A Szilárdtestfizikai Laboratórium összegyüjtött közleményei

I

Budapest

1970

MTA KFKI Könyvtár

40.280

987

2015

2011

KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KÖNYVTÁRA
leltárba vétel 40.280 alatt.
Budapest, 1971 év 3 hó 12-én

E l ő s z ó

Ennek a cikk-gyüjteménynek az elkészitésére nemcsak azért vállalkoztunk, mert a Központi Fizikai Kutató Intézet Szilárdtestfizikai Főosztálya már több mint 10 éve eredményesen tevékenykedik, hanem azért is, mert ugy éreztük, hogy a megjelent dolgozatok nagy többsége maradandó értéket képvisel és összegyüjtésük jó szolgálatot tesz azoknak, akik tájékozódni akarnak a Szilárdtestfizikai Főosztály eddigi munkájáról.

A Központi Fizikai Kutató Intézetben a szilárdtestfizikai kutatások viszonylag régi multra tekintenek vissza. A mágneses kutatások 1953-ban kezdődtek. 1959-től a kutató reaktor uj vizsgálati módszerek alkalmazását tette lehetővé, aminek hatására erőteljes fejlődés indult meg a szilárdtest kutatás számos aktuális területén.

A vizsgálatok lényegében két fő kérdés köré csoportosithatók: a mágneses szerkezetek és fázisátalakulások, valamint a hig mágneses ötvözetek legaktuálisabb kérdései köré.

Az elmult időszak alatt kutatóink jelentős nemzetközi visszhangot kiváltó eredményeket értek el mindkét területen. Bátran mondhatjuk, hogy eredményeink növelték mind Intézetünk, mint pedig egyes kutatóink nemzetközi tekintélyét. Különösen említésre méltó az elméleti szilárdtestfizika területén végzett tevékenységünk. Aligha szükséges hangsulyoznunk, hogy egyes kisérleti eredményeink /például uj mágneses szerkezetek felismerése, a fázisátalakulások törvényszerüségeinek feltárása, töltés- és spinsürüség perturbációk természetrajzának felderitése, stb./ éppen olyan nagy szerepet játszottak nemzetközi megbecsültségünk kialakulásában, mint az elméleti eredmények.

Reméljük, hogy a következő években mind az elvi kutatások, mind a gyakorlati alkalmazások terén ujabb eredmények születnek. Ehhez azonban a kutatók tehetsége, szorgalma és lelkesedése mellett megfelelő anyagi feltételek is szükségesek.

Meg vagyunk győződve arról, hogy a szilárdtestkutatás fontos szerepet tölt be a müszaki, tudományos és technológiai forradalomban és ezért reméljük, hogy kutatógárdánk megkapja azokat a lehetőségeket munkájához, amelyek a jövőt minden egyes tehetséges kutató számára vonzóvá teszik.

Pál Lénárd

T A R T A L O M J E G Y Z É K

PÁL LÉNÁRD: Ferromágneses anyagok energia-anizotrópiájának kvantumelméletéről 1
Magy. Fiz. F., 2, 397 /1954/

PÁL LÉNÁRD: Domen-fal eltolódások dinamikája 11
KFKI Közl., 2, 701 /1954/

PÁL LÉNÁRD, ZSIGMOND GYÖRGY: Szolenoid erős mágneses terek előállitására 17
KFKI Közl., 3, 300 /1955/

PÁL LÉNÁRD: Maghasadási vizsgálatoknál fellépő valószinüségszámitási kérdésekről 37
Magy. Fiz. F., 3, 31 /1955/

ZSIGMOND GYÖRGY: Laboratóriumi szolenoid közepes erősségü mágneses terek előállitására 49
KFKI Közl., 3, 690 /1955/

NAGY IMRE, PÁL LÉNÁRD, PALLAGI DEZSŐ: A magnetit permeabilitásának frekvencia függése mikrohullámu elektromágneses terekben 61
Magy. Fiz. F., 4, 359 /1956/

NAGY IMRE, PÁL LÉNÁRD: Ferromágneses rezonancia vizsgálata különböző anyagokban 72
KFKI Közl., 4, 450 /1956/

PÁL LÉNÁRD: Hexagonális szerkezetü kristályszemcsékből álló ferromágneses anyagok differenciális szuszceptibilitásának térerősségtől való függése erős mágneses terekben . . . 84
Magy. Fiz. F., 4, 539 /1956/

PÁL LÉNÁRD: Az atomreaktorok stochasztikus folyamatainak elméletéről 91
KFKI Közl., 4, 594 /1956/

PÁL LÉNÁRD: A neutronok lelassitásának néhány kérdéséről 116
Mat. Kut. Int. Közl., 1, 41 /1956/

PÁL LÉNÁRD, TARNÓCZI TIVADAR: A kobalt differenciális szuszceptibilitásának hőmérséklettől való függése erős mágneses terekben 130
Magy. Fiz. F., 5, 29 /1957/

ÁDÁM ANDRÁS, BATA LAJOS: A diffuziós és a lelassulási-hossz mérése vizben 141
KFKI Közl., 6, 14 /1958/

ÁDÁM ANDRÁS, KOSÁLY GYÖRGY: A diffuziós és lelassulási-hossz meghatározásának néhány kérdéséről 152
KFKI Közl., 6, 14 /1958/

PÁL LÉNÁRD: Neutronsokszorozás statisztikus ingadozásai 160
KFKI Közl., 6, 222 /1958/

PÁL LÉNÁRD, NÉMETH GÉZA: Nagyenergiáju részecskékkel besugárzott szilárd testek rácssérüléseinek statisztikus elmélete 184
KFKI Közl., 6, 246 /1958/

PÁL LÉNÁRD, TARNÓCZI TIVADAR: Rendeződési folyamatok vizsgálata vas-aluminium ötvözetekben 200
KFKI Közl., 7, 265 /1959/

SZABÓ PÁL: Finomkristályos szénféleségek által szórt intenzitás számitásáról 211
KFKI Közl., 6, 147 /1958/

SZABÓ PÁL: Neutron-diffraktométer kollimátorának méretezése és elhelyezése 223
KFKI Közl., 6, 475 /1958/

ZSIGMOND GYÖRGY, TARNÓCZY TIVADAR: Homogén mágneses terek előállitása kompenzált szolenoiddal 233
KFKI Közl., 6, 420 /1958/

FOGARASSY BÁLINT, NÉMETH GÉZA: Uj potenciálfüggvény kétatomos molekulák számára 243
KFKI Közl., 7, 302 /1959/

FOGARASSY BÁLINT, NÉMETH GÉZA: Szilárd testek fajhőjéről és hőtágulásáról 253
KFKI Közl., 7, 312 /1959/

NAGY ELEMÉR, NAGY IMRE, TÓTH JÓZSEF: A rendezett fázis kialakulásának kinetikája Cu_3Au ötvözetben 272
KFKI Közl., 7, 276 /1959/

PÁL LÉNÁRD, NÉMETH GÉZA: Neutronok lelassulási idejének szórásáról 283
KFKI Közl., 7, 347 /1959/

SZABÓ PÁL: A totálreflexió befolyása neutron-kollimátorok méretezésére 288
KFKI Közl., 7, 257 /1959/

SZABÓ PÁL, KRÉN EMIL: Neutron-monokromatizálás céljára készitett nagy egykristályok orientálása 294
KFKI Közl., 7, 366 /1959/

SZABÓ PÁL: Finomkristályos szenek kristályszerkezeti rendezetlenségének kimutathatóságáról 303
KFKI Közl., 7, 296 /1959/

TOMPA KÁLMÁN: Relaxációs idők meghatározása fémekben elektron-mag kettős rezonancia alapján 309
KFKI Közl., 7, 115 /1959/

GORDON JÁNOS, SZABÓ PÁL: Neutron-diffraktométerekhez detektorként alkalmas nagy BF_3-os számlálócsövek 317
Magy.Fiz.F., 8, 211 /1960/

SZABÓ PÁL: Neutron-diffrakciós vizsgálatokra való felkészülés kapcsán elért eredményeinkről 323
KFKI Közl., 8, 189 /1960/

TARNÓCZI TIVADAR: A köbös módosulatu kobalt mágneses telitési törvényének kisérleti vizsgálata 328
KFKI Közl., 8, 31 /1960/

KISDINÉ KOSZÓ É., KROÓ NORBERT, PRAVETZKY ENDRE, ZSIGMOND GYÖRGY: Grafitból készült neutron-kollimátorok vizsgálata 336
Magy.Fiz.F., 9, 341 /1961/

KRÉN EMIL, SZABÓ PÁL: Egyszerü módszer nagy egykristályok előállitására alacsony olvadáspontu fémekből 343
Magy.Fiz.F., 9, 161 /1961/

KROÓ NORBERT: A vas teljes hatáskeresztmetszete hőmérsékletfüggésének mérése 346
KFKI Közl., 9, 4 /1961/

ZSIGMOND GYÖRGY: Laboratóriumi elektromágnes 350
KFKI Közl., 9, 357 /1961/

PRAVECZKI ENDRE: A mágnesezettség meghatározása alacsony hőmérsékleten a Green-függvény módszer alapján 361
KFKI Közl., 10, 423 /1962/

PRAVECZKI ENDRE: A Heisenberg-modell mágnesezettségének meghatározása a Green-függvény módszer alapján S> 1/2 esetén 365
KFKI Közl., 10, 427 /1962/

TARNÓCZI TIVADAR: Fe_3Al rendeződés-kinetikájának vizsgálata mágneses méréssel 371
KFKI Közl., 10, 93 /1962/

TÓTH JÓZSEF: Mérési módszer fémek és fémes ötvözetek differenciális termofeszültségének meghatározására 378
KFKI Közl., 10, 357 /1962/

MADARÁSZ ZOLTÁN: Bórtrifluorid töltésü proporcionális számlálócsövek 385
KFKI Közl., 11, 321 /1963/

MADARÁSZ ZOLTÁN, SZABÓ ZOLTÁN: Kombinált palládiumszelep 394
KFKI Közl., 11, 421 /1963/

PÁL LÉNÁRD, KISDINÉ KOSZÓ ÉVA: Termikus neutronok teljes hatáskeresztmetszetének mérésével kapcsolatos matematikai-statisztikai problémákról 397
KFKI Közl., 11, 1 /1963/

PRAVECZKI ENDRE: Az ideális spinhullám elmélet hőmérsékleti renormálása 414
KFKI Közl., 11, 355 /1963/

TOMPA KÁLMÁN, TÓTH FERENC: "Széles-jelü" /wide-line/ mag mágneses rezonancia spektrométer 443
Magy. Fiz. F., 11, 177 /1963/

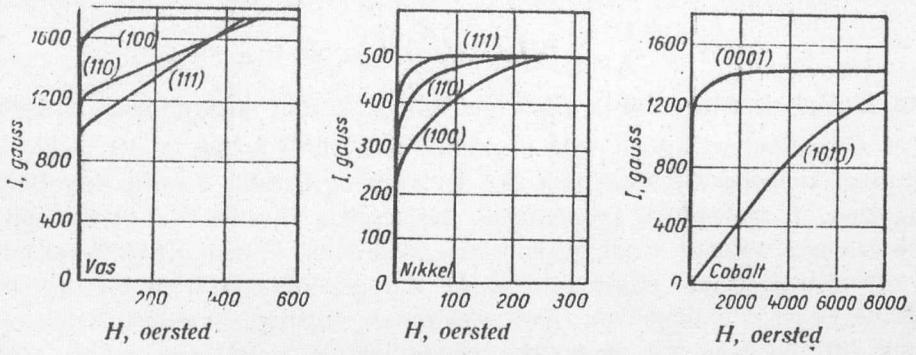
TOMPA KÁLMÁN, TÓTH FERENC: Hideg hengerlés és hőkezelés hatása ^{63}Cu mag mágneses rezonancia spektrumára réz fóliákban. . . . 456
KFKI Közl., 11, 215 /1963/

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT
II. 1954.

FERROMAGNESES ANYAGOK ENERGIA-ANIZOTRÓPIÁJÁNAK KVANTUMELMÉLETÉRŐL

PÁL LÉNÁRD
Központi Fizikai Intézet, Ferromágneses Osztály

A ferromágneses monokristályok mágnesezési görbéinek analízise azt mutatja, hogy a kristálytani tengelyekhez képest különböző irányokban felvett mágnesezési görbék nagymértékben különböznek egymástól (1. ábra). A mágnesezési görbéknek ebből az anizotrópiájából arra lehet következtetni, hogy a ferromágneses kristály szabad-energiájának mágneses része két tagból: egy



1. ábra
Ferromágneses egykristályok mágnesezési görbéinek anizotrópiája.

izotróp és egy anizotróp tagból áll. A ferromágneses monokristályok mágnesezési görbéinek anizotrópiájáról az első kísérleti munka csaknem ötven évvel ezelőtt, 1904-ben jelent meg [1]. *Weiss* magnetit és pirotin monokristályok mágnesezési görbéinél észlelte először a fentemlített anizotrópiát. Később *Beck* [2], *Webster* [3], *Honda, Kaya, Masuyama* [4] és még sokan mások végeztek ilyen irányú kísérleti vizsgálatokat a legkülönbözőbb ferromágneses anyagokon.

A kérdés elméleti tisztázására csak jóval később került sor. Ezen a téren *N. Akulov* [5] végezte az úttörő munkát. 1928-ban, kandidátusi disszertációjában megmutatta, hogy a ferromágneses anyagok energia-anizotrópiájának az okát a kristály rácspontjaiban elhelyezkedő elemi mágnesek multipol jellegű kölcsönhatásában kell keresni. Meg kell azonban jegyeznünk, hogy ez a koncepció, bár kvalitatíve helyesen tükrözte a tényleges viszonyokat, mégsem volt alkalmas arra, hogy az energia anizotróp részének nagyságrendjét helyesen adja meg. Mint *Becker* [6] és mások megmutatták, az elemi mágnesek közötti klasszikus multipol kölcsönhatás egy-két nagyságrenddel kisebb értéket szolgáltat az energia anizotróp részére a kísérleti úton meghatározott értékhez képest.

Egészen világos, hogy a kérdés csak kvantummechanikai úton tisztázható. Magának a ferromágnesség jelenségének szabatos tisztázása is csak a kvantum elmélet alapján vált lehetővé. *Frenkel* [7] és *Heisenberg* [8] megmutatták, hogy a hidrogén molekula Heitler—London-féle modelljének kristályrácsra való általánosításánál bizonyos feltételek mellett (amelyeket itt részletezni nem kívánunk) energetikailag kedvezőbb az elektron-spinek párhuzamos orientációja. Ez azt jelenti, hogy a kristály spontán módon telitésig mágnesezödne, ha csupán a spinmomentumokat párhuzamosító kicserélődési erők működnének. A kristály felületének lemágnesező hatása eredményezi a kisebb spontán mágneses tartományok (domének) létrejöttét bizonyos ú. n. könnyű mágnesezési irányokban.

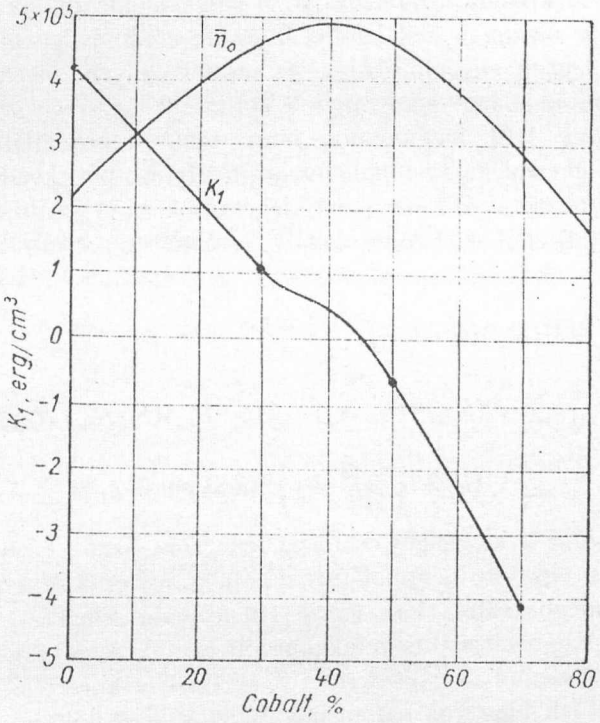
Könnyű megmutatni, hogy a Heitler—London-féle modellnek, bizonyos egyszerűsítő feltevések mellett, kristályokra való alkalmazása esetében az energia operátor mágneses részére a következő kifejezést írhatjuk fel:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\sum_{l}^{N}\sum_{m}' 2M(R_{lm})(\hat{S}_l \cdot \hat{S}_m) - 2\beta H\sum_{l}^{N}\hat{S}_l, \qquad (1)$$

ahol $M(R_{lm})$ az l-ik és m-ik atom elektronjai közötti kicserélődési integrál, $\hat{S}_l$ az l-ik atomhoz tartozó spin-operátor. H a külső mágneses tér, melynek irányával koordináta-rendszerünk OZ tengelye egybeesik, β pedig egy Bohr-magneton. A fentemlített egyszerűsítő feltevések a következők: *a*) eltekintettünk az egyes atomok sajátfüggvényeinek átfedésétől, *b*) nem vettük figyelembe az egy atomon belüli elektronok közötti kicserélődéseket, *c*) a *d*-elektronok sajátfüggvényeit *s*-állapotban lévő elektronok sajátfüggvényeivel helyettesítettük, *d*) elhanyagoltuk a vezetési elektronok és a be nem töltött héjak elektronjai közötti kölcsönhatást és *e*) természetesen nem vettük figyelembe az elektronok mágneses kölcsönhatását.

A fenti kifejezés izotróp a spin-tér forgás-transzformációval szemben úgy, hogy a kicserélődési kölcsönhatás, amely a ferromágnesség jelenségének közvetlen oka, izotróp energiaspektrumra vezet. Egészen nyilvánvaló, hogy az irány szerinti elfajulást bizonyos tenzor jellegű erők szüntethetik meg. Ilyen tenzor jellegű erők származtathatók az elektronok mágneses kölcsönhatásának figyelembevétele révén. A mágneses kölcsönhatás figyelembevételével egész sor szerző végzett számításokat. Ezek közül a szerzők közül megemlítjük *Bloch* [9], *Van Vleck* [10], *Vonsovsky* [11], *Brooks* [12] és *Tjáblikov* [13] nevét. Megjegyzendő, hogy Tjáblikov rendkívüli szellemes munkája kivételével, a legtöbb szerző a mágneses kölcsönhatást, mint kis perturbációs kölcsönhatást tekintette, ami sajnos nem jogosult, habár a mágneses kölcsönhatás energiája nagyságrendben két-három nagyságrenddel kisebb, mint a kicserélődési kölcsönhatás energiája. A helyzet ugyanis az, hogy a ferromágneses kristály mágneses kölcsönhatással nem perturbált energia-nívói igen közel vannak egymáshoz, úgyhogy az egyes nívók közötti különbség nagyságrendben egyezik a perturbáló mágneses kölcsönhatás energiájával. Ezt a

nehézséget rendszerint úgy szokták megkerülni, hogy feltételezik rendkívüli nagy külső mágneses tér jelenlétét, ami széthúzza a perturbálatlan állapotnak megfelelő energianívókat olyannyira, hogy elvben a mágneses kölcsönhatást fel lehet fogni, mint kis perturbációs tagot. Számításainkban mi eltekintünk ilyen mesterkélt feltevésektől és megmutatjuk, hogy követve *Holstein* és *Primakoff* [14] módszerét, energia-operátorunk diagonálisra való transzformálásánál nem kell alkalmazni perturbációs számítást.



2. ábra

Co—Ni homogén ötvözetrendszer anizotrópia-állandója és egy atomra eső átlagos mágneses momentuma különböző Co koncentrációk mellett.

A mágneses kölcsönhatás lehetséges formái a következők: a spin mágneses momentumok közötti kölcsönhatás, a spin és a pálya mágneses momentumok közötti kölcsönhatás és végül a pálya mágneses momentumok közötti kölcsönhatás. Az energia-operátor mágneses részének meghatározásánál nagy elvi nehézséget jelent az a tény, hogy a nem relativisztikus kvantummechanika nem adhat teljes képet a fentemlített kölcsönhatások természetét illetően. Így rendszerint bizonyos egyszerűsítő feltevésekhez kell folyamodni.

A spin mágneses momentumok közötti kölcsönhatás nem játszik döntő szerepet az energia anizotróp részének kialakításában, egyrészt nagyságrendileg kisebb értékre vezet a kísérletileg megállapítottnál, másrészt bizonyos esetekben kvalitatíve is rosszul tükrözi a viszonyokat. Például, mint ahogy disszer-

tációmban [15] is megmutattam, a kobaltvas homogén ötvözetrendszerben az energia anizotróp része éppen a maximális egy atomra eső átlagos spin mágneses momentumnak ($\bar{n}_0$) megfelelő kobalt koncentrációnál (cca 45% Co) válik nullává (2. ábra). Az energia anizotróp részének létrehozásában a döntő szerepet a spin és pálya mágneses momentumok kölcsönhatása játssza. Mint ismeretes, a kristályrács elektrosztatikus terében a pályamomentumok csak határozott orientációkat vehetnek fel, a kristálytani tengelyekhez képest, ilyenmódon a spin-momentumok a pályamomentumokkal való kölcsönhatás révén mintegy érzik a kristály szimmetriáját. A pálya momentumok közötti kölcsönhatásnak pedig olyannak kell lennie, hogy az eredő pálya mágneses momentum zérussal legyen egyenlő. Hogy az utóbbi milyen mechanizmus folytán biztosítódik, mind a mai napig nyitott kérdés.

Van Vleck [10] megmutatta, hogy reális reprezentálni a spin-pálya kölcsönhatást ekvivalens rövidhatótávolságú dipol-dipol, kvadrupol-kvadrupol, stb. kölcsönhatásokkal. Ha már most kiegészítjük az (1) alatti energia-operátort a spin-pálya kölcsönhatást reprezentáló multipol tagokkal, úgy a következő kifejezéshez jutunk:

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\sum_{l}^{N}\sum_{m}' 2M(R_{lm})(\hat{S}_l\cdot\hat{S}_m) +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{l}^{N}\sum_{m}' P(R_{lm})\{(\hat{S}_l\cdot\hat{S}_m)-3(\hat{S}_l\cdot\vec{R}_{lm})(\hat{S}_l\cdot\vec{R}_{lm})R_{lm}^{-2}\} +$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{l}^{N}\sum_{m}' Q(R_{lm})R_{lm}^{-4}(\hat{S}_l\cdot\vec{R}_{lm})^2(\hat{S}_m\vec{R}_{lm})^2 - 2\beta H\sum_{l}^{N}\hat{S}_l, \qquad (2)$$

$P(R_{lm})$ és $Q(R_{lm})$ a megfelelő csatolási tényezők. Sajnos ezen csatolási tényezők elméletileg egyelőre nem határozhatók meg, így értéküket a kísérleti adatok alapján kell megbecsülni. *Van Vleck* [10] hasonló kifejezést használt, de a sajátérték meghatározásánál nem alkalmazott következetes módszert. A kicserélődési kölcsönhatásból származó részt a Weiss-féle kifejezéssel helyettesítette, ami számításainak bizonyos fenomenologikus jelleget kölcsönöz. Az első végig következetes kvantummechanikai számítást *Tjáblikov* [13] adta hexagonális rendszerű kristályok esetére. A mi általunk közölt eljárás bizonyos értelemben általánosítása *Tjáblikov* eredményeinek, amennyiben mi számításainkat kiterjesztettük a szabályos rendszerű kristályok esetére is.

Az energia-operátornak csupán azon sajátértékeit kívánjuk meghatározni, amelyek a ferromágneses kristály olyan állapotaihoz tartoznak, amelyekben az

$$\hat{\Omega} \quad \sum_{l}^{N}\hat{S}_l$$

operátor átlagértéke alig különbözik a maximális sajátértékétől. Ez azt jelenti, hogy a kristály az abszolút telítettségnek megfelelő állapothoz közel van, a továbbiakban ezt az állapotot kvázi-telítettségi állapotnak nevezzük.

Célszerű bevezetni a következő új operátorokat:

$$\hat{S}_l^+ = \hat{S}_l^x + i\hat{S}_l^y$$
$$\hat{S}_l^- = \hat{S}_l^x - i\hat{S}_l^y \qquad (3)$$
$$\hat{n}_l = S - \hat{S}_l^z.$$

A kristály állapotát jellemzik a következő tulajdonságokkal bíró, ortonormált, teljes függvényrendszert alkotó állapotfüggvények:

$$\hat{n}_l \psi_{n_1 \dots n_l \dots n_N} = n_l \psi_{n_1 \dots n_l \dots n_N}$$
$$\hat{S}_l^+ \psi_{n_1 \dots n_l \dots n_N} = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{n_l - 1}{2S}\right)^{1/2} n_l^{1/2} \psi_{n_1 \dots n_{l-1} \dots n_N} \qquad (4)$$
$$\hat{S}_l^- \psi_{n_1 \dots n_l \dots n_N} = (2S)^{1/2} (n_l + 1)^{1/2} \left(1 - \frac{n_l}{2S}\right)^{1/2} \psi_{n_1 \dots n_{l+1} \dots n_N}$$

ahol n_l a spin-deviáció operátorának, $\hat{n}_l$-nek sajátértéke. Bevezetjük a második kvantálásból jólismert emissziós és abszorpciós operátorokat:

$$\hat{a}_l^* \psi_{n_1 \dots n_l \dots n_N} = (n_l + 1)^{1/2} \psi_{n_1 \dots n_{l+1} \dots n_N}$$
$$\hat{a}_l \psi_{n_1 \dots n_l \dots n_N} = n_l^{1/2} \psi_{n_1 \dots n_{l-1} \dots n_N}. \qquad (5)$$

Ezek segítségével:

$$\hat{S}_l^+ = (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{\hat{a}_l^* \hat{a}_l}{2S}\right)^{1/2} \hat{a}_l$$
$$\hat{S}_l^- = (2S)^{1/2} \hat{a}_l^* \left(1 - \frac{\hat{a}_l^* \hat{a}_l}{2S}\right) \qquad (5')$$
$$\hat{n}_l = \hat{a}_l^* \hat{a}_l$$

Ha most a kvázi telítettségnek megfelelő állapotra szorítkozunk, amikor is

$$\frac{1}{2} \frac{I_S(0, \infty) - I_S(T, H)}{I_S(0, \infty)} = \frac{\bar{\hat{n}}_l}{2S} = \frac{\bar{\hat{a}}_l^* \hat{a}_l}{2S} \ll 1 \qquad (6)$$

úgy a következő elhanyagolásokat eszközölhetjük:

1. $$\left(1 - \frac{\hat{a}_l^* \hat{a}_l}{2S}\right)^{1/2} \cong \left(1 - \frac{\bar{\hat{n}}_l}{2S}\right)^{1/2} \sim 1.$$

2. A $2S\bar{\hat{n}}_l$ mellett elhagyható az $\overline{\hat{n}_l \hat{n}_m}$, ha eltekintünk a spindeviációk közötti korrelációktól. Ugyanis ebben az esetben

$$2S\bar{\hat{n}}_l - \overline{\hat{n}_l \cdot \hat{n}_m} = 2S\bar{\hat{n}}_l \left(1 - \frac{\bar{\hat{n}}_m}{2S}\right) \sim 2S\bar{\hat{n}}_l .$$

3. Mivel átmeneti effektusokat nem vizsgálunk, elhagyjuk azokat a tagokat is, amelyek az $\hat{a}_l$ operátorok hármas szorzatait tartalmazzák.

