření vibračních rychlostí. Řešení této problematiky by mohlo být cílem navazující práce.

6. Závěr

Cílem této práce bylo posoudit vliv nežádoucích vibrací vzorku na parametry a obecný tvar spektra ve standardní transmisní geometrii měření Mössbauerova spektra. Experimenty měly za cíl simulovat situaci, kdy vzorek není v relativním klidu, ale je zatěžován zanesenými vibracemi z okolí, například z kryogenních soustav nebo běžné činnosti v okolí měřící soustavy. Proto jsme se snažili vytvořit nejen vhodnou měřící soustavu, kde bychom mohli provádět experimenty s daným typem zatížení, ale i teoretický matematický model s cílem popsat vzniklé chyby a distorze.

V úvodu práce jsme popsali fyzikální jevy, které provázejí jev rezonanční emisní absorpce gamma-záření a provedli jeho rozšíření za využití Dopplerova jevu. Takto vytvořený funkční model jsme následně modifikovali o skutečnost, kdy se nepohybuje jen zářič, ale i vzorek. Relativní pohyb vzorku a zářiče, který je normálně dán pouze průběhem rychlosti modulačního zařízení připojeného na zářič (obvykle režim konstantního zrychlení), jsme doplnili obecným pohybem vzorku $\alpha(t)$. Po finalizaci matematického modelu jsme dospěli k závěru, že pozorované spektrum vzniká modulací původního nezatíženého spektra a průběhem hustoty pravděpodobnosti vibračních rychlostí (HPVR). Ze zmíněného modelu jsme získali i předpis jak z průběhu modulační rychlosti získat funkci $P(V)$, která odpovídá HPVR. Na základě vytvořeného modelu jsme si připravili sadu několika experimentů s rozličnými parametry popisující vibrace. Z této množiny jsme posléze udělali omezený výběr v závislosti na tom, jakou standardní situaci u reálné měřící soustavy představují.

V první řadě jsme na základě znalostí parametrů vibračních rychlostí vytvořili jejich analytickou reprezentaci, ať už na základě modelu popsaného rovnicí (26) nebo diskretním načítáním do histogramu. V případech jednoduše popsatelných vibrací (obyčejný sinus nebo šum mající normální rozdělení vibračních rychlostí) se nám analytický model shodoval s histogramem a vhodně nám tedy popisoval situaci pro následnou modulaci se spektrem. Pokud jsme se ovšem snažili popsat složitější vibrace (obvykle mající diskretní spektrum frekvencí) pak nám model selhával a neshodoval se nám s histogramem. I tak jsme však dosáhli jisté míry shody modelu s reálnými průběhy vibrací.

Se znalostí některých HPVR jsme přistoupili k simulaci deformací spekter. Na začátku jsme si vytvořili teoretické vstupní nezatížené spektrum, jehož intenzitu jsme korelovali s intenzitou kalibračního spektra v experimentu W00095. Na zmíněném teoretickém průběhu spektra jsme následně prováděli konvoluci s hustotami pravděpodobnosti vibračních rychlostí pořízených v předchozí části práce. Přesvědčili jsme se, že model v tomto případě funguje a opravdu nám provádí deformaci spekter. Ve všech případech došlo k rozšíření spektrální čáry, v některých situacích natolik, že ohromným způsobem klesla rozlišitelnost rezonančního a nerezonančního stavu. Pro případ sinusových pohybů, nebo jejich superpozic, nám ve spektru dokonce vznikali artefakty ve tvaru dvou rozlišitelných píků. Jelikož vstupní spektrum odpovídalo singletu, je tento „štěpný“ fenomén chybovým a může vytvářet problém při snaze interpretovat naměřené výsledky.

