



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

ZIENTZIA
ETA TEKNOLOGIA
FAKULTATEA
FACULTAD
DE CIENCIA
Y TECNOLOGÍA



Gradu Amaierako Lana / Trabajo Fin de Grado
Fisikako Gradua / Grado en Física

Recreación experimental de un descubrimiento galardonado con el Premio Nobel: El efecto Mössbauer

Egilea/Autor/a:

Ander Urrutia Irazabal

Zuzendaria/Director/a:

Jose Javier Sáiz Garitaonandia

Índice

Introducción.....	3
1. Fundamento teórico.....	4
1.1 El fenómeno de la resonancia.....	4
1.2 Resonancia de absorción nuclear.....	5
1.2.1 Anchura natural y forma de las líneas de emisión y absorción.....	5
1.2.2 Transiciones nucleares en átomos (núcleos) libres.....	7
1.2.3 Primeras observaciones.....	9
1.3 Modelo de Debye.....	10
1.4 Resonancia de absorción nuclear sin retroceso o efecto Mössbauer.....	11
1.5 Fracción sin retroceso.....	15
1.6 Espectroscopia Mössbauer.....	16
2. Objetivos.....	20
3. Materiales y método.....	21
3.1 Espectrometro Mössbauer.....	21
3.2 Proceso de obtención de los espectros.....	25
4. Resultados y discusión.....	30
5. Conclusiones.....	36
6. Bibliografía.....	38

Introducción

La resonancia es un fenómeno físico que ha sido estudiado desde hace varios siglos, el cual se ha podido observar en numerosos sistemas. La vibración de un vaso de cristal sometido a un sonido es un claro ejemplo de este hecho a escala macroscópica. A mediados del siglo XIX, este fenómeno también sería observado también a nivel atómico, como es la fluorescencia.

Desde principios del siglo XX, los físicos supusieron que, si existía la resonancia a nivel atómico, también debía existir este fenómeno a nivel nuclear. A pesar de los esfuerzos de muchos de ellos, no fue hasta los primeros años de la década de los 50 que se consiguió visualizarlo por primera vez. Varios físicos presentaron métodos y montajes distintos para poder lograr verlo, consiguiendo su propósito, pero la resonancia observable era muy pequeña.

Al mismo tiempo, un joven físico llamado R.L. Mössbauer se dedicaba a hacer experimentos y estudios sobre la vida media de varios elementos para completar su doctorado. En uno de estos experimentos, desoyendo los estudios que se tenían en aquel tiempo sobre resonancia nuclear y casi por casualidad, este físico alemán conseguiría hacer historia en el mundo de la física con su descubrimiento: la resonancia nuclear sin retroceso o el efecto Mössbauer.

Este trabajo tiene como objetivo recrear el experimento que hizo Mössbauer, observar la resonancia nuclear sin retroceso, analizar sus características y la dependencia de esta con la temperatura. Además, se tratará de obtener la temperatura de Debye de una muestra metálica, el acero inoxidable.

El texto se divide en varios apartados: primeramente, se presenta un fundamento teórico con los conceptos necesarios para poder entender los objetivos y el proceso experimental. A continuación, se explica que recursos se han utilizado y los procesos que se han llevado a cabo. Posteriormente, se exponen los resultados obtenidos y un análisis acerca de los mismos para, finalmente, concluir con las conclusiones de este trabajo experimental.

1 Fundamento teórico

1.1 El fenómeno de la resonancia

En la naturaleza, la resonancia es un fenómeno que ocurre habitualmente y de manera espontánea, hecho por el cual, es de suma importancia su estudio y comprensión. Un ejemplo familiar de este hecho es la vibración o la rotura de una copa de cristal al estar sometida a un sonido, como la voz humana o un instrumento. La copa de cristal posee una cierta frecuencia, específica para cada objeto debido a su composición, geometría, etc; a la cual es excitado. Por tanto, si la copa de cristal esta sometido a un sonido cuya frecuencia sea igual a la frecuencia característica de excitación de la misma, esta comenzara a vibrar. En el caso de que ese sonido aumente de intensidad o se mantenga emitiendo el tiempo necesario, la copa se romperá. Esta frecuencia característica de los objetos se llama frecuencia de resonancia.

Al igual que en el ejemplo anterior, donde la resonancia ocurre a escala macroscópica y mediante ondas sonoras, este fenómeno también tiene lugar a nivel microscópico. El átomo consta de un núcleo y de un número de electrones que llenan los niveles de energía del átomo, de menor a mayor energía, los cuales están discretizados y bien definidos. Si una radiación electromagnética es emitida hacia un átomo, esta será absorbida si la energía de la radiación coincide con la diferencia de energía entre dos niveles electrónicos del átomo. Al absorber la radiación, un electrón de un nivel inferior saltará a un nivel superior, de acuerdo con la energía del fotón absorbido y el átomo se situará ahora en un estado excitado. Después de un cierto tiempo, el átomo buscará situarse en un estado de menor energía y, por lo tanto, el átomo emitirá un fotón de la misma energía que la diferencia entre los niveles electrónicos en los que se ha situado el electrón desexcitado. El átomo volverá al estado energético más bajo, el estado fundamental.

Este proceso, donde el fotón absorbido por el átomo y el reemitido por el átomo poseen la misma frecuencia, es conocida como resonancia de absorción atómica o resonancia fluorescente. La resonancia fluorescente de las líneas amarillas del sodio en vapor de sodio es un ejemplo muy estudiado [1, 2].

1.2 Resonancia de absorción nuclear

En 1929, W.Kuhn opinó que la resonancia de absorción nuclear o de rayos gamma podría ocurrir de manera análoga a la resonancia óptica fluorescente [1, 2]. En este caso, la fuente de luz debería ser sustituida por una fuente radioactiva, el cual emite rayos gamma que provoque el proceso inverso a la resonancia de absorción nuclear en un absorbente compuesto de núcleos del mismo tipo o elemento a aquellos que decaen energéticamente de la fuente. Las transiciones energéticas ocurrirán entre los estados nucleares.

A pesar de esta teoría, durante dos décadas no fue posible observar esta resonancia a nivel nuclear. Esto fue debido a diversas consideraciones que se explicaran a continuación.

1.2.1 Anchura natural y forma de las líneas de emisión y absorción

El estado excitado en el que se encuentra un núcleo emisor tiene una duración limitada; es decir, el núcleo en ese estado no es estable y, por tanto, tratará de encontrar un estado de energía más bajo que sea estable, emitiendo en este caso un fotón γ . El tiempo en el que permanece el núcleo en el estado excitado se conoce como vida media. La energía de estos estados excitados no puede ser determinada exactamente debido al limitado intervalo de tiempo Δt para medirlo. Por tanto, la energía del estado excitado será obtenida con una cierta incertidumbre ΔE . Estas dos variables están relacionadas mediante la relación de incertidumbre de Heisenberg para la energía y el tiempo:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (1.1)$$

donde \hbar es la constante de Planck entre 2π . Este intervalo de tiempo es del orden de la vida media τ ; por tanto, al ser la vida media del estado fundamental infinito, la energía está exactamente definida.

Debido a esta incertidumbre, la energía E de los fotones emitidos por un conjunto de núcleos idénticos en la transición nuclear variará ΔE alrededor de la energía media $E_\gamma = E_e - E_0$. La distribución de la intensidad de la radiación como función de la energía E , llamado línea de emisión, es una curva Lorentziana dada por la ecuación de Breit-Wigner [3]:

$$I(E) = \frac{\frac{\Gamma}{(2\pi)}}{(E - E_\gamma)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \quad (1.2)$$

Como se muestra en la figura 1.1, la línea emisión está centrada en valor medio de la energía de la transición nuclear. Se puede ver que $I(E) = \frac{1}{2} I(E_0)$ para $E = E_0 \pm \Gamma/2$, donde Γ es la anchura de la línea de emisión a la mitad del valor máximo de la intensidad. Γ es definido como anchura natural de estado nuclear excitado. La línea de absorción posee la misma forma que la línea de emisión por razones de la invariancia de inversión temporal.

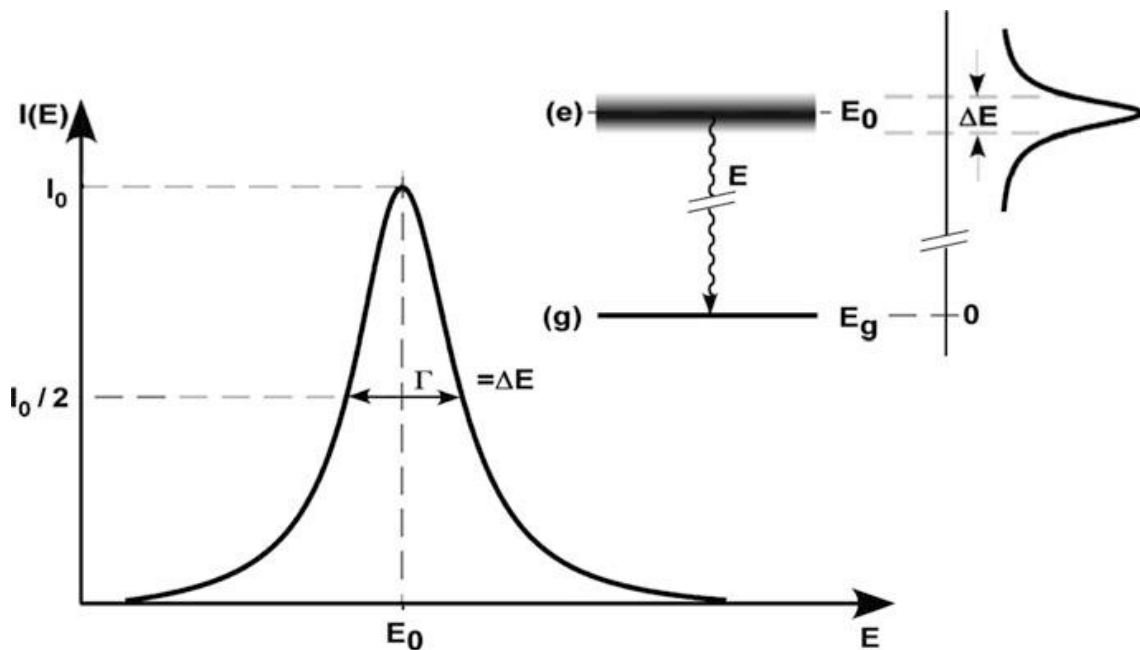


Figura 1.1.: Diagrama de la distribución de la intensidad o línea de emisión [3].

Al igual que la energía y el tiempo, la vida media y la anchura natural de las líneas de emisión y absorción tienen una estrecha relación semejante a la incertidumbre de Heisenberg:

$$\Gamma\tau = \hbar \quad (1.3)$$

Las vidas medias de los estados nucleares excitados de más baja energía normalmente oscila entre 10^{-7} y 10^{-11} s, correspondiendo a un intervalo entre 10^{-8} y 10^{-4} eV para la anchura natural de las líneas que aparecen en transiciones al estado fundamental [1, 2, 3]. Estos valores son similares para los estados excitados electrónicos del rango óptico.

1.2.2 Transiciones nucleares en átomos (núcleos) libres

La transferencia de toda la energía de la transición nuclear al fotón emitido no ocurre en ciertos casos, ya que existe la posibilidad de que el núcleo, tanto el emisor como el absorbente, sufran un retroceso. Este es el caso para núcleos localizados en átomos libres.

Consideremos un núcleo en un átomo libre que está en un nivel excitado E_e y emite un fotón de energía E_γ para situarse en el estado energético fundamental E_0 . El átomo está en reposo. Teniendo en cuenta la conservación del momento, el fotón emitido, que su momento es E_γ/c , imparte un momento \vec{p}_R de misma magnitud pero en sentido opuesto al núcleo. Consecuentemente, también le dota de una energía cinética E_R , es decir una energía de retroceso. Este hecho hace que parte de la energía de la transición nuclear no sea transferido al fotón y que la energía del fotón sea la energía del estado excitado menos la energía de retroceso. Además, esta energía de retroceso hace que la línea de emisión no se sitúa en la posición de la energía de transición E_e , sino desplazado a energías menores una cantidad E_R .