Ezen elhanyagolások figyelembevételével, valamint a (3—5) összefüggések felhasználásával az energia-operátor a következő alakra hozható:

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 + \sum_{l>m}^{N} \{A(R_{lm})\hat{a}_l^* \hat{a}_m + B(R_{lm})\hat{a}_l^* a_l\} + 2\beta H \sum_{l=1}^{N} \hat{a}_l^* \hat{a}_l +$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{l>m}^{N} \{C^+(R_{lm})\hat{a}_l^* \hat{a}_m^* + C^-(R_{lm})\hat{a}_l \hat{a}_m\} + \tag{7}$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{l>m}^{N} \{D^+(R_{lm})\hat{a}_l^* \hat{a}_l^* + D^-(R_{lm})\hat{a}_l \hat{a}_l\},$$

ahol $A(R_{lm})$, $B(R_{lm})$, $C^{\pm}(R_{lm})$, $D^{\pm}(R_{lm})$ a koordináták bonyolult kifejezései. Ennek a kifejezésnek a diagonálisra való transzformálása két lépésben történik. Először az $\hat{a}_l$ operátorok Fourier transzformáltjának segítségével a (7) alatti kifejezést átalakítjuk. Meg kell jegyeznünk, hogy az átalakításnál nem vettük figyelembe a kristály véges-méretűségét, s ezzel mintegy $1/N$ nagyságrendű hibát követtünk el, ahol N a kristály atomjainak száma. Az átalakítás eredménye:

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 + \sum_{\lambda} U_\lambda \hat{\alpha}_\lambda^* \hat{\alpha}_\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} V_\lambda^+ \hat{\alpha}_\lambda^* \hat{\alpha}_{-\lambda}^* + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} V_\lambda^- \hat{\alpha}_\lambda \hat{\alpha}_{-\lambda} \tag{8}$$

$$\hat{\alpha}_l = N^{-1/2} \sum \hat{\alpha}_\lambda e^{-i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_l}, \quad \hat{a}_l^* = N^{-1/2} \sum \hat{\alpha}_\lambda^* e^{i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_l}. \tag{8'}$$

A második lépés két célszerűen választott lineáris transzformáció alkalmazásából áll, amelyek eredményeként a kvázi-telítettségi állapotnak megfelelő spektrum a következő alakba írható:

$$\hat{\mathcal{H}} = E_0 + \Delta E_0 + \sum_{\lambda} E_\lambda \hat{C}_\lambda^* \hat{C}_\lambda$$
$$\hat{C}_\lambda^* \hat{C}_\lambda = N_\lambda \qquad (N_\lambda = 0, 1, 2, \ldots) \tag{9}$$
$$\Delta E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} (E_\lambda - U_\lambda) \quad \text{és} \quad E_\lambda = (U_\lambda^2 - |V_\lambda|^2)^{1/2},$$

ahol

$$U_\lambda = 2S \sum_h M_h (1 - \exp i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_h) + \frac{1}{2} S \sum_h P_h (1 - \exp i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_h) + 2\beta H -$$
$$- \frac{1}{2} S \sum_h \{3P_h + (4S^2 - 4S + 1)Q_h\} z_h^2 R_h^{-2} (1 - \exp i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_h) +$$
$$+ \frac{1}{2} S \sum_h (SQ_h - 3P_h) + \tag{10}$$
$$+ \frac{1}{2} S(4S^2 - 4S + 1) \sum_h Q_h z_h^4 R_h^{-4} (1 - \exp i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_h) -$$
$$- \frac{1}{2} S(10S^2 - 7S + 1) \sum_h Q_h z_h^4 R_h^{-4} +$$
$$+ \frac{1}{2} S \sum_h \{9P_h + (6S^2 - 8S + 1)Q_h\} z_h^2 R_h^{-2}$$

és

$$V_\lambda^{\pm} = \frac{3}{4} S \sum_h P_h (R_h^{\pm})^2 R_h^{-2} (1 - \exp i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_h) +$$

$$+ \frac{1}{4} S (6S^2 - 5S + 1) \sum_h Q_h z_h^2 (R_h^{\pm})^2 R_h^{-4} - \qquad (11)$$

$$- \frac{1}{4} S (4S^2 - 4S + 1) \sum_h Q_h z_h^2 (R_h^{\pm})^2 R_h^{-4} (1 - \exp i\vec{K}_\lambda \cdot \vec{R}_h) +$$

$$+ \frac{1}{4} S \sum_h (SQ_h - 3P_h)(R_h^{\pm})^2 R_h^{-2}$$

mig

$$R_h^{\pm} = x_h^{+} i y_h .$$

Tekintettel arra, hogy a kicserélődési energia mintegy három nagyságrenddel nagyobb, mint a mágneses kölcsönhatás energiája, azaz $U_\lambda >> |V_\lambda|$ úgy $E_\lambda - t\,|V_\lambda| U_\lambda^{-1}$ hatványai szerint sorbafejtve és csupán a $|V_\lambda| U_\lambda^{-1}$-ben lineáris tagokat megtartva az energiaspektrum a következő egyszerű kifejezésre hozható:

$$E_{N_\lambda} \sim E_0 + \sum_\lambda U_\lambda N_\lambda \qquad (12)$$

$$(N_\lambda = 0, 1, 2, \ldots)$$

és

$$E_0 = -S^2 \sum_{l>m}^{N} M(R_{lm}) - 2\beta SNH + \frac{1}{2} S^2 \sum_{l>m}^{N} P(R_{lm}) + \frac{1}{8} S^2 \sum_{l>m}^{N} Q(R_{lm}) -$$

$$- \frac{1}{2} S^2 \sum_{l>m}^{N} \{3P(R_{lm}) + \frac{1}{2} Q(R_{lm}) - SQ(R_{lm})\} z_{lm}^2 R_{lm}^{-2} + \qquad (13)$$

$$+ \frac{1}{8} S^2 (4S^2 - 4S + 1) \sum_{l>m}^{N} Q(R_{lm}) z_{lm}^4 R_{lm}^{-4} .$$

Mielőtt a kristály szabad energiáját meghatároznánk, ki kell számolnunk az U_λ kifejezésében bizonyos, a kristály-szimmetriától függő összegeket. Mivel mind a kicserélődési, mind a multipol erők rövid hatótávolságúak, az összegezésnél csak a közeli szomszédokra szorítkoztunk. Ha még feltesszük, hogy $|K_1| << 1$, ami nem túlmagas hőmérséklet mellett igaz, akkor az U_λ-ra a következő kifejezéseket kapjuk hexagonális és köbös rendszerű kristályok esetében:

$$U_\lambda \sim U_0 + U_x^2 K_{\lambda x}^2 + U_y^2 K_{\lambda y}^2 + U_z^2 K_{\lambda z}^2 , \qquad (14)$$

ahol az U_0, U_x, U_y és U_z forgás-transzformációkkal szemben nem invariáns mennyiségek. Részletesen nem érdemes felírni őket, mivel eléggé bonyolult kifejezések.

A szabadenergiát a következőképpen kapjuk:

$$F = E_0 + kT \sum_\lambda \ln \left\{ 1 - \exp\left(- \frac{U_\lambda}{kT} \right) \right\} \qquad (15)$$

Az U_λ kifejezését behelyettesítve és az összegezést integrálásra váltva, köny-

nyen megmutatható, hogy:

$$F = E_0 + \frac{1}{2}\frac{N}{2\pi^2}(kT)^{5/2}(U_x U_y U_z)^{-1} L(\vartheta), \tag{16}$$

ahol

$$L(\vartheta) = \int_0^\infty \ln(1 - e^{\vartheta - z})\sqrt{z}\,dz$$

és

$$\vartheta = \frac{U_0}{kT}.$$

Hasonló kifejezést kapunk a szabályos rendszerű kristályok esetében is. Különválasztva a szabad-energia anizotróp részét, megengedett elhanyagolásokkal hexagonális kristályok esetében a következő eredményhez jutunk:

$$F_h^{(a)} \sim K_1(T)\cos^2\Theta + K_2(T)\cos^4\Theta + \cdots, \tag{17}$$

ahol Θ a hexagonális tengely és a mágneses intenzitás vektora közötti szög, K_1 és K_2 pedig az úgynevezett anizotrópia állandók

$$K_1(T) \sim K_{01}\{1 - T^{3/2}(\alpha_1 T + \alpha_0)\} \tag{18}$$

$$K_2(T) \sim K_{02}\{1 - T^{3/2}(\beta_1 T + \beta_0)\}. \tag{19}$$

Szabályos rendszerű kristályok esetében:

$$F_k^{(a)} \sim K(T)\{S_1^2 S_2^2 + S_2^2 S_3^2 + S_1^2 S_3^2\}, \tag{20}$$

ahol S_1, S_2, S_3 a mágneses intenzitás vektorának iránykoszinuszai a szabályos rendszerű kristály kristálytani tengelyeivel egybeeső koordináta rendszerben, míg

$$K(T) \sim K_0\{1 - T^{3/2}(\gamma_1 T + \gamma_0)\}. \tag{21}$$

A (18), (19), (21) kifejezésekben előforduló állandók pedig:

$$\alpha_0 = \frac{1}{12\pi^{3/2}}\left(\frac{k}{2SM}\right)^{3/2}\zeta(^3/_2)\,\frac{9P - \frac{1}{2}(78S^2 - 47S + 7)Q}{S\left\{3P - \frac{1}{8}(36S^2 - 28S + 5)Q\right\}}$$

$$\alpha_1 = \frac{1}{12\pi^{3/2}}\left(\frac{k}{2SM}\right)^{5/2}\zeta(^5/_2)\,\frac{3(4S^2 - 4S + 1)Q}{S\left\{3P - \frac{1}{8}(36S^2 - 28S + 5)Q\right\}} \tag{22}$$

$$\beta_0 = \frac{10}{12\pi^{3/2}}\left(\frac{k}{2SM}\right)^{3/2}\zeta(^3/_2)\,\frac{S - ^1/_5}{S(S - ^1/_2)},$$

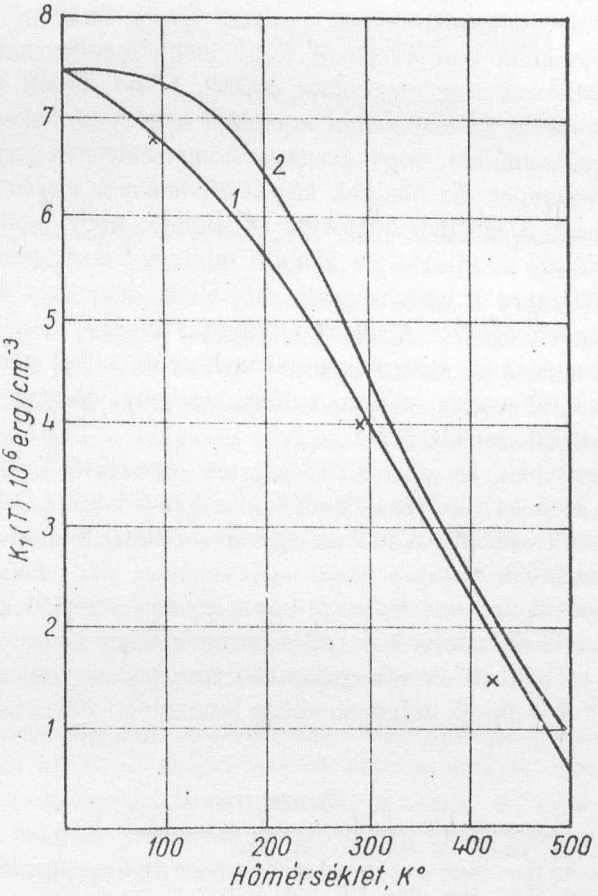
$$\beta_1 = -\frac{14}{17}\frac{1}{12\pi^{3/2}}\left(\frac{k}{2SM}\right)^{5/2}\zeta(^5/_2)\,\frac{1}{S} \tag{23}$$

$$\gamma_0 = \frac{10}{8\pi^{3/2}}\left(\frac{k}{2SM}\right)^{3/2}\zeta(^3/_2)\,\frac{S - ^1/_5}{S(S - ^1/_2)},$$

$$\gamma_1 = -\frac{1}{8\pi^{3/2}}\left(\frac{k}{2SM}\right)^{5/2}\zeta(^5/_2)\,\frac{1}{S}, \tag{24}$$

ahol $\zeta(x)$ a Riemann-féle zetafüggvény. A kísérleti eredményekkel való összehasonlítás előtt rá kell mutatnunk arra, hogy eredményeink nem mondanak ellent a termodinamika *Nernst*-féle tételének, amennyiben

$$\lim_{T \to 0} \frac{dF^{(a)}}{dT} \to 0,$$



3. ábra

A kobalt első anizotrópia-állandójának hőmérséklettel való függése. Az 1 görbét a (18), (19)-es kifejezések alapján számítottuk, a 2 görbét pedig Vonsovsky [11] formulája alapján. x-el jelöltük K. Honda és H. Masumoto (Sci. Rep. Tohoku Univ. *20*. 323. 1931.) kísérletileg meghatározott mágnesezési görbéi alapján L. M. Bozorth (Journ. Appl. Phys. *8*. 575. 1937.) által számított anizotrópia állandó értéket.

ami pl. nem mondható el a *Van Vleck* által kapott kifejezésről. Van Vleck formulája az anizotrópia állandó hőmérsékleti függésére helytelen következtetéseket enged meg. Szabályos rendszerű kristályok esetében a Van Vleck által adott kifejezés olyan, hogy

$$\lim_{T \to 0} \frac{dF^{(a)}}{dT} \to + \infty,$$

ami rendkívüli súlyos szépséghiba. Hexagonális kristályok esetében pedig a kísérleti tapasztalattal ellentétben nem tudja megmagyarázni a K_1 jelváltását kobalt esetében. Meg kell jegyeznünk, hogy a kobalt első anizotrópia állandójának hőmérsékleti függésére *Vonsovsky* először vezetett le használható kifejezést. Sajnos az általa alkalmazott módszer erősen bírálható. Bár számításait az abszolút zéruspont környezetében végzi, mégis a gerjesztett állapotok figyelembevétele határozza meg eredménye alakját. Mivel kobalt esetében az első gerjesztett állapot és az alapállapot energiája közötti különbség kb. 10^{-12} erg, úgy nagyon valószínűtlen, hogy alacsony hőmérsékleten a gerjesztett állapotok játszanának főszerepet. Az általunk kapott eredmények alacsony hőmérsékleten elég jól egyeznek a kísérleti adatokkal. Kiadódott, hogy szabályos rendszerű kristályok esetében az anizotrópia állandó mintegy tízszer gyorsabban csökken a hőmérséklettel mint a telítettségnek megfelelő mágneses intenzitás. Ez az eredmény kitűnően egyezik *Kirenszkij* [16] és *Titov* [17] mérési eredményeivel.

Nikkel esetében az összehasonlítás nehezebb, mivel a nikkel Curie-hőmérséklete nem túl magas, viszont extrém alacsony hőmérsékleteken csupán két mérési adat áll rendelkezésre.

Kobalt esetében, ha $P \sim 3.10^{-6}$ erg és $Q \sim 6.10^{-17}$ erg, akkor formulánk leírja az első anizotrópia állandók kb. 250 C° körül kísérletileg észlelt előjel változását és általában jobban egyezik a kísérleti adatokkal, mint Vonsovszky formulája (3. ábra).

Hangsúlyozni szeretnénk, hogy bár tárgyalási módunk következetes volt, kiindulási energia-operátorunk a reális ferromágneses kristály viszonyait nem tükrözi teljes mértékben. A spin-pálya kölcsönhatásnak pontosabb figyelembevételéről egyik következő dolgozatunkban szeretnénk beszámolni.

IRODALOM

[1] *P. Weiss*, Journ. de Phys. *3*, 194, 1904.
[2] *V. Beck*, Jahr. Sch. der Nat. Ges. in Zürich *63*, 116, 1918.
[3] *Webster*, Proc. Roy. Soc. *107*, 496, 1925.
[4] *Honda, Kaya, Masuyama*, Nature 117, 1926.
[5] *N. Akulov*, Z. Phys. *52* 389, 1928.
[6] *R. Becker*, Z. Phys. *62*, 253, 1930.
[7] *J. Frenkel*, Z. Phys. *49*, 31, 1928.
[8] *W. Heisenberg*, Z. Phys. *49*, 619, 1928.
[9] *F. Bloch* u. *G. Gentile*, Z. Phys. *70*, 395, 1931.
[10] *J. H. Van Vleck*, Phys. Rev. *52*, 1178, 1937.
[11] С. Вонсовский, ЖЭТФ *8*, 1104, 1938.
[12] *H. Brooks*, Phys. Rev. *58*, 909, 1940.
[13] С. Тябликов, ЖЭТФ *20*, 661, 1950.
[14] *T. Holstein* a. *H. Primokoff*, Phys. Rev. *58*, 1098, 1940.
[15] Л. Пал, Диссертация, Москва, 1953.
[16] Л. Киренский, ЖЭТФ *8*, 198, 1938.
[17] Титов, ЖЭТФ *6*, 675, 1936.

A FERROMÁGNES OSZTÁLY KÖZLEMÉNYE
OSZTÁLYVEZETŐ: PÁL LÉNÁRD

Domen-fal eltolódások dinamikája

Irta: Pál Lénárd

Minden véges vezetőképességgel rendelkező anyagban váltakozó külső mágneses tér hatására - mint ahogy ez jól ismeretes - örvényáramok keletkeznek, amelyek mágneses tere csökkenti az anyag belsejében kialakuló mágneses teret. Egyszerü geometriai formával rendelkező anyagok esetében igen jó közelitéssel ki is számolható a mágneses térnek anyagon belüli eloszlása. Azonban ferromágneses anyagok esetében az ilyen számitások igen bonyolultakká válhatnak. Ha nem vesszük figyelembe a mágneses fázisok /a domen-szerkezet/ sajátosságait, azaz ha a ferromágneses közeget mágneses szempontból homogénnek tekintjük, akkor a permeabilitás térerősségtől való függése okoz igen nagy matematikai nehézséget. A mi szempontunkból elsősorban a mágneses szerkezettel kapcsolatos problémák érdekesek. Itt azonban legalábbis az első közelitésben meg kell elégednünk azzal, hogy a permeabilitást állandónak tekintjük és a tényleges mágneses szerkezet helyettesitésére lehetőleg olyan egyszerü modellt választunk, amelyre a számitások kellő szigoruséggal végezhetők el.

Legyen az egymással ellentétesen mágnesezett mágneses tartományok közötti válaszfalak sikja az /x, z/ sikkal párhuzamos. A lemezalaku próbatest y tengelymenti d vastagsága legyen kicsiny a lemez x irányu h hosszához képest és a z tengely irányában pedig legyen olyan magas, hogy a mágneses tartományok végeinek zavaró hatását el lehessen hanyagolni.

Váltakozó mágneses terekben a domen-falak /az egyes mágneses tartományokat elválasztó sikok/ mozgását fékezi az a mágneses tér, amely éppen a domen-falak mozgásával kapcsolatos lokális fluxusváltozás eredményeként jelentkezik. Ezeknek a "mikro-örvényáramoknak" hatására keletkező fékező tér szerepére elöször V. Arkadiew [1] mutatott rá és a mágneses viszkozitás régen ismert kisérleti tényének kézenfekvő magyarázataként tekintette.

A legtöbb esetben eltekinthetünk a domen-fal szerkezetével kapcsolatos effektusoktól, különösen nem tul nagy frekvenciáju mágneses tér esetében. A domen-falat jelen esetben is csupán mint két mágneses fázis közötti válasz-

falat fogjuk fel A k-ik és az i-ik mágneses fázis közötti falra H külső mágneses térben

$$P_H = H\left(J_{S_k} - J_{S_i}\right) \qquad /1/$$

"nyomás" hat. Ennek a nyomásnak a hatására a domen-fal kimozdul eredeti egyensulyi helyzetéből. Jelöljük Δx -el a H mágneses tér hatására előálló elmozdulást. A $P_H \Delta x$ munkával egyenértékü energia Bloch-féle domen-falak esetében teljesen a domen-fal γ felületi energiájának növelésére forditódik. /Becker-féle domen-fal esetében a munka legnagyobb része a kristály térfogati feszültségi energiáját növeli./ Bloch-féle domen-fal esetében

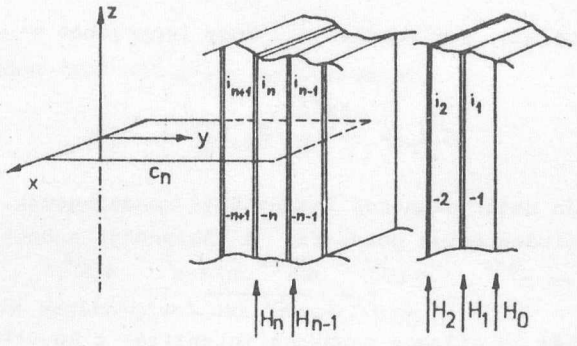
$$P_H = 2HJ_S = \frac{d\gamma}{dx} \qquad /2/$$

a γ -nak /és igy a $P_\gamma = \frac{d\gamma}{dx}$ -nak is/ az x helyzet koordinátától való függése igen bonyolult lehet. Mi a legegyszerübb feltevéssel kivánunk élni /ami igaz is a kezdő-permeabilitás tartományában/, nevezetesen amikor $\frac{d\gamma}{dx} \sim A\Delta x$ ahol A erg. cm^{-1} dimenzióju állandó és Δx a domen-fal elmozdulása. Igy H külső mágneses tér hatására bekövetkező fal-eltolódás

$$\Delta x = 2A^{-1} J_S H \qquad /3/$$

Becker [2] határozta meg először a Bloch-féle falra ható fékező teret azzal a feltevéssel, hogy az adott domen-falra csak a saját mozgása által okozott fékező tér hat. Természetesen eljárását nem lehet pontosnak minősiteni, mivel a környező domen-falak mozgása is befolyásolja a kérdéses domen-fal mozgását. Először Polivanov [3] majd Akulov és Krincsik [4] kisérelték meg ennek a kooperativ jelenségnek pontos tárgyalását. A Polivanov által választott modell nem egészen következetes, mivel nála váltakozva követik egymást Bloch- és Becker-féle doman-falak. A Becker-féle domen-falak elmozdulásának meghatározására nem használható fel a /3/ alatti kifejezés, mivel a mágneses rugalmas energia növelésére jelentős külső munka forditódik. Akulov és Krincsik nem kisérelték meg a probléma korrekt megoldását és csak olyan határesetekkel foglalkoztak, amelyekre vonatkozóan a Becker-féle megoldás is helyes.

A következőkben röviden összefoglaljuk azokat a vizsgálatokat, amelyeket abból a célból végeztünk, hogy korrektebb módon meghatározzuk a domenfal mozgások közötti kölcsönhatásnak a látszolagos permeabilitás frekvenciafüggésére gyakorolt hatását. Az 1. ábrán látható az általunk vizsgált modell vázlatos sémája. A külső mágneses tér irányát válasszuk párhuzamosnak a z tengely irányával. A domen-falak egymástól való távolságát jelöljük b-vel. Megjegyzendő, hogy a domen-fal elmozdulása következtében a domen-falak közötti távolság /b/ nem marad állandó. A kedvező orientációju domenek határoló falai közötti távolság nagyobb, mint a kedvezőtlen orientációju domeneké.



1. ábra

Továbbá annak következtében, hogy az anyag belsejében lévő domen-falakra gyengébb mágneses tér hat, mint a felülethez közel fekvőkére, a beljebb lévő kedvező orientációju domenek határoló falai közötti távolság kisebb /a kedvezőtlen orientációjuaké pedig nagyobb/, mint a felülethez közel fekvők esetében. Azonban, ha csak kis elmozdulásokra szoritkozunk, akkor ezeket a körülményeket figyelmen kivül hagyhatjuk. Azt mondhatjuk, hogy elhanyagolható a mikroörvényáramoknak magára a domen-szerkezetre gyakorolt visszahatása. Számitásainkban nem vettük figyelembe ezt a visszahatást.

Koordináta rendszerünk középpontját helyezzük a kérdéses ferromágneses anyagból készült lemez középpontjába és tegyük fel, hogy az y tengely mentén jobbra és balra N számu, b szélességü mágneses tartomány helyezkedik el /2Nb = d <<1/. Tegyük fel, hogy már az /n+1/-ik (n + 1 < N) domen-falra olyan kicsiny H_{n+1} eltéritő mágneses tér hat, hogy hatását elhanyagolhatjuk. Igy sorban az n, n-1, ..., 3, 2, 1 indexü domen-falakra H_n, H_{n-1}, ..., H_3, H_2, H_1 eltéritő tér hat, amelyekre nyilvánvalóan teljesül, hogy $H_n < H_{n-1} < \ldots < H_2 < H_1 < H_o$ A negativ y tengely mentén szimmetria okokból teljesen hasonlóak a viszonyok. Az y_n koordinátáju n-ik domen-fal Δy_n elmozdulásával $(\Delta y_n = 2A^{-1} J_s H_n)$ az n-ik domen-fal körül i_n áramsürüséggel örvényáram indukálódik, ami arra vezet, hogy

$$\Delta H_n = H_{n-1} - H_n$$

Határozzuk most meg az n-ik és az n-1-ik domen-falra ható eltéritő mágneses terek közötti ΔH_n különbséget.

Mindenekelőtt könnyü belátni, hogy a /3/ alatti kifejezésben az A anyagi állandó a kezdő szuszceptibilitással helyettesithető. Mivel a próba test átlagos mágneses intenzitása

$$\bar{J} = \frac{2A^{-1} J_s}{2Nb} \sum_{n=1}^{2N} H_n \qquad /4/$$

kifejezéssel adható meg, azt mondhatjuk, hogy lényegében minden egyed domenfalhoz az

$$J_n = \frac{2A^{-1} J_s}{b} H_n \qquad /5/$$

összefüggés alapján saját mágneses intenzitást rendelhetünk. Ha már most feltételezzük, hogy minden egyes domen-fal A állandója azonos, akkor

$$\chi = \frac{2A^{-1} J_s}{b} \qquad /6/$$

Végeredményben tehát az átlagos mágneses intenzitás a következőképpen irható fel:

$$\bar{J} = \frac{\chi}{2N} \sum_{n=1}^{2N} H_n \qquad /7/$$

A ΔH_n meghatározása céljából az /x,y/ sikban az n-ik domen-fal körül jelöljünk ki gondolatban egy négyszöget olyan módon, hogy a négyszög x tengellyel párhuzamos oldalai egységnyi hosszuságuak legyenek és közülük egyik az n-ik és /n-1/-ik domen-fal között, mig a másik koordináta rendszerünk középpontján haladjon át. A kijelölt négyszög által határolt területen átfolyó erővonal fluxusnak időben változó része nyilván

$$\phi_n(t) = J_s \Delta y_n = \chi b H_n \qquad /8/$$

A domenfal Δy_n elmozdulásának változása

$$i_n = -\frac{\sigma}{c} = -\frac{d\phi_n}{dt} = -\frac{\sigma \chi b}{c} \frac{dH_n}{dt} \qquad /9/$$

sürüségü áramot hoz létre, amely viszont azt eredményezi, hogy az n-ik domenfalra a H_{n-1} eltéritő térnél

$$\Delta H_n = \frac{2\pi}{c} b i_n \qquad /10/$$

térrel kisebb mágneses tér hat. /Könnyü meggyőződni arról, hogy a fenti modell esetében a kijelölt négyszög y tengellyel párhuzamos oldala mentén folyó áramot a mellé csatlakozó hasonló áramkörök ellentétes irányu áramai teljesen kompenzálják. Ez azt jelenti, hogy az y tengellyel párhuzamos áram hatását csak a lemez szélein kell figyelembe venni. A lemez középpontjához szimmetrikus helyzetü domen-falak mozgásához tartozó áramok x tengellyel párhuzamos komponensei a lemez középpontjával ellentétes irányuak és kompenzálják egymást. Ezeknek a megjegyzéseknek alapján világos, hogy az i_n sürüségü áram által keltett mágneses tér meghatározásánál az

$$\oint H_s \, ds = \frac{4\pi}{c} i_n b$$

kifejezés baloldalán álló integrál egyszerüen 2H-val egyenlő. Természetes, hogy ΔH_n az n-ik domen-fal mozgásától származó fékező térnek csupán azt a részét jelenti, amennyivel nagyobb fékező tér hat az n-ik mint az /n-1/-ik domenfalra./

Ilyen módon /10/-ból a /9/ segitségével

$$\Delta H_n = -\frac{2\pi}{c}\chi\sigma b^2\frac{dH_n}{dt} = -a\frac{dH_n}{dt} \qquad /11/$$

Az /n-k/-ik domen-falra ható eltéritő mágneses tér

$$H_{n-k} = H_{n-k+1} + \Delta H_n + \Delta H_{n-1} + \ldots + \Delta H_{n-k+1} \qquad /12/$$

Egyszerü számitások segitségével azt kapjuk, hogy

$$H_{n-k} = H_n\left\{\sum_{=0}\binom{k+j}{2j}a^j\,(i\omega)^j\right\} \qquad /13/$$

s mivel

$$H_o = H_n\left\{\sum_{j=0}^{n}\binom{n+j}{2j}a^j\,(i\omega)^j\right\} \qquad /14/$$

ahol H_o a külső mágneses tér, a /13/ alatti kifejezés a következőképpen irható fel:

$$H_{n-k} = \frac{\sum_{j=0}\binom{k+j}{2j}a^j(i\omega)^j}{\sum_{j=0}^{n}\binom{n+j}{2j}a^j(i\omega)^j}H_o \qquad /15/$$

Ennek a kifejezésnek a felhasználásával a /7/ alapján a látszólagos permeabilitás /a szuszceptibilitás helyett egyszerüen vehetjük a permeabilitás értékét, mivel

$$\bar{\mu} = \mu_1 - i\mu_2 \sim \frac{\bar{J}}{H_o} = \frac{\chi}{N}\,\frac{\sum_{j=0}^{n-1}\binom{n+j}{2j+1}a^j(i\omega)^j}{\sum_{j=0}^{n}\binom{n+j}{2j}a^j\,(i\omega)^j} \qquad /16/$$

A látszólagos permeabilitás mint komplex-mennyiség jelentkezik, amelynek valós része monoton csökkenő, képzetes része pedig maximummal rendelkező görbét mutat.

Hogy a viszonyokat jobban áttekinthessük, vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor mindössze két domen-fal vesz részt aktivan a külső tér hatására előálló mozgásban. Anélkül, hogy részletekbe bocsátkoznánk, mindjárt felirjuk az első és a második domen-falra ható eltéritő mágneses tereket. Ezek sorban a következők:

$$H_1 = \frac{1 + 2\omega^2 a^2}{(1-a^2-\omega^2)^2 + 9a^2\omega^2} H_o - i\omega a \frac{2 + a^2\omega^2}{(1-a^2-\omega^2) + 9a^2\omega^2} H_o$$

$$H_2 = \frac{1 - a^2\omega^2}{(1-a^2\omega^2)^2 + 9a^2\omega^2} H_o - i \frac{3a\omega}{(1-a^2\omega^2)^2 + 9a^2\omega^2} H_o \qquad /17/$$

Jól látható, hogy a kényszeritett rezgő-mozgást leiró differenciál egyenlet megoldásához hasonlók az itt fellépő kifejezések is. Jól definiált frekvenciánál rezonancia lép fel. Ennek a frekvenciának, amelyet "kritikus" frekvenciának nevezünk, az a jelentése, hogy ezen frekvencián tul a ferromágneses anyag kezdi elveszíteni ferromágneses tulajdonságait. A jelen esetben ez a kritikus frekvencia

$$\omega_k = \frac{c^2}{2\pi\chi\sigma b^2} \qquad /18/$$

Látható, hogy minél kisebb a domen-falak egymástól való távolsága, minél nagyobb a kérdéses anyag elektromos ellenállása és minél kisebb a tényleges permeabilitása, annál nagyobb a kritikus frekvencia. A /13/ alatti általános kifejezésből következik, hogy $n - k > 2$ esetben több ilyen kritikus frekvencia lép fel, amelyek hatása a látszólagos permeabilitás kifejezésében átlagolódik és a képzetes rész maximumának kiszélesedéséhez vezet.

Kisérleteket kivánunk folytatni annak a megvizsgálására, hogy létezike a kritkus frekvenciáknak eme elméletileg kiadódó spektruma.