Dále jsme provedli sadu měření, kterou jsme specifikovali v tabulce 1. Výsledky vibračně modulovaných spekter jsme porovnávali se vstupním kalibračním spektrem W00095. Na spektrech získaných z experimentů jsme mohli pozorovat zvětšující se šířku spektrálních čar v případě rostoucí nejistoty vibračních rychlostí. V některých případech bylo rozmazání spektra natolik velké, že nebylo možné jednoznačně určit rezonanční

energii – pokles intenzity rezonančního píku byl natolik velký, že se stal nerozlišitelný od nerezonančních stavů. Pro tyto případy jsme modulačně zatížené spektrum vykreslili zvlášť, abychom získali představu o obecném tvaru spektra, které v případě vibrační modulace se dvěma preferovanými rychlostmi obsahuje artefakty ve formě dvou spektrálních píků. Ze spekter lze tedy pozorovat přímý vliv vibrací.

7. Diskuse

Vytvořený matematický model nám v případě jednoduše definovaných vibrací vhodně popisoval průběhy HPRV, které se shodovaly s histogramy vibračních rychlostí. Zmíněné histogramy jsou při snaze popsat průběh vibrací jednodušeji získatelné a sloužili jako ověření správných průběhů HPRV. Složitější situace nastala u vibrací, které byly superpozicí sinů nebo obecně měly diskrétní frekvenční spektrum (obdélníkový signál). V takovém případě matematický model selhával a nedokázal nám vhodně popsat charakter vibrací. U rychlostního signálu majícího tvar obdélníků byla získaná hustota pravděpodobností natolik odlišná a divergentní, že ji nemělo smysl uvádět. Nekompatibilita těchto výsledků s reálnými vibracemi je pravděpodobně způsobena divergencemi v okrajových bodech rozdělení. Při vytváření konvoluce nám tyto divergence nevadí, jelikož mají formu Diracových δ -impulsů, ale v případě, že popisujeme signál, který je superpozicí dílčích signálů, pak nám tyto divergence vznikají uvnitř rychlostního intervalu a způsobují pak deformaci průběhu HPRV.

Pokud jsme dokázali získat vhodný analytický předpis pro HPRV, byli jsme schopni provádět konvoluce vstupního nezatíženého spektra. Na vzniklých zkrácených spektrech jsme mohli pozorovat míru rozšiřování čar, která byla v souladu s představou rozšiřování energetických hladin. Nicméně bez vhodného analytického předpisu HPRV jsme nebyli schopni zmíněné konvoluce provést a pro spojitě veličiny je dále tato metoda numericky náročná na výpočet. Proto by v případě dalšího pozorování tohoto fenoménu bylo vhodné využít spíše diskrétních modelů.

V experimentálním uspořádání jsme provedli sadu několika měření, mimo jiné i s příčnými vibracemi na směr šíření gamma-záření emitoru. Do výsledků experimentální části nebyly tyto pokusy zařazeny, jelikož vibrace měly zanedbatelný vliv na tvar spektra. To je v souladu s modulační představou (12), jelikož uvažujeme pouze podélné vibrace. Pokud byly amplitudy výchylek v této geometrii opravdu významné (rychlosti vibrací až v jednotkách $\text{mm}\cdot\text{s}^{-1}$), pak jsme mohli pozorovat malou modulaci spekter. To bylo patrně způsobeno faktem, že jsme nebyli schopni plně dodržet podmínku kolmosti a do podélného směru se nám pak projevovala úhlová projekce těchto pohybů.

Simulovaná deformovaná spektra se nám v jisté míře dobře shodovala s experimenty. Nicméně opačného procesu k vylepšení již zatížených spekter jsme nedosáhli kvůli selhání modelu v programu Mathematica a kvůli naší snaze pracovat s analytickými průběhy. Možnou alternativou jak tuto problematiku dále řešit by byl přechod k diskrétním Fourierovým transformacím.