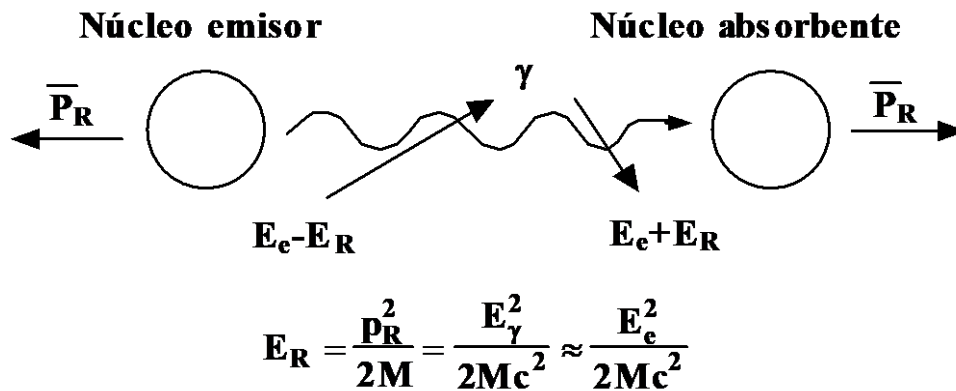


Figura 1.2: Representación esquemática del proceso de emisión y absorción nuclear [4].

Una situación muy similar ocurre cuando la radiación es absorbida por el núcleo. El núcleo, al absorber el fotón incidente, sufrirá un momento \vec{p}_R de retroceso. Al contrario que en proceso de emisión, este momento tendrá la misma dirección que la del fotón. Por ello, éste debe tener una energía mayor al de la diferencia de energía entre el estado fundamental y el estado excitado. La energía que debe portar el fotón será la diferencia entre estados nucleares más la energía de retroceso, $E_e + E_R$. El desplazamiento en la

línea de absorción será la misma cantidad E_R que en la de emisión, pero hacia una posición de energías mayores. Consecuentemente, la separación entre ambas líneas será de $2E_R$, tal y como muestra la figura 1.3.

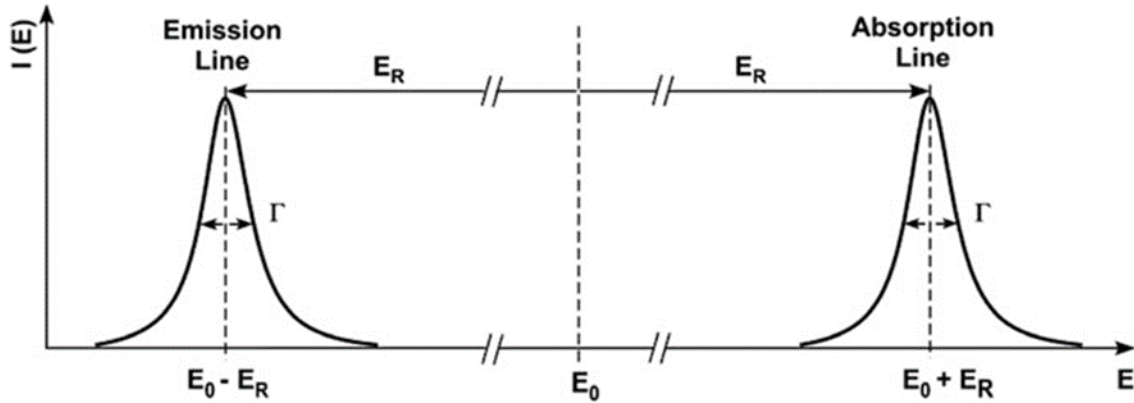


Figura 1.3: Separación energética de las líneas de emisión y absorción debido a la energía de retroceso en átomos libres [3].

Una comparativa entre fotones de distinto rango energético, mostrara la importancia de la energía de retroceso. La tabla 1 muestra las energías de desexcitación, energías de retroceso y la anchura de los niveles energéticos para emisiones γ y ópticas [4]. Como se ha mencionado anteriormente, las emisiones γ son aquellas que ocurren en transiciones nucleares y las emisiones ópticas o de luz ocurren en transiciones electrónicas de energía baja-media, como resonancia fluorescente del vapor de sodio. En ambos casos, como se ha citado en el apartado 1.2.1, los estados excitados poseen una vida media de entre 10^{-7} y 10^{-11} segundos y, por tanto, una anchura natural de las líneas del rango 10^{-8} a 10^{-4} eV aproximadamente.

	Óptica	nuclear (γ)
E_e (eV)	1-4	10^4 - 10^6
E_R (eV)	10^{-11} - 10^{-10}	10^{-3} - 10^3
Γ (eV)	10^{-8} - 10^{-4}	10^{-8} - 10^{-4}

Tabla 1.1: Valores típicos de energía de desexcitación, E_e , energía de retroceso del núcleo, E_R , e anchura natural de las líneas energéticas, Γ , en procesos de emisión óptica y nuclear.

En el caso óptico, puede verse que la energía de retroceso es despreciable comparada con la anchura de los niveles energéticos. Esto hace que la visualización de la resonancia sea posible de manera natural. Sin embargo, la energía de retroceso para la emisión nuclear es varios órdenes de magnitud mayor que Γ . Esto hace que la resonancia absorción nuclear no pueda ser observada, es decir, la probabilidad de que ocurra la resonancia es tan pequeña que escapa a su detección.

1.2.3 Primeras observaciones

La primera confirmación experimental de la resonancia de absorción nuclear llegó en 1951, a cargo del físico británico P.B. Moon [1, 2]. La idea fundamental de su experimento consistía en compensar la pérdida de energía de los rayos gamma debido al retroceso. Para ello, la fuente radioactiva utilizada en el experimento era movida a velocidades considerablemente altas en dirección al absorbente. De esta manera, es decir, mediante el efecto Doppler, la línea de emisión es desplazada hacia posiciones más energéticas que conseguían solaparse con la línea de absorción, y así, obtener una resonancia fluorescente nuclear medible. Las velocidades requeridas para el solapamiento de las líneas oscilan entre 10^2 y 10^3 m/s.

Además de la utilización del efecto Doppler contrarrestar la energía de retroceso del núcleo, el físico noruego K.G. Malmfors consiguió un resultado satisfactorio de la siguiente manera: elevando la temperatura del emisor y absorbente [1, 2]. Al aumentar la temperatura de ambos sistemas, se ensanchan las líneas, haciendo que las líneas de emisión y absorción se puedan solapar y que la resonancia se observable. Mediante estas dos técnicas se consiguió observar la resonancia fluorescente en varios núcleos.

Hasta el momento, los emisores y absorbentes utilizados para la observación de la resonancia fluorescente nuclear eran núcleos que constituían átomos libres en un gas. A continuación, describiré una teoría de sólidos cristalinos, el cual describe de manera adecuada el comportamiento de los átomos y núcleos cuando están ligados fuertemente entre sí. Esto será útil a la hora de comprender el fenómeno descrito en el posterior apartado.

1.3 Modelo de Debye

Como se ha dicho anteriormente, los átomos en los sólidos o redes cristalinas están ligados fuertemente entre sí, situación muy diferente a los gases y los líquidos donde esta ligadura es mucho más débil. Esta interacción entre ellos es tan débil que considerar los átomos de un gas como partículas libres es una aproximación adecuada, tal y como se ha tratado en el apartado 1.2.2.

Los átomos en un sólido están vibrando, pudiendo ser considerados como osciladores armónicos tridimensionales. Hasta principios del siglo XX, la teoría clásica describía estos osciladores como clásicos, los cuales tenían un desplazamiento respecto a su posición de equilibrio y sus niveles de energía eran continuos [5]. Esta teoría era capaz de describir el comportamiento del calor específico de un sólido correctamente a temperaturas altas. Sin embargo, los datos experimentales diferían mucho cuando el calor específico era medido a bajas temperaturas, debido a que esta decrecía hasta cero a medida que la temperatura de medición descendía a 0°K y la teoría clásica describía el calor específico como una característica independiente de la temperatura.

Por ello, Einstein llevo a cabo una teoría para la descripción cuántica de los sólidos, debido a que la teoría clásica fallaba a la hora de describir el comportamiento del calor específico de los sólidos a bajas temperaturas [5]. Einstein supuso, como la teoría clásica, que los átomos se movían como osciladores armónicos en tres dimensiones, alrededor de su posición de equilibrio, con la diferencia que los átomos no pueden oscilar a una frecuencia arbitraria, sino que estas son frecuencias discretas y bien definidas. Las energías asociadas a estas frecuencias son múltiplos de la constante de Planck, y, por tanto, están cuantizadas.

El modelo de Einstein llevo a explicar el comportamiento del calor específico de los sólidos a bajas temperaturas. A pesar de ello, los valores experimentales estaban lejos de los predichos por el modelo de Einstein.

Años más tarde, Debye formulo su propio modelo [5]. Einstein supuso que cada átomo vibraba de manera independiente sin tener ninguna interacción con sus vecinos más próximos. Debye, por el contrario, asumió que debía tomarse en cuenta el acoplamiento entre los átomos vecinos, oscilando de manera colectiva todo el sistema. Los modos de

vibración de los átomos para cada frecuencia se llaman fonones. Estos modos de vibración están cuantizados.

Este modelo supone que el número de modos de vibración en cada intervalo de frecuencia viene dado por una función de distribución de frecuencias $Z(\omega)$, llamado espectro de frecuencias del cristal. Además, Debye puso un límite al número de modos permitidos en el sólido, un máximo de frecuencias de fonones permitido. Esta frecuencia de corte se llama frecuencia de Debye ω_D . A su vez, relacionándolo con esta frecuencia definió una temperatura de Debye [5]:

$$\theta_D = \hbar \omega_D / k_B \quad (1.4)$$

donde k_B la constante de Boltzmann. Esta temperatura es característica para cada compuesto, ya que representa el valor de la fuerza de cohesión entre los distintos átomos que constituyen la red.

1.4 Resonancia de absorción nuclear sin retroceso o efecto Mössbauer

En 1955, el físico alemán R.L. Mössbauer, comenzaba su tesis doctoral en el instituto Max Planck de Heidelberg. En uno de sus experimentos, empleando una fuente radioactiva el cual emitía un rayo gamma de 129 KeV y conducía al estado fundamental del ^{191}Ir , su intención era medir la vida media de este estado mediante el método y el montaje utilizados por K.G. Malmfors en la resonancia de absorción nuclear [1, 2]. Malmfors, calentó el emisor y absorbente para que las líneas de ambos se ensancharan y así solaparse, obteniendo una resonancia medible. En el caso de la transición 129KeV, las líneas conseguían solaparse incluso a temperatura ambiente debido a la pequeña energía de retroceso y por tanto, pequeño desplazamiento de las dos líneas. Este hecho hizo que con un aumento de la temperatura o incluso un descenso de la temperatura obtendría una diferencia medible en la absorción nuclear, siendo la segunda opción la escogida por Mössbauer. La razón por la cual eligió descender la temperatura de la fuente y el absorbente era que el efecto de los enlaces químicos era más fuerte a temperaturas bajas que a altas.

Esta decisión de Mössbauer resulto ser crucial para obtener un resultado imprevisto y en un principio considerado anómalo. Los resultados mostraron un notable incremento de la resonancia de absorción, contradictorio con las expectativas teóricas, las cuales predecían una disminución de la absorción al descender la temperatura.

En el apartado anterior, se ha explicado que la teoría clásica suponía que los átomos de un sólido cristalino podían vibrar a cualquier frecuencia y por tanto tener cualquier energía. Esta consideración clásica no era capaz de explicar el resultado obtenido por Mössbauer. Sin embargo, analizando el problema desde un aspecto cuántico, teniendo en cuenta una teoría como la de Debye, es posible obtener una explicación plausible.