I r o d a l o m

[1] V. Arkadiew, Elektromagnitnüje processzü v metallach, 1936. Moszkva.

[2] R. Becker, Ann. der Phys. 36. 340. 1939.

[3] K. Polivanov, Problems of the ferromagnetism and of the magnetodynamic, Ed. V. Arkadiew, Moscow, 1946.

[4] H. Akulov és Krincsik, Dokladü Akademii Nauk, 81. 171. 1951.

Elhangzott az 1954. évi fizikus vándorgyülésen.

A FERROMÁGNESES OSZTÁLY KÖZLEMÉNYE
OSZTÁLYVEZETŐ: PÁL LÉNÁRD

Szolenoid erős mágneses terek előállitására

Irta: Pál Lénárd és Zsigmond György

Bevezetés

A ferromágneses anyagok mágneses tulajdonságainak vizsgálatához jól kézben tartható, viszonylag nagy homogénitásu és széles határok között változtatható mágneses terek előállitására van szükség. Néhány tized Oe térintenzitástól mintegy 10^4 Oe térintenzitásig változtatható mágneses terek előállitására sokkal alkalmasabbnak látszik a szolenoid, mint az elektromágnes. Ugyanis az elektromágnes sarui közé helyezett ferromágneses próbatestnek a sarukra való visszahatása nagy gerjesztő áram mellett igen jelentős hibára vezethet. Fallot [1] számitásai szerint 2.10^4 Oe térerősség mellett az igy előálló hiba 50 % is lehet. Kis mágneses terek előállitására az elektromágnes egyáltalán nem jöhet számitásba és igy az a kivánalom, hogy széles térerősség tartományt tudjunk átfogni, elektromágnessel nem valósitható meg. További nehézséget jelent, hogy a térerősség a gerjesztő áramnak nem lineáris és nem is egyértelmü függvénye. A saruk közötti távolság változtatása a tér homogenitását befolyásolja. Mindezek a körülmények arra mutatnak, hogy nagypontosságu méréseket célszerüen szolenoiddal előállitott mágneses térben lehet végezni.

Tartós üzemü, erős mágneses teret adó légmagos szolenoid konstrukciós kérdéseivel viszonylag sokan foglalkoztak [2], azonban kevés olyan közlemény jelent meg, amely már megvalósitott és tartós üzemközben kipróbált szolenoid konstrukciós kérdéseiről és müködési adatairól szól.

Bitter [3] spektroszkópiai vizsgálatokhoz és alacsony hőmérsékletek előállitásához szükséges rendkivül erős mágneses teret biztositó szolenoid konstrukciós és üzemeltetési kérdéseiről mintegy 16 évvel ezelőtt részletes beszámolót közölt. Az általa konstruált szolenoid természetesen mágneses mérésekre nem alkalmas, viszont közleménye rendkivül hasznos az általános müszaki nehézségek /hütés, áramellátás, stb./ feltárása szempontjából.

MTA KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KÖNYVTÁRA

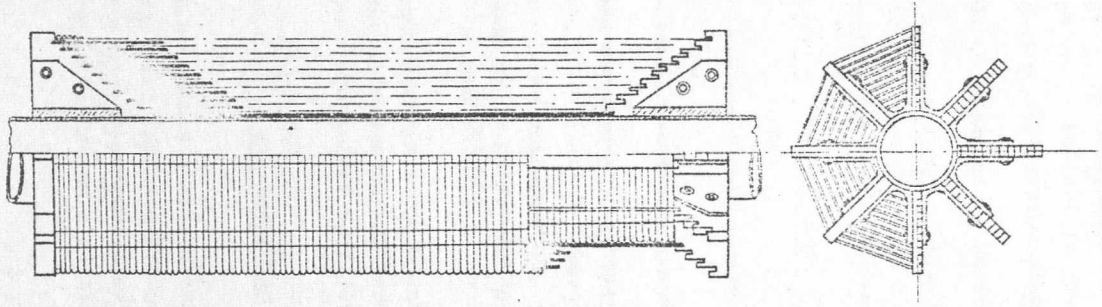
Megjegyzendő, hogy különösen az utóbbi években sok közlemény [4] jelent meg a Helmholtz-féle légmagos szolenoid konstrukciós és üzemeltetési kérdéseiről. Mivel ilyen szolenoidok üzemeltetése igen jelentős elektromos teljesitményt kiván, nehéz arra gondolni, hogy ez a szolenoid tipus mint egyszerü laboratóriumi eszköz széleskörüen elterjedjen. A Helmholtz- tipusu légmagos szolenoid alkalmazását elsősorban a mágneses tér homogénitására vonatkozó igen erős megkötések teszik szükségessé. /Az atommagok mágneses nyomatékának méréséhez pl. csak olyan mágneses tér használható, amelynek inhomogenitása 1-2 cm^3 -nyi térfogatban kisebb mint 0,01 %./ A ferromágneses anyagok vizsgálatához szükséges mágneses terekre vonatkozó homogenitási követelmények ennél jóval enyhébbek, azonban az 1-2 %-nál kisebb axiális inhomogenitás biztositása jóval nagyobb szakaszon /80-100 mm/ kivánatos.

Éppen ezért választásunk olyan szolenoidra esett, amelynek segitségével tartósan előállithatunk 80 mm hosszuságu, 23 mm átmérőjü hengeralaku térben maximálisan 2 % inhomogénitást mutató 0,1 - 10^4 Oe intervallumban szabályozható mágneses teret.

A következőkben ismertetjük az általunk megépitett szolenoid legfontosabb adatait és összehasonlitjuk eredményeinket más szerzők által tervezett szolenoidokra vonatkozó eredményekkel.

1.§. A szolenoid leirása

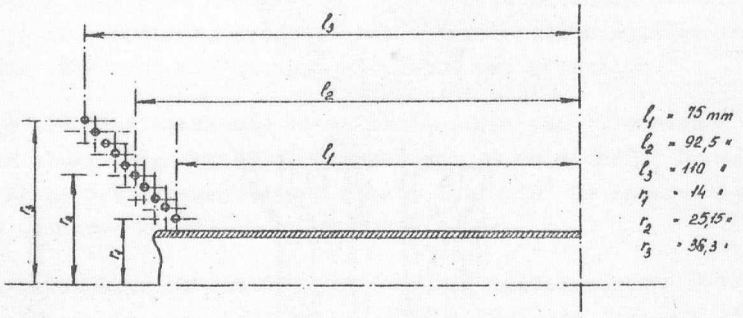
A tekercs magját egy 23/25 mm ∅ sárgarézcső képezte. Erre épitettük fel az elméletileg meghatározott profilu tartószerkezetet, amely a mag kerületen 8 egyenletesen elosztott, lépcsősen kiképzett sortartó szigetelőt rögzitett /lásd az 1. ábrát/. Az első réteget 8 db keskeny pertinax rudra tekercseltük. Igy szabályos nyolcszögü tekercssor keletkezett, amely a rudacskákra való felfekvési helytől eltekintve nem érintkezett a tartó maggal. Mindkét oldalon az utolsó menetek a nyolcszarnyu tartószerkezet vállára feküdtek fel. Az első sor befejezése után 8 db 0,7 mm vastag, 5 mm széles pertinax távtartó biztositotta a következő menetsor oly módon való tekercselési lehetőségét, hogy a két sor minden oldallapja között nagyjából egyenletes üreg képződjön a hűtőfolyadék átvezetésére. Ilyen módon 10 réteget tekercseltünk fel folyamatosan. A tekercs 1,55 mm ∅ duroflex zománcszigetelésü huzalból készült. A megtekercselt szolenoid főbb adatait az alábbi összeállitás mutatja:



1. ábra.
Szolenoid tekercs felépitése

menetszám/cm	N = 6,06
rétegek száma	z = 10
közepes tekercsátmérő	d_2 = 50,3 mm
egyenáramu ellenállás	R_Ω = 1,68 Ohm
önindukciós együttható	L = 4,4 mH

A 2. ábrán feltüntettük a szolenoid 10 rétegének számitások utján meghatározott adatait.



2. ábra.
A tekercs számitások utján meghatározott főméretei.

A vázolt tekercselési módot a hatásos hütés biztositása céljából alkalmaztuk. A 3.§-ban ismertetni fogjuk a hütőberendezéssel kapcsolatos követelményeket, valamint az általunk kivitelezett hütőberendezést.

2.§. A tekercs mágneses terének számitása

Az előállitandó mágneses térre vonatkozó kikötések alapján a tekercs geometriai adatai könnyen meghatározhatók. Elemi számitások segitségével egy n oldalu szabályos sokszög keresztmetszetü, 2ℓ hosszuságu tekercs tengelye mentén a mágneses tér eloszlására a következő kifejezés vezethető le:

$$H_n = \frac{2nJN}{c}\left\{\operatorname{arctg}\left(\frac{\ell - x}{\sqrt{r^2 + (\ell-x)^2}}\operatorname{tg}\frac{\pi}{n}\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{\ell + x}{\sqrt{r^2 + (\ell+x)^2}}\operatorname{tg}\frac{\pi}{n}\right)\right\} \quad /1/$$

ahol r az n-oldalu sokszög köré irható kör sugara, J a tekercsen átfolyó áram erőssége, x a tekercs középpontjából mért távolság, N a hosszegységre eső menetek száma. Ha $n \to \infty$, akkor az /1/ alatti kifejezés természetesen a körkeresztmetszetü tekercsekre jól ismert

$$H = \frac{2\pi JN}{c}\left\{\frac{\ell - x}{\sqrt{r^2 + (\ell-x)^2}} + \frac{\ell + x}{\sqrt{r^2 + (\ell+x)^2}}\right\} \qquad /2/$$

kifejezésbe megy át. A mi esetünkben $n = 8$ s igy

$$H_8 = \frac{16JN}{c}\left\{\operatorname{arctg}\left(\frac{\ell - x}{\sqrt{r^2 + (\ell-x)^2}}\,0{,}414\right) + \operatorname{arctg}\left(\frac{\ell + x}{\sqrt{r^2 + (\ell+x)^2}}\,0{,}414\right)\right\} \qquad /3/$$

Nem követünk el nagy hibát, ha a /3/ alatti kifejezés helyett a /2/ alattit használjuk. Ugyanis

$$\frac{H_\infty - H}{H} \lesssim \frac{8}{\pi}\,\operatorname{tg}\frac{\pi}{8} - 1 \sim 0{,}05 \qquad /4/$$

Ezért a /3/ alatti kifejezés helyett a jóval kényelmesebb /2/ alatti kifejezéssel számoltunk. A megoldandó feladatot a következőképpen fogalmazhatjuk meg: meg kell határozni egy olyan egyrétegü r sugaru hengeres szolenoid legrövidebb hosszát, amelynek mágneses tere a tekercs középpontjától jobbra-balra x cm-en belül legfeljebb p százaléknyi hibával homogén.

Jelöljük a tekercs ismeretlen hosszát 2ℓ -el. Mivel a 2ℓ hosszuságu tekercs középpontjában a mágneses térerősség

$$H_o = 0{,}2\,\pi NJ\,\frac{2\ell}{\sqrt{\ell^2 + r^2}} \qquad /5/$$

és ettől x távolságra

$$H_x = 0{,}2\pi NJ\left\{\frac{\ell - x}{\sqrt{(\ell-x)^2 + r^2}} + \frac{\ell + x}{\sqrt{(\ell+x)^2 + x^2}}\right\} \qquad /6/$$

a probléma egyenlete

$$\frac{H_o - H_x}{H_o} = 1 - \left(\frac{\ell - x}{\sqrt{(\ell-x)^2 + r^2}} + \frac{\ell + x}{\sqrt{(\ell+x)^2 + r^2}}\right)\frac{\sqrt{\ell^2 + r^2}}{2\ell} \le \frac{p}{100}.$$

A lehetséges legkisebb ℓ meghatározására numerikus eljárás volna szükséges /azaz végeredményben próbálgatás és interpoláció/. Mivel pedig ezt az egyenletet sokféle r és x -re kellett volna megoldani, célszerünek

látszott a "próbálgatást" grafikusan végezni.[x/]

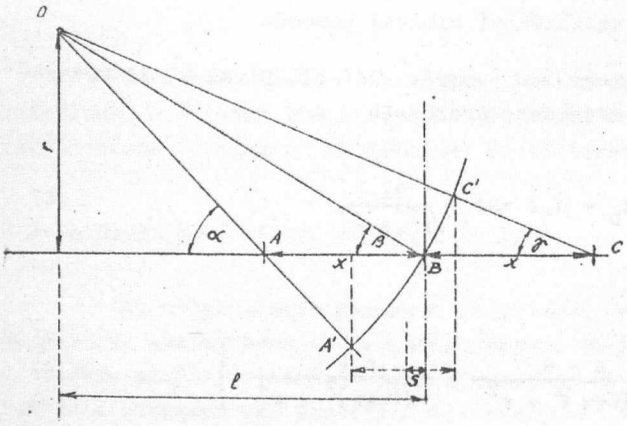
Rajzoljuk le miliméter papiron a tekercs félhosszát és r sugarát, az ábrán látható módon. Az O ponton, mint középponton át OB sugárral huzzunk körivet, amely az OA, OC félsugarakat az A' illetőleg C' pontokban metszi. Az A' illetve C' pontokon átmenő függőlegesek távolságát felezzük meg és mérjük le, hogy a felező egyenes milyen távolságra fekszik a B ponton átmenő függőlegestől. Jelöljük ezt a távolságot s -sel. Ha $\frac{s}{\ell} \leq \frac{p}{100}$, akkor a kiválasztott ℓ félhosszuságu tekercs tere a kivánalmaknak eleget tesz.

A levezetés teljesen elemi és a /6/ baloldalán álló kifejezés grafikus megszerkesztésén alapul. Irható ugyanis /az ábra jelölései szerint/:

$$\left(\frac{\ell - x}{\sqrt{(\ell-x)^2 + r^2}} + \frac{\ell + x}{\sqrt{(\ell+x)^2 + r^2}} \right) \frac{\sqrt{\ell^2 + r^2}}{2\ell} = \frac{\cos\alpha + \cos\gamma}{2\cos\beta} \qquad /8/$$

és az ábrán látható hasonló derékszögü háromszögek segitségével kiadódik, hogy

$$S = \ell \left(1 - \frac{\cos\alpha + \cos\gamma}{2\cos\beta} \right) \qquad /9/$$



3. ábra.
Grafikus szerkesztési eljárás

Ez a grafikus módszer elég gyorsnak mutatkozott. A lapos metszések miatt pontatlan, ha $\frac{r}{\ell}$ kicsiny, itt azonban a pontossági követelmény nem volt nagyon szigoru. Kényelmetlen volna, ha p << 1 volna, azonban p=2 volt és nem tul nagy rajzon s mm nagyságrendünek adódott. A szerkesztési eljárás az adott feltételeknek eleget tevő minimális tekercshosszak meghatározásával gyorsan kiadja a szolenoid két végének profilját. A legbelső és legkülső réteg minimális hossza, valamint a szerkesztési eljárással meghatározott végprofil meghatározzák a tekercsteret, amelynek optimális kitöltése képezi a tulajdonképpeni feladatot.

[x/] A grafikus eljárás kidolgozásáért Békéssy András kollegánknak ezuton mondunk szives köszönetet.

A 4. ábra a szolenoid általunk kivitelezett alakját mutatja oldalnézetben és félmetszetben. A központi tartócsövet a ráépitett tekercseléssel (1) zárt olajtérbe helyeztük. A nyolcszögü tekercs lapos oldallapjait megfelelő idomu bakelit lemezekkel ugy képeztük ki, hogy a tekercs külső rétege henger alakuvá vált. Az ilyen módon kiképzett tekercs sárgarézcsőből készitett, mindkét oldalán peremmel ellátott, hengeralaku köpenybe (5) került. A tekercs és a sárgaréz henger közötti távolságot mintegy 0,7 mm-nek választottuk.

A köpenyt felülről fejöntvény (3) zárja le, amelyet olajálló tömités (4) alkalmazásával szereltünk a sárgaréz csőre, csavarok (21) segitségével. A fej hátsó részén nagyméretü peremes csatlakozást képeztünk ki, melyhez az olajvezető cső (22) csatlakozik. A (23) csavarral lezárt furatot szolenoid légtelenitésére és nyomásmérések elvégzésére használtuk.

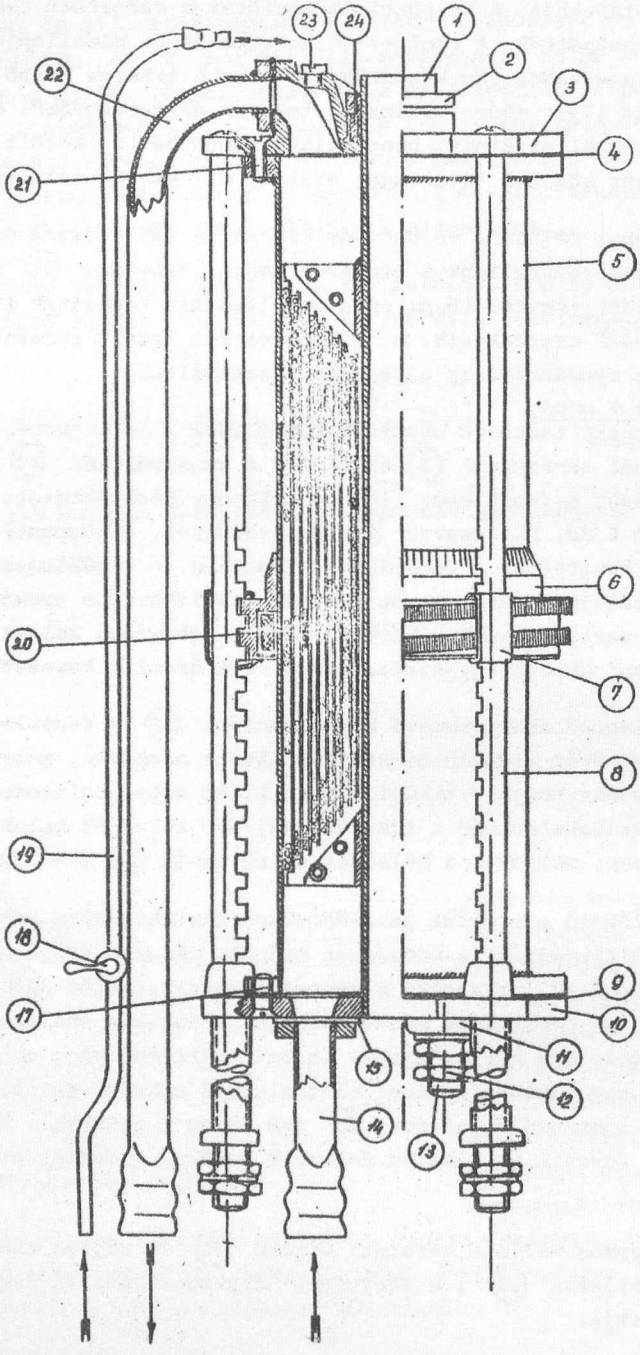
A központi tartócső nyomásálló tömitése a fejen keresztül való átvezetésnél hollandi szoritóval (2) és olajálló gumigyürüvel (24) történt. A köpeny (5) alsó lezárását a fenéklemez (10) és a köpeny közé iktatott tömitőgyürü (9) biztositotta, a 6 db. M.6 csavar (17) segitségével. A központi tartócsövet lágy forrasztással rögzitettük a fenéklemez hüvelyébe. A fenéklemezre tömitőlemez (15) közbeiktatásával csavaros rögzitéssel csatlakozik a nyomócsőcsonk (14). Az alsó nagy ürtartalmu puffer-térben az olaj sebessége lelassul és a szolenoid tekercssorai között egyenletesen elosztva áramlik keresztül.

A szolenoid árambevezető csatlakozását (13) a fenéklemezre épitettük. Az áramvezető mindkét oldalán menettel ellátott csap van, melynek középső részét az elfordulási veszély kiküszöbölése miatt négyszögletesnek képeztük ki. Az elektromos szigetelést és a tömitést egy-egy külső és belső fibertárcsával (11) oldottuk meg, melyeket a külső és belső anyák (12) szoritanak össze.

A szolenoid szerelési lehetőségének biztositására három fogasrudat (8) alkalmaztunk. Differenciális módszeren alapuló mérések céljára a három fogas rudra egy emelhető-süllyeszthető kompenzáló tekercstartót (20) szereltünk. A fogas rud 10 mm emelkedésü menetbevágásai vezetik a skálázott tekercstartógyürüt (6), amely egy körfordulatra 10 mm-t süllyed, vagy emelkedik. A tárcsa 100 osztása és egy további noniusz biztositja a tekercs axiális helyzetének meghatározását. A kompenzáló tekercs (20) nem forog a gyürüvel. Egy közéiktatott alátét lemezen fekszik és a három fogasrud vezeti, valamint akadályozza meg elfordulását.

Két egymás mellett vezetett vizcső (19) /a rajzon csak a nyomócső látszik/ csappal ellátva (18), a mérüregbe helyezhető mérési szerelvény vizellátását biztositja.

Az előző §-ban ismertetett adatok alapján a szolenoid állandó értéke k = 75,5 -nek, a tengely mentén 2 %-nál kisebb hibával homogénnek tekinthető

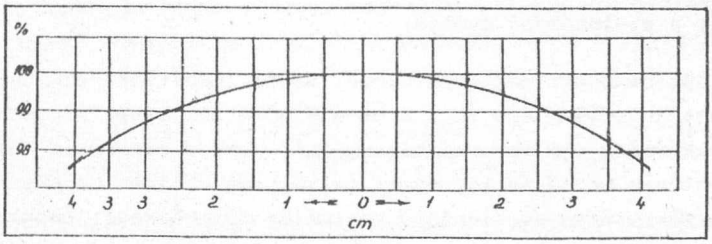


4. ábra.
Kivitelezett szolenoid vázlatos képe

hossz 80 mm-nek /mig a 0,5 %-nál kisebb hibával homogénnek tekinthető hossz 40 mm-nek/ adódott.

A tér radiális homogenitására vonatkozóan nem végeztünk számitásokat. Az elkészült szolenoidon azonban kisérletileg meghatároztuk a radiális irányu inhomogenitást és azt találtuk, hogy 20 mm szakaszon 0,2 %-nál nem nagyobb.

Az 5. ábrán látható az általunk kivitelezett szolenoid mágneses terének tengelymenti változását mutató kisérleti görbe. A kisérletileg talált szolenoid állandó k = 74,1 , tehát 1,8 % pontossággal egyezik meg az elméleti értékkel. Az eltérést a tekercs kitöltési tényezőjére vonatkozó számitott és kivitelezett értékek közötti különbség adja.



5. ábra.
Szolenoid mágneses terének tengelymenti inhomogenitása.

3.§. A szolenoid energia-ellátása

A hütés kérdései

A szolenoid táplálására egy kb. 600 A^h 280 V feszültségü ólomakkumulátor telep szolgál. Az áramerősség szabályozását szervomotorral működtetett távkormányozásu szabályozó ellenállás egység biztositja oly módon, hogy kb. 100 Oe-ig max. 1 Oe, 1000 Oe-ig kb. 5 Oe, mig 10000 Oe-ig kb. 50 Oe max. lépcsők jelentkezzenek a különben folyamatos és minden körülmények között megszakitásmentes szabályozás alatt. /Az áramszabályozóra vonatkozó részleteket lásd a 4.§-ban./

Az általunk megvalósitott esetben 0,8 . 10^4 Oe mellett cca 23 kW /5,5 kcal/sec/, mig 1,0 . 10^4 Oe mellett cca 35 kW /8,5 kcal/sec/ teljesitmény szabadul fel, mintegy 1500 cm^3 -nyi térfogatban. Már ebből is látható, hogy a szolenoid tekercsrétegeiben felszabaduló hőmennyiség egész sor különleges hütéstechnikai problémát, a hütés pedig igen sok nehezen áttekinthető áramlástani problémát vet fel. Nyilvánvaló, hogy nagy térerősségek előállitásának lehetőségeit elsősorban hütéstechnikai kérdések korlátozzák. Mivel az egyes menetsorok között a hütőfolyadék átáramlásának biztositása érdekében réseket kell

hagyni, a tekercstér kitöltési tényezője megromlik. Ennek az áramsürüség emelkedésével elérhető kompenzálása csak egy bizonyos határig ad kielégitő megoldást, mivel az áramsürüséggel a felszabaduló hőmennyiség is növekszik s igy a hütés szempontjából a hütőrések keresztmetszetét tovább kivánatos növelni. A helyes és gazdaságos - de mindenképpen valamelyik irányban kompromisszumot jelentő - megoldást meglehetősen körülményes volna megtalálni.

Hütőfolyadékul $C = 0,45$ cal/fok fajhőjü, $\eta = \sim 6E^{O}$ viszkozitásu, $\gamma = 0,9$ fajsulyu transzformátorolajat használtunk. Természetesen desztillált vizzel történő közvetlen hütés sokkal előnyösebb lett volna. Azonban, főleg az árambevezetők szigetelési nehézségei miatt, a viz alkalmazása veszélyesnek mutatkozott. A szolenoidból kilépő hütőolaj vizvezetéki vizzel táplált hütőrendszerbe kerül, ahonnan a lehült olajat egy megfelelő teljesitményü szivattyu ismét a szolenoidba nyomja.

A hütőrendszer megtervezésénél abból indultunk ki, hogy $\Delta t_c = 50\ C^{O}$ tulmelegedést engedtünk meg /t_c a vezető hőmérséklete/. Nagyobb tulmelegedést már csak azért sem érdemes megengedni, mert a szolenoid egyenáramu ellenállása jelentősen megnő és igy adott feszültség mellett csökken az áramsürüség, ami természetesen az elérhető maximális térerősséget csökkenti. Az I. táblázat jól szemlélteti, hogyan csökken a hőmérséklet növekedésével 280 V tápfeszültség mellett elérhető maximális térerősség.

I. táblázat

t_c C^{O}	R_Ω	J_A	N_{kW}	$H_{max.}$ Oe
20	1,68	166,5		
50	1,87	149	41,7	11,600
60	1,91	147	41,1	11,450
70	1,93	145	40,6	11,300

Térerősség csökkenése a tekercs melegedésének függvényében.

Hütőrendszerünket ugy terveztük meg, hogy a $0,8 \cdot 10^4$ Oe térerősség huzamos fenntartása $\Delta t_c = 30\ C^{O}$ -nál nagyobb felmelegedést ne okozzon. Ehhez másodpercenként mintegy 0,5 l olajat kell a szolenoidon átáramoltatnunk. Az olaj által elszállitott hőmennyiséget egy vizhütőrendszer veszi fel. Mivel az olaj nem hüthető vissza kezdeti hőmérsékletre, a cirkuláció alatt egyre nö-

vekszik a beáramló hütőolaj hőfoka. Ennek megfelelően a kb. 15-16 C^o hőmérsékletü hütővíz és az általa lehütött olaj hőmérséklete között egy kb. 25 C^o-ra tehető hőlépcsőt vettünk figyelembe, részben becslés, részben tapasztalatok alapján.

Az olajszivattyu és a csatlakozó olajvezetékek surlódási veszteségeiből eredő olajfelmelegedés a szolenoidban bekövetkező hőleadás mellett elenyészően kicsi.

A szolenoid nyolcszögletü tekercsrétegei közötti kb. 0,7 mm széles olajrések közepes keresztmetszete mintegy 0,001 m^2.

A szolenoidon átáramló olaj azonban nem sima párhuzamos oldalfalak között áramlik, hanem az egyes rétegek meneteinek megfelelő diffuzor-konfuzor jellegü falak között. Mint sima falakat figyelembe véve, a rétegek szabad összeflülete mintegy 0,57 m^2.

A szolenoid fajlagos felületi terhelése 0,8 . 10^4 Oe térerősség mellett mintegy 40 kW/m^2, mig 1,0 . 10^4 Oe mellett 62 kW/m^2.

Hogy a kivánt 0,5 l/sec olajmennyiséget a mintegy 0,001 m^2 keresztmetszeten átnyomhassuk kb. 0,5 m/sec olajsebességet kell biztositanunk. Ilyen sebesség mellett az olaj áramlása valószinüleg turbulens jellegü.

Ezeknek a megfelelően közelitő becslések alapján a hütőrendszert a következőképpen alakitottuk ki. A hütő felépitésénél vasalkatrészeket nem alkalmaztunk és igy az egész hütőrendszert közvetlenül a szolenoid alá építhettük. Ilyen módon megtakaritottuk a hosszu olajvezetéket és a szolenoid a hütőberendezéssel és egyéb kiszolgáló berendezéseivel együtt egy közös egységet képezhetett.

A teljes hütőberendezést - beleértve a szivattyumotort és vizhütőt is - egy kb. 130 l ürtartalmu aluminium edénybe helyeztük, amely egyuttal a hütőolaj tartására is szolgált. Az edényt a vizhütőegység két részre osztja, amelyeket felül a vizhütő oldalfalán kiképzett nagy keresztmetszetü rések, alul pedig a szivattyu szivó-nyomó vezetéke köt össze. A két részre választott tartály egyik részét a szivattyumotor, mennyiségmérő és nyomóvezeték, a másik részét a vizhütő foglalja el; olajkiszoritásuk együttesen kb. 7 l. Ennek megfelelően a tartályban kényelmesen tárolhattunk 75-80 l olajat.