8. Seznam referencí

- [1] Skála, L. *Úvod do kvantové mechaniky*. Karolinum 2011
- [2] Kulhánek, P. *Kvantová teorie: Studijní text pro doktorské studium*. FEL ČVUT, Praha 2001/2010/2012
- [3] May, L. *An introduction to MS*. The Catholic University of America, London 1971
- [4] Siegbahn, K. *Alpha-, Beta- and Gamma-ray spectroscopy - Volume I*. University of Uppsala, North-Holland Publishing Company 1968
- [5] Siegbahn, K. *Alpha-, Beta- and Gamma-ray spectroscopy - Volume II*. University of Uppsala, North-Holland Publishing Company 1968
- [6] Dickson, D. P., Berry, F.J. *Mössbauer spectroscopy*. Cambridge University Press 1986
- [7] Greenwood, N. N., Gibb, T. C. *Mössbauer spectroscopy*. Chapman and Hall Ltd 1971
- [8] Cohen, R. L. *Applications of MS - Vol 1*. Bell Laboratories Murray Hill, New Jersey, Academic Press 1976
- [9] Cohen, R. L. *Applications of MS - Vol II*. Bell Laboratories Murray Hill, New Jersey, Academic Press 1980
- [10] Procházka, V. *Neobvyklá Mössbauerova spektroskopie*. UP Olomouc, Olomouc 2014
- [11] Mašláň, M. *Mössbauerova spektroskopie*. Olomouc 1992
- [12] Baldini, A., Giallo, F. Del, Pieralli, F., Spina, G. *Analysis of velocity noise in Mössbauer experiments*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B42 (1989) 393-396
- [13] Procházka, R., Tuček, P., Tuček, J., Marek, J., Mashlan, M., Pechousek, J. *Statistical analysis and digital processing of the Mössbauer spectra*. Measurement Science and Technology 21 (2010) 025107 (7pp)
- [14] Tongue, B. H. *Principles of Vibration*. Oxford University Press, 2001
- [15] Thompson, W.T. *Theory of Vibrations*. Nelson Thornes Ltd, 1996
- [16] Stoer, J., Bulirsch, R. *Introduction to Numerical Analysis*. Springer-Verlag New York Inc., 2002
- [17] Kopáček, J. *Matematická analýza nejen pro fyziky (I)*. MatfyzPress, 2004
- [18] Kopáček, J. *Matematická analýza nejen pro fyziky (II)*. MatfyzPress, 2007
- [19] Černý, I. *Analýza v komplexním oboru*. Academia, Praha, 1983
- [20] https://en.wikipedia.org/wiki/Poisson_distribution
- [21] Kubáček, L., Kubáčková, L. *Statistika a metrologie*. UP Olomouc, 2000
- [22] Mlčoch, J., Rössler, T. *Teorie měření a experimentu*. UP Olomouc, 2005
- [23] Říha, J., Látal, F., Kainzová, V., Mošová, V., Vyšín, I., Švrček, F., Richterek, L. *Software Mathematica v přírodních vědách a ekonomii*. UP Olomouc, 2012

9. Seznam použitých veličin

ΔE	Neurčitost energie [eV]
E	Energie [eV]
Δt	Neurčitost času [s]
t	Časová proměnná [s]
\hbar	Redukovaná Planckova konstanta $\hbar = 6,582119514 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$
Γ	Šířka energetické hladiny [eV]
τ	Střední doba života kvantového stavu [s]
ω	Frekvence [Hz]
I	Intenzita
m	Hmotnost jádra [kg]
c	Rychlost světla $c = 299\,792\,458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
μ_A, μ_E	Linární absorbní koeficienty absorberu a emitru [m ⁻¹]
d_A, d_E	Tloušťky absorberu a emitru
v, v_{mod}	Modulační rychlost zářiče a absorberu (vzorku) [m·s ⁻¹]
δE	Energetický modulační příspěvek [neV]
Γ_{mod}	Šířka modulované energetické hladiny [eV]
α	Okamžitá modulační rychlost vzorku [m·s ⁻¹]
V	Substituovaná okamžitá modulační rychlost vzorku [m·s ⁻¹]
T	Doba měření [h]
P	Pravděpodobnost [%], []
u	Okamžité napětí přivedené na elektrodynamický vibrátor [V]
D	Disperze rozdělení vibračních rychlostí [m·s ⁻¹]

10. Seznam použitých zkratek

MS.....	Mössbauer spectroscopy
VPD.....	Velocity probability density
FT.....	Fourierova transformace
HPRV.....	Hustota pravděpodobností rychlostních vibrací
SNR.....	Signal to noise ratio
Mod.....	Modus
konst.....	Konstanta
PID.....	Proporcionálně integračně derivační