La energía de retroceso que se muestra en las líneas de emisión y absorción de un rayo gamma por un núcleo ligado a un sólido es recogida parcialmente en forma de energía traslacional y en forma de energía interna. La energía traslacional es despreciable debido a que como los núcleos están ligados unos a otros, esta energía lo absorbe todo el sólido, en comparación a un solo núcleo.

En cuanto al aumento de la energía interna, hará que los átomos se sitúen en frecuencias de oscilación más altas. A consecuencia de que las frecuencias de oscilación están cuantizadas, el cristal puede absorber la energía de retroceso en cantidades discretas de energía. Las transiciones nucleares de núcleos que están ligados están habitualmente acompañadas de transiciones simultáneas de los osciladores del cristal. Por tanto, un rayo gamma puede ser emitido y simultáneamente uno de los osciladores sufre una transición a un estado de energía vecino. De la misma manera, este rayo es posible que provoque la transición de dos osciladores del cristal simultáneamente. Por la misma razón, existe la posibilidad de que la absorción o emisión de un rayo gamma no genere ningún cambio en los niveles de energía de los osciladores.

Posteriormente experimentos de Mössbauer estudiando la transición entre estados nucleares del ^{191}Ir [2], mostraron que el pico correspondiente a la transición nuclear entre el estado excitado más bajo y el estado fundamental en el espectro de emisión coincidía con el espectro de absorción, es decir, la energía en la cual se situaba ese pico era precisamente la diferencia entre los estados nucleares. En la figura 1.4 se puede observar este hecho.

Este resultado corroboraba el hecho de que el fenómeno de la resonancia de absorción nuclear podía ocurrir sin que hubiera ningún retroceso en las líneas de emisión y

absorción y, por tanto, no había ninguna pérdida de energía en los rayos gamma emitidos o absorbidos. Este efecto se denominó resonancia de absorción nuclear sin retroceso o efecto Mössbauer, en honor a su descubridor.

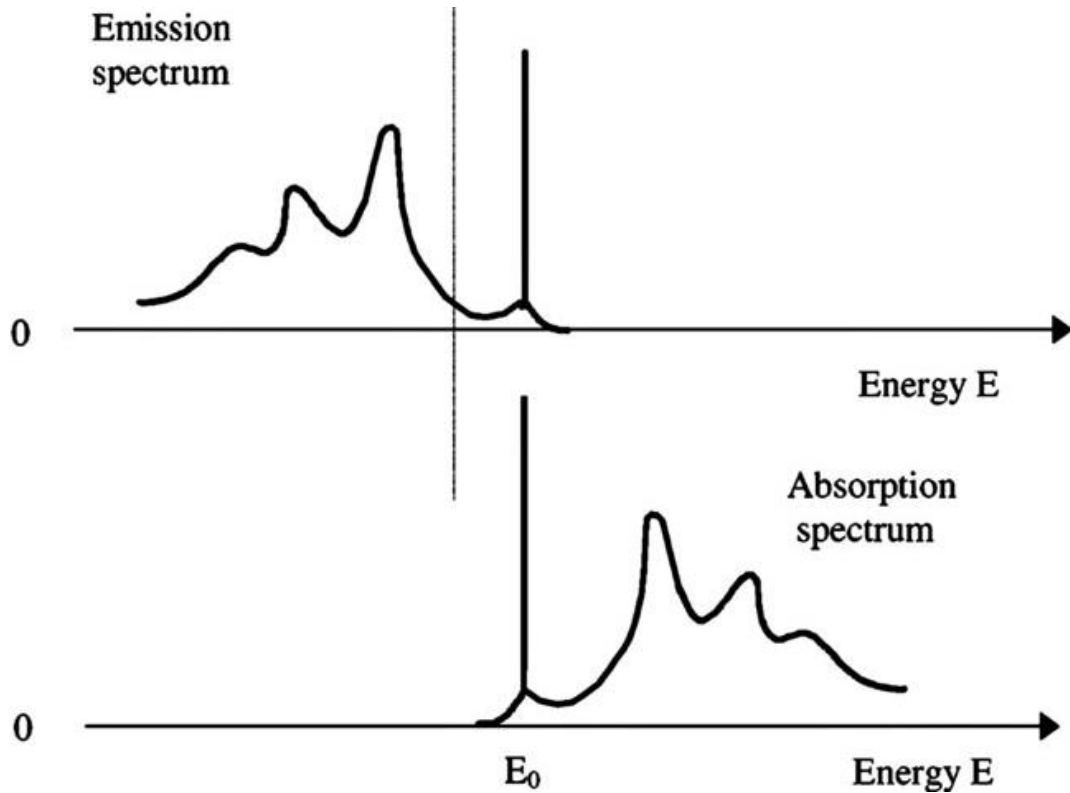


Figura 1.4: Líneas de emisión y absorción de radiación gamma resonante de un núcleo en un sólido cristalino. Los distintos picos están asociados a las distintas transiciones nucleares [1].

Sin embargo, estos resultados no demostraban de manera directa este fenómeno, era necesario cuantificar los eventos de resonancia que ocurrían sin retroceso y que un desplazamiento de las líneas de absorción y emisión disminuían el solapamiento y el efecto disminuía. Para ello, Mössbauer se basó en el montaje utilizado por Moon [2], el cual, imprimía una velocidad a la fuente para solapar las dos líneas. La diferencia consistía en que las anchuras naturales de las líneas eran muy pequeñas, alrededor de 10^{-6} eV, por tanto, para desplazar las líneas no era necesario imprimir una velocidad tan grande como la utilizada por Moon, unos 670 m/s. La finalidad, en el caso de Moon, era conseguir contrarrestar la energía de retroceso de unos $10^{-2} - 10^{-1}$ eV. Por ello, Mössbauer debía utilizar velocidades unas 4 o 5 órdenes de magnitud más pequeñas, en

la región de cm/s. Para ello, coloco la fuente en un dispositivo que rotaba a velocidad constante. El resultado se muestra en la figura 1.5, el cual verifica que la máxima resonancia de absorción ocurre cuando la velocidad relativa entre la fuente y el absorbente es cero, es decir, cuando hay una superposición completa de ambas líneas, llamadas líneas sin retroceso de absorción y emisión [1,2].

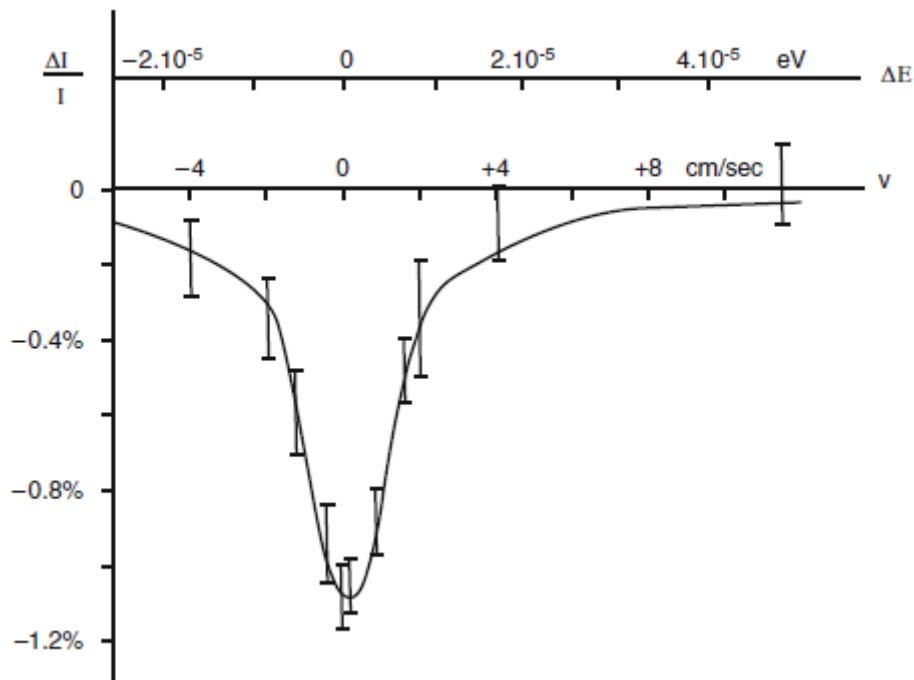


Figura 1.5: Ratio de la intensidad relativa de la radiación gamma medida colocando el iridio como absorbente resonante, en comparación con un absorbente no resonante [1].

El aumento de la velocidad relativa produce una disminución en la absorción y un aumento en la intensidad detectada por el detector. Además, el experimento también verificaba la anchura natural de las líneas de emisión y absorción, consiguiendo una resolución energética mucho mayor de lo conseguido hasta el momento. Esto supuso un avance muy importante ya que posibilitaba la medida de cambios energéticos muy pequeños entre dos sistemas. Este nuevo método de espectroscopia se bautizó como espectroscopia Mössbauer. En un próximo apartado se explicará con más detalle en que consiste esta técnica.

Como consecuencia a estos hallazgos, R.L.Mössbauer recibió el premio Nobel el año 1961.

1.5 Fracción sin retroceso

El efecto Mössbauer puede ocurrir siempre que las energías de retroceso sean menores a las energías de excitación de los fonones. Es decir, una emisión o absorción de radiación gamma sin excitar ninguno de los osciladores del cristal. En otros procesos, es posible que haya resonancia, pero el cristal absorberá esa energía de retroceso excitando alguno de los modos de este. Por tanto, estadísticamente, es posible calcular los eventos en los que haya emisiones sin retroceso en algunos casos. Mediante un cálculo al detalle [6], puede encontrarse que la probabilidad de que haya eventos sin retroceso es:

$$f = \exp(-k^2 \langle x^2 \rangle) \quad (1.5)$$

donde $k = E_\gamma / \hbar c$, representa el vector de onda de la radiación emitida y $\langle x^2 \rangle$ es el valor medio del desplazamiento al cuadrado del núcleo de su posición de equilibrio. De la ecuación 1.5, se observa una dependencia entre la energía de la radiación γ y la fracción sin retroceso. Este hecho limita los isotopos y las transiciones nucleares adecuados mediante los cuales es posible la visualización del efecto Mössbauer.

Para poder hallar el valor de $\langle x^2 \rangle$, se necesita la referencia de un modelo de red cristalina, en este caso, el modelo de Debye (apartado 1.3). El valor medio de x^2 , teniendo en cuenta todas las frecuencias de vibración hasta la frecuencia de Debye ω_D es [6]:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^{\omega_D} \left(n + \frac{1}{2} \right) Z(\omega) \frac{\hbar}{M\omega} d\omega \quad (1.6)$$

siendo n la función distribución de Bose-Einstein [5] y M la masa del núcleo. A partir de aquí, añadiendo la energía del punto cero y haciendo un cambio de variable $x = \hbar\omega/k_B T$, el modelo de Debye nos da la fracción sin retroceso para cualquier temperatura de que un núcleo emita un rayo γ sin perder o ganar energía de la red [6, 7], tal que:

$$f(T) = \exp \left\{ -\frac{3}{2} \frac{E_R}{k_B \theta_D} \left[1 + 4 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x dx}{e^x - 1} \right] \right\} \quad (1.7)$$

Como muestra la ecuación, a medida que la temperatura aumenta, la fracción sin retroceso disminuye. Por tanto, a bajas temperaturas mayor será f , hecho que está de acuerdo con el experimento de Mössbauer. A medida que va tendiendo la temperatura al

cero absoluto, la fracción f tiende a un máximo de valor $\exp(-\frac{3}{2} \frac{E_R}{k_B \Theta_D})$, debido al punto cero de energía del sistema. Aproximaciones adecuadas de la integral [3], conducen a una dependencia de la temperatura T^2 con f para temperaturas bajas ($T \ll \Theta_D$):

$$f(T) = \exp \left[-\frac{E_R}{k_B \Theta_D} \left(\frac{3}{2} + \frac{\pi^2 T^2}{\Theta_D^2} \right) \right] \quad (1.8)$$

mientras que para temperaturas altas ($T > \Theta_D$), la dependencia se vuelve lineal

$$f(T) = \exp \left[-\frac{6E_R}{k_B \Theta_D^2} T \right] \quad (1.9)$$

La condición fundamental necesaria para que el efecto Mössbauer ocurra es que el valor medio del desplazamiento del núcleo al cuadrado en un sólido debe ser menor que la longitud de onda de la radiación γ . Otra condición necesaria para poder observar el efecto Mössbauer es que se cumpla $E_R < k\Theta_D$. Para ello necesitamos rayos γ de baja energía, y sólidos que posean una temperatura de Debye alta, es decir, una energía de enlace grande.