A vizhütőt bordás egységekből állitottuk össze, amelyeken vörösréz hütőcső halad át. Az egységeket a beszerelés után ónfürdőbe mártottuk s igy a vizcsövekre huzott vörösréz bordák által megnagyobbitott hütőfelület a hütőcsövekkel fémesen érintkezett. Az egységekből 9 emeletet állitottunk össze, amelyek összfelülete kb. 6,5 m^2. A vizhütő csöveket az egy-egy sorban lévő

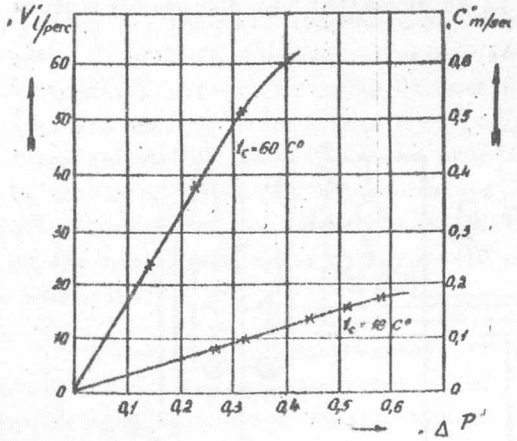
3 egységben párhuzamosan kapcsoltuk, tehát az alulról bevezetett hideg hütőviz egyidejüleg párhuzamosan haladhat az azonos sorban lévő mindhárom hütőegység 2-2 csővezetékén. Az elhelyezett hütőcső hossza 15 méter.

A szivattyu szivónyilása a hütő alsó olaj terébe csatlakozik, nyomóvezetéke pedig a szolenoidhoz csatlakozik. A felmelegedett hütőolaj egy olajmennyiségmérőn keresztül az olajtartály baloldali elválasztott részébe kerül vissza. A jobboldali térből történő elszivás hatására a tartályba bezuduló olajmennyiség átkerül a jobboldalra, ahol a vizzel hütött sürün bordázott hütőcsőrendszerrel kerül érintkezésbe és lassan süllyedni kezd, miközben egyre hidegebb hütőegységeken jut át. A nyomóvezetéket vizköpennyel vettük körül. Erre azért volt szükség, nehogy a lehütött olajat a szolenoidból visszatérő meleg olaj felmelegitse.

Mivel a hütés kimaradása igen veszélyes következményekkel járhatna, szükségesnek mutatkozott olyan érzékelő berendezést tervezni, amely csakis a normális mennyiségü hütőfolyadék áramlása eseten teszi lehetővé a szolenoid üzembe helyezését és minden, akár az üzem alatt is előálló csökkent vagy kimaradt hütőfolyadék szállitás esetén automatikusan üzemen kivül helyezi az egész berendezést. Az érzékelő szerv lényegében a szolenoidon átáramló olajmennyiséget regisztrálja. A mennyiségmérő egy a tartályba épitett tölcséralaku edény, amelybe a szolenoidból visszaáramló olaj ömlik. A kifolyó nyilásba egy szabályozható reteszt épitettünk, ami korlátozza az átfolyó olaj mennyiségét. Amennyiben a mérőbe beáramló olaj mennyisége több, mint amennyit a kifolyó nyilás le tud vezetni, ugy a tölcsér lassan megtelik olajjal és a fölösleges olaj a falain kivül lefolyik. A tölcsért egy mérlegkaron függesztettük fel és a kar másik oldalára állitható ellensulyt helyeztünk. Ha az átáramló olajmennyiség csökken és kevesebb, mint ami a beállitásnak megfelel, a tölcsér kiürül és a mérlegkar az ellensuly hatására felbillen. Ez a billenés egy higanykapcsolót müködtet, ami viszont a szolenoid áramát egy mágneskapcsoló utján megszakitja. A nyomócsőben uralkodó nyomást egy manométer, a visszafolyó olaj hőmérsékletét pedig egy távhőmérő mutatja.

A szolenoid terében a be- és kiáramló részeken a szolenoid köpenyén belül szabad teret képeztünk ki. Ennek az a feladata, hogy szétossza a benyomott olajat a szolenoid hütőhornyai felé, illetve a szolenoid felső részén a tekercsek résein át kiáramló olajat összegyüjtse és elvezesse. /A szolenoid alsó és felső részén csatlakozási lehetőséget biztositottunk higanymanométer beiktatására, hogy a szolenoid végpontjai közötti nyomásesést mérhessük. Erre az olajsebesség beállitása során volt csak szükség./

Az olajcirkuláltató szivattyu egy 0,4 LE motorral meghajtott 2800 ford/perc fordulatszámu centrifugálszivattyu. Teljesitménye 0,6 atm. tul-



6. ábra.

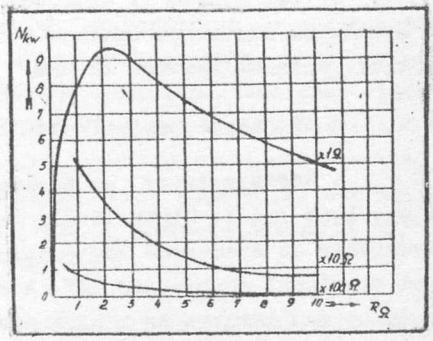
A szolenoidban fellépő nyomásesés az átfolyó olajmennyiség függvényében.

nyomás mellett kb. 60 liter/perc, transzformátorolaj alkalmazása esetén. A 6. ábrán a szolenoidon átfolyó olajmennyiség és a nyomásesés közötti összefüggés kisérletileg meghatározott görbéje látható. /A kisérleti vizsgálatot az tette szükségessé, hogy elméletileg nem sikerült megnyugtató megoldást találni az áramlási viszonyok tisztázására./

4.§. A szolenoid mágneses terének szabályozása

A kb. 2 Ohm ellenállásu szolenoidon átfolyó áramerősség 0,1 - 150 A határok közötti szabályozásával elérhető a térerősség 10 - 10^4 Oe határok közötti szabályozása. /A 0,1 - 10 Oe közötti további szabályozás már nem jelent különösebb nehézséget./

A 7. ábrán látható a szolenoiddal sorbakötött szabályozó ellenálláson különböző ellenállás értékek mellett felszabaduló teljesitmény kW-okban 270 V tápfeszültségre számitva. Laboratóriumi tolóellenállásokból összeállitani egy ilyen szabályozó-egységet gyakorlatilag megvalósithatatlannak látszott. Éppen ezért speciális szabályozó egységet terveztünk, amely a kényelmes és üzembiztos áramszabályozást biztosithatta.

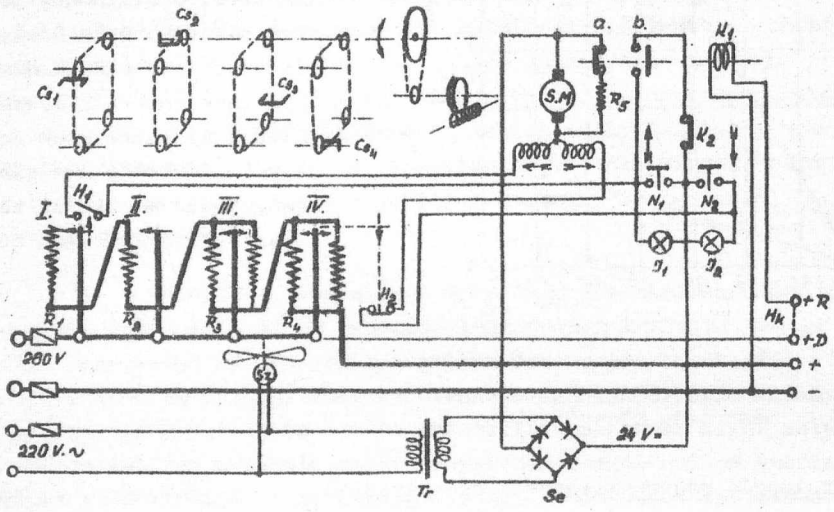


7. ábra.

Az áramszabályozón fellépő veszteségek.

A 8. ábrán látható a szabályozó egység vázlatos rajza. Az ellenállás az I-II-III-IV jelzésü egységekből áll, amelyek közül az I-es kb. 2000 Ohm ellenállásu. Az egységet csökken ellenállás értékek felé állandóan növekvő keresztmetszetü kanthal "D" ellenálláshuzalból tekercseltük meg /a tekercs - testet 80 mm átmérőjü 600 mm hosszu hőálló anyagból készült henger alkotta./

A II. egység kb. 50 Ohm ellenállásu. Felületét ugy növeltük meg, hogy a 80 mm ϕ tartóhengert két részre vágtuk és egymástól kb. 400 mm távolságra levő ives tartószerkezetre erősitettük.



8. ábra.
Áramszabályozó vázlatos ábrázolása.

A III. egység az előzővel azonos kiképzésü, azonban szerkezetileg két egymástól független oszlopból áll. A két egységet egymással párhuzamosan kötöttük. Ellenállása kb. 10 Ohm.

A IV. egység szintén két önálló oszlopból áll. Ellenállása kb. 1,3 Ohm.

A kefeszerkezet az áramvezető rudon csuszik végig. Az egyes ellenállás egységek /az I. kivételével/ felső részén szigetelő gyürü van, tehát felső helyzetében az áramszedő nem érintkezik az ellenállással. Az ellenállás egységeket egymással sorba kötöttük. A szabályozó alapállásában minden ellenállás egység be van iktatva és minden áramszedő a felső helyzetben van. Ennek megfelelően a baloldali felső határkapcsoló is nyitott, tehát a szervomotor csak egy irányban müködtethető. Amint a kefeszerkezet a nyugalmi helyzetből elmozdul, az áramkör ujból záródik. Igy a két határhelyzet között /mivel mindkét határkapcsoló zárva van/ a szervomotor mindkét irányban müködtethető. Az ellenkező irányu határhelyzet elérésekor a határkapcsoló megszakitja a szervomotor egyik irányu müködési lehetőségét. A határhelyzetek elérését jelzőlámpa kigyulása jelzi.

A szervomotor 1:25 áttételü csigamü és egy frikciós tengelykapcsolóra épitett 1:3 áttételü lánckerék utján hajtja az egyes fokozatok lánc-továbbitómüvét. Ez utóbbit a meghajtó tengely rögzitett hajtókereke és 3 szabadonfutó lánckerék vezeti. Az egyes ellenállás egységek továbbitó láncain 1-1 kétoldalra kiálló csap /"Cs"/ van. A csapok a kefeszerkezetet tartó hidak mozgatására szolgálnak. A csapokat az egyes oszlopok hosszának megfelelő távolságra toltuk el egymáshoz képest, amivel elértük, hogy az egyes ellenállás egységekhez tartozó csapok egymás után lépnek müködésbe oly módon, hogy amint az I. egység csapja elérte az első forduló pontot, a II. egység csapja éppen akkor lép müködésbe.

A csapok a kefeszerkezetet tartó hid szigetelt, megfelelően kiképzett pofáiba akadnak be az átforduláskor felül, majd alul kiakadnak és a kefeszerkezet az alsó helyzetben megáll. Egyirányu müködtetés esetén tehát a kefeszerkezeteket tartó hidakat egymás után huzogathatják le a hozzájuk tartozó továbbitó láncok csapjai. Igy az áramkör sohasem szakad meg, hanem az egyes ellenállás egységek záródnak csak rövidre, mégpedig az áram növelésekor az I-II-III-IV oszlopok sorrendjében.

A szervomotor 24V egyenárammal müködtetett kb. 0,2 LE teljesitményü főáramkörü motor. Az "N_1" és "N_2" nyomógombok a kétirányu müködtetést végzik. A "K_1" mágneskapcsoló az "a" és "b" érintkezőket müködteti. A "K_1" mágneskapcsoló tekercsének egyik ága a szolenoid olajtartályába helyezett olajmennyiségmérő "K_4" higanykapcsolóján keresztül csakis abban az esetben kap áramot, ha az egyenáram bekapcsolása az olajszivattyu normális müködésének visszajelzése után megtörtént. Árammentes helyzetben a "K_1" kapcsoló az a érintkező révén megszakitja a szervomotor forgórészének shunt-ellenállását, a "b" érintkező révén pedig zárja az "N_1" nyomógomb áramkörét és igy a szabályozó ellenállást bármely előző helyzetéből gyorsitott visszafutással az alaphelyzetbe állitja. Ugyancsak automatikusan állitja vissza a szabályozót a max. beiktatott ellenállás értékre, ha az olajhütés elégtelen, vagy egyáltalán nem müködik. Az alaphelyzetben a határkapcsoló leállitja a szervomotort és a "J_1" jelzőlámpa kigyulással jelzi a határhelyzet elérését.

A szabályozó ellenállás pillanatnyi helyzetét egy mechanikusan müködtetett jelzőberendezés mutatja. A mutató állásából a skálán leolvasható a szolenoiddal sorba iktatott ellenállás nagysága és látható, hogy az áramszedő szerkezet pillanatnyilag melyik ellenállás egységen nyugszik.

Az áramszabályozást biztositják a szabályozóra szerelt "N_1" és "N_2" nyomógombok. Ugyancsak megoldható az áramszabályozás a szolenoidra és a központi vezérlő asztalra szerelt nyomógombokkal is.

5.§. Távmüködtetés és központi vezérlés

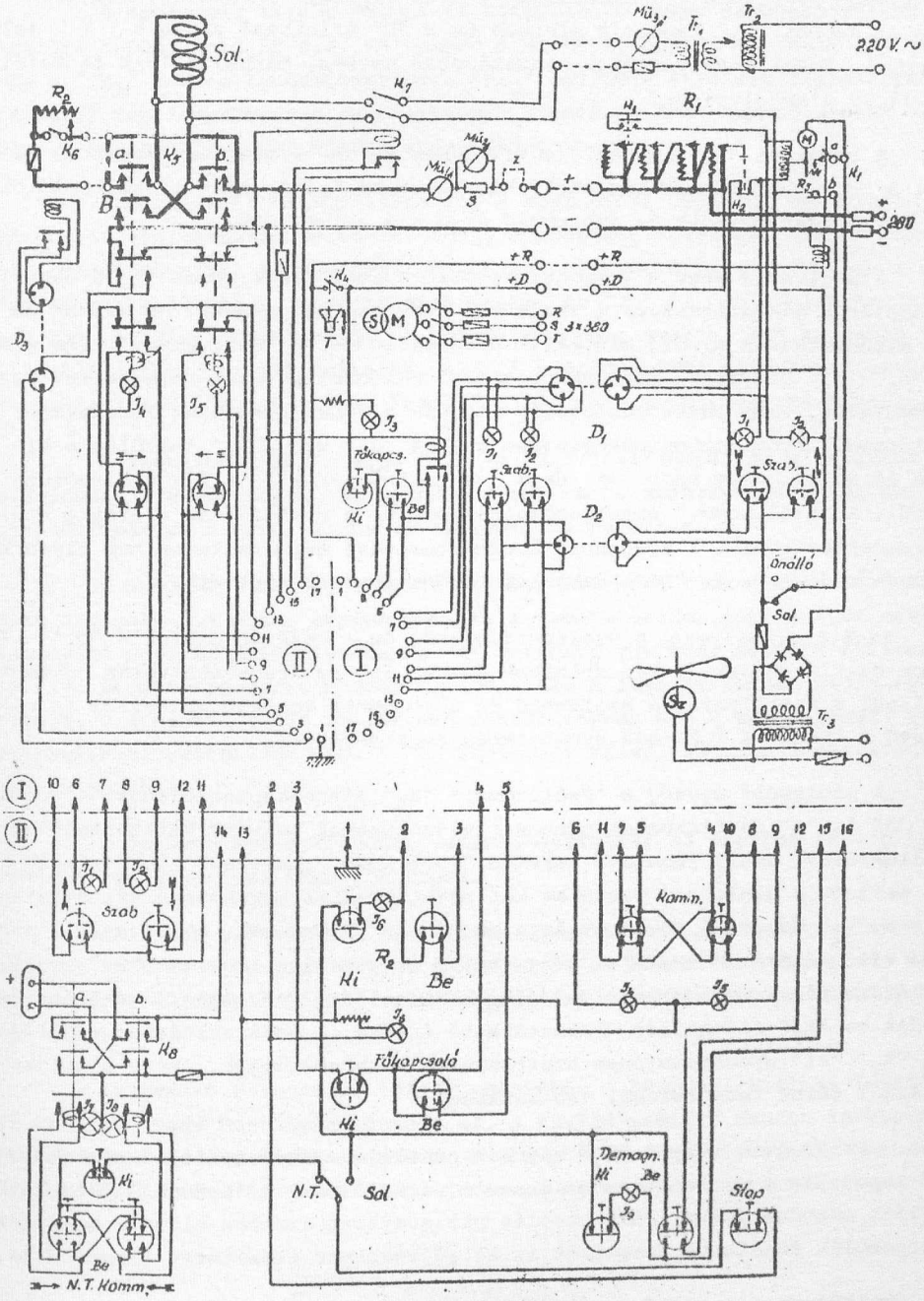
A távmüködtetés lehetővé teszi, hogy minden vezérlési, kapcsolási és mérési müveletet egyszerü gombnyomással, egy központi vezérlő asztaltól végezhessük el. A vezérlő asztaltól a következő müveletek kapcsolhatók:

a/ az egész berendezés üzemkész állapotba helyezése,
b/ az olajszivattyu ki-be kapcsolása,
c/ a szolenoid áram alá helyezése és kikapcsolása,
d/ a szolenoid áramának kommutálása,
e/ a szolenoid áramának folyamatos szabályozása
0,1 - 150 A-ig,
f/ a szolenoid áramának ugrásszerü szabályozása
0 - 30 A-ig
g/ demagnetizáló egység ki-be kapcsolása és müködtetése,
h/ a hitelesitás céljait szolgáló normáltekercs ki- és bekapcsolása,
i/ a normáltekercs áramának kommutálása,
j/ üzemzavar esetén mindezeknek együttes és pillanatszerü kikapcsolása.

Az egyes egységeket elláttuk mindazokkal a biztonsági reteszelő berendezésekkel, amelyek bármilyen téves, vagy egyidőben alkalmazott, ellentétes értelmü kapcsolást lehetetlenné tesznek.

A 9. ábrán látható a szolenoid teljes áramköri kapcsolása. Áramköri szempontból célszerü különválasztva tárgyalni a következő egységeket: a léptető szabályozó ellenállást, a szolenoidot közvetlen tartozékaival, a demagnetizáló egységet, az áramszabályozót és a központi vezérlő asztalt. Az egyes egységek csatlakozásait szaggatott vonallal jelöltük.

Az egységek villamosösszeköttetése és a megfelelő áramnemek bekapcsolása a berendezést előkészületi állapotba helyezi. Miután közvetlen kézikapcsolások felhasználásától üzembiztonsági okokból tartózkodtunk, áramhiány esetén semmiféle kapcsolás el nem végezhető. A távmüködést biztositó egyenáram vezérlésü mágneskapcsolók áramellátását ugyanazon áramforrás szolgáltatja, mint a szolenoidét. Az egységek összekapcsolása után a -28O+D kapcsokról jut a vezérlő feszültség a főkapcsoló nyomógombjaira. Bármelyik helyről is müködtetjük a főkapcsoló "be" nyomógombját, a "K_3" háromsarku mágneskapcsoló üzembe helyezi az "SM" olajszivattyut. Az olaj a szolenoidon és a "T" olajmennyiségmérőn keresztül folyik vissza az olajtartályba. Az olajmennyiségmérő müködését már az előzőekben ismertettük. Normális olajszállitás mellett a mérlegkarra épitett "T" tölcsér átbillen és a "K_4" higanykapcsoló a "+R" vezetéken keresztül feszültséget ad az áramszabályozó egység "K_1" mágneskapcsolójára, amely az "a" kapcsoló utján az "R_5" motorfordulatszámcsökkentő ellenállást rákapcsolja a "SM" szervomotor forgórészére és egyidejüleg bontja az áramszabá-



9. ábra.

Szolenoid teljes áramköri kapcsolása.

lyozó egység ↓ jelü nyomógombjának eddigi zárását. /Áramhiány esetében ugyanis az előbbi "K_1" kapcsoló elenged és a "b" érintkező zárja a ↓ jelü nyomógombot. Ennek következtében a szabályozó egység, bárhol álltak is keféi, visszaáll az alaphelyzetbe.

A behuzott "K_1" kapcsoló egyidejüleg a "+R" vezetéken keresztül müködteti a "J_3" jelzőlámpát is, amely kigyulásával jelzi, hogy a szolenoid olajhütése normálisan müködik és szolenoid áram alá helyezhető.

A szolenoid vagy a központi vezérlő asztal "Szol.komm." jelü bármelyik nyomógombjának müködtetésével a szolenoid áram alá helyezhető. Az üzembe helyezés automatikusan mindig minimális árammal indul. A "Szol.komm." nyomógombok a "K_5 - K_5" nagyáramu mágneskapcsolókat müködtetik. Ezek reteszeltek és igy kommutálás, vagy téves müködtetés folytán szembekapcsolásuk lehetetlen. A "Szol.komm." nyomógombok müködtetése után a "J_4" vagy "J_5" jelzőlámpa kigyullad és jelzi, hogy vagy ⇐ vagy ⇒ irányu áram folyik a szolenoidon keresztül. A "Szol.komm." nyomógombjainak egyidejü müködtetése esetén a szolenoid árammentesitődik. A szolenoid árammentesitése természetesen nem ilyen módon, hanem a főkapcsoló "Ki" gombjának müködtetésével történik.

Az áramszabályozó, a szolenoid egység és a vezérlő asztal a "D_1" - "D_2" dugaszos csatlakozásokkal kapcsolhatók össze. Igy az áramszabályozás egymástól függetlenül a szabályozó, a szolenoid és a központi vezérlő asztalról is elvégezhető a "Szab ↑ ↓ " jelü nyomógombok segitségével.

A szolenoid egység a "Szol.komm." "K_5" mágneskapcsolójának "a" oldalán az "A" és "B" csatlakozási pontok rövidzárásának helyére beiktatható az "R_2" ellenállás, amely lehetővé teszi a "Szol.komm." kapcsoló ⇒ irányu állása mellett a szolenoid áramának két szint közötti ugrásszerü változtatását. Ha a "K_6" kapcsoló rövidre zárja az "A - B" kapcsokat, akkor csak a szabályozó ellenállásának megfelelő áram halad át a szolenoidon. Az "R_2" rövidrezárt áramkörének megszakitásával /"K_6" kapcsoló/ a szolenoid áramkörébe beiktatódik az "R_2" ellenállás változtatható értéke. A megszakitást a vezérlő asztal "R_2" "ki" nyomógombjának segitségével eszközölhetjük. /Erre a teljes mágnesezési görbe felvételénél van szükség./

A szolenoid egység "K_7" mágneskapcsolója a demagnetizáló váltakozó áramot kapcsolja a szolenoidra a központi vezérlő asztal "Demagn." "Ki" és "Be" gombjainak müködtetésével. Bekapcsolás pillanatában azonban először bontja a "K_5" kapcsolók fenntartó áramkörét és az egyenáramot előzetesen lekapcsolja.

A központi vezérlő asztal "Stop" nyomógombja üzemzavar vagy veszély esetén pillanatszerüen mindent kikapcsol, a szolenoidot árammentesiti, a szabályozó ellenállást alaphelyzetébe állitja vissza és csupán a szolenoid olajhütését hagyja müködésben a főkapcsoló "Ki" nyomógombjának müködtetéséig.

A szolenoid terébe helyezett vizsgálandó anyag demagnetizálása a szolenoidra kapcsolható 50 c/s. váltakozó áram segitségével történik oly módon, hogy a "Tr_1" toroid transzformátor a "Tr_2" 220/60 V áttételü transzformátoron keresztül kap folyamatosan szabályozható áramot. A "K_7" kapcsoló csak a szolenoid egyenáramtól mentes állapotában müködtethető.

A berendezés hitelesitése egy a kapcsolási vázlaton nem szereplő normáltekercs segitségével történik, amely a központi vezérlőasztal "N.T.Komm." jelü nyomógombjaival kapcsolható. Ugyancsak ezeknek a nyomógomboknak a segitségével kommutálható a normáltekercs árama. Az "J_7" és "J_8" jelzőlámpák a ⇐ vagy ⇒ áramirányokat jelzik. A normáltekercset csak a "K_9" kapcsoló "NT" állásában lehet áram alá helyezni. A "K_9" kapcsoló "NT" állásban a szolenoidot árammentesiti. A "K_9" kapcsoló "Szol." állásban a normáltekercset kapcsolja ki.

A szabályozó berendezés "J_1" és "J_2" jelzőlámpáitól eltekintve a többi jelzőlámpát a mágneskapcsolók meghuzó áramköreibe sorosan épitettük be. Ezzel a jelzőlámpák az olvadó biztositó szerepét is betöltik.

A szolenoid egységbe épitett "$Mü_1$" árammérő csak tájékoztató árammérésre szolgáló 1,5 oszt. Deprez-müszer. A laboratóriumi pontosságot megkivánó árammérést 0-30 A intervallumban a "z" bontható rövidzár helyére iktatott 0,2 osztályu Deprez-rendszerü müszerrel, 30 - 150 A intervallumban pedig egy beépitett, 0,1 osztályu "S" söntön eső feszültségnek 0,2 % pontossággal való meghatározásával valósitjuk meg. A "z" rövidzárt külső, könnyen hozzáférhető helyen helyeztük el.

A szolenoidot a központi vezérlő asztallal 34 érpáros kettős (I) (II) dugaszos csatlakozóval kötöttük össze.

Amint az előbbiekből is kitünik, igyekeztünk még a látszólagos tulkomplikálások árán is biztositani a kényelmes és üzembiztos kezelést, miután a berendezés kézikapcsolókkal való müködtetése elkerülhetetlen tévedéseket rejt magában.

Az ismert berendezés teljes egészében a Központi Fizikai Kutató Intézet Ferromágneses Osztályán készült el. A kivitelezésért ezuton is köszönetet mondunk Kozma József főmühelyvezető, Szakács Béla főmühelyvezető, Marosi Endre intézeti mechanikus és Tumay János intézeti mechanikus kartársaknak.

Irodalom

[1] M. Fallot, Ann. de Phys. 6. 305. /1936/

[2] G. Gerloff, E. Lőwe, Z. f. Phys. 98. 559. /1936/
F. Bitter, Rev. Sci. Instr. 7. 482. /1936/
И. М. Пузей, Зав. Лаб. 2. 176. /1949/
B. Lewis, Br. J. appl. Phys. 1. 238. /1950/
T.A. Heddle, Br. J. appl. Phys. 3. 95. /1952/
[3] F. Bitter, Rev. Sci. Inst. 10. 373. /1939/
[4] S. T. Lin and A.R. Kaufmann, Rev. Mod. Phys. 25. 182. /1953/

Érkezett: 1955. május 17.
KFKI Közl., 3, 300, /1955/

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT
III. 1955.

MAGHASADÁSI VIZSGÁLATOKNÁL FELLÉPŐ VALÓSZÍNŰSÉGSZÁMÍTÁSI KÉRDÉSEKRŐL*

PÁL LÉNÁRD
Központi Fizikai Intézet, Ferromágneses Osztály

Maghasadási folyamatok tanulmányozására szolgáló ionizációs kamrák konstrukciójánál igen fontos feladat olyan mérési feltételek biztosítása, amelyek mellett a jelenlévő α-részecskék okozta ionizáció zavaró hatása kicsiny.

A hasadási termékek energiája igen széles határok között változhat, mindenesetre az átlagos energia legalább egy nagyságrenddel nagyobb, mint az α-részecskék energiája. Azonban az α-részecskék által keltett ionizációs lökések szuperponálódhatnak és így olyan ionizációs lökések állhatnak elő, amelyeket berendezésünk, mint a hasadási termékek ionizációs lökéseit regisztrálja. *B. B. Rossi* és *H. H. Staub* [1] könyvükben foglalkoznak ennek a hibának korrekciójával. Az általuk javasolt korrekció a gyakorlati esetekre csak közelítőleg alkalmazható (amint ezt a szerzők maguk is megjegyzik), mivel nem vették figyelembe, hogy az egymásra szuperponálódó impulzusok exponenciális alakúak.

Ebben a dolgozatban megmutatjuk, hogy a maghasadások számának meghatározásánál hogyan kell figyelembe venni, legalább elvileg korrektebb módon, az α sugárzás zavaró hatását.

1. §

Legyen $H(x)$ annak a valószínűsége, hogy egy α-részecske által okozott feszültséglökés amplitudója x-nél kisebb. Tegyük fel az egyszerűség kedvéért, hogy az α részecskék által okozott impulzusok Poisson-eloszlást követnek[1] és legyen N a Poisson-eloszlás sűrűsége. Ha most $R(x,t)$-vel jelöljük annak a valószínűségét, hogy a (o, t) időközben keletkező feszültségimpulzusok (amelyek $e^{-\frac{t}{\tau}}$ exponenciális törvény szerint csökkennek) összege t időpontban x-nél kisebb, akkor az $R(x, t+\Delta t)$ valószínűség a következő két egymást kizáró esemény valószínűségeinek összegével lesz egyenlő:

1) a $(t, t+\Delta t)$ időközben nem következik be feszültséglökés és t időben az impulzusok összege kisebb, mint $xe^{\frac{\Delta t}{\tau}}$, vagy

* Érkezett 1954. augusztus 18.

[1] A Függelék A) részében megmutatjuk, hogy igen egyszerű módon általánosítani lehet az itt tárgyalt esetet bizonyos nem Markov-típusú folyamatokra is. Hasonló általánosítással *Takács L.* [2] is foglalkozott.

2) a $(t, t+\Delta t)$ időközben bekövetkezik legalább egy impulzus [annak a valószínűsége, hogy egynél több impulzus következzék be $o(\Delta t)$], amelynek amplitudója az $(y, y+dy)$ intervallumba esik és t időpontban az impulzusok összege kisebb, mint $(x-y)e^{\frac{\Delta t}{\tau}}$. Tehát

$$R(x, t+\Delta t) = (1-N\Delta t)\, R(xe^{\frac{\Delta t}{\tau}}, t) + N\Delta t \int_0^x R(x-y, t)\, dH(y) + o(\Delta t). \tag{1}$$

Ebből

$$\frac{\partial R}{\partial t}\Delta t = \frac{x}{\tau}\frac{\partial R}{\partial t}\Delta t + N\Delta t \left\{ \int_0^x R(x-y, t) dH(y) - R(x, t) \right\} + o(\Delta t). \tag{2}$$

Ha ezt az egyenletet Δt-vel osztjuk és a $\Delta t \to 0$ határátmenetet elvégezzük, akkor az $R(x, t)$ meghatározására a következő integro-differenciál egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \frac{x}{\tau}\frac{\partial R}{\partial x} + N \left\{ \int_0^x R(x-y, t)\, dH(y) - R(x, t) \right\}. \tag{3}$$

Ha létezik a

$$\lim_{t \to \infty} R(x, t) = R(x)$$

stacionárius esetnek megfelelő eloszlásfüggvény, akkor a (3) egyenletből az

$$\frac{x}{\tau}\frac{dR}{dx} = N \left\{ R(x) - \int_0^x R(x-y) dH(y) \right\} \tag{4}$$

alakú összefüggésre jutunk.