La fracción sin retroceso es un parámetro que permite determinar la contribución del efecto Mössbauer en el compuesto a estudiar, además de valores teóricos como puede ser la temperatura de Debye de un sólido que contiene núcleos Mössbauer. De manera general, los sistemas metálicos tienen una temperatura de Debye alta, desde los 300°K hasta superar los 1000°K. Por el contrario, la temperatura Θ_D de los compuestos organico-metalicos se sitúa entre 100 y 200°K. El efecto Mössbauer ha sido observado en aproximadamente 80 isótopos, de los cuales los más estudiados y conocidos son ^{57}Fe ($E_\gamma = 14.4\text{KeV}$) y ^{119}Sn ($E_\gamma = 26\text{KeV}$) [3, 6].

1.6 Espectroscopia Mössbauer

El descubrimiento del efecto Mössbauer, transiciones nucleares sin retroceso, supuso una herramienta más a la hora de analizar las propiedades que poseen los sólidos. Los núcleos que componen un sólido están sometidos a distintas interacciones debido al entorno que les rodea. Éstas, no solo se limitan a la fuerza de cohesión entre los núcleos; ya que este entorno está constituido por cargas eléctricas, como los electrones que orbitan alrededor de los núcleos, y momentos magnéticos.

Las interacciones electromagnéticas entre el núcleo y su entorno, como pueden ser campos eléctricos o momentos magnéticos, suelen ser de una energía aproximada de 10^{-6} eV, mientras que la energía de las transiciones nucleares Mössbauer son de orden 10^4 eV. La diferencia energética entre ambos es de 10 órdenes de magnitud, por lo cual estos campos y momentos afectan de manera perturbativa los niveles de energía nucleares. En concreto, estos elementos externos al núcleo producirán pequeños desplazamientos o corrimientos, así como desdoblamientos de los niveles de energía nucleares del orden de 10^{-6} . Estas alteraciones en los estados energéticos se llaman interacciones hiperfinas [3, 4, 6, 7]

La estructura energética debido a las interacciones hiperfinas, también llamado estructura hiperfina de los niveles de energía nucleares, no fue observada en las técnicas anteriores al descubrimiento del efecto Mössbauer porque la resolución no era lo suficientemente alta. Para poder visualizar el efecto de estas interacciones de manera clara, la definición de los espectros de emisión o absorción nuclear debe tener una resolución igual o mayor a la diferencia de los órdenes de magnitud de la energía entre las transiciones energéticas de los núcleos Mössbauer y los campos perturbativos. Es decir, una resolución de 1 parte en 10^{10} o incluso 10^{12} . La única manera de poder obtener este nivel de resolución es la utilización del fenómeno de la resonancia.

En el apartado del efecto Mössbauer, se ha tratado la anchura de las líneas de emisión y absorción que poseen los núcleos. Esta anchura es de 10^{-8} eV, es decir 2 órdenes menor a la energía de las interacciones hiperfinas. Por lo cual, si existen diferencias entre el entorno del núcleo emisor y el núcleo absorbente, no habrá solapamiento entre las líneas de emisión y absorción, y no se producirá resonancia alguna. Por tanto, se necesita proveer al sistema de un mecanismo que haga posible la resonancia entre ambos núcleos, y que, a su vez, muestre la diferencia entre los niveles de energía debido a las distintas interacciones hiperfinas de los núcleos emisor y absorbente. Esta idea es la base de la espectroscopia Mössbauer. Luego, un espectrómetro Mössbauer funciona más como un receptor de radio, y no tanto como un espectrómetro dispersivo, en el cual un circuito resonante oscila alrededor de un rango de frecuencias en los que se está interesado.

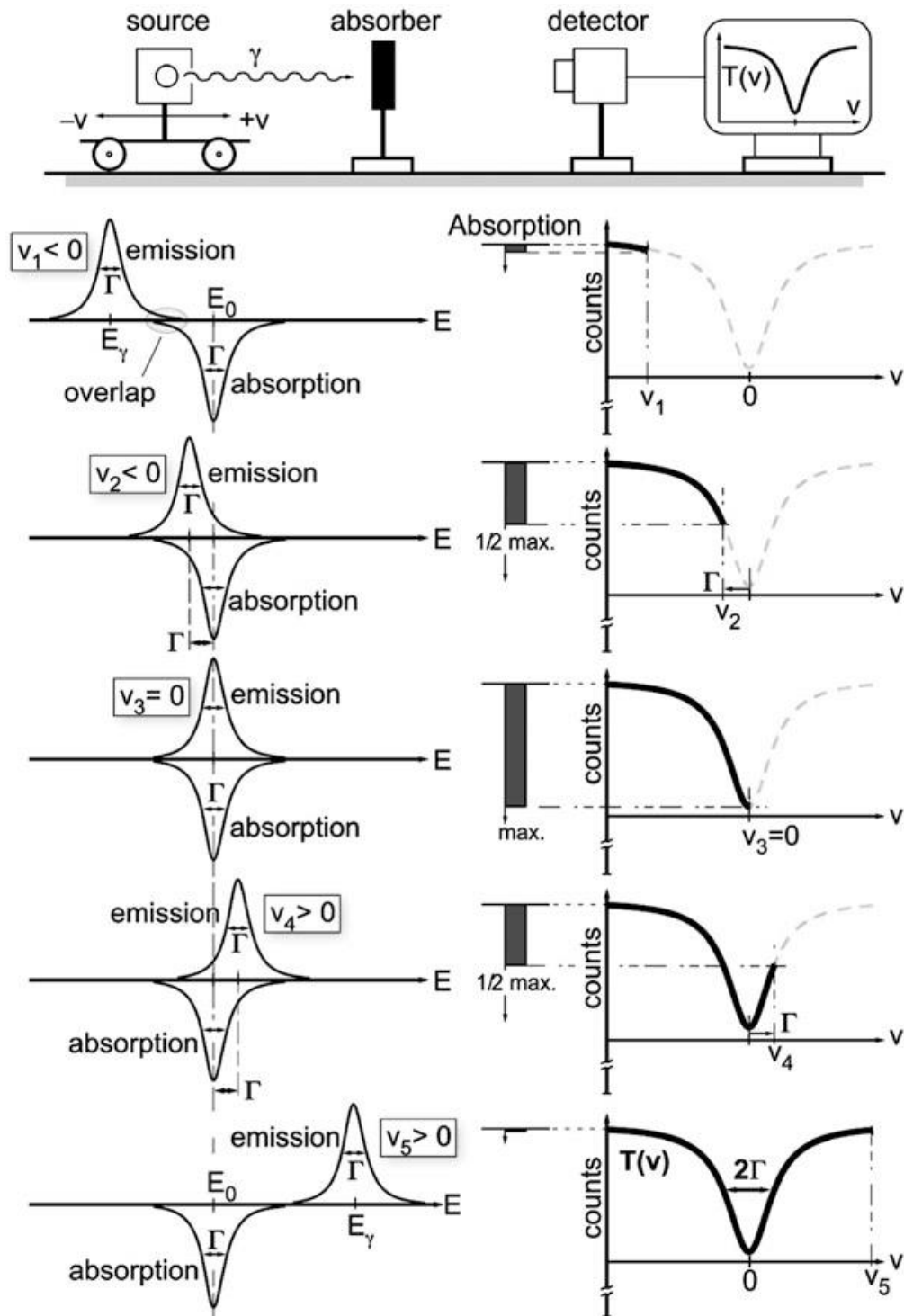


Figura 1.4: Ilustración esquemática de la creación de un espectro en 5 pasos, utilizando el efecto Doppler para poder solapar ambas líneas de emisión. La barra describe la intensidad de la resonancia absorbente dependiendo de la velocidad [3].

La manera más utilizada de conseguir ajustar y modificar el rango de frecuencias que queremos buscar es el efecto Doppler [3, 6]. Para ello, se implementa una velocidad de oscilación v a la fuente, mientras que la muestra absorbente permanece en reposo, de tal manera que la energía del fotón emitido se ve modificada.

Este movimiento oscilante debe tener una aceleración constante, permitiendo un barrido alrededor de la energía de la desexcitación del núcleo, haciendo que los fotones emitidos tengan una energía:

$$E_{\gamma} = \left(1 \pm \frac{v}{c}\right) E_e \quad (1.10)$$

La figura 1.4 muestra de manera esquemática, el movimiento que lleva a cabo la fuente paso a paso recorriendo todas las velocidades, a la vez que forma el espectro. El rango de velocidades que se deberá suministrar al emisor depende de que núcleos Mössbauer se utilicen. Para la mayoría de estos, como es el caso del ^{57}Fe , la velocidad máxima requerida es del orden de mm/s, mientras que, para algún caso aislado, es necesario suministrar velocidades del orden de decenas de cm/s.

Otro factor importante es la pureza del núcleo emisor. Generalmente, el núcleo absorbente suele ser el núcleo de estudio, analizando cuál es su estructura de niveles de energía y ver a qué interacciones y de qué tipo está sometido. Por tanto, se necesita colocar el emisor en un entorno donde la interacción este limitado al máximo. De esta manera, las líneas de energía no sufrirán ningún desdoblamiento y solo será emitida una única línea, facilitando la observación de la estructura hiperfina característica del núcleo absorbente. Por eso, es necesario poseer información detallada del núcleo emisor y de su entorno.

2 Objetivos

En 1958, R.L. Mössbauer consiguió observar por primera vez la resonancia nuclear sin retroceso o efecto Mössbauer, mediante la técnica de la espectroscopia Mössbauer, descrita en el apartado 1.6. La muestra utilizada fue el ^{191}Ir , el cual su primera transición nuclear, es decir, la diferencia energética entre el estado fundamental y el primer estado excitado nuclear es de 129keV[1, 2]. El objetivo principal de este trabajo será recrear el experimento que llevo a cabo Mössbauer, empleando la misma técnica, pero en este caso utilizando una fuente de ^{57}Co de 14.4 KeV de energía.

Se quiere conseguir, además, los siguientes objetivos específicos:

1. La observación de la resonancia nuclear sin retroceso o el efecto Mössbauer en una muestra modelo con alto contenido en Fe como es el acero inoxidable. Al mismo tiempo, se comprobará que las características descritas en el apartado 1.2 del fundamento teórico para las resonancias nucleares son visualizadas en los espectros obtenidos.
2. Analizar la dependencia de la fracción sin retroceso con el cambio de temperatura del absorbente, en rango de temperaturas entre 20°K – 470°K. Posteriormente, verificar que el comportamiento observado está de acuerdo con la teoría descrita en el apartado 1.5.
3. Mediante la formulación empleada en el apartado 1.5 y teniendo como base la teoría de los sólidos de Debye [5], hallar un resultado estimado de la temperatura de Debye para la muestra analizada, el acero inoxidable.

3 Materiales y método

3.1 Espectrómetro Mössbauer

El aparato con el cual es posible crear un solapamiento entre las líneas de emisión y absorción, por tanto, generar la resonancia entre ambos núcleos y; visualizar y cuantificar distintos parámetros de un sólido es el espectrómetro Mössbauer. En la figura 3.1, se observa un esquema de cómo es un espectrómetro Mössbauer y la figura 3.2 muestra una imagen del espectrómetro utilizado en este experimento. Este consta de las siguientes partes:

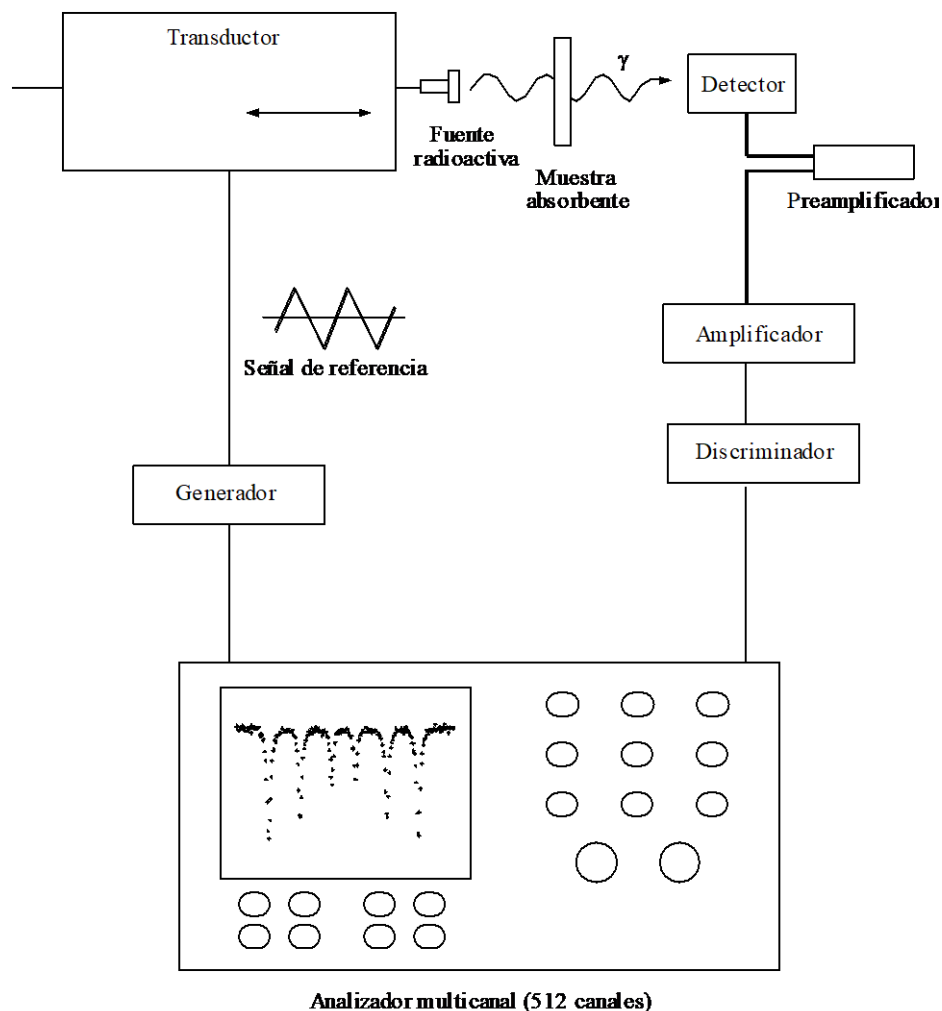


Figura 3.1: Diagrama de los componentes de un espectrómetro Mössbauer de transmisión [4].

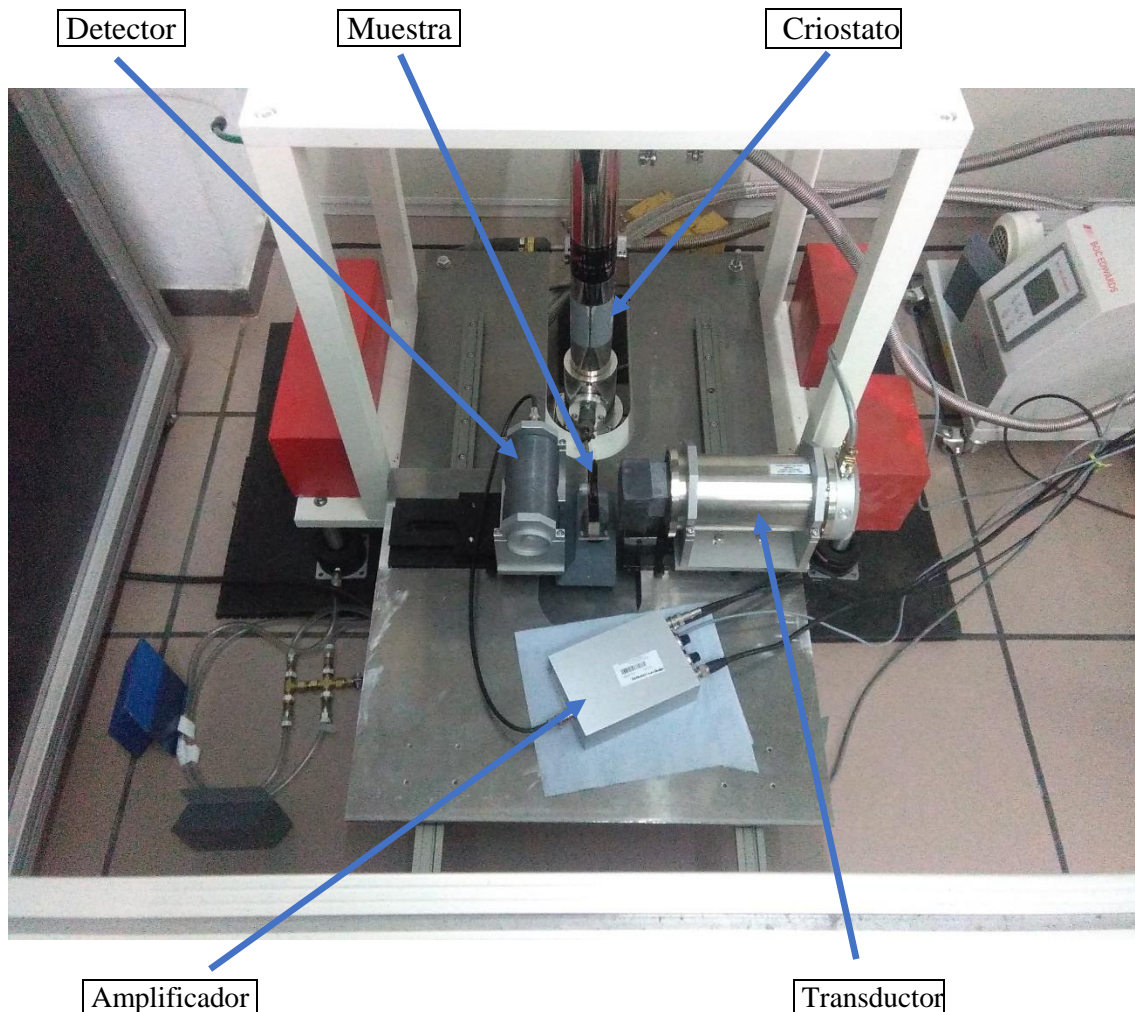


Figura 3.2: Imagen de la parte principal del espectrómetro Mössbauer utilizado durante el trabajo experimental.

- Fuente radioactiva

La elección de la fuente es crucial para que sea posible la técnica. Es necesario encontrar una fuente el cual pase de un estado excitado al estado fundamental. La solución más conveniente es encontrar un elemento radioactivo que decae a un núcleo Mössbauer en estado excitado. Para el caso de la espectroscopia de ^{57}Fe , el ^{57}Co es el elemento que provee al sistema de núcleos de ^{57}Fe en estado excitado. La figura 1.6, esquematiza la desintegración del ^{57}Co . La vida media del ^{57}Co es de 270 días, el cual decae por captura electrónica en núcleos de ^{57}Fe a un estado excitado $5/2$. Este a su vez, decae parcialmente al estado fundamental y también al estado excitado $3/2$ que posee una energía de 14.4KeV. Por último, este estado excitado, de vida media de 10^{-7} , decae

al estado base $1/2$ emitiendo un rayo gamma. Estos rayos son los utilizados para la espectroscopia [7].

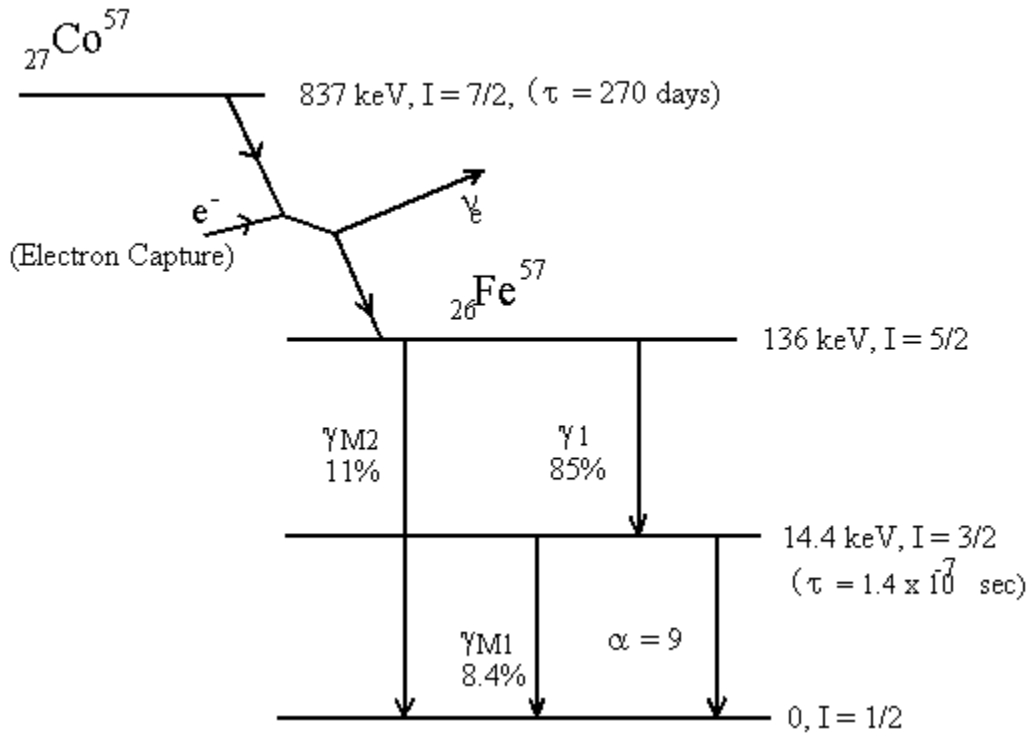


Figura 3.3: Diagrama de la desintegración del $^{57}_{27}\text{Co}$ [7].

- Generador y transductor

La fuente radioactiva está sujeta en el transductor, el cual, se mueve de manera controlada para modular la frecuencia de la radiación gamma emitida por el efecto Doppler. El movimiento que describe el transductor es suministrado por el generador, es decir, el generador envía una señal, en este caso triangular, con una cierta amplitud o rango de velocidades. El transductor traduce esta señal y hace un barrido por todas las velocidades predeterminadas por el generador. La señal es triangular, ya que se requiere que el transductor opere con aceleración constante.

- Detector

El detector registra la lectura de los fotones emitidos que han atravesado la muestra absorbente. Cada uno de los fotones detectados es transformado en un impulso eléctrico.

- Preamplificador y amplificador

El uso del preamplificador es debido a que se quiere evitar una atenuación del impulso eléctrico que llega desde el detector. Este consta de un adaptador de impedancias y conectado inmediatamente después del detector.

Posteriormente la señal pasa al amplificador, a través de un cable coaxial, el cual amplía la señal y lo transforma en modo cuadrado. Este proceso hace que la señal pueda ser analizada de manera más precisa por los dispositivos a los que llega este impulso.