Tekintettel arra, hogy az α-részecskék által okozott impulzusok függetlenek a hasadási termékek impulzusaitól, külön meghatározhatjuk a hasadási termékek feszültségimpulzusainak szuperpozíciójából adódó feszültség eloszlásfüggvényét a következő egyenlet alapján:

$$\frac{x}{\tau}\frac{dS}{dx} = M \left\{ S(x) - \int_0^x S(x-y) dK(y) \right\}, \tag{5}$$

ahol $K(y)$ a hasadási termékekhez tartozó feszültséglökések amplitudóinak eloszlásfüggvénye és így a tényleges feszültségre vonatkozó eloszlásfüggvényt a

$$P(x) = \int_0^x R(x-y) dS(y) \tag{6}$$

kifejezés szolgáltatja.

Legyen V az ionizációs kamrához csatlakozó diszkriminátor szelektáló feszültsége. Ha a diszkriminátor bemenő ellenállásán a feszültség a V szelektáló feszültség fölé ugrik, akkor berendezésünk „maghasadási" esetet regisztrál. Természetesen az ilyen esetekhez a nem valódi maghasadási esetek is hozzátartoznak. Jelöljük Q-val a nem valódi és a valódi maghasadási esetek

sűrűségeinek összegét. Poisson-folyamat esetében a

$$Q = Q_1 + Q_2,$$

ahol Q_1 a valódi maghasadási folyamatok sűrűsége, míg Q_2 a nem valódi maghasadási folyamatok sűrűsége. Q_1-re és Q_2-re a következő kifejezéseket kapjuk:

$$Q_1 = M \int_0^V \{1 - K(y)\} dP(V-y), \tag{7}$$

$$Q_2 = N \int_0^V \{1 - H(y)\} dP(V-y). \tag{8}$$

Ugyanis ahhoz, hogy a diszkriminátor bemenő ellenállásán a feszültség a V feszültség fölé ugorjon az szükséges, hogy az ugrás előtt a feszültség V-nél kisebb legyen [$dP(V-y)$ éppen annak a valószínűsége, hogy a feszültség valamely, a bekapcsolástól elég távoli időpontban a $(V-y-dy, V-y)$ intervallumba essen] és egy α-részecskétől $\{1-H(y)\}$ vagy egy hasadási terméktől származó impulzus $\{1-K(y)\}$ hatására a V fölé emelkedjen. Mivel az α-részecskék sűrűsége N, a hasadási termékeké pedig M, a Q_1 és Q_2-re adott (7) és (8) alatti kifejezések éppen a valódi, illetve hamis hasadási esetek sűrűségét adják meg.

A V diszkriminációs feszültség és egyéb paraméterek célszerű megválasztásával arra kell törekedni, hogy $Q_1 \gg Q_2$ teljesüljön.

2. §.

Az α-részecskék okozta feszültséglökések amplitudóinak eloszlásfüggvényére vonatkozóan éljünk azzal a feltevéssel, hogy

$$H(x) = 1 - e^{-ax}, \tag{9}$$

ahol a^{-1} a feszültséglökések átlagértéke. A hasadási termékek esetében két (vagy elvileg több) részecske ionizációjának hatása összegeződik. Így lényegében két (9) típusú eloszlás kompozícióját kell vennünk:

$$K(x) = b \int_0^x \{1 - e^{-b(x-y)}\} e^{-by} dy, \tag{10}$$

ahol b^{-1} a hasadási termékek okozta feszültségimpulzusok átlagértékének a fele.

A (9) felhasználásával a (4)-ből a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{d \ln r(z)}{dz} = -N r(z+a)^{-1}, \tag{11}$$

ahol

$$r(z) = \int_0^\infty e^{-zx} dR(x).$$

A (11) egyenletből rögtön következik, hogy

$$r(z) = a^{N\tau}(z+a)^{-N\tau}. \tag{12}$$

Ennek a kifejezésnek az inverz transzformáltja egyszerűen előállítható:

$$r(x) = \frac{ae^{-ax}(ax)^{N\tau-1}}{\Gamma(N\tau)}. \tag{13}$$

Az eloszlásfüggvény pedig:

$$R(x) = \frac{\Gamma(ax, N\tau)}{\Gamma(N\tau)}, \tag{14}$$

ahol $\Gamma(ax, N\tau)$ a nem teljes gamma-függvény.

Az $s(z)$-re pedig a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{d \ln s(z)}{dz} = -M\tau\{(z+b)^{-1} + b(z+b)^{-2}\}, \tag{15}$$

amiből

$$s(z) = b^{M\tau} \exp\{-M\tau z(z+b)^{-1}\}(z+b)^{-M\tau}. \tag{16}$$

A (16)-ból igen egyszerűen következik, hogy

$$s(x) = b\left(\frac{xb}{M\tau}\right)^{\frac{M\tau-1}{2}} \exp\{-(M\tau+bx)\} I_{M\tau-1}(2\sqrt{M\tau bx}), \tag{17}$$

ahol

$$I_\nu(x) = i^{-\nu} J_\nu(ix).$$

A tulajdonképpeni feladat a $Q(V)$ függvény meghatározása. A (7, 8)-ból a (6) felhasználásával és figyelembevéve a (12) és (16) alatti eredményeket felírhatjuk, hogy

$$Q_1(z) = \tag{18}$$
$$= Ma^{N\tau}b^{M\tau}\exp\{-M\tau z(z+b)^{-1}\}(z+a)^{-N\tau}\cdot(z+b)^{-(M\tau+1)}\{1+b(z+b)^{-1}\},$$

$$Q_2(z) = Na^{N\tau}b^{M\tau}\exp\{-M\tau z(z+b)^{-1}\}(z+a)^{-(N\tau+1)}\cdot(z+b)^{-M\tau}, \tag{19}$$

ahol

$$Q_1(z) = \int_0^\infty e^{-zx} Q_1(x)\,dx, \quad Q_2(z) = \int_0^\infty e^{-zx} Q_2(x)\,dx.$$

Az áttekinthetőség kedvéért vezessük be a következő jelöléseket: $N\tau = \alpha$, $M\tau = \beta$. A gyakorlatilag fontos esetekben $\alpha > \beta$ és $\alpha \ll 1$.

A (18) és (19) alatti kifejezések inverz transzformáltjainak kiszámításánál a következő integrálokat kell meghatározni:

$$Q_2(x) = \tag{20}$$
$$= (2\pi i)^{-1} Na^\alpha b^\beta e^{-\beta} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \exp\{zx + \beta b(z+b)^{-1}\}(z+a)^{-(\alpha+1)}(z+b)^{-\beta}\,dz.$$

Míg

$$Q_1(x) = Q_{11}(x) + Q_{12}(x),$$

ahol

$$Q_{11}(x) = \tag{21}$$

$$= (2\pi i)^{-1} M a^{\alpha} b^{\beta} e^{-\beta} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \exp\{zx + \beta b(z+b)^{-1}\}(z+a)^{-\alpha}(z+b)^{-(\beta+1)}\,dz$$

és

$$Q_{12}(x) = \tag{22}$$

$$= (2\pi i)^{-1} M a^{\alpha} b^{\beta} e^{-\beta} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \exp\{zx + \beta b(z+b)^{-1}\}(z+a)^{-\alpha}(z+b)^{-(\beta+2)}\,dz.$$

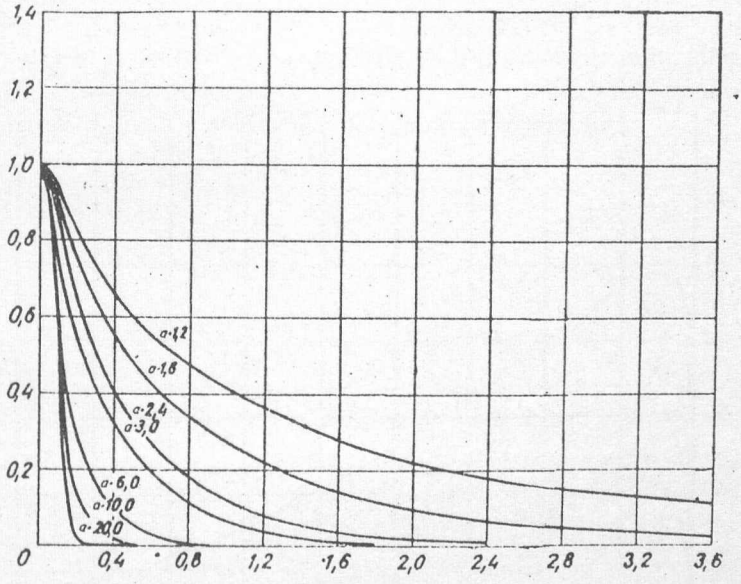
Mivel a számításba jövő V értékek olyanok, hogy $\beta b V \ll 1$, könnyen megkaphatjuk a Q_1 és Q_2 integrálok közelítő formuláit. Ezek a formulák sorban a következők[1]:

$$Q_1(V) \sim M \exp\{-(M\tau + bV)\}(Va)^{N\tau}(Vb)^{M\tau}(1+bV), \tag{23}$$

$$Q_2(V) \sim N \exp\{-(M\tau + aV)\}(aV)^{N\tau}(bV)^{M\tau}. \tag{24}$$

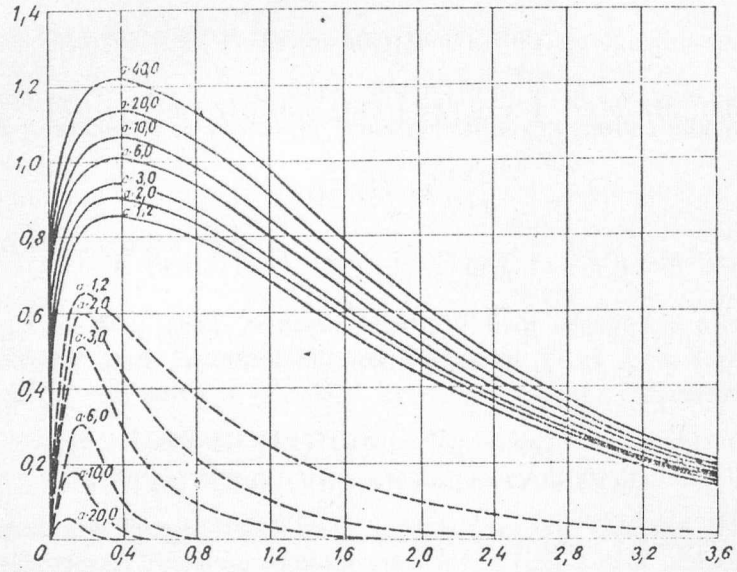
A (24) kifejezés az α-részecskék feszültséglökéseitől származó hamis hasadási esetek, míg a (23) a tényleges hasadási esetekből leszámlálásra került esetek száma.

Az 1. ábrán láthatjuk, hogyan függ a diszkriminációs feszültségektől az $\frac{MQ_2(V)}{NQ_1(V)}$ viszony adott $\frac{M}{N}$ arány és különböző ab^{-1} értékek mellett. Az

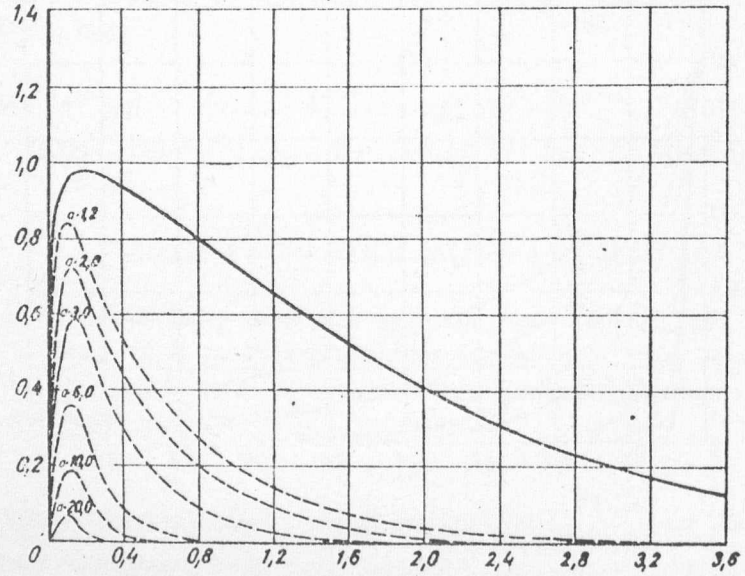


1. ábra. Az $\frac{MQ_2(V)}{NQ_1(V)}$ arány (ordináta) függése különböző a értékek mellett a V diszkriminációs feszültségtől (abszcissza). A feszültség egységéül a b^{-1} mennyiséget választottuk.

[1] A (20) és (22) integrálok kiszámításának menetét lásd a Függelék B) részében.



2. ábra. A kihúzott görbék a valódi maghasadási esetek okozta impulzusok ($Q_1 M^{-1}$) viszonylagos számát (ordináta), míg a szaggatott görbék az α-részecskéktől származó impulzusok ($Q_2 N^{-1}$) relatív számát (ordináta) szemléltetik a V diszkriminációs feszültség függvényében (abszcissza) különböző a értékek mellett $M = 10^{-2}$ és $N = 10^{-1}$ esetben. A feszültség egységéül a b^{-1} mennyiséget választottuk.



3. ábra. Ugyanaz mint a 2. ábra, csak $M = 10^{-4}$ és $N = 10^{-3}$.

$\frac{MQ_2(V)}{NQ_1(V)}$ viszony a hamis és valódi maghasadási esetek sűrűségeinek arányát adja meg. Megjegyezzük, hogy a V feszültséget b^{-1} egységekben fejeztük ki a könnyebb áttekinthetőség kedvéért. Ha ismerjük a hasadási termékek okozta impulzusok és az α-részecskéktől származó impulzusok amplitudóinak átlagértékét, akkor az 1. ábra alapján könnyű kiválasztani azt a diszkriminációs feszültséget, amely mellett a regisztrálás kedvező. A 2—3. ábrán külön feltüntettük azoknak az impulzusoknak a számát, amelyek a valódi hasadási esetekből származnak és azokat, amelyek az α-részecskék szuperponálódó impulzusaiból származnak a diszkriminátorfeszültség függvényében, különböző ab^{-1} és Nr, valamint Mr értékek mellett. (A b^{-1} itt is a feszültség egységéül szolgál.) A diszkriminációs feszültség helyes megválasztásánál figyelembe kell venni, hogy az α-részecskék okozta hibás jelek kizárása céljából túl nagynak választott diszkriminációs feszültség a valódi maghasadási esetek közül regisztrált esetek számának is erős csökkenésére vezet. Az optimális diszkriminációs feszültség meghatározására adnak útmutatást a 2—3. ábrák.

Az I—III. táblázatok a grafikonoknál pontosabb képet adnak a mennyiségi viszonyokról.

Befejezésül szeretnénk kiemelni, hogy számításainkban az a feltevés, hogy mind az α-részecskék, mind a hasadási termékek ionizációja okozta feszültséglökések amplitudói exponenciális eloszlást mutatnak, a számítást egyszerűsíti és emellett igen sok esetben gyakorlatilag is helyes. Érdemes megemlíteni, hogy a közölt módszer sokkal általánosabb érvényű, mint ahogy ez a fentebbiekből első pillanatra látszik és alkalmazható különböző amplitudódiszkriminálással kapcsolatos statisztikai feladatok megoldására.

I. TÁBLÁZAT

$MQ_2(V) \cdot N^{-1}Q_1(V)^{-1}$

V \ a	1.2	1.6	2.0	2.4	3.0	6.0	10.0	20.0
0.2	0.801	0.739	0.682	0.630	0.559	0.306	0.138	0.019
0.4	0.659	0.562	0.789	0.408	0.321	0.097	0.019	
0.8	0.473	0.344	0.250	0.181	0.112	0.010		
1.2	0.357	0.221	0.137	0.085	0.041	0.001		
1.4	0.315	0.180	0.103	0.059	0.025			
1.8	0.249	0.121	0.159	0.029	0.010			
2.4	0.182	0.070	0.027	0.010	0.002			
2.8	0.150	0.049	0.016	0.005	0.001			
3.2	0.125	0.035	0.010	0.003				
3.6	0.106	0.025	0.006	0.001				
4.0	0.090	0.018	0.004	0.001				

II. TÁBLÁZAT

$M_r \cdot 10^{-2}$, $N_r \cdot 10^{-1}$

V \ a	2.0		3.0		6.0		10.0		40.0	
	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}
0.2	0.873	0.596	0.909	0.508	0.975	0.299	1.026	0.141	1.178	*
0.4	0.900	0.431	0.937	0.301	1.005	0.097	1.057	*0.021	1.215	
0.8	0.837	0.209	0.872	0.098	0.935	*0.009	0.984		1.130	
1.2	0.717	0.098	0.747	*0.031	0.801	*0.001	0.843		0.968	
1.4	0.652	*0.067	0.679	*0.017	0.727		0.765		0.879	
1.8	0.524	*0.031	0.546	*0.005	0.585		0.615		0.707	
2.4	0.360	*0.010	0.375	*0.001	0.402		0.423		0.486	
2.8	0.275	*0.004	0.286		0.306		0.322		0.370	
3.2	0.206	*0.002	0.215		0.230		0.242		0.278	
3.6	0.153		0.160		0.171		0.180		0.207	
4.0	0.113		0.118		0.126		0.133		0.153	

A csillaggal megjelölt (és a ki nem írt) értékek felülről becsült korrekciói 5%-nál nagyobbak (lásd a IV. táblázatot).

III. TÁBLÁZAT

$M_r \cdot 10^{-1}$, $N_r \cdot 10^{-3}$

V \ a	2.0		3.0		6.0		10.0		40.0	
	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}
0.2	0.981	0.669	0.982	0.548	0.982	0.301	0.983	0.135	0.984	
0.4	0.938	0.449	0.938	0.301	0.939	0.091	0.939	0.018	0.941	
0.8	0.809	0.202	0.809	0.091	0.810	0.008	0.810		0.811	
1.2	0.663	0.091	0.663	0.027	0.664	0.001	0.664		0.665	
1.4	0.592	0.060	0.593	0.015	0.593		0.593		0.594	
1.8	0.463	0.027	0.463	0.004	0.464		0.464		0.465	
2.4	0.309	0.008	0.309	0.001	0.309		0.309		0.310	
2.8	0.231	0.004	0.231		0.232		0.232		0.232	
3.2	0.171	0.002	0.171		0.172		0.172		0.172	
3.6	0.126	0.001	0.126		0.126		0.126		0.126	
4.0	0.092		0.092		0.092		0.092		0.092	

IV. TÁBLÁZAT

$M_r \cdot 10^{-2}$, $N_r \cdot 10^{-1}$

V \ a	2.0		3.0		6.0		10.0	
	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}
0.2	0.00243	0.00370	0.00253	0.00440	0.00271	0.00494	0.00285	0.00405
0.4	0.00431	0.00545	0.00449	0.00565	0.00481	0.00413	0.00506	0.00258
0.8	0.00668	0.00585	0.00696	0.00472	0.00746	0.00204	0.00785	0.00102
1.2	0.00762	0.00473	0.00794	0.00315	0.00851	0.00119	0.00896	0.00066
1.4	0.00772	0.00407	0.00803	0.00252	0.00861	0.00095	0.00906	0.00054
1.8	0.00740	0.00289	0.00770	0.00160	0.00825	0.00063	0.00869	0.00036
2.4	0.00623	0.00162	0.00649	0.00083	0.00695	0.00034	0.00732	0.00020
2.8	0.00530	0.00109	0.00552	0.00055	0.00591	0.00023	0.00622	0.00013
3.2	0.00439	0.00072	0.00457	0.00036	0.00490	0.00015	0.00515	0.00009
3.6	0.00355	0.00048	0.00370	0.00024	0.00397	0.00010	0.00417	0.00006
4.0	0.00283	0.00032	0.00295	0.00016	0.00316	0.00007	0.00332	0.00004

A $g(z)$ ismeretében kiszámítható a $G(x)$ eloszlásfüggvény. A $G(x)$ ismeretében viszont könnyű meghatározni annak a valószínűségét, hogy valamely tetszőleges időpontban a feszültségek összege x-nél kisebb legyen. Jelöljük ezt a valószínűséget $R(x)$-el. Ekkor

$$R(x) = \lambda \int_0^\infty \{1 - F(t)\} G(xe^{rt}) dt, \tag{A.5}$$

ahol

$$\lambda = \int_0^\infty \{1 - F(t)\} dt. \tag{A.6}$$

Ha az egymás után következő impulzusok közötti időtartamok közös eloszlásfüggvénye

$$F(t) = 1 - e^{-Nt} \tag{A.7}$$

vagyis, ha impulzusok Poisson-folyamatot alkotnak, akkor az (A.6) alatti egyenlettel teljesen ekvivalens az 1. §-ban levezetett (4) integro-differenciál egyenlet:

$$\frac{x}{r}\frac{dR}{dx} = N\left\{R(x) - \int_0^x R(x-y)dH(y)\right\}. \tag{A.8}$$

B)

A (20), (21) és (22) alatti kifejezésekben

$$\Phi(x) = (2\pi i)^{-1} \int_{\delta - i\infty}^{\delta + i\infty} \exp\{xz + \beta b(z+b)^{-1}\} (z+a)^{-(\nu+\alpha)} (z+b)^{-(\mu+\beta)} dz \tag{B.1}$$

típusu integrálokat kell meghatározni. A $\beta b x \ll 1$ valamint a $\beta < \alpha < 1$ viszonyokat figyelembe véve a következőképpen járhatunk el. Az

$$\exp\{\beta b(z+b)^{-1}\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta b)^n}{n!} (z+b)^{-n}$$

gyorsan konvergáló sor felhasználásával a feladat a következő integrál kiszámítására redukálható:

$$\Phi_n(x) = (2\pi i)^{-1} \int_{\alpha - i\infty}^{\alpha + i\infty} e^{zx} (z+a)^{-(\nu+\alpha)} (z+b)^{-(n+\mu+\beta)} dz. \tag{B.2}$$

A (*B*.2) alatti integrál nehézség nélkül [3] kiszámítható:

$$\Phi_n(x) = e^{-ax} \frac{x^{r_n+\mu-1}}{\Gamma(r_n+\mu)} {}_1F_1(r_n, r_n+\mu, cx), \tag{B.3}$$

ahol

$$r_n = n+l+\beta, \quad \mu = r+\alpha, \quad c = a-b \tag{B.4}$$

és ${}_1F_1(r_n, r_n+\mu, cx)$ az elfajult hipergeometrikus függvény. Tehát a (*B*.1)

V. TÁBLÁZAT

$M = 10^{-4}$. $N = 10^{-3}$

V \ a	2.0		3.0		6.0		10.0	
	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}	Q_1M^{-1}	Q_2N^{-1}
0.2	0.00002	0.00004	0.00002	0.00004	0.00002	0.00005	0.00002	0.00002
0.4	0.00004	0.00005	0.00004	0.00005	0.00004	0.00004	0.00004	0.00004
0.8	0.00006	0.00006	0.00006	0.00004	0.00006	0.00002	0.00006	0.00001
1.2	0.00007	0.00004	0.00007	0.00003	0.00007	0.00001	0.00007	
1.4	0.00007	0.00004	0.00007	0.00002	0.00007	0.00001	0.00007	
1.8	0.00007	0.00003	0.00007	0.00001	0.00007		0.00007	
2.4	0.00006	0.00001	0.00006		0.00006		0.00006	
2.8	0.00005	0.00001	0.00005		0.00005		0.00005	
3.2	0.00004	0.00001	0.00004		0.00004		0.00004	
3.6	0.00003		0.00003		0.00003		0.00003	
4.0	0.00003		0.00003		0.00003		0.00003	

Függelék.

A)

Legyen $F(t)$ az egymás után következő ionizációs aktusok közötti időtartamok közös eloszlásfüggvénye. Ha most $G_n(x)$-el jelöljük annak a valószínűségét, hogy az n-ik impulzus bekövetkezésekor az ionizációs kamra kimenő ellenállásán a feszültség x-nél kisebb, akkor — figyelembevéve, hogy a feszültség értéke két impulzus közötti időtartam alatt $e^{-\frac{t}{\tau}}$ szerint csökken — felírhatjuk a következő rekurziós formulát:

$$G_n(x) = \int_0^\infty \int_0^x G_{n-1}\{(x-y)e^{\frac{t}{\tau}}\}\, dF(t)\, dH(y). \tag{A.1}$$

Ha most bevezetjük a

$$g_n(z) = \int_0^\infty e^{-zx}\, dG_n(x), \qquad h(z) = \int_0^\infty e^{-zx}\, dH(x) \tag{A.2}$$

Laplace—Stieltjes transzformáltakat, akkor az (A.1) alatti egyenletből a következő kifejezésre jutunk:

$$g_n(z) = h(z) \int_0^\infty g_{n-1}(ze^{-\frac{t}{\tau}})\, dF(t). \tag{A.3}$$

Ha létezik a

$$\lim_{n \to \infty} g_n(z) = g(z)$$

határérték, akkor $g(z)$ kielégíti a következő integrálegyenletet:

$$g(z) = h(z) \int_0^\infty g(ze^{-\frac{t}{\tau}})\, dF(t). \tag{A.4}$$

alatti integrál egyszerűen mint egy gyorsan konvergáló végtelen sor állítható elő:

$$\Phi(x) = e^{-ax} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta b)^n}{n!} \frac{x^{r_n+\mu-1}}{\Gamma(r_n+\mu)} {}_1F_1(r_n, r_n+\mu, cx). \qquad (B.5)$$

Most megmutatjuk, hogy a $\beta bx \ll 1$ feltétel mellett igen jó közelítést kapunk már akkor, ha csak az első tagra szorítkozunk. Először is minden nehézség nélkül belátható, hogy

$${}_1F_1(k+\varepsilon, m+\delta, cx) \leq {}_1F_1(k, m, cx) \qquad (B.6)$$

ahol k és m egészszámok és $\delta > \varepsilon$ és $\delta \ll 1$. Így

$$\Phi(x) = e^{-ax} \frac{x^{\alpha+\beta+r+l-1}}{\Gamma(\alpha+\beta+r+l)} {}_1F_1(\beta+l, \alpha+\beta+r+l, cx) + \Phi_{\text{kor.}}(x) \qquad (B.7)$$

és

$$\Phi_{\text{kor.}}(x) = e^{-ax} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta b)^n}{n!} \frac{x^{n+l+r-1}}{\Gamma(n+l+r)} {}_1F_1(n+l, n+l+r, cx). \qquad (B.8)$$

A minket érdeklő esetekben a következő r és l értékek fordulnak elő:

a) $r = 1, \quad l = 0$

b) $r = 0, \quad l = 1$

c) $r = 0, \quad l = 2$

Így az a) esetben

$$\Phi^{(a)}_{\text{kor.}}(x) = e^{-ax} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta b)^n}{n!} \frac{x^n}{n!} {}_1F_1(n, n+1, cx). \qquad (B.9)$$

Az ${}_1F_1(n, n+1, cx)$ a következő paraméteres integrállal adható meg:

$${}_1F_1(n, n+1, cx) = n \int_0^1 t^{n-1} e^{cxt}\, dt.$$

Tehát

$$\Phi^{(a)}_{\text{kor.}}(x) = e^{-ax} x\beta b \int_0^1 e^{xbt} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x\beta bt)^n}{n!} \frac{1}{(n+1)!} \right\} dt = \frac{\beta b}{a-b} (e^{-bx} - e^{-ax}) I_1(2), \qquad (B.10)$$

ahol $I_1(2) = 1{,}5906\ldots$. Ily módon állíthatjuk, hogy az a) esetben elkövetett hiba biztosan kisebb, mint $\beta(a-b) e^{-ax} x^{\alpha+\beta+1} + \frac{\beta b}{a-b} (e^{-bx} - e^{-ax}) I_1(2)$, tehát felírhatjuk, hogy $\Phi_a \sim e^{-ax} x^{\alpha+\beta}$.

A b) és c) esetben a számítás jóval egyszerűbb. Végeredményül azt kapjuk, hogy $\Phi_b(x) \sim e^{-bx} x^{\alpha+\beta}$ és $\Phi_c(x) \sim e^{-bx} x^{\alpha+\beta+1}$. Az elkövetett hiba b) esetben biztosan kisebb mint $x\beta be^{-bx} \{I_0(2) - 1\}$ és c) esetben pedig mint $x^2 \beta b e^{-bx} \{I_1(2) - 1\}$.

Könnyű meggyőződni, hogy a korrekciók, (amelyek itt lényegesen nagyobbak a helyes értéknél) a gyakorlatilag fontos esetekben alig 2—5%-ot jelen-

tenek.[1] A IV. és V. táblázatokban összeállítottuk ezeknek a felülről becsült korrekcióknak értékeit.

A numerikus számítások elvégzéséért *Rozsnyai Balázs* kollégámnak ezúton mondok szíves köszönetet.

IRODALOM

[1] *B. B. Rossi a. H. H. Staub*, Ionization chambers and counters 1949.

[2] *L. Takács*, Poisson-folyamat által származtatott másodlagos sztochasztikus folyamatokra vonatkozó tételekről. MTA III. Osztályának Közleményei. (Sajtó alatt).

[3] В. А. Диткин, П. И. Кузнецов, Справочник по операционному исчислению, Москва—Ленинград 1951.