- Discriminador

La totalidad de los fotones recogidos en el detector no corresponden a las emitidas por transiciones Mössbauer. De hecho, la mayoría de los fotones corresponde a distintos procesos de desexcitación. Por ello, la función del discriminador es reducir la contribución que pueden tener estos otros procesos, limitando el paso únicamente los fotones que poseen energías cercanas a las transiciones Mössbauer. La figura 3.4, muestra el espectro de la fuente radioactiva ^{57}Co , entre las energías 2 y 32 KeV. Se observa que existen contribuciones de rango de energía de rayos X de una intensidad alta. Estas corresponden a procesos de desexcitación a nivel electrónico.

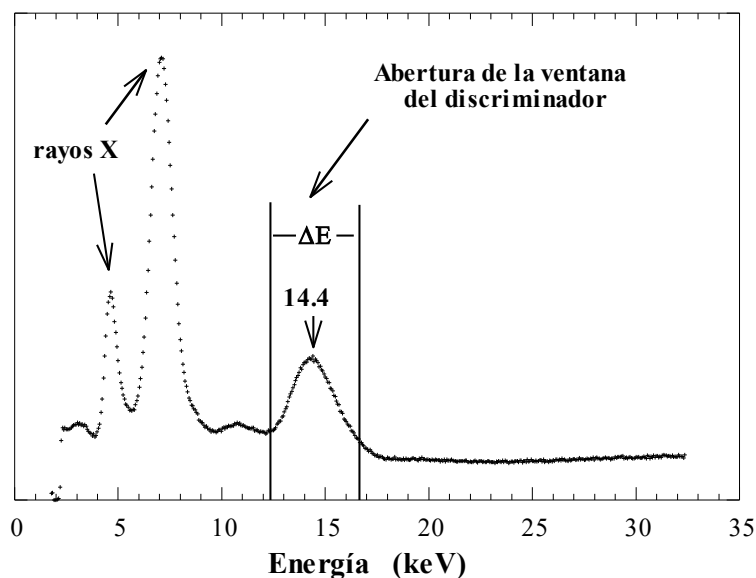


Figura 3.4: Espectro de la fuente radioactiva utilizada en espectrómetro Mössbauer [4].

- Analizador multicanal

Este dispositivo tiene como función clasificar y colocar los pulsos o señales según la energía que posean. El analizador utilizado contiene 512 canales, es decir, el rango de las energías de los fotones emitidos por el núcleo será dividido en 512 intervalos iguales. Cada intervalo o canal corresponde a un rango de energías ΔE . Cada canal recoge las cuentas durante el tiempo en el que la fuente pasa de una velocidad v a $v+\Delta v$. Pasado este tiempo, el canal se cierra y se abre el siguiente, y almacena las cuentas correspondientes al siguiente incremento de velocidad, completando la misma operación en cada canal.

- Criostato

La muestra absorbente se sitúa dentro del criostato. Su finalidad es mantener el interior de ello a una temperatura muy baja. Para ello, en este caso se utiliza Helio gas, es decir, un criostato de ciclo cerrado. De esta manera es posible hacer mediciones a temperaturas tan bajas como unos pocos grados Kelvin.

3.2 Proceso de obtención de los espectros

En primer lugar, es necesario hacer una calibración del espectrómetro previo a la colocación de la muestra a analizar. La calibración de la escala de energías del espectrómetro Mössbauer es esencial para obtener unos datos adecuados para su posterior análisis. Para este espectrómetro, el cual está dotado de una fuente de ^{57}Co , la calibración se lleva a cabo con una lámina de hierro metálico puro a temperatura ambiente. Concretamente, este posee una fase cristalina muy estable con estructura de red cubica centrada, $\alpha\text{-Fe}$ o bcc-Fe . Es una referencia adecuada para la calibración ya que se conoce de manera exacta cuales son las características hiperfinas del espectro de resonancia de éste a temperatura ambiente. Por ello, es habitual referir los datos obtenidos de los distintos compuestos analizados por espectroscopia Mössbauer en base a la calibración hecha mediante el $\alpha\text{-Fe}$, como pueden ser el desplazamiento isomérico.

Posteriormente, se coloca la muestra a analizar, el acero inoxidable o “stainless steel” en este experimento. El grosor de la muestra dependerá de la concentración de núcleos

Mössbauer que posea ésta, es decir, una muestra de una concentración alta de núcleos Mössbauer requerirá un grosor menor mientras que uno de concentración baja necesitara un grosor mayor para que se pueda obtener una lectura óptima de absorción. La muestra utilizada posee un grosor de 20 μm , ya que la concentración de núcleos Mössbauer en el acero inoxidable es alta, el cual contiene 8-12 mg de Fe natural por cm^2 , siendo un 2% de ^{57}Fe [3, 4]. El acero inoxidable es un compuesto paramagnético en todo el rango de temperaturas a medir, por tanto, al no estar sometido a ningún campo magnético externo el sistema, no habrá interacciones magnéticas. Por esta razón solo presenta un pico de absorción y su análisis resulta sencillo.

Las velocidades entre las que oscilara el transductor serán desde -8,5 mm/s hasta 8,5 mm/s. El centro de desplazamiento de velocidades, es decir la posición para el canal de energía asociado a la velocidad $v_{\text{transductor}} = 0$, estará situado en el centro del espectro del $\alpha\text{-Fe}$ de calibración, ya que los resultados obtenidos se muestran con referencia al compuesto de calibración. El rango de velocidades escogida es el adecuado para los propósitos de este trabajo y del compuesto a analizar, ya que como se ha comentado anteriormente, el acero inoxidable solo presenta un pico de resonancia de absorción y la anchura de líneas de la transición nuclear del ^{57}Fe es lo suficientemente estrecha como para ser visualizada correctamente utilizando las velocidades comentadas con anterioridad.

Una vez hecho estos ajustes, se procede a la obtención del espectro Mössbauer del compuesto. La figura 3.5 muestra esquemáticamente el proceso de una manera ordenada y clara. El transductor se mueve con aceleración constante mediante una señal triangular que envía el generador, haciendo que el transductor recorra las velocidades de menor a mayor en primer lugar, y a continuación los recorra de mayor a menor. Cada intervalo de incremento de velocidad Δv está asociado con cada uno de los 512 canales de energía que posee el analizador. Estos canales recogen la cuenta de los fotones que llegan al detector durante el tiempo que cada uno de éstos esté abierto, aproximadamente 100 μs . Pasado ese tiempo, ya que el transductor ha modificado su velocidad, el canal referido a ese intervalo de velocidad se cierra y procede a abrirse el siguiente canal; así hasta finalizar el paso por los 512 canales.

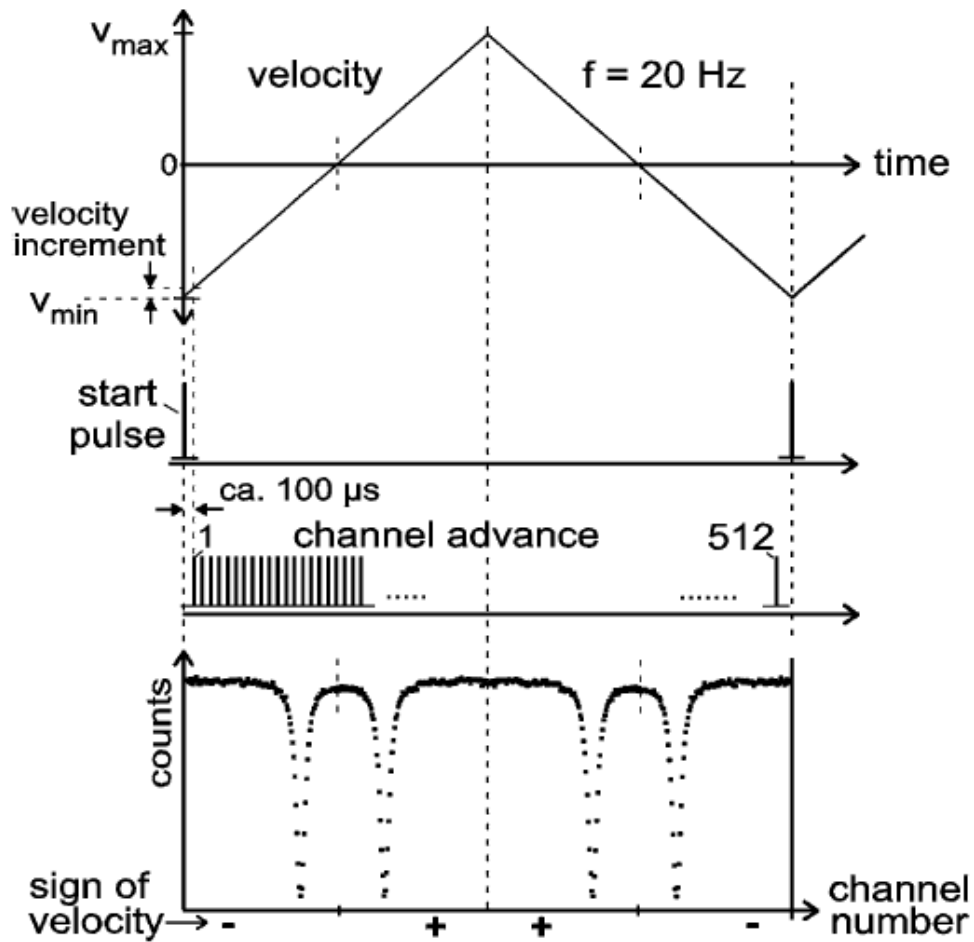


Figura 3.5: Esquema del proceso de obtención del espectro [3].

La primera medida del espectro se realiza a 20°K , y sucesivamente se va aumentando la temperatura, en intervalos de 10°K , hasta llegar a los 470°K . El tiempo invertido en la obtención de los espectros para cada temperatura es aproximadamente de 2 horas y media, el cual es suficiente para obtener un espectro adecuado para los objetivos y posteriores cálculos.

Concluidas las medidas, los datos recogidos por el analizador multicanal son trasferidos a un ordenador y son ordenados en una columna de n números para posteriormente ser procesados y analizados, siendo n el número de canales del analizador, en este caso 512. La figura 3.6 muestra el espectro contabilizando el número de fotones detectados por cada canal de energía.

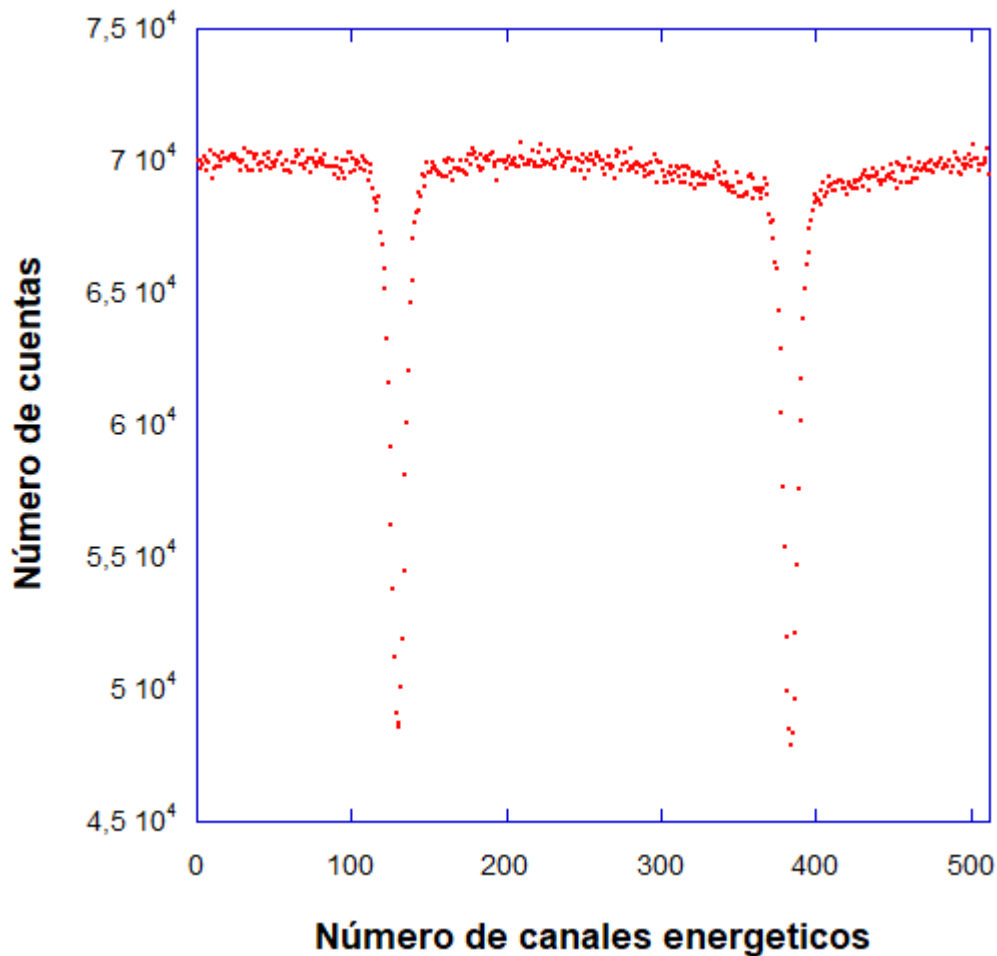


Figura 3.6: Espectro correspondiente a 90°K sin doblar que se obtiene mediante los datos recogidos por el analizador multicanal. Este, muestra el número de cuentas detectados por cada canal energético.

Es posible ver tanto en la figura 3.5 como en la 3.6, que el espectro obtenido está compuesto por dos imágenes antisimétricas especulares, por la razón de que la señal suministrada por el generador es triangular. Debido a este hecho, mediante un programa informático se procede a hacer un doblamiento del espectro inicialmente obtenido por el analizador multicanal para conseguir representar el espectro como una media de las dos imágenes antisimétricas. El programa analiza el espectro y busca el canal en el cual se encuentra el plano especular para ejecutar el doblamiento. Esto hace que se reduzca el número de canales a la mitad, 256.

Además del doblamiento del espectro, el programa procesa el número de cuentas que ha habido en cada canal para posteriormente identificando cual ha sido el canal con el

mayor número de cuentas y cual ha sido esta cifra; obtener el espectro descrito en función de la absorción relativa de la muestra.

Por último, al estar los canales energéticos relacionados con la velocidad al que se mueve el transductor, el programa transforma el número de canales en la velocidad del transductor que está asociada con cada canal. Por tanto, el espectro, finalizado el procesamiento del programa, estará descrito por la absorción relativa de la muestra para cada intervalo de velocidad del transductor. De esta forma se puede extraer la información necesaria de manera sencilla. Este proceso se lleva a cabo con cada uno de los espectros obtenidos para las distintas temperaturas.

4 Resultados y discusión

La figura 4.1, muestra el espectro Mössbauer para el acero inoxidable a una temperatura de 50°K, una vez éste ha sido doblado y calibrado. Se puede observar que existe un pico de resonancia un punto cercano en que la velocidad del transductor es cero. Este pico manifiesta el hecho de que se ha experimentado una absorción de fotones por partes de los núcleos de ^{57}Fe sin que haya habido retroceso de estos. Esto es una evidencia experimental en sí, como se ha explicado en el fundamento teórico de manera detallada: la existencia de la resonancia de absorción nuclear sin retroceso o efecto Mössbauer.

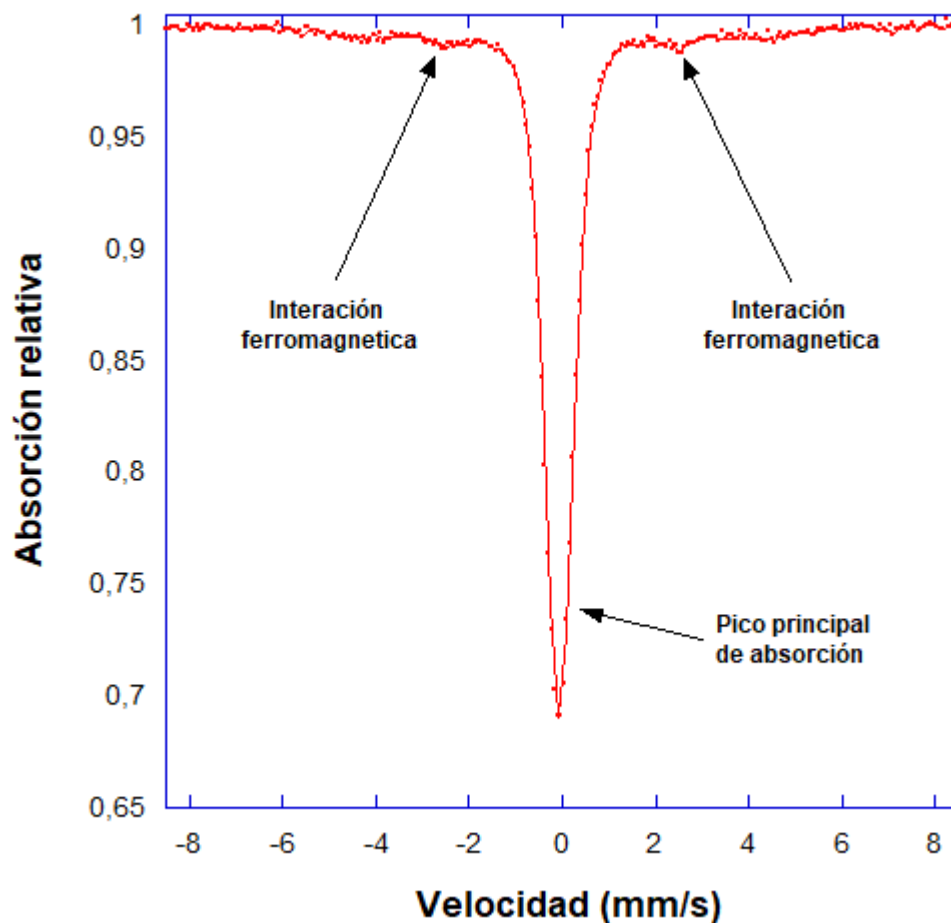


Figura 4.1: Espectro Mössbauer del acero inoxidable para 50°K de temperatura. El eje Y representa el ratio entre los fotones recibidos por el detector y el número de fotones total emitido. El eje X muestra el rango de velocidades del transductor.

La razón por la cual el pico no está centrado en $v = 0$ es debido a que la estructura del acero inoxidable y la del α -Fe son muy similares, pero no idénticos. El entorno de los núcleos de ^{57}Fe en el α -Fe y el acero es ligeramente distinto debido a la presencia de núcleos de carbono.

La figura 4.1 también muestra el porcentaje de fotones que han sido absorbidos mediante el efecto Mössbauer. Este porcentaje llega hasta un 31,5%, un valor mucho mayor que el obtenido por R.L.Mössbauer en su demostración experimental del efecto, en el cual solo observo un 1% [1]. Esto se debe a que Mössbauer utilizó ^{191}Ir , en vez de un compuesto con núcleos de ^{57}Fe , siendo estos últimos núcleos mucho menos pesados. Además, esta absorción depende de la cantidad de los isotopos resonantes y de una optimización tanto de la muestra como del proceso.

Por otra parte, a pesar de que esta figura muestra un único pico de resonancia, es posible visualizar pequeñas perturbaciones en la absorción relativa a ambos lados del pico principal. Esto es debido a que la muestra estudiada posee una pequeña cantidad de átomos con carácter magnético, hecho que no es esperado, ya que el acero inoxidable se comporta de manera paramagnética en todo el rango de temperaturas analizado.

La figura 4.2 muestra una comparativa entre los espectros Mössbauer del acero inoxidable a temperaturas de 20°K, 50°K, 270°K y 460°K. Se observa una disminución del pico de resonancia a medida que la temperatura aumenta. La absorción relativa disminuye de 0,340 a 0,274, es decir, de un 34,0% a un 27,4%. Este resultado confirma la dependencia del factor sin retroceso con la temperatura de tal manera que, aumentando la temperatura del sistema el número de eventos Mössbauer disminuye. Esto es debido al aumento de la energía interna de los núcleos al aumentar la temperatura.

En la misma figura, se puede observar un cambio en la ubicación de los picos de resonancia con respecto a la velocidad, es decir, que al aumentar la temperatura este pico progresa a velocidades menores. Este desplazamiento del pico, o desplazamiento isomérico se debe a la interacción monopolar eléctrica entre la carga nuclear y la densidad electrónica en el núcleo. El hecho de que el desplazamiento isomérico tienda a velocidades menores al aumentar la temperatura es debido a la que diferencia energética entre los estados fundamental y excitado nucleares disminuye con el incremento de la temperatura.

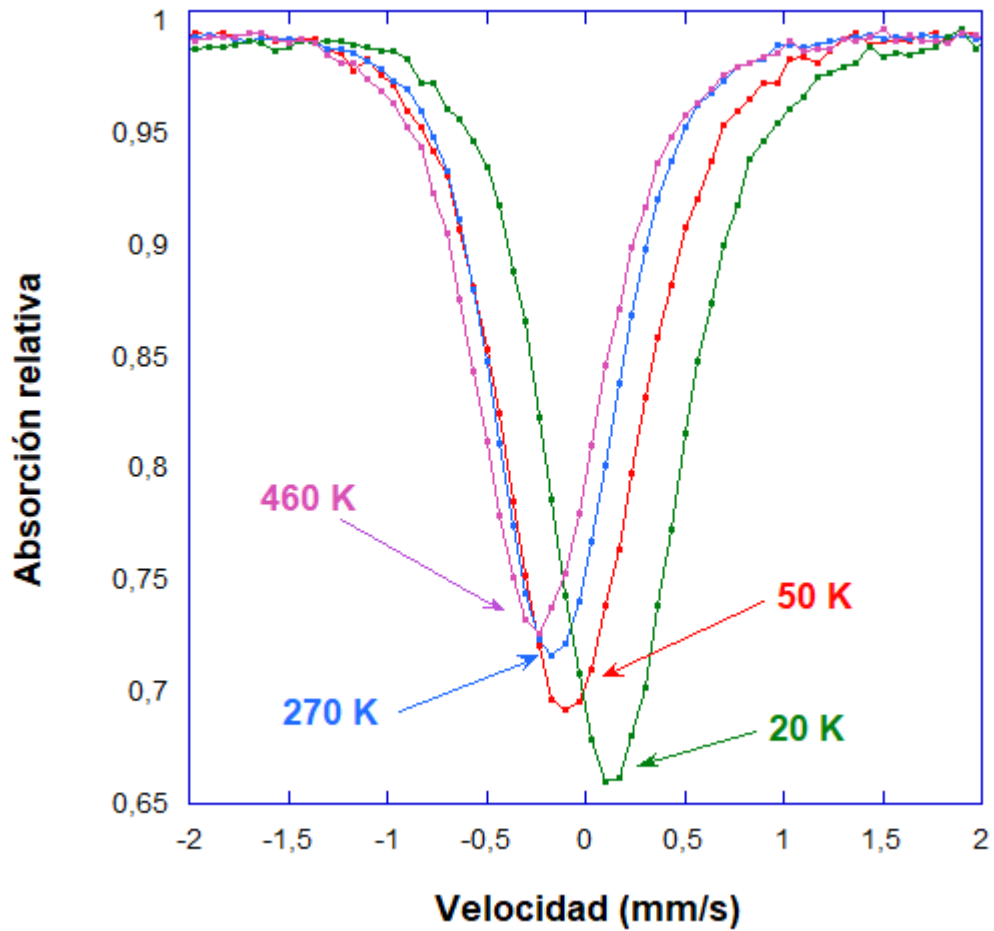


Figura 4.2: Comparativa entre los espectros Mössbauer del acero inoxidable a temperatura de 20°K (verde), 50°K (rojo), 270°K (azul) y 460°K (morado).