[1] Megjegyzendő, hogy a (*B*.10) alatti kifejezés értéke bizonyos körülmények között (ha $\beta \cdot M_1$ nem eléggé kicsiny) jelentős lehet. Azonban a gyakorlatilag fontos esetekben $\beta \cdot M_1 < 10^{-3}$ úgy hogy (*B*.10) csupán 2—5%-os korrekciót jelent. A II. és IV. táblázat adatainak összehasonlítása mutatja, hogy $M_1 \sim 10^{-2}$ mellett a közelítés elég rossz, míg a III. és V. táblázat adatainak összevetése azt igazolja, hogy a gyakorlatilag fontos esetekben a közelítés elég jó.

A FERROMÁGNESES OSZTÁLY KÖZLEMÉNYE
OSZTÁLYVEZETŐ: PÁL LÉNÁRD

Laboratóriumi szolenoid közepes erősségü mágneses terek előállitására

Irta: Zsigmond György

A ferromágneses anyagok vizsgálatához gyakran szükséges közepes erősségü /1000-5000 Oe/, viszonylag nem nagy homogenitásu /pl. 5 cm szakaszon 1% max. inhomogenitást mutató/ állandó mágneses tér előállitása. Erős mágneses terek /10^4 Oe/ létesitésére szolgáló szolenoidok nem tulzottan költséges és viszonylag jó teljesitmény-kihasználással müködő tipusai közül nemrég [1] ismertettünk egy széleskörü felhasználásra alkalmas laboratóriumi tipust. A nyert tapasztalatok felhasználásával és néhány uj technikai megoldás alkalmazásával egyszerübb, könnyebben kezelhető, közepes erősségü mágneses teret szolgáltató tipust dolgoztunk ki.

A kitüzött feladat egy 28 mm átmérőjü légrés 2 cm hosszu szakaszán, maximálisan 0,2 % inhomogenitást /illetőleg 5 cm szakaszon maximálisan 1 % inhomogenitást/ mutató, 5000 Oe maximális térerősséget adó szolenoid kivitelezése volt. A szolenoidot általános laboratóriumi használatra terveztük, azonban külön figyelmet forditottunk arra, hogy 1000-3000 MHz-es frekvencia tartományban a ferromágneses rezonancia-abszorbció vizsgálatokhoz szükséges állandó mágneses tér létrehozására is alkalmas legyen.

A szolenoid segédberendezéseit /hütőkör, áramszabályzóegység, kapcsoló és kommutáló rendszer/ ugy terveztük, hogy bizonyos határok között különböző méretü szolenoidokat kapcsolhassunk a segédberendezésekhez.

1.§. Laboratóriumi szolenoidok tervezésének néhány kérdéséről

Egy tekercsben létesitett mágneses tér erőssége az egységnyi hosszra eső ampermenetek számának lineáris függvénye. A térerősség növelése vagy a tekercsen átfolyó áram, vagy az egységnyi hosszra eső menetek számának növelésével érhető el. Ha a vezetőben állandó áramsürüséget tételezünk fel, akkor a mágnesező áram növelése szükségessé teszi a keresztmetszet arányos növelését és igy a nagyobb tekercstér alkalmazását. Az áramot állandónak véve és a menetszámot növelve, hasonlóképpen növekszik a tekercstér szükséglet. Mindkét esetben tehát kizárólag a tekercstér növelésével érhető el térerősség növekedés, ami természetesen a tekercs ohmikus ellenállásának, tehát a tekercs-

ben felszabaduló veszteségeknek aránytalan megnövekedésére vezet.

Egy adott tekercstér és tekercskitöltési tényező mellett a menetszám és az áram bármilyen variálása sem változtat egy adott térerősség előállításához szükséges elektromos teljesitmény szükségleten. Valóban pl. egy R ellenállásu szolenoidban felszabaduló I^2R veszteség semmit sem változik, ha tekercsterét változatlan kitöltési tényező mellett pl. q/2 keresztmetszetü vezetővel töltjük ki és közben ugy választjuk meg az átfolyó áramerősséget, hogy a szolgáltatott mágneses tér állandó maradjon. Ugyanis a menetszám 2N-re az ellenállás pedig /a keresztmetszetcsökkenés és a menetszámnövekedés következtében/ 4R-re nő meg, mig a mágneses tér megkövetelt állandósága folytán az áramerősség I/2-re csökken. Végeredményben $(I/2)^2.4R = I^2R$, tehát az adott térerősség előállításához szükséges teljesitmény nem változott. Megjegyzendő azonban, hogy adott tekercstérre vonatkozóan a huzal keresztmetszetcsökkenésével a tényleges tekercskitöltési tényező is csökken. Hogy a térerősség ne változzon, a rosszabb kitöltési tényezőt csak a tekercstér arányos megnövelésével lehet elkerülni, ez pedig a tekercsben fellépő veszteségek növekedéséhez vezet.

Az I. táblázatban összefoglaltuk egy 30 mm kezdő átmérőjü, 5000 Oe térerősségü és 2 cm szakaszon 0,2 %-nál nem nagyobb inhomogenitásu szolenoid teljesitményszükségletét különböző áramerősség és menetszám alkalmazása mellett állandó N.I. érték és áramsürüség figyelembevételével. A táblázatból látható, hogy a sorok számának és ebből kifolyólag a tekercs méreteinek növekedése folytán a tekercsben fellépő veszteségek is nőnek.

A térerősség növelése előnyösen az áramsürüség növelésével érhető el. Nagy térerejü /10^4-10^5 Oe/ szolenoidoknál a 100 A/mm^2 és ennél nagyobb áramsürüségek alkalmazása sem ritka. /Előzően megépitett szolenoidunknál [1] 86 A/mm^2 áramsürüséget alkalmaztunk./ Ha a tekercs hütése megfelelően biztositható, akkor pl. 100 A/mm^2 áramsürüség alkalmazása esetén 1/50 tekercstér szükséges ugyanannyi gerjesztő ampermenet elhelyezésére mint 2 A/mm^2 áramsürüséggel müködő természetes hütésü tekercs esetében.

I. táblázat

A szolenoid teljesitményszükséglet változása különböző "k" értékek alkalmazása esetén

k	N/cm	ω amp	Z sorok száma	P kW
125	100	40	14	7,2
150	120	33,5	15	7,8
165	132	30	16	8,3
180	142	28	16	8,8

M.T.A. KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KÖNYVTÁRA

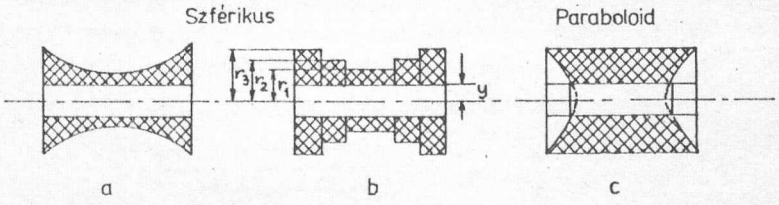
A térerősség növelése megközelitően négyzetes teljesitmény-szükségletet igényel. Pl. egy kb. 3 cm belső átmérőjü szolenoid üzemeltetéséhez, melynek tere 8 cm szakaszon 2%-ra homogén,

1.000 Oe-nél	0,4 kW
5.000 "	10 "
10.000 "	40 "
20.000 "	160 "
50.000 "	1.000 "

elektromos energia szükséges.

Ezek után vizsgáljuk meg, milyen alaku tekercstér esetében biztosithatjuk minimális teljesitmény szükséglettel a legkisebb inhomogenitást és a legnagyobb térerősséget. T.A.Heddle [2] ugy találta, hogy az 1. ábrán látható "a" tipusu szférikus tekercsforma a legkedvezőbb. Minthogy ennek gyakorlati megvalósitása a felépités és a hütés szempontjából igen nagy nehézségeket jelentene, az általa végzett kisérletekhez az "a" tipust megközelitő többlépcsős, Helmholz-rendszerü tekercselést alkalmazta ("b" tipus).

A többlépcsős Helmholz-rendszerü tekercs mágneses tere az egyes r_1, r_2,...r_k sugaru tekercsek által szolgáltatott mágneses térerősségek összegével egyenlő.



1. ábra

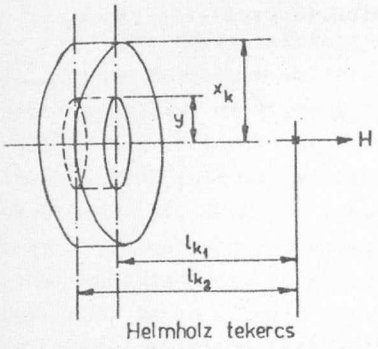
$$H_k = k \left[f(l_{k_2}, r_k) - f(l_{k_1}, r_k) \right] \qquad /1/$$

az /1/ alatti kifejezésben $k = \frac{2\pi NJ}{10}$, mig

$$f(l_{k_{1,2}}, x) = l_{k_{1,2}} \log e \left[\frac{r_k + \sqrt{(r_k^2 + l_{k_{1,2}}^2)}}{y + \sqrt{(y^2 + l_{k_{1,2}}^2)}} \right] H_{Oe\text{-ben}} \qquad /2/$$

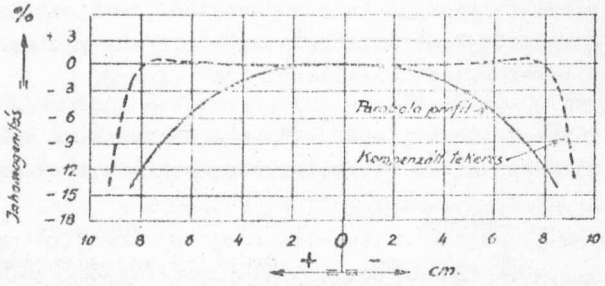
ahol N az 1 cm^2-re eső menetek száma, I a tekercsen átfolyó áram Amp.-ben, $l_{k_{1,2}}$ és y jelentése a 2. ábrán látható.

Az ilyen módon felépitett szolenoid mágneses terének homogenitása lényegesen nagyobb mint a szokásos egyszerü többrétegü tekercseké. Egy 2,5 cm



2. ábra

átmérőjü magra tekercselt 20 cm hosszu szolenoid 8 cm szakaszon kb. 2 %, mig 12 cm szakaszon kb. 6% inhomogenitást mutat. Hasonló méretek mellett a lépcsőzetesen felépitett tekercsrendszerrel 12 cm távolságon 0,5 %-nál nem nagyobb inhomogenitás érhető el. Összehasonlitásul szolgáljon a 3. ábra, amely azonos kezdő átmérőjü és azonos közepes hosszuságu többlépcsős Helmholz-rendszerü és egy szokásos kivitelü paraboloid /az 1. ábra "c" tipusa/ profilu szolenoid mágneses terének tengelyirányu változását szemlélteti.



„b" és „c" tipusu szolenoidok téreloszlási görbéje

3. ábra

Az "a" és "b" tipusu profilkiképzéssel a tekercs végei felé az 1 cm-re eső menetek száma ugy nő, hogy a végek felé máskülönben erőteljesen jelentkező térerősségcsökkenést a megnövekedett menetszám kompenzálja. Ezzel szemben a "c" tipusu tekercskiképzéssel csupán annyi érhető el, hogy az alsó menetsor térerősség eloszlása a következő nagyobb átmérőjü tekercssorokra vonatkoztatva is azonos lesz. A tekercsvégek felé jelentkező térerősség csökkenés tehát nem szüntethető meg. Ahhoz, tehát, hogy a központtól x távolságra is azonos intenzitásu tér alakuljon ki, a térerősség csökkenését ujabb tekercssorokkal kell kompenzálni.

B.Lewis [3] hasonló elgondolásokból kiindulva azt a megoldást alkalmazta, hogy a szokásos többrétegü tekercs végeire szimmetrikus segédtekercseket helyezett. Ezzel csökkentette a tekercs felépitésével és a hütésével járó nehézségeket és a tér homogenitását jelentősen megnövelte.

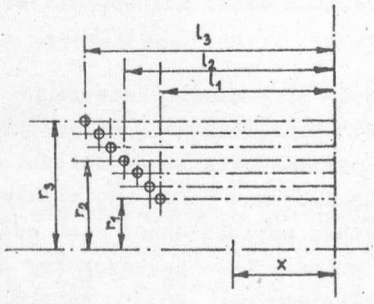
Közelitő számitásokat végezve az 1. ábrán feltüntetett "b" és "c" tipusu tekercsprofilra, ugy találtuk, hogy a tervezendő 2 cm hosszuságu szakaszon 0,2 % inhomogenitást meg nem haladó 5000 Oe térerősségü szolenoid esetében a "b" tipusu kiképzés előnyei nem állanak arányban a szekcionált tekercselés és a hütési problémák okozta kiviteli nehézségekkel. Ezért a "c" tipusu tekercskiképzés mellett döntöttünk, amely kivitelezés szempontjából előnyösebbnek látszott.

2.§. A szolenoid számitása és jellemző adatainak kisérleti meghatározása

A tekercs felépitésénél a hatásos hütés biztositása miatt a nyolcszögletesre kialakitott tekercsformát választottuk. A számitásokat a nyolcszögletü tekercsre érvényes képlet [1] segitségével végeztük el:

$$H_3 = \frac{16\,NJ}{c}\left\{\operatorname{arc\,tg}\left(\frac{\ell - x}{\sqrt{r^2+(\ell-x)^2}}\;0{,}414\right) + \operatorname{arc\,tg}\left(\frac{\ell + x}{\sqrt{r^2+(\ell+x)^2}}\;0{,}414\right)\right\} \quad /3/$$

Az I. táblázatban foglaltuk össze a számitások eredményeit. A táblázatból a k = 165-höz tartozó N = 132 tekercselési adatot választottuk. Ezen adatok alapján a számitásokat a tekercs tengelye mentén több ponton elvégeztük, hogy meghatározzuk azt a tekercsprofilt, amely mellett biztositható 2 cm hosszuságu szakaszon a 0,2%-nál nem nagyobb inhomogenitás. A szolenoid geometriai adatai az alábbiak szerint alakultak:



l_3 = 8,6 cm
l_2 = 8,0 cm
l_1 = 7,4 cm
r_3 = 4,5 cm
r_2 = 3,07 cm
r_1 = 1,65 cm
x = 2 cm

A szolenoid tekercselési méretei

4. ábra

A tekercselés megkönnyitése végett a paraboloid végeket kupos profillal helyettesitettük. A tekercs magját egy 28/30 mm átmérőjü sárgarézcső képezte. A végekre megfelelő dülésü, kupalaku szigetelő anyagból készitett tárcsákat szereltünk. Ezeket a tengelyre merőleges irányban csillagalakura képeztük ki, hogy a közöttük levő tekercsrétegek egyenletes hütését biztositani tudjuk. A kuptámaszok egyben meghatározták az egyes menetsorok hosz-

szát. Az első menetsort 8 db keskeny szigetelő rudra tekercseltük, amelyek a tekercset enyhén lekerekitett sarku nyolcszögletté formálták. Az élekre fektetett 8 db 0,7 mm vastag pertinax távtartó /kb 7 mm szélességben/ biztositotta az egymásfölé tekercselt sorok közötti hütőréseket. Igy az egyes menetsorok mindkét oldalán hatásos hütést biztositottunk.

A tekercselésre zománcszigetelésü 1,1 mm vastag vörösrézhuzalt használtunk. A megtekercselt szolenoid számitásokból nyert főbb adatai és méretei:

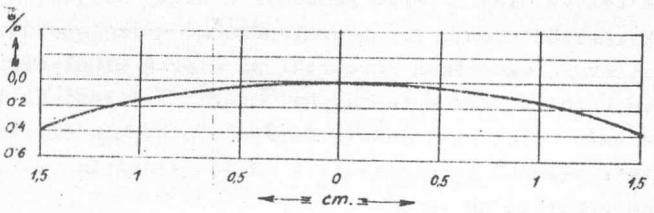
menetszám/cm	$n = 8,3$
rétegek száma	$z = 16$
összmenetszám/cm	$N = 132$
közepes átmérő	$2r_k = 6,15$ cm
közepes hossz	$2l_k = 16$ cm
hideg ellenállás	$R_h = 8,4$ Ohm
tekercsállandó	$k = 165$

A szolenoid mágneses terének inhomogenitását ballisztikus eljárással határoztuk meg. A méréseket differenciális mérőtekercs párral végeztük. Az egyik tekercset a szolenoid maximális térerősségü pontjában rögzitettük. A másik tekercs, amelyet az elsővel ellentétes menetirányba sorbakötöttünk, a szolenoid tengelye mentén mindkét irányban mozgatható volt. Az igy sorositott két tekercset oly mértékig kompenzáltuk, hogy a szolenoid max. térerősségü pontjába helyezve az egymásba tólt, illetőleg egymással fedésbe hozott két tekercsen a szolenoid áramának kommutálásából eredő különbözeti feszültséget a ballisztikus galvanométer nem mutatott.

Tekintettel arra, hogy a mérés elve elkerülhetetlenné tette a mérőtekercseknek a galvanométer körébe való bekapcsolását, kuszóáramok és átvezetések elkerülése miatt a tekercseket pleximagokra tekercseltük. A mérőtekercsek szélességi méretét 5 mm-re, az átmérőjüket pedig ugy választottuk meg, hogy a szükséges szigetelések biztositása mellett éppen csak egymásba tolhatók legyenek. A mérésnél felhasznált ballisztikus galvanométer érzékenységét figyelembe véve olyan menetszámokat alkalmaztunk, hogy a térerősség 0,1 %-al való csökkenése kb. 20 osztásrész kitérést okozzon.

A szolenoid terének axiális inhomogenitását az 5. ábra mutatja. Az inhomogenitás nagysága a számitottakkal megegyezik.

A szolenoid állandó a számitások szerint $k = 165$-nek adódott. Az ellenőrző méréseket három különböző áramerősségnél végeztük el, és a középértékből számitott állandó $k = 160,2$ volt. Ez kb. 3%-kal kisebb mint a számitott. Feltételezhetően ez a tekercstér rosszabb kitöltési viszonyai miatt állott elő, amihez hozzájárult még az is, hogy a tekercsvégeket nem paraboloid, hanem a tekercselés egyszerüsitése miatt kup alakra képeztük ki.



A szolenoid terének axiális inhomogenitása

5. ábra

A szolenoid táplálása a rendelkezésünkre álló 280 V 600 A^h kapacitásu akkumulátortelepről történt.

40 C^o szolenoid tulmelegedést megengedve, a tekercs meleg ellenállása R_m = 9,6 Ohm, igy a rajta átfolyó 29,2 Amp. max. árammal 160,2 x 29,2 = 4650 Oe térerősség állitható elő.

3.§. A szolenoid hütése

A szolenoid tekercseiben felszabaduló max. hőenergia:

$$Q = 0{,}293.I^2.R_m.t = 1{,}935 \text{ Kcal/sec.}$$

Ennek elvitelére:

$$G = \frac{Q.60}{/t_2-t_1/.c} = 7{,}2 \text{ kg/perc} \quad \text{illetve} \quad \frac{7{,}2}{0{,}9} = 8 \text{ l/perc}$$

hütőolaj mennyiség szükséges. A szolenoid menetsorai között kiképzett olajvezető hornyok összkeresztmetszete 15,4 cm^2, igy a szolenoidon átfolyó hütőolaj sebessége: $C = \frac{V}{F}$ = 0,086 m/sec. Ez a sebesség még a lamináris áramlási tartományba esik. Jóllehet az olajvezető hornyok nem sima oldalfalak, hanem a menetek számának megfelelő ismétlődésü diffuzor-konfuzor jellegü vezetőrések, a tapasztalataink szerint még jóval magasabb olajsebességeknél sem lép fel turbulencia.

A szolenoid teljes hütőfelülete /az egyes sorok mindkét oldalát mint aktiv felületet figyelembevéve/ F = 9900 cm^2 azaz megközelitőleg 1 m^2. A fajlagos felületi terhelés tehát: $I^2.R/ F = 82 \text{ W/dm}^2$.

A hütőberendezést az olajszivattyuval és az áramszabályozóval közös olajtartályba épitettük. A központosan elhelyezett olajszivattyu egy szürőn

keresztül szivja fel az olajtér alsó részéből a hideg olajat, és a baloldali nyomóvezetéken keresztül nyomja fel a szolenoidba. A szolenoidot átjárt olaj a jobboldali csatlakozó vezetéken keresztül az alatta elhelyezett mennyiségmérőn is átfolyva kerül vissza a tartályba. Miután az elszivás alulról történik, a visszaáramló meleg olaj lassan süllyed, miközben érintkezik a nagy felülettel ellátott vizhütő rendszerrel. A hütés ellenáramu és a hütőfelület a bordákkal megnagyobbitva kb. 2 m^2.

A vizhütőt két, egymáson belül fekvő spirálisan feltekercselt 5 menetü vörösrézcsőből készitettük. A széthuzott menetsorok közé iktattuk be a vörösrézszalagból készitett és cikk-cakk-ba összehajtogatott bordázatot. A bordázat szalag anyagból sajtolással készült, anélkül, hogy az egyes bordák egymástól el lettek volna választva. A présszerszám a bordákat két oldalon ivesen benyomta, és a hajtogatási helyeken 1-1 keskeny ablakot vágott. Emiatt a hajtogatáshoz nem kellett külön szerszámot készitenі, az kézben végezve is megfelelő pontossággal és igen gyorsan ment. Minden egyes borda a kihajlitott ives támaszával feküdt fel a vizhütő csövekre. Az összeszerelés után az egész hütőegységet ónfürdőbe mártottuk, igy a hütőbordák és a hütőcsövei között is fémes érintkezés keletkezett.

A hütés hatásossága és a hőlépcsők megállapitása céljából, miután az erre vonatkozó számitások nem látszottak feltétlenül megbizhatónak, az alábbi vizsgálatot végeztük el. A szolenoidot max. terhelés alá helyeztük. A termikus egyensuly beállása után mértük a be és kiáramló olaj, valamint a hütőviz hőmérsékletét és átfolyó mennyiségét, a bevezetett elektromos energiát, a szolenoid hideg és meleg ellenállását.

A hőegyensuly kb. 1 órai üzemeltetés után állott be. A vizsgálat célja az volt, hogy megállapitható legyen a bevezetett és a hütőviz által elvitt hőenergia számszerü értéke és arányszáma. A mérések az alábbi eredményeket szolgáltatták:

a bevezetett hütőviz hőfoka	t_1 = 14,6 C^o
az elvezetett " "	t_2 = 25,1 C^o
az átfolyó hütőviz mennyisége	G_v = 10,35 l/perc
a belépő hütőolaj hőmérséklete	t_1 = 46,5 C^o
a kilépő " "	t_2 = 64,5 C^o
a szolenoid hideg ellenállása 20 C^o-nál	R_h = 8,45 Ohm
a szolenoid meleg "	R_m = 9,68 Ohm
a szolenoid kapcsain levő feszültség	U =277,5 V
a szolenoidon átfolyó áram	I = 28,65 A

A mérési adatok felhasználásával kiszámitható, hogy a szolenoidban

$$Q_1 = U.I.0{,}000239.t_{/idő/} = 113{,}92 \text{ Kcal/perc}$$

hőenergia szabadul fel. A hütőviz pedig: $Q_2 = /t_2-t_1/G_v = 108{,}675$ Kcal/perc hőenergiát szállit el, ill. vesz át az olajtól. A kettő különbsége:

$$Q_2-Q_1 = 5{,}245 \text{ Kcal/perc}$$

amely a felületi lesugárzásokkal veszett el. A szolenoid tekercsének átlagos tulmelegedése:

$$\vartheta_t = \frac{R_m - R_h}{R_h} \cdot \left(\frac{1}{\alpha} + t_h\right) = 37{,}1\ C^o \qquad \frac{1}{\alpha} = 235\ C^o \qquad t_h = 20\ C^o$$

A hütőolaj és a vörösréz vezető /tekercs/ közötti hőlépcsőt vizsgálva nem követünk el nagy hibát ha a belépő hütőolaj által először érintett vezető hőmérsékletét az olajéval egyenlőnek tételezzük fel. Miután megállapitottuk a szolenoid ellenállásváltozásából, hogy a 20 C^o-hoz képest beállott tulmelegedése $\vartheta_t = 37{,}1\ C^o$, a hütőolajnak pedig a szolenoidban fellépő közepes hőmérséklete

$$t_o = \frac{t_1 + t_2}{2} = 55{,}5\ C^o$$

a szolenoid közepes hőmérséklete:

$$t_{sz} = t_h + \vartheta_t = 20+37{,}1 = 57{,}1\ C^o \ .$$

Igy az olaj és a vörösréz vezető közötti közepes hőlépcső:

$$t_l = t_{sz}-t_o = 57{,}1-55{,}5 = 1{,}6\ C^o \ .$$

A szolenoid hütésére igen kis viszkozitásu finom orsó olajat használtunk, az olajat pedig vezetéki vizzel hütöttük.

4.§. A szolenoid áramának szabályozása, a berendezés felépitése és áramköri kapcsolása

A szolenoid áramszabályozó ellenállását a hőcserélő olaj terébe helyeztük. Testét egy vizzel hütött gyürü alakura összehegesztett vörösréz-cső képezte. A gyürüt alul-felül egy-egy ives kiképzésü pertinax tárcsa fedte le, amelyre toroidtekercs szerüen helyeztük el "Kanthal D" ellenálláshuzalból a meneteket. A menetek nem közvetlenül a pertinaxra, hanem egy lágyabb szigetelő anyagból készitett gyürü alaku alátétre feküdtek fel. A feszesen tekercselt huzalok kisé bemélydtek a lágyabb gyürübe, igy biztositani lehetett

a kis mértékü hőtágulásból fellépő menetlazulások kiküszöbölését. A tekercselést a jü térkihasználás szempontjából állandóan csökkenő méretü huzallal végeztük. Igy 7 lépcsőben megközelitőleg egyenletes áramsürüséget tudtunk tartani, egyben jelentősen nagyobb összellenállást sikerült beépitenünk.

A szabályozó ellenállás áramszedője lamellált, un. fésüs rendszerü. Az áramszedő forgató tengelye az olajtartály fedelét áttöri, és egy kupkerék párral meghajtva egy vizszintes tengelyü kézi kerékkel forgatható.

A II. táblázatban összefoglaltuk a szabályozó ellenállás összes lényeges adatait, ezenkivül feltüntettük a szabályozás lépcsőzetességét is. A lépcsőzetesség kiküszöbölése céljából a szabályozóval sorba köthető egy kis ellenállásu külső szabályozó is. Az erre a célra szolgáló csatlakozó csavarokat a kezelőszekrény oldalán helyeztük el.

II. táblázat

A szabályozó ellenállás főbb adatai

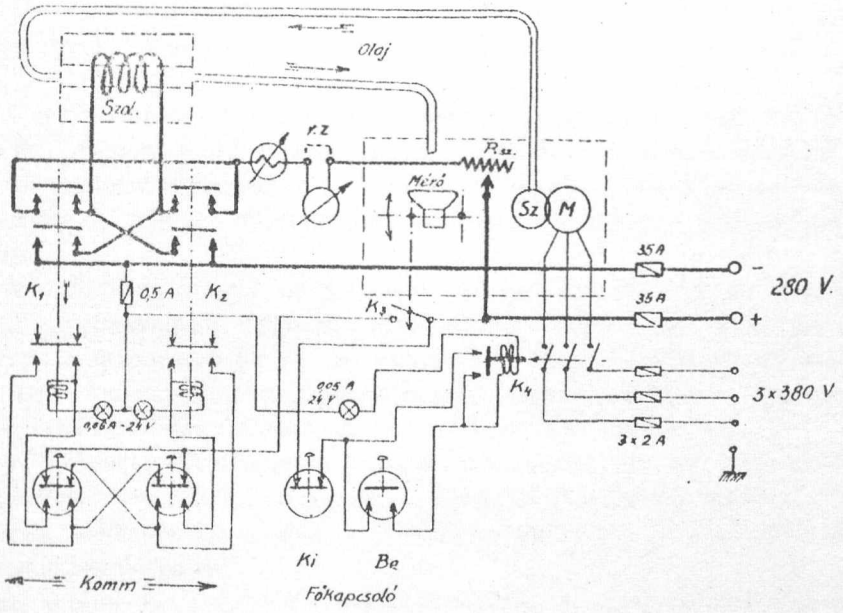
Huzal ∅ mm	1,5	1,3	1	0,8	0,55	0,4	0,25
" hossz m.	5	7	8,8	10,8	12,5	16	14,5
Ellenállás Rsz.	3,5	7	15	30	70	170	395
Összellenállás + 9 Ω	12,5	19,5	34,5	64,5	134,5	304	700
Áramsürüség A/mm^2	18-12	18-12	19-11	17-9	18-9	17-7,5	18-8
Átfolyó áram A	31-23	23-15	15-8,3	8,3-4,3	4,3-2,1	2,1-0,92	0,92-0,40
Térerősség Oe	5000 - 3800 - 2500 - 1380 - 720 - 350 - 150 - 65						
Lépcsőzet Oe/menet	35	26	17	8,5	4	1,6	0,55

A szolenoid kapcsoló és müködtető berendezéseinek megtervezésénél sulyt helyeztünk arra, hogy automatikus védelmi és reteszelő berendezés segitségével minden téves vagy hibás müködtetés lehetőségét kizárjuk. A szolenoidot és minden kiszolgáló berendezését egy aluminium szekrénybe szereltük. Ennek boritólapján foglal helyet maga a szolenoid, amely könnyen szerelhető módon, hollandi csatlakozásokkal van az olajtartályhoz rögzitve. A müszerek, ellenőrző lámpák, vezérlő berendezések nyomógombjai, hőfokmérő stb. jó áttekintése és könnyü kezelhetősége miatt a szerelvényfalat megdöntöttük.

Az ide beépitett árammérőmüszer csak tájékoztató adatok szolgáltatására szükséges, laboratóriumi pontos mérések egy az áramkörbe beiktatható 0,2 oszt. müszerrel végezhetők el.

A szekrény belsejébe épitettük be az olajtartályt a hütő és áramszabályozó berendezésével, továbbá mindazon elektromos berendezést, melynek segitségével az üzembehelyezés és müködtetés biztositható. A szekrény oldalára egy az oldallappal azonos méretü lehajtható külön asztallapot szereltünk, amely lehetőséget nyujt mérőmüszereknek vagy kisérleti berendezéseknek, közvetlenül a szolenoid közelébe való elhelyezésre. A pótasztal lehajtásával a tartótámaszok a szekrénybe süllyednek, az asztallap pedig a szekrény oldalához simul.

A berendezés vázlatos áramköri elrendezését a 6. ábra mutatja. Az automatikája és müködése annyira le van egyszerüsitve, hogy magyarázatra nem szorul.



6. ábra

Ezuton mondunk köszönetet Pál Lénárd osztályvezetőnek, aki a tervezés és a kivitelezés munkáit hasznos elméleti és gyakorlati tanácsaival támogatta, a kivitelezésért pedig Szakács Béla és Kozma József főmühelyvezető, Marosi Endre és Tumay János intézeti mechanikus kartársaknak.

I r o d a l o m

[1] Pál L. - Zsigmond Gy. KFKI Közl. 3, 300 /1955/
[2] T.A. Heddle, Brit.J.Appl.Phys. 3, 95 /1952/
3] B.Lewis, Brit.J.Appl.Phys. 1, 65 /1950/
J.R.Barker, Brit.J.Appl.Phys. 1, 65 /1950/
Bitter, Rev.Sci.Instr.vol. 10.Dec. /1939/

Érkezett 1955. nov.8.
KFKI Közl., 3.évf. 1955.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT IV/4. 1955.

A MAGNETIT PERMEABILITÁSÁNAK FREKVENCIA FÜGGÉSE MIKROHULLÁMÚ ELEKTROMÁGNESES TEREKBEN*

NAGY IMRE—PÁL LÉNÁRD—PALLAGI DEZSŐ

Magnetit komplex permeabilitásának frekvencia függését vizsgáltuk az 1000—3000 MHz-es tartományban. A méréseket koaxiális tápvonalban elhelyezett, paraffinban szuszpendált magnetitporon végeztük. Eredményeink jól megegyeznek az irodalomból ismert adatokkal.

1. Bevezetés

A ferromágneses anyagok nagyfrekvenciás mágneses térben való viselkedésének kutatása mind elméleti, mind gyakorlati szempontból nagy jelentőségű. Új adatokat szolgáltat a ferromágneses anyagok fizikájához és elősegíti a rohamosan fejlődő mikrohullámú technika mágneses anyagigényeinek kielégítését.

Az első ilyen irányú vizsgálatokat *Arkadiev* [1], [2] végezte. Kimutatta, hogy a nagyfrekvenciás elektromágneses térben fellépő mágnesezési veszteségek miatt a mágnesező tér és az indukció vektorai nincsenek fázisban. A veszteségek fenomenologikus figyelembevétele legegyszerűbben a $\mu = \mu_1 - j\mu_2$ komplex permeabilitás fogalmának bevezetésével lehetséges.

A frekvencia növelésével a permeabilitás csökken és 10^4 MHz körül az anyag teljesen elveszti ferromágneses jellegét [3], [4], [5], [6]. Kisebb frekvenciáknál a csökkenés kismértékű, a legtöbb anyagnál kb. 10^2—10^4 MHz körül válik csak jelentékennyé.

Az utóbbi két évtizedben sokan vizsgálták a permeabilitás frekvencia függését és keresték ennek magyarázatát. Elméleti téren *Landau* és *Lifschitz* [7], *Becker* [8], *Döring* [9], *Polivanov* [10], *Akulov* és *Krincsik* [11], *Kittel* [12], *Néel* [13], *Pál* [14] végeztek jelentős munkát, *Potapenko* [15], *Rado* [16], *Unterman* [17] és *Birks* [18] mérései pedig sok adatot szolgáltattak.

Megjegyezzük, hogy az irodalomban sokáig meglehetős zavar uralkodott a különböző mérések eredményeinek értelmezésében. *Kittel* [12] szerint a mérési eredmények feldolgozására a következő két eljárást használhatjuk. A

* Érkezett 1955. VIII. 7.

nagyfrekvenciás kör elméletileg számított $Z_s(\omega, \mu)$ impedanciájának a mért $Z_m(\omega)$ impedanciával való egybevetése alapján meghatározhatjuk a

$$\mu = \mu_1 - j\mu_2 \tag{1,1}$$

effektív komplex permeabilitást.

Eljárhatunk azonban úgy is, hogy valós permeabilitás (μ) figyelembevételével számítjuk ki a nagyfrekvenciás kör $Z_s(\omega, \mu)$ impedanciáját. A $Z_s(\omega, \mu)$ impedancia $R_s(\omega, \mu)$ valós és $X_s(\omega, \mu)$ képzetes részeit a mért $Z_m(\omega)$ impedancia $R_m(\omega)$ valós és $X_m(\omega)$ képzetes részeivel egybevetve az

$$R_s(\omega, \mu) = R_m(\omega) \tag{1,2}$$

és

$$X_s(\omega, \mu) = X_m(\omega) \tag{1,3}$$

egyenletek alapján két μ_1-től és μ_2-től különböző μ_R és μ_L permeabilitás értéket határozhatunk meg. (μ_R az (1, 2) alatti első egyenletnek, míg μ_L a második egyenletnek a megoldása.) A két eljárás közötti lényeges különbség tehát abban van, hogy míg az első eljárásnál a nagyfrekvenciás kör impedanciájának kifejezésében már eleve komplex permeabilitással számoltunk, addig a második eljárásnál valós permeabilitást használtunk.

Az általunk alkalmazott mérési módszer a $\mu = \mu_1 - j\mu_2$ komplex permeabilitás értékének meghatározását teszi lehetővé.

2. Mérési módszer

Ismeretes [19], hogy egy μ permeabilitású és ε dielektromos állandójú anyaggal kitöltött koaxiális tápvonal hullámellenállása (ellenálláson mindig normalizált ellenállást értünk) és a terjedési tényező az anyag permeabilitásával és dielektromos állandójával a következőképpen fejezhető ki:

$$Z = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \tag{2,1}$$

és

$$\gamma = j\frac{2\pi}{\lambda_0}\sqrt{\mu\varepsilon}, \tag{2,2}$$

ahol λ_0 a szabadtéri hullámhossz.

Látható, hogy a Z és γ ismerete — mindkettő komplex mennyiség lévén — elegendő az anyag komplex permeabilitásának és komplex dielektromos állandójának meghatározásához. A feladat tehát eme két mennyiség meghatározása. A mérés elvégzéséhez a vizsgálandó ferromágneses anyaggal d hosszúságban kitöltünk egy üres koaxiális tápvonalat. A tápvonal-elméletből tudjuk, hogy a végén rövidre zárt tápvonal bemenő ellenállása a rövidzártól d távolságra

$$Z_i = Z \operatorname{th} \gamma d, \tag{2,3}$$

a végén nyitott tápvonal bemenő ellenállása pedig a „szakadás"-tól d távolságra

$$Z_n = Z \operatorname{cth} \gamma d. \tag{2, 4}$$

A rövidzárási és üresjárati bemenő impedanciából Z és γ kifejezhető. A (2, 3) és (2, 4) szorzatából adódik a következő kifejezés:

$$Z = \sqrt{Z_r Z_n}. \tag{2, 5}$$

Ha pedig a kettőt elosztjuk, akkor azt kapjuk, hogy

$$\gamma = \frac{1}{d} \operatorname{arth} \sqrt{\frac{Z_r}{Z_n}}. \tag{2, 6}$$

A γ meghatározására komplex argumentumú th-táblázat [20] szükséges. Elkerülhetjük azonban a komplex th-táblázat használatát akkor, ha a th γd valós és képzetes részét különválasztjuk [21], [22]. Írjuk fel exponenciális alakban a th γd-t:

$$\operatorname{th} \gamma d = \operatorname{th}(\alpha d + j\beta d) = \sqrt{\frac{Z_r}{Z_n}} = T e^{j\varphi}. \tag{2, 7}$$

A valós és képzetes rész szétválasztásával és trigonometrikus átalakítással azt kapjuk, hogy

$$\operatorname{tg} 2\beta d = \frac{2T \sin \varphi}{1 - T^2}, \tag{2, 8}$$

$$\operatorname{th} 2\alpha d = \frac{2T \cos \varphi}{1 + T^2}. \tag{2, 9}$$

A (2, 8) és (2, 9) egyenletekből kapott $\gamma = \alpha + j\beta$-t osszuk el $j\frac{2\pi}{\lambda_0}$-lal. Azt találjuk, hogy

$$\frac{\gamma}{j\frac{2\pi}{\lambda_0}} = \gamma' = \sqrt{\mu\varepsilon}. \tag{2, 10}$$

A (2, 1) és (2, 10) egyenletek szorzatából kapjuk a permeabilitás, hányadosából pedig a dielektromos állandó értékét. Tehát:

$$\mu = \mu_1 - j\mu_2 = \gamma' Z, \tag{2, 11}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_1 - j\varepsilon_2 = \frac{\gamma'}{Z}. \tag{2, 12}$$

Ha még γ'-t és Z-t is

$$\gamma' = T_1 e^{j\varphi_1} \text{ és } Z = T_2 e^{j\varphi_2} \tag{2, 13}$$

alakúra hozzuk, akkor a permeabilitás és dielektromos állandó abszolút érté-

kére, valamint a veszteségi szögekre a következő összefüggéseket vezethetjük le:

$$|\mu| = T_1 T_2, \quad \delta_\mu = \alpha_1 + \alpha_2, \tag{2, 14}$$

$$|\varepsilon| = \frac{T_1}{T_2}, \quad \delta_\varepsilon = \alpha_1 - \alpha_2, \tag{2, 15}$$

ahol δ_μ és δ_ε a veszteségi szögek.

Mind a karakterisztikus impedancia, mind a terjedési állandó kiszámításához a próbatesttel kitöltött vonal bemenő impedanciájának meghatározása szükséges. Ezt állóhullámaránymérő segítségével mérhetjük meg. A feszültség állóhullámarányt és az első minimumhelynek a mérendő $Z_{b\sim}$ impedanciától való távolságát ismerve $Z_{b\sim}$ az alábbi összefüggés alapján számítható [18]:

$$Z_{b\sim} = \frac{\frac{1}{n} - j \operatorname{tg} \beta_0 l}{1 - j \frac{1}{n} \operatorname{tg} \beta_0 l}, \tag{2, 16}$$

ahol $\beta_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$, $n = \frac{V_{max}}{V_{min}}$ és l a minimumhely távolsága attól a síktól, amelyhez tartozó $Z_{b\sim}$ impedanciát mérni akarjuk. A mérést tehát végeredményben n, l és λ_0 mérésére vezettük vissza.

n mérése

A feszültség állóhullámarány közvetlenül is mérhető, de sokkal előnyösebb — a méréseinknél előforduló esetekben — a minimumhely környéki hullámalakból számolni [23]. Feltéve, hogy az üres vezető (állóhullámmérő) vesztesége elhanyagolható, a vonalmenti feszültségeloszlást a következő kifejezés írja le (az egyenirányító kristály négyzetes karakterisztikája miatt mindjárt a feszültség négyzetét véve):

$$V^2 = V_{min}^2 (\cos^2 \beta_0 x + n^2 \sin^2 \beta_0 x), \tag{2, 17}$$

ahol x a minimumhelytől mért távolság. Innen

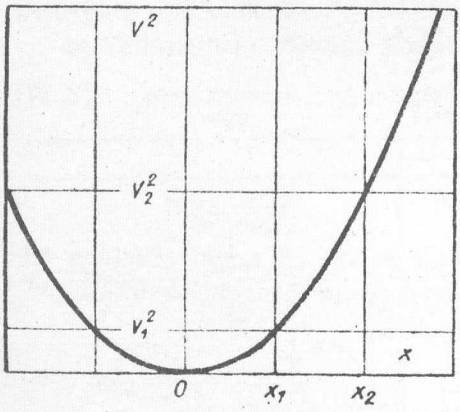
$$n^2 = 1 + \left| \left(\frac{V}{V_{min}} \right)^2 - 1 \right| \frac{1}{\sin^2 \beta_0 x}, \tag{2, 18}$$

vagy $\left(\frac{V}{V_{min}} \right)^2 = 2$ választással:

$$n = \sqrt{1 + \frac{1}{\sin^2 \beta_0 x}}. \tag{2, 19}$$

Tehát n egyszerűen távolságméréssel határozható meg. $n > 10$ esetén V_{min} már olyan kicsi, hogy mérése pontatlan. Célszerűbb ilyenkor a minimumhelytől

x_1 és x_2 távolságra levő pontokon mérni a feszültséget (lásd az 1. ábrát).



1. ábra. Állóhullámarány meghatározása a minimumhely körüli feszültségeloszlásból

x_1 helyen

$$V_1^2 = V_{\min}^2(\cos^2\beta_0 x_1 + n^2 \sin^2\beta_0 x_1), \quad (2,20)$$

x_2 helyen pedig

$$V_2^2 = V_{\min}^2(\cos^2\beta_0 x_2 + n^2 \sin^2\beta_0 x_2). \quad (2,21)$$

Ezekből

$$n^2 = \frac{V_2^2 \cos^2\beta_0 x_1 - V_1^2 \cos^2\beta_0 x_2}{V_1^2 \sin^2\beta_0 x_2 - V_2^2 \sin^2\beta_0 x_1}. \quad (2,22)$$

Ha x_1 és x_2 értékét úgy választjuk, hogy $V_2^2 = 2V_1^2$ legyen, akkor

$$n^2 = 1 - \frac{1}{2\sin^2\beta_0 x_1 - \sin^2\beta_0 x_2}. \quad (2,23)$$

A mérésnél ügyelnünk kell arra, hogy a V_2 ne lépje túl azt a feszültséget, amely felett a kristálykarakterisztika már nem tiszta négyzetes.

l mérése

A minimumhely távolságát közvetett úton mértük. A 2. ábrából látható, hogy

$$b + m\frac{\lambda_2}{2} = c + l + d, \quad (2,24)$$

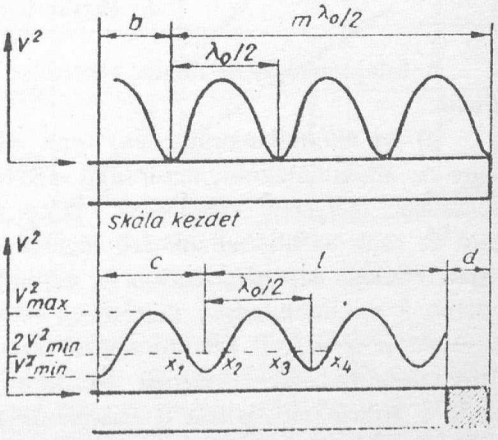
innen

$$\operatorname{tg}\beta_0 l = \operatorname{tg}\beta_0(b - c - d), \quad (2,25)$$

ahol $|b-c|$ nem más, mint a minimumhely-eltolódás.

λ_0 mérése

A hullámhossz pontos mérése nagyon lényeges. Ezért nem közvetlenül a minimumhelyek távolságából határoztuk meg, hanem az irodalomból [23] jól ismert módon mértük. Ha két szomszédos minimumhely környezetében megkeressük azokat az x_1, x_2, x_3 és x_4 pontokat, amelyekhez azonos nagyságú feszültség tar-



2. ábra. Minimumhely-eltolódás meghatározása

tozik (2. ábra), akkor

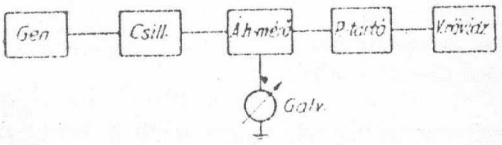
$$\frac{\lambda_m}{2} = \frac{x_2 + x_1}{2} - \frac{x_1 + x_0}{2}, \tag{2, 26}$$

amiből

$$\lambda_m = (x_2 + x_1) - (x_1 + x_0). \tag{2, 27}$$

3. Mérőberendezés

A berendezés vázlatos rajza a 3. ábrán látható. A szignálgenerátor HF gyártmányú, 15—30 cm-ig (1—2 kMc) folyamatosan hangolható trióda oszcillátor. Maximálisan kivehető teljesítmény: 1 W.



3. ábra. Mérőberendezés blokk-sémája

Az állóhullámmérő „transzformált" típusú hasított koaxiális tápvonal [24], amely a generátorhoz egy 12 db-es leválasztó porvascsillapítón keresztül hajlékony koaxiális kábelen csatlakozik. Az állóhullámmérő másik végét változtatható rövidzár zárja le. A vizsgálandó anyaggal a hullámmérő és a rövidzár között levő próbadarabtartó tápvonalrészt töltöttük ki. Indikátorként 0,3 μA végkitérésű, 50 ohm belső ellenállású galvanométert használtunk.

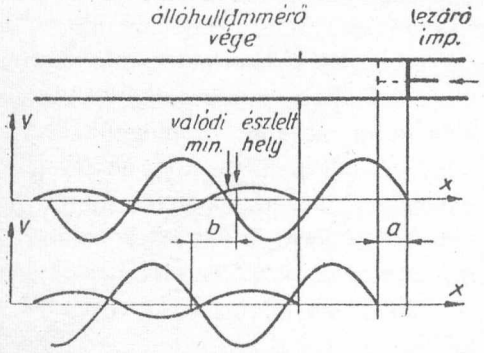
4. Mérés és számolás

A tulajdonképpeni mérés elkezdése előtt az alábbiakat szükséges ellenőrizni:

a) Az állóhullámarányмérő saját reflexiója. Általában fontos követelmény, hogy az állóhullámarányмérő saját reflexiója minél kisebb legyen. Ha a szonda behatolási mélysége elég kicsi, akkor az általa okozott reflexió elhanyagolható és csak az állóhullámmérő végéről történő visszaverődés zavarhat. A nagy saját reflexió nem is annyira az állóhullámarányмérést hamisítja meg, mint inkább a minimumhelyek mérésében okozhat komoly hibát. Ugyanis a valódi minimumhely helyett két különböző fázisban reflektált hullám eredőjéhez tartozó minimumhelyet észleljük (4. ábra). A hiba könnyen észrevehető abból, hogy a lezáró impedancia *a* elmozdulásához a minimumhelynek általában egy *b* elmozdulása tartozik.

A saját állóhullámarányt az irodalomból ismert [25] módon mértük és $n_s < 1{,}05$-re csökkentettük.

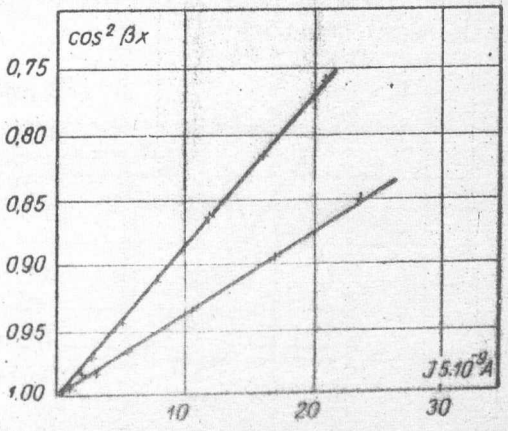
b) Változtatható rövidzár jósága. A rövidzár minden állásában veszteségmentes, más szóval $n > 10^2$ legyen. Ezt a követelményt az általunk használt állítható rövidzár messzemenően kielégítette.



4. ábra.
Az állóhullámmérő végének illesztetlenségéből származó minimumhely-eltolódási hiba

c) Kristálykarakterisztika. Az állóhullámarány kiszámításánál feltételeztük, hogy a kristálykarakterisztika négyzetes. Ennek ellenőrzése úgy történt, hogy rövidrezárt hullámmérőn állóhullámképet mértünk. Az 5. ábrán láthatók az általunk használt kristályok karakterisztikái. A mérésnél lényeges, hogy a kicsatoló szondát jól kihangoljuk és behatolási mélységét lehetőleg minél kisebbre válasszuk. Hosszabb használat után az ellenőrzést újra el kell végezni.

d) Harmonikus tartalom, zavaró módusok. Jellemző hiba pl. a fenti szignálgenerátornál, hogy a sáv egyes részein az üreg olyan módusban is erősen rezeg, amelynek frekvenciája az alapnak körülbelül a fele. Az állóhullámkép vizsgálatából ez a hiba is könnyen észrevehető. A maximumok nem egyenlő nagyok és a minimumhelyek nem egyforma távolságra vannak egymástól (6. ábra). A zavaró módusok az üreg hangolásával és a visszacsatolás változtatásával megfelelő értékre csökkenthetők.



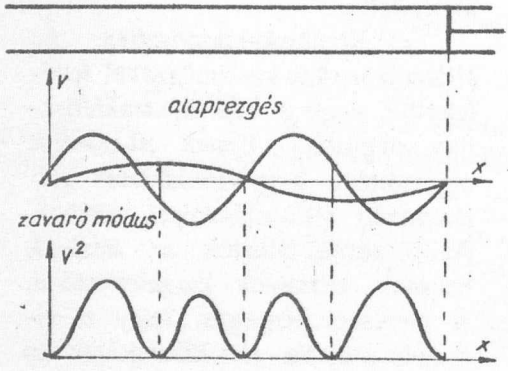
5. ábra. A használt kristályok jellemző görbéi

e) λ_0 mérés az előzőkben leírt módon történik.

Ha az *a*)—*e*) elővizsgálatokat elvégeztük, akkor hozzáfoghatunk a tulajdonképpeni méréshez. A mérést, amint már említettük, a 3. ábrán látható berendezés segítségével végeztük el. Megmértük először rövidzárban *b*, majd a próbatestet a rajzon látható módon elhelyezve, *c* értékét, valamint mindkét esetben az állóhullámarányt. Az üresjárási impedancia mé-

rése az előbbiekhez hasonlóan történt, csak mérés előtt a rövidzárt $\frac{\lambda_0}{4}$ értékkel eltoltuk a próbatest mögött.

A méréseinknél használt próbatestek pontosan meghatározott térfogatarányú paraffin és 10μ alatti szemcsenagyságú magnetitpor keverékéből készültek. Olvadt paraffinba adagoltuk a magnetitport és addig kevertük, míg a keverék dermedni kezdett. Ekkor a magnetit szemcsék gyakorlatilag már nem ülepedtek. Ilyen módon sikerült biztosítani a keverék homogenitását. Lényeges követelmény, hogy az anyag a kívánt d távolságon belül mindenütt tökéletesen kitöltse a koaxiális hullámvezetőt, ezért a próbatesteket 40—50 C°-on pontosan méretre sajtoltuk.



6. ábra. A zavaró módusok hatása

A mérés kiértékelésénél szükségünk volt a paraffin ε-jának és tg δ-jának az ismeretére is. E két mennyiség egyetlen (akár üresjárási, akár rövidzárási) mérésből meghatározható. (Lásd pl. a [26] alatti hivatkozást.) Méréseink szerint a paraffin dielektromos állandója $\varepsilon_p = 2{,}18$, veszteségi szöge pedig $\operatorname{tg}\delta_\varepsilon < 10^{-4}$, tehát számításainkban elhanyagolható. A mérési adatok feldolgozásához az I. táblázatban látható sémát dolgoztuk ki.

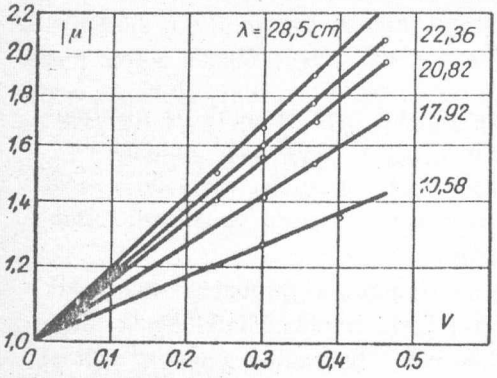
1. TÁBLÁZAT

A magnetit permeabilitása és dielektromos állandója kiszámításának menete 175,85 mm-es hullámhosszon

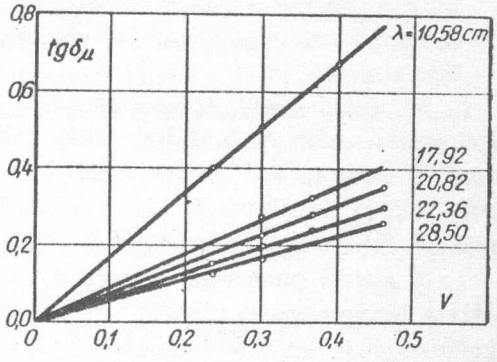
λ_0	175,85	$\frac{1}{n_r}$	0,3845
β_0	0,0357	$\frac{1}{n_{ii}}$	0,1454
d	7,9	Z_r	0,765 exp (i 46,12)
b	272,75	Z_{ii}	0,2765 exp (— i 56,75)
c_r	281,85	Z_0	0,468 exp (— i 5,32)
c_{ii}	258,25	th $\gamma d = Te^{j\tau}$	1,635 exp (i 51,44)
tg $\beta_0 l_r$	0,6945	γ'	3,96 exp (— i 16,11)
tg $\beta_0 l_{ii}$	0,239	$\lvert\mu\rvert$	1,855
x_r	12,05	δ_μ	21,43°
x_{1ii}	6,75	$\lvert\varepsilon\rvert$	8,46
x_{2ii}	10,7	δ_ε	10,79°

5. *Mérési eredmények*

A méréseket különböző térfogati koncentrációjú próbatesteken végeztük 10,58; 17,92; 20,82; 22,36 és 28,5 cm-en. *Lichtenecker* [27] szerint a térfogati



7a ábra. A magnetit permeabilitásának meghatározása Lichtenecker [27] formulája szerint



7b ábra. A magnetit veszteségi szögének meghatározása Lichtenecker [27] formulája szerint. (Az elmélet szerint nem a $\operatorname{tg}\delta_\mu = v \operatorname{tg}\delta_\mu^{(a)}$, hanem a $\delta_\mu = v\,\delta_\mu^{(a)}$ összefüggés a helyes, azonban kis értékek esetében Birks [18] nyomán az előbbi összefüggést használtuk)

koncentráció, a $|\mu|$ és $|\varepsilon|$, valamint $\operatorname{tg}\delta_\mu$ és $\operatorname{tg}\delta_\varepsilon$ között a következő összefüggések állnak fenn:

$$\log|\mu| = v \log|\mu_a|, \qquad (5,1)$$

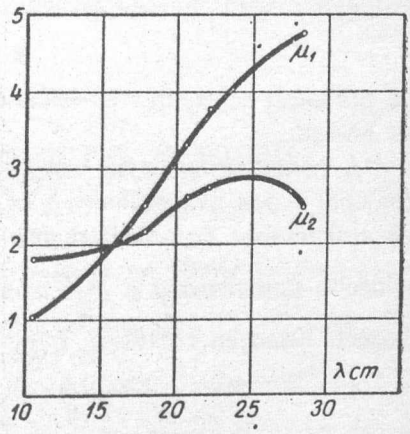
$$\log|\varepsilon| = v \log|\varepsilon_a| + (1-v)\log\varepsilon_p, \qquad (5,2)$$

$$\operatorname{tg}\delta_\mu = v \operatorname{tg}\delta_{\mu_a}, \qquad (5,3)$$

$$\operatorname{tg}\delta_\varepsilon = v \operatorname{tg}\delta_{\varepsilon_a}, \qquad (5,4)$$

ahol v a magnetit és a próbatest térfogatának viszonya. Az a index a $v = 1$-re extrapolált értéket jelent, ε_p pedig a paraffin dielektromos állandója. Az eredményeket a 7. ábra tünteti fel.

A 8. ábrán a permeabilitás valós és képzetes részének a hullámhossztól való függése látható. A valós rész, (μ_1) a 20—10 cm-es szakaszon erősen csökken és 10 cm-nél már alig nagyobb az egységnél. A képzetes rész (μ_2) 24 cm körül maximumot mutat.



8. ábra. A magnetit permeabilitásának hullámhossztól való függése

Mivel a magnetit aránylag jó vezető, a permeabilitás erőteljes csökkenése viszonylag már nagy hullámhosszak mellett elkezdődik. Az észlelt relaxáció a faleltolódási és forgási folyamatok eredő hatásaként jelentkezik.

Függelék.

Az irodalomban úgyszólván semmiféle adatot nem találunk az alkalmazott mérési módszer hibájára. *Birks* [18] megjegyzi, hogy „No general estimate of error in the determination of μ and ε can be given". Mások a hibát 10—30%-ra becsülik. A mi méréseinknél a μ-re és ε-ra vonatkozó eredmények hibája nem volt nagyobb $\pm 3\%$-nál.

A mérési pontosság jelentősen függ az alkalmazott próbatest hosszától. Már a legegyszerűbb esetben, pl. a paraffin dielektromos állandójának meghatározásánál, különböző hosszúságú próbatesteket használva jelentős szórást kapunk. Igen könnyű belátni, hogy mi a fellépő pontatlanság oka. Az irodalom [26] azonban nem sok felvilágosítást ad erre vonatkozóan, ezért célszerűnek látszik egy olyan eljárás ismertetése, amelynek segítségével kiválasztható az a próbatesthossz, amely nem vezet túl nagy mérési hibához.

Veszteségmentes dielektrikumok ε-jának meghatározása a

$$\frac{\operatorname{tg} \Phi}{\Phi} = \frac{\operatorname{tg} \beta_0(\delta + d)}{\beta_0 d} = A \tag{F, 1}$$

összefüggés segítségével történhet, ahol

$$\Phi = \beta_0 d \sqrt{\varepsilon}, \tag{F, 2}$$

δ a próbatest behelyezésekor előálló minimumhely-eltolódás, d pedig a próbatest hossza.

A pontatlanság egyik oka abban rejlik, hogy a választott próbatesthossz véletlenül éppen akkora, hogy a $(\delta + d)$ mennyiségnek a tangens-görbe meredek szakaszához tartozó érték felel meg. Ezért a δ és d mérésénél elkövetett legkisebb pontatlanság a $\frac{\operatorname{tg} \Phi}{\Phi}$ mennyiség meghatározásánál már jelentős hibát okozhat. Könnyen belátható, hogy

$$\frac{\Delta A}{A} = \frac{2\beta_0}{\sin 2\beta_0(\delta + d)} \Delta\delta. \tag{F, 3}$$

A relatív hiba akkor minimális, ha

$$\delta + d = \frac{\lambda_0}{8}(2k + 1), \tag{F, 4}$$

$$(k = 0, 1, 2, \ldots).$$

Tehát próbálgatással olyan próbatest hosszúságot kell kiválasztani, amelyre teljesül az (F, 4) alatti feltétel.

A pontatlanság egy másik oka lehet az, hogy a próbatest véglapja nem pontosan merőleges a koaxiális hullámvezető tengelyére; ugyancsak hibát okozhatnak a véglap mechanikai egyenetlenségei is. Ezek a hibaforrások különösen akkor jelentékenyek, amikor a próbatest feszültségmaximum környezetében végződik, jóllehet, hogy egyéb szempontok éppen ezt teszik kívánatossá. Mindez arra utal, hogy a próbatest hosszának megválasztásánál körültekintő gondossággal kell eljárni.

IRODALOM

[1] В. К. Аркадьев, ЖРФХО ч. Физ. *45*, 302, 1913.

[2] В. К. Аркадьев, Электромагнитные процессы в металлах I—II. Энергоиздат, Москва, 1936.

[3] О. И. Велецкая, ХЭТФ, *5*, 322, 1935.

[4] *K. A. Wolkova*, Z. f. Phys. *74*, 388, 1932.

[5] О. И. Велецкая—В. М. Гойтанников, Практические проблемы электромагнетизма, Изд. АН. 1939. 73. стр.

[6] Н. Н. Малов, Ж. Прикл. Физ. *6*, 26, 1929.

[7] *L. D. Landau—E. M. Lifschitz*, Sow. Phys. *8*, 153, 1935.

[8] *R. Becker*, Phys. Z. *39*, 856, 1938.

[9] *W. Döring*, Z. f. Naturforsch. *3a*, 373, 1948.

[10] К. М. Поливанов, Изв. АН. сер. Физ. *16*, 449, 1952.

[11] Н. С. Акулов—Г. С. Кринчик, Изв. АН сер. Физ. *16*, 523, 1952.

[12] *C. Kittel*, Phys, Rev. *70*, 281, 1946.

[13] *L. Néel*, Ann. de Phys. *36*, 340, 1939.

[14] *L. Pál*, Közp. Fiz. Kutató Int. Közl. *2*, 701, 1954.

[15] *G. Potapenko—R. Sänger*, Z. f. Phys. *104*, 779, 1937.

[16] *G. T. Rado*, Phys. Rev. *71*, 322, 1947.; *75*, 841, 1949.; *80*, 273, 1950.

[17] *G. Untermann*, Z. f. angew. Phys. *1*, 233, 1950.

[18] *J. B. Birks*, Proc. Phys. Soc. *60*, 282, 1948.; *63*, 65, 1950.

[19] *J. C. Slater*, Microwave Transmission, New York, 1942.

[20] *A. E. Kennelly*, Chart Atlas of Complex Hyperbolic and Circular Function, Cambridge 1914.

[21] Й. Н. Колли—К. М. Поливанов, Изв. АН сер. Физ. 18. 382. 1954.

[22] *E. Jahnke—F. Emde*, Funktionentafeln, Leipzig 1933.

[23] *H. M. Barlow—A. L. Cullen*, Microwave Measurements, London 1950.

[24] *W. Bruce Wholey—W. Noel Eldred*, Proc. I. R. E. *38*, 244, 1950.

[25] *Gy. Almássy*, Mikrohullámú mérések (kézirat), Budapest 1954.

[26] *C. G. Montgomery*, Technique of Microwave Measurements, New York 1947.

[27] *K. Lichtenecker*, Phys. Z. *19*, 374, 1918.

A FERROMÁGNESES OSZTÁLY KÖZLEMÉNYE
OSZTÁLYVEZETŐ: PÁL LÉNÁRD

Ferromágneses rezonancia vizsgálata különböző anyagokban

Irta: Nagy Imre és Pál Lénárd

Bevezetés.

A ferromágneses anyagok mikrohullámu elektromágneses terekben való viselkedésénél nagy szerepet játszik a ferromágneses rezonancia jelensége. A ferromágneses rezonancia, a paramágneses rezonanciához hasonlóan, spin rezonancia. Az elemi mágneses nyomatékok külső mágneses térben adott frekvenciával processzálnak a mágneses tér iránya körül. Ha a külső váltakozó, mágneses tér frekvenciája megegyezik a precesszió frekvenciájával, akkor maximális energiát tudnak abszorbeálni a térből. A ferromágneses rezonancia kisérleti megvalósitása ugy történik, hogy a próbatestet sztatikus mágneses térben telitésig mágnesezzük és megmérjük azt az intenzitás -változást, amelyet a sztatikus térre merőlegesen alkalmazott mikrohullámu mágneses tér okoz. Akár a mikrohullámu mágneses tér frekvenciáját, akár a sztatikus tér erősségét változtatjuk, bizonyos frekvenciánál illetve térerősségnél a próbatest által a mikrohullámu térből elnyelt energia rezonanciaszerüen megnő. Ez a veszteség természetesen nem származhat a domenfalak mozgásából, mivel a sztatikus mágneses térrel a próbatestet telitésig mágneseztük, hanem a mágnesség elemi hordozóinak, a spin-nyomatékoknak rezonanciajellegü energia abszorpciójával kapcsolatos.

A ferromágneses rezonancia elmélete.

Mint ismeretes, szabad elektron spinje a külső mágneses tér iránya körül $\omega = \gamma H$ Larmor-frekvenciával processzál, ahol H a külső tér, $\gamma = g \frac{e}{2mc}$ a giromágneses arány és g a Landé-faktor, vagy más néven spektroszkópiai felhasadási tényező. g értéke szabad spin esetén 2 , mig szabad pályanyomatékra 1 . A maximális energia-abszorpciót szabad elektron esetén akkor kap-

nánk, ha a külső térerősség és a váltakozó mágneses tér frekvenciája kielégiti a Larmor-frekvencia egyenletét.

Ilyen egyszerü pörgettyü modellt alkalmazva, ferromágneses anyagok esetében nem kapunk a kisérletekkel megyegyező eredményt. Az eltérés különösen γ meghatározásánál szembetünő. Ugyanis ilyen feltételek mellett γ -ra hat-tizszer kisebb értéket kapunk, mint amit az Einstein-de Haas kisérlet alapján várni lehet. Ennek oka abban keresendő, hogy a ferromágneses anyagban az elemi mágneses nyomatékok a külső mágneses tér mellett erős elektromos (kicserélődési) és belső mágneses tér hatásának vannak kitéve. Ezért a rezonancia állapot előállitásához szükséges mágneses tér értéke is eltér a szabad elektronra érvényes Larmor-frekvencia kifejezéséből adódó tér értékétől. Azonban a szemléletes pörgettyü modell mellett maradva a kisérletekkel elég jól egyező eredményt kapunk abban az esetben, ha a külső tér helyett bizonyos effektiv mágneses térrel (H_{eff}) számolunk. Az effektiv tér a következő terekből tevődik össze: a külső térből, az alaktól függő lemágnesező térből, a mágneses anizotropia teréből és esetleg a kicserélődési erők ekvivalens teréből. Ezzel az effektiv mágneses térrel számolva Kittel [1] megmutatta, hogy a rezonancia frekvenciát most az

$$\omega_0^2 = \gamma^2 \left[H_0 + (N_x + N_x^e - N_z) M_0\right]\left[H_0 + (N_y + N_y^e - N_z) M_0\right] \qquad (1)$$

egyenlet határozza meg, ahol H_0 a külső z irányu mágneses tér, N_x, N_y, N_z az alaktól függő lemágnesező tényező három komponense, N_x^e, N_y^e az anizotropia miatt fellépő effektiv lemágnesező tényezők, M_0 a telitési mágneses intenzitás.

Ugyanerre az eredményre jutott Van Vleck [2] is, aki kvantummechanikai módszerekkel határozta meg a rezonancia frekvenciát. Az általa használt energia operátor három tagból áll: a spin momentumok és a külső mágneses tér közötti kölcsönhatások, a szomszédos spin momentumok egymás közötti dipol jellegü kölcsönhatásai és a spin-pálya kvadrupol kölcsönhatások operátorából. Az első a külső lemágnesező teret, az utolsó pedig a mágneses anizotropia terét adja ki automatikusan. Ezen kölcsönhatások mellett ujabban más, relaxációs jellegü kölcsönhatást is figyelembe vesznek, amely a rezonancia vonal kiszéle-

sedését hivatott magyarázni. Ilyen kölcsönhatásnak tekintette Van Vleck [3] pl. a spinek közötti, Achiezer [4] a spin hullámok és rácsvibráció közötti, Bloenbergen [5] a ferromágnességért felelős spinek és a vezetési elektronok spinjei közötti kölcsönhatást.

Ezekből a kölcsönhatásokból számolt vonalszélességek és a kisérleti eredmények között vagy nagyságrendi eltérések vannak, vagypedig a vonalszélességnek különböző paraméterektől való függését nem adják meg helyesen.

A rezonancia vonal egy további pszeudo kiszélesedédét okozhatja pl. a polikristályos próbatestek esetén az a körülmény, hogy a rezonancia tér értéke függ az egyes krisztallitek könnyü mágnesezési tengelye és a külső tér iránya közötti szögtől. Mivel polikristályos próbatestek krisztalitjeinél mindenfajta orientáció előfordulhat, minden egyes kristályszemcséhez más és más rezonancia maximum tartozhat, ami a rezonanciavonal kiszélesedését okozhatja.

A ferromágneses rezonancia elméletének a kisérletekkel való összehasonlitására célszerü olyan mágneses mennyiségeket használni, amelyek a külső térerősség és a frekvencia függvényében érzékenyen változnak az energia abszorpció következtében. Ilyen mennyiség pl. a komplex permeabilitás képzetes része.

Klasszikus tárgyalási módnál maradva, a permeabilitás értől való függését könnyen meghatározhatjuk a kényszermozgást végző rendszer mozgás-egyenletéből. Jelen esetben a mozgásegyenletek egységnyi térfogatra vonatkoztatva a kövezkező alakuak lesznek /5/:

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma [M \times H_{eff}]_x - \frac{M_x}{T} \quad , \tag{2}$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma [M \times H_{eff}]_y - \frac{M_y}{T} \quad , \tag{3}$$

$$\frac{dM_z}{dt} \simeq 0 \quad , \tag{4}$$

ahol $\frac{M_x}{T}$ és $\frac{M_y}{T}$ csillapitó tagok, amelyek empirikusan veszik figyelembe a vonalkiszélesedést okozó relaxációs kölcsönhatásokat, $\frac{1}{T}$ a relaxáció frekvenciája. A szuszceptibilitás x komponensére $\left(\chi_x = \frac{M_x}{H_x}\right)$ és ebből a komplex permeabilitásra

$(\mu_1 - j\mu_2 = 4\pi\chi_x + 1)$ a mozgásegyenletek megoldásából a következő kifejezéseket kapjuk:

$$\mu_1 = \frac{4\pi\gamma^2 M_0 [H_0 + (N_y + N_y^e - N_z) M_0] (\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \frac{4\omega^2}{T^2}} + 1 \qquad (5)$$

és

$$\mu_2 = \frac{4\pi\gamma^2 M_0 [H_0 + (N_y + N_y^e - N_z) M_0] \cdot \frac{2\omega}{T}}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \frac{4\omega^2}{T^2}} , \qquad (6)$$

ahol ω a mikrohullámu tér frekvenciája. A rezonancia frekvencia a csullapitó tag bevezetése miatt kissé eltér a Kittel által meghatározottól:

$$\omega_0^2 = \gamma^2 [H_0 + (N_x + N_x^e - N_z) M_0][H_0 + (N_y + N_y^e - N_z) M_0] + \frac{1}{T^2} . \qquad (7)$$

A ferromágneses rezonancia kutatás egyik célja a rezonanciavonal szélességének és ezzel kapcsolatban a relaxációs kölcsönhatásoknak kisérleti és elméleti magyarázata. Sokan [5] [6] [7] végeztek ilyenirányu méréseket, amelyekben elsősorban a vonalszélességnek hőmérséklettől való függését tanulmányozták. A kisérletek szerint a vonalszélesség a hőmérséklettől nem egyértelmüen függ. Általában a hőmérséklet emelésével nő a vonalszélesség, néhány anyagnál azonban (ilyen pl. a Mn-Zn ferrit [8]) éppen forditva, növekvő hőmérséklettel csökken. Érdekes és még nem kellőképpen tanulmányozott a vonalszélesség hőmérséklettől való függése a Curie pont környezetében.

Ujabban [9] végeztek olyan kisérleteket, amelyekben a vonalszélességnek a telitési mágneses intenzitástól való függését tanulmányozták. Standley [9] különböző rézötvözetekkel végzett ilyen méréseket és azt találta, hogy a vonalszélesség a telitési mágneses intenzitással közel exponenciálisan csökken.

A rezonancia kisérletek egy további problémája a Landé-faktor meghatározása. A Landé-faktort sokkal pontosabban tudjuk meghatározni a rezonancia görbéből, mint a giromágneses kisérletekből. A rezonancia kisérletek mindig $g \geq 2$ -t adnak, ellentétben a giromágneses kisérletekkel, ahol rendszerint $g \leq 2$

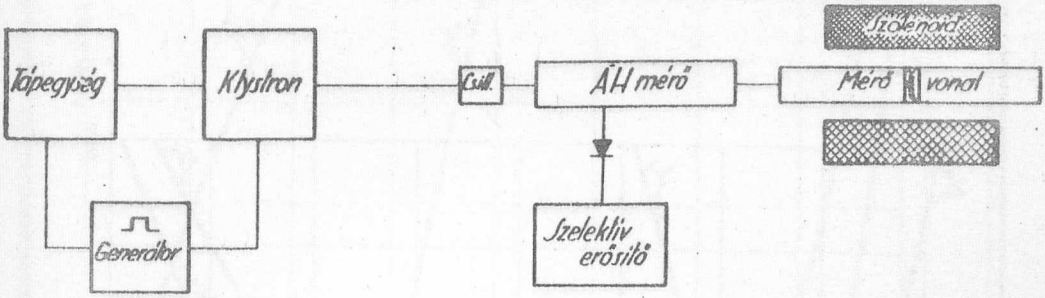
Az anomália magyarázatát abban kell keresni, hogy az eredő mágneses momentum kialakitásában a spin-momentumok mellett kis-

mértékben a pálya momentumok is résztvesznek.

A ferromágneses rezonancia mérése ezenkivül egy uj, a régivel megegyező pontosságu módszert szolgáltat az anizotropia állandó meghatározására monokristályon. Ha két különböző frekvencián vesszük fel a rezonancia görbét, akkor a (7) egyenlettel adott rezonancia frekvencia kifejezéséből g és az N_x^e, N_y^e -ben szereplő K_1 anizotropia állandó könnyen meghatározható. Ilyenmódon határozta meg Bickford [10] magnetit egykristály anizotropia állandójának hőmérsékletfüggését.

Kisérleti módszer.

Az általunk használt kisérleti elrendezéssel a vizsgált anyag komplex permeabilitása határozható meg. A probatestet egy koaxiális hullámvezetőbe helyeztük, amelynek végén állitható rövidzár van. A nagyfrekvenciás elektromágneses teret egy külső üreges klisztronnal állitottuk elő, amelynek frekvenciája 3000 Mc/sec. A klisztron üreget $\pm$ 400 Mc/sec frekvenciával lehetett elhangolni. A reflektor feszültségét 970 Hz-es négyszög-impulzusokkal vezéreltük. A klisztronról 10 db-es csillapitón és állóhullámaránymérőn keresztül csatlakoztunk a próbatestet tartó, rövidzárral ellátott, koaxiális mérővonalhoz. Az állóhullámaránymérőből kicsatolt áramot kristálydiódával egyenirányitottuk és nagy bemenő érzékenységü /erősités 5.10^6/, kis-zajszintü /5.10^{-9} V/ szelektiv erősitővel indikáltunk. A mérővonal egy szolenoidon ment keresztül, amely a hullámvezető tengelyével megegyező irányu sztatikus mágneses teret szolgáltatta. A szolenoid térerőssége 0-tól 5000 Oe-ig folyamatosan változtatható. Fontos követelmény, hogy a térerősség a próbatest minden pontjában azonos legyen. Az általunk használt próbatest hossza nem haladta meg a 15 mm-t. A szolenoid középpontjától $\pm$ 10 mm távolságra, azaz 20 mm hosszon, a tér inhomogénitása 0,2 % alatt volt. Igy az egyenletes tér feltételét messzemenően ki tudtuk elégiteni.



1. ábra

A mérést a már más alkalommal 11 ismertetett módszer szerint végeztük. Mértük a rövidzárási és nyitottvégü karakterisztikus impedanciát és terjedési állandót. E két mennyiségből a komplex permeabilitás és dielektromos állandó a következő képletek szerint határozható meg:

$$\mu = \mu_1 - j\mu_2 = \frac{\lambda_0}{2\pi} \gamma Z_0 \qquad (8)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_1 - j\varepsilon_2 = \frac{\lambda_0}{2\pi} \frac{\gamma}{Z_0} \qquad (9)$$

ahol λ_0 a szabadtéri hullámhossz, γ a terjedési állandó, Z_0 a karakterisztikus impedancia.

Kisérleti eredmények

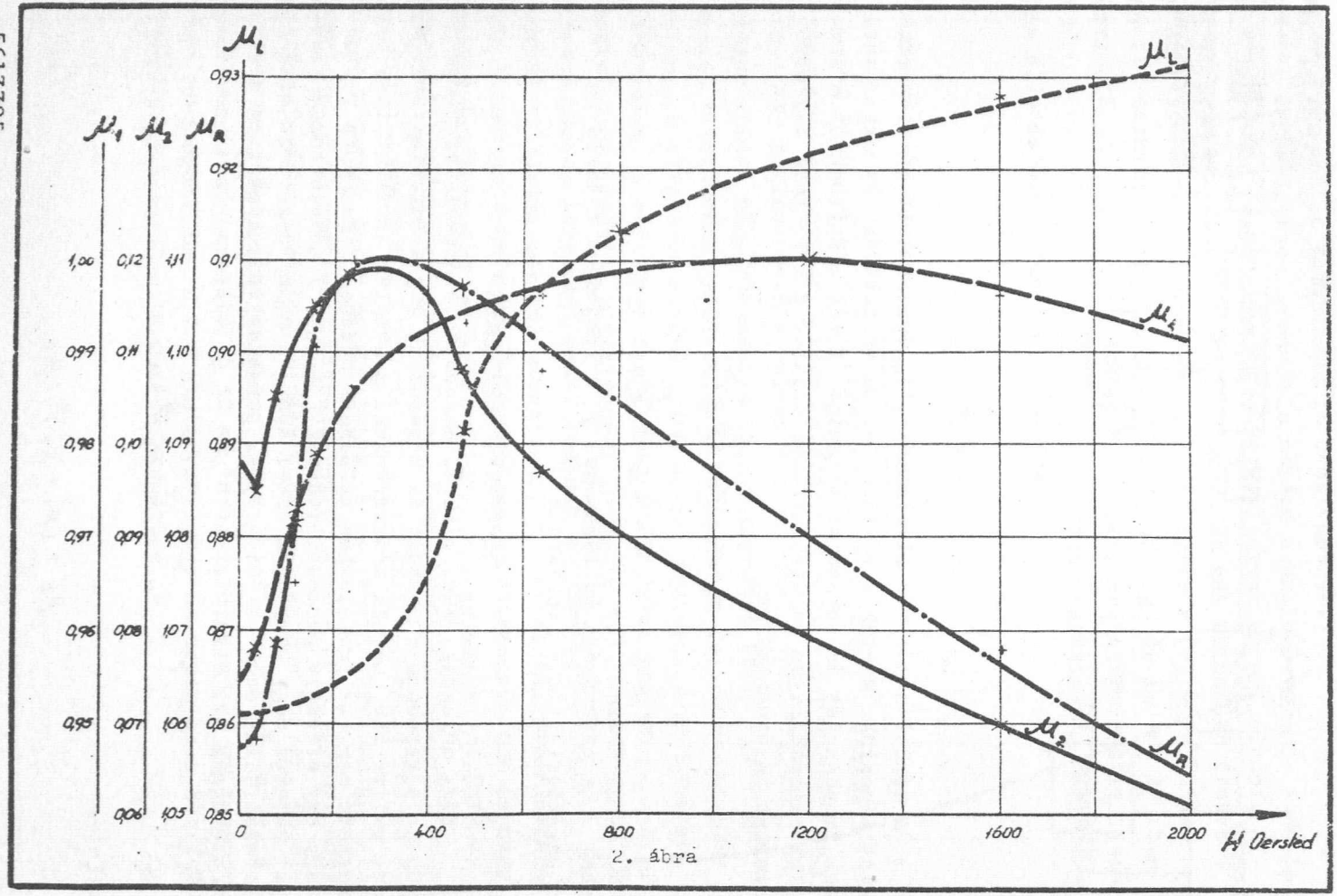
Négy anyagnak, vas, nikkel, magnetit és nikkel-ferritnek mértük ki a rezonancia görbéit és határoztuk meg a Landéfaktorét. Mint már emlitettük, mérési módszerünkkel a komplex permeabilitás határozható meg. Az irodalomban található mérések legnagyobb része vagy egy effektiv permeabilitásnak (μ_R , μ_L) nevezett mennyiséget határoz meg, vagy csak ezzel arányos mennyiséget. Az effektiv permeabilitás és a valódi komplex permeabilitás között egyszerü összefüggés áll fenn:

$$\mu_R = (\mu_1^2 + \mu_2^2)^{1/2} + \mu_2 \qquad (10)$$

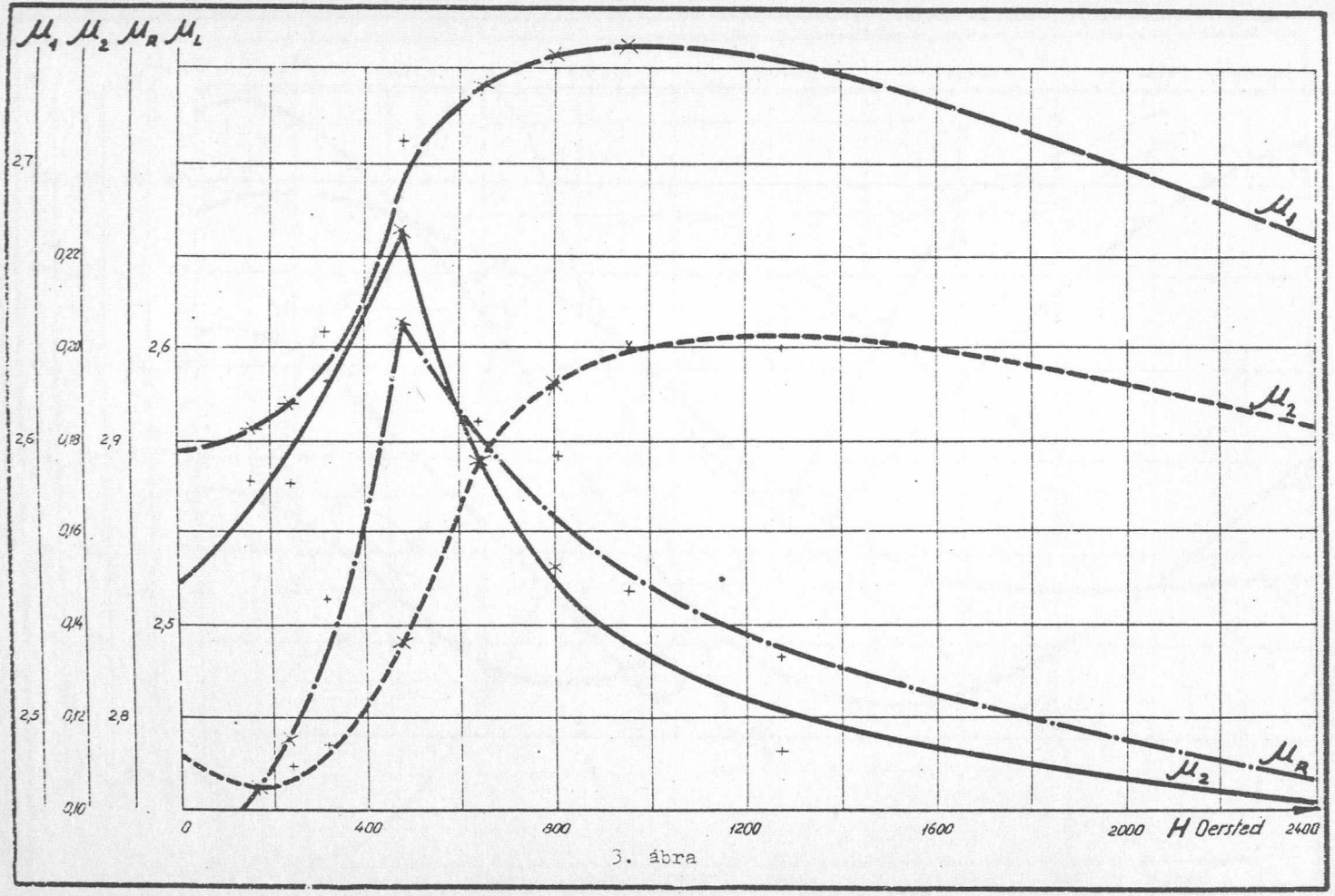
illetve

$$\mu_L = (\mu_1^2 + \mu_2^2)^{1/2} - \mu_2 \qquad (11)$$

5613385

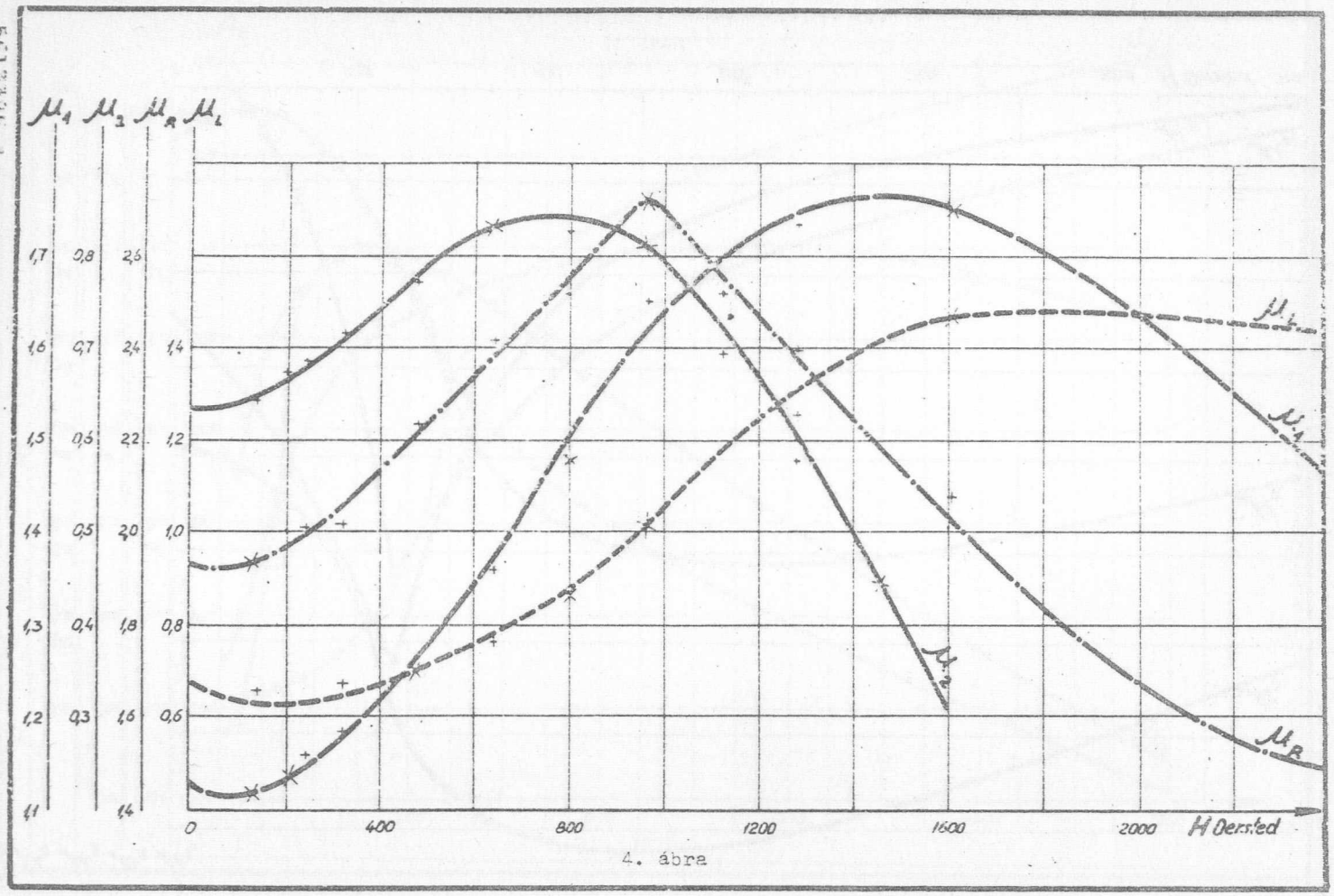

μL
μ1
μ2
μR
0,93
0,92
0,91
0,90
0,89
0,88
0,87
0,86
0,85
1,00
0,99
0,98
0,97
0,96
0,95
0,12
0,11
0,10
0,09
0,08
0,07
0,06
1,11
1,10
1,09
1,08
1,07
1,06
1,05
0
400
800
1200
1600
2000
H Oersted

2. ábra