En la figura 4.3 se observa la relación entre el logaritmo neperiano de la absorción relativa de la muestra con respecto a la temperatura, según los datos obtenidos experimentalmente. Se han relacionado estas dos magnitudes de esta manera debido a la relación que expone la formulación del apartado 1.5:

$$f(T) = \exp \left[-\frac{E_R}{k_B \Theta_D} \left(\frac{3}{2} + \frac{\pi^2 T^2}{\Theta_D^2} \right) \right] \quad (1.8)$$

para temperaturas bajas ($T \ll \Theta_D$) y

$$f(T) = \exp \left[\frac{6E_R}{k_B \Theta_D^2} T \right] \quad (1.9)$$

para temperaturas altas ($T > \Theta_D$).

En ella es posible distinguir dos intervalos de temperatura, en los cuales la relación entre los dos términos expuestos en la gráfica es distinta. En el rango de temperaturas bajas, es decir, desde los 20°K hasta los 250-270°K aproximadamente (delimitada con las barras negras), la relación entre el logaritmo neperiano de la absorción relativa y la temperatura es cuadrática.

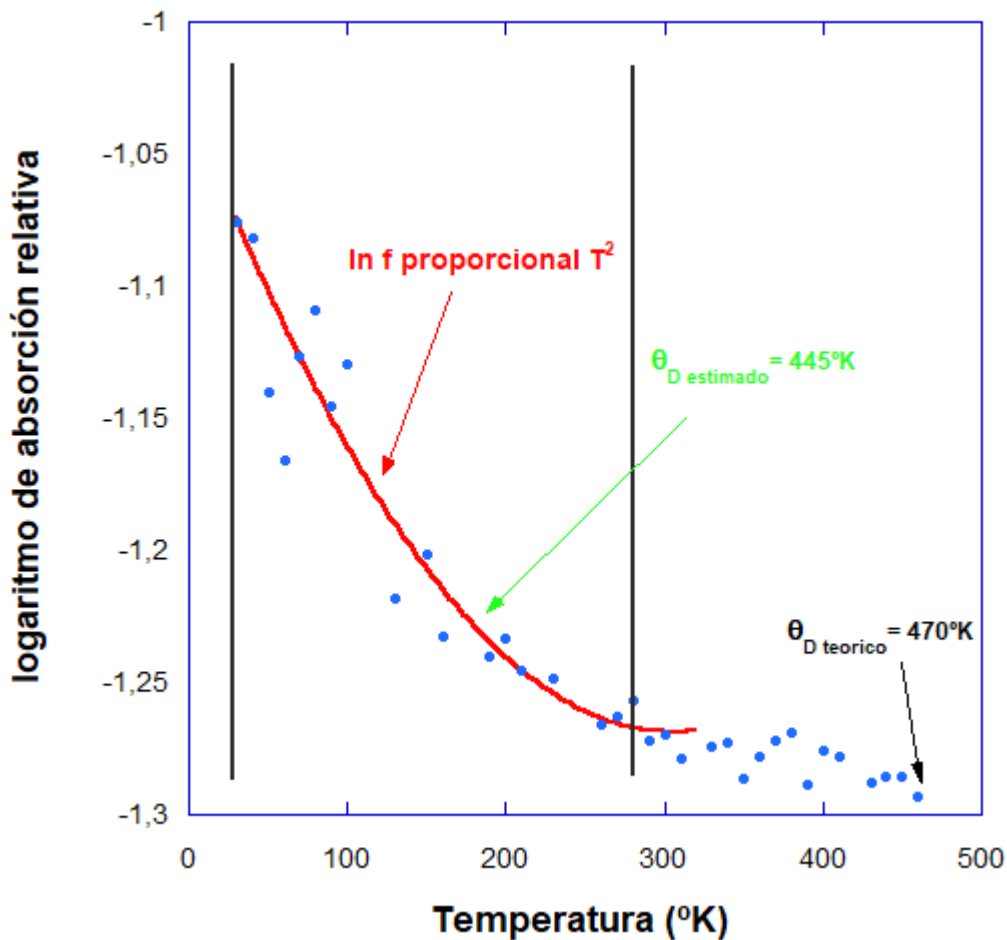


Figura 4.3: Relación entre el logaritmo neperiano de la absorción relativa y la temperatura según los datos obtenidos. La curva (roja) muestra una relación cuadrática para temperaturas bajas ($\theta_D \gg T$). Las dos barras negras muestran el intervalo de temperaturas utilizado para hallar la temperatura de Debye.

Este resultado es congruente con la base teórica expuesta en el apartado 1.5 y, concretamente con la ecuación (1.8). Esta, describe una relación cuadrática entre estos dos términos a temperaturas $T \ll \Theta_D$, siendo la temperatura de Debye del acero inoxidable aproximadamente de 470°K, según la bibliografía consultada [8].

A su vez, existe otra región de temperaturas, desde aproximadamente 230°K-250°K hasta los 470°K, (la temperatura más alta a la cual se han realizado medidas). En este intervalo, la figura muestra que se rompe la proporción cuadrática y la relación entre ambos términos no es clara. La teoría, no entra en contradicción con este hecho, ya que la formulación descrita, ecuaciones (1.8) y (1.9), no explica cual es el comportamiento del logaritmo neperiano de la absorción relativa con respecto a la temperatura en la región térmica $T \sim \Theta_D$.

Basándose en los datos obtenidos por regresión parabólica en el intervalo de las bajas temperaturas, delimitado por barras negras en la figura 4.3, y mediante la formulas (1.8), ha sido posible calcular la temperatura de Debye para el acero inoxidable.

La temperatura de Debye obtenida para la muestra de acero inoxidable ha sido:

$$\theta_D = 445 \pm 26 \text{ } ^\circ K$$

La temperatura de Debye obtenida comparada con la teórica (470°K) [8] se ajusta realmente bien, además de que el valor teórico se solapa con el resultado, ya que el error cometido es de un 5% aproximadamente. El error cometido es aceptable debido distintos factores que se deben tener en cuenta, los cuales se expodrá a continuación.

El hecho de que la muestra presente ciertas débiles interacciones ferromagnéticas, hacen que el espectro, y consecuentemente la absorción relativa se vean ligeramente perturbadas. Esto conlleva que el pico de resonancia principal presente una absorción relativa menor a la que correspondería a una muestra de acero inoxidable totalmente paramagnética. Puesto que los cálculos llevados a cabo solo han tenido en cuenta la absorción relativa del pico principal, el factor sin retroceso calculado no ha tenido en cuenta la absorción relativa de esas pequeñas perturbaciones. El porcentaje estimado de estas perturbaciones con respecto a la absorción del pico principal representaría entre un 3-5%.

Por otra parte, una duración más prolongada de la muestra a la radiación gamma para la obtención del espectro para cada una de las temperaturas supondría un aumento del

número de fotones que recibe el detector y, también, aumentaría el número de eventos Mössbauer. Esto haría que la cuenta de los fotones para cada uno de los canales energéticos aumentase, haciendo que estadísticamente se obtengan espectros mejor definidos y una mejor cuantificación de la absorción relativa de la muestra. Por tanto, sería posible obtener cálculos más exactos obteniendo mejores resultados finales.

Es necesario tener en consideración que la temperatura de Debye es una propiedad obtenida de manera teórica, ya que este está basado en el modelo teórico de los sólidos de Debye. A pesar de que las fórmulas utilizadas para el cálculo de la temperatura de Debye consiguen relacionar éste con la absorción relativa o la fracción sin retroceso, el modelo de Debye se ha descubierto que presenta ciertas inexactitudes en la descripción de los sólidos. Por tanto, es razonable que exista una cierta diferencia entre los valores experimentales y los datos teóricos de las temperaturas de Debye de las muestras.

Además de estas tres razones importantes, podrían existir otros pequeños factores, principalmente relacionados con el montaje experimental, que no tienen apenas relevancia en comparación con los anteriores.

Por último, hay que puntualizar que no ha sido posible calcular la temperatura de Debye mediante la fórmula (1.9), puesto que no se ha recogido apenas ningún dato en el rango de temperaturas en el que rige esa fórmula, es decir, temperaturas superiores a Θ_D .

5 Conclusiones y perspectivas

En este trabajo ha sido posible observar la resonancia de absorción nuclear sin retroceso o efecto Mössbauer mediante el método de la espectroscopia del mismo nombre. A su vez, ha sido posible verificar que las líneas de absorción observadas poseen las características descritas en el fundamento teórico, cumpliendo así el primero de los objetivos. A pesar de ello, hay que puntualizar que se han observado interacciones ferromagnéticas débiles en la muestra analizada del acero inoxidable, lo cual no era esperado debido a que teóricamente, el acero inoxidable es un compuesto paramagnético en el rango de temperaturas analizado. Esto quizá haya sido debido a la degradación de la muestra.

Además, se ha comprobado que existe una relación entre la temperatura del sistema y la absorción relativa de la muestra, relacionada a su vez con el factor sin retroceso. El aumento de la temperatura del sistema provoca una disminución del factor sin retroceso. Sin embargo, esta relación es distinta según la región térmica: a temperaturas mucho menores que la temperatura de Debye de la muestra, el logaritmo neperiano de la absorción relativa disminuye cuadráticamente con respecto a la temperatura. Por otro lado, esta relación se vuelve lineal a medida que la temperatura aumenta y es cercana a la temperatura de Debye del acero inoxidable. Por tanto, el segundo objetivo de este trabajo ha sido completado exitosamente, puesto que la base teórica corrobora estas observaciones.

Finalmente, se ha conseguido obtener una buena estimación de la temperatura de Debye del acero inoxidable, utilizando para ello los resultados obtenidos en la región de temperaturas mucho menores que la temperatura de Debye, es decir, cuando la relación entre el logaritmo neperiano de la absorción relativa y la temperatura es cuadrática. Consecuentemente, se concluye que ha sido posible satisfacer el último de los objetivos de este trabajo.

A la vista de los resultados y análisis llevados a cabo, es conveniente comentar que la espectroscopia Mössbauer es una excelente herramienta para lograr datos sobre las propiedades de los compuestos que poseen núcleos Mössbauer.

Igualmente, esta misma técnica ha sido un buen método para obtener un resultado adecuado para la temperatura de Debye de compuestos con núcleos Mössbauer. No obstante, es necesario mencionar que la temperatura de Debye es una temperatura teórica, la cual está basada en la teoría de Debye de los sólidos.

6 Bibliografía

- [1] R.L. Mössbauer, *Nobel Lecture, December 11*, (1961)
- [2] M. Kalvius, P. Kienle, *The Rudolf Mössbauer Story: His Scientific Work and Its Impact on Science and History*, (Springer, 2012)
- [3] P. Gütlich, E. Bill, A.X. Trautwein, *Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry: Fundamentals and Applications*, (Springer, 2011)
- [4] J.J. Sáiz Garitaonandia, *La espectroscopia Mössbauer en el estudio de transiciones y transformaciones de fase magnéticas*, (Tesis doctoral, Universidad del País Vasco, 1998)
- [5] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, (Harcourt College Publishers, 1976)
- [6] T.E. Cranshaw, B.W. Dale, G.O. Longworth, C.E. Johnson, *Mössbauer spectroscopy and its applications*. (Cambridge University Press, 1985)
- [7] P. Carretta, A. Lascialfari, *NMR-MRI, μ SR and Mössbauer Spectroscopies in Molecular Magnets*, (Springer, 2007)
- [8] S.M. Dubiel, J. Cieslak, B.F.O. Costa, *J. Phys. Cond. Matter* 22 (2010) 55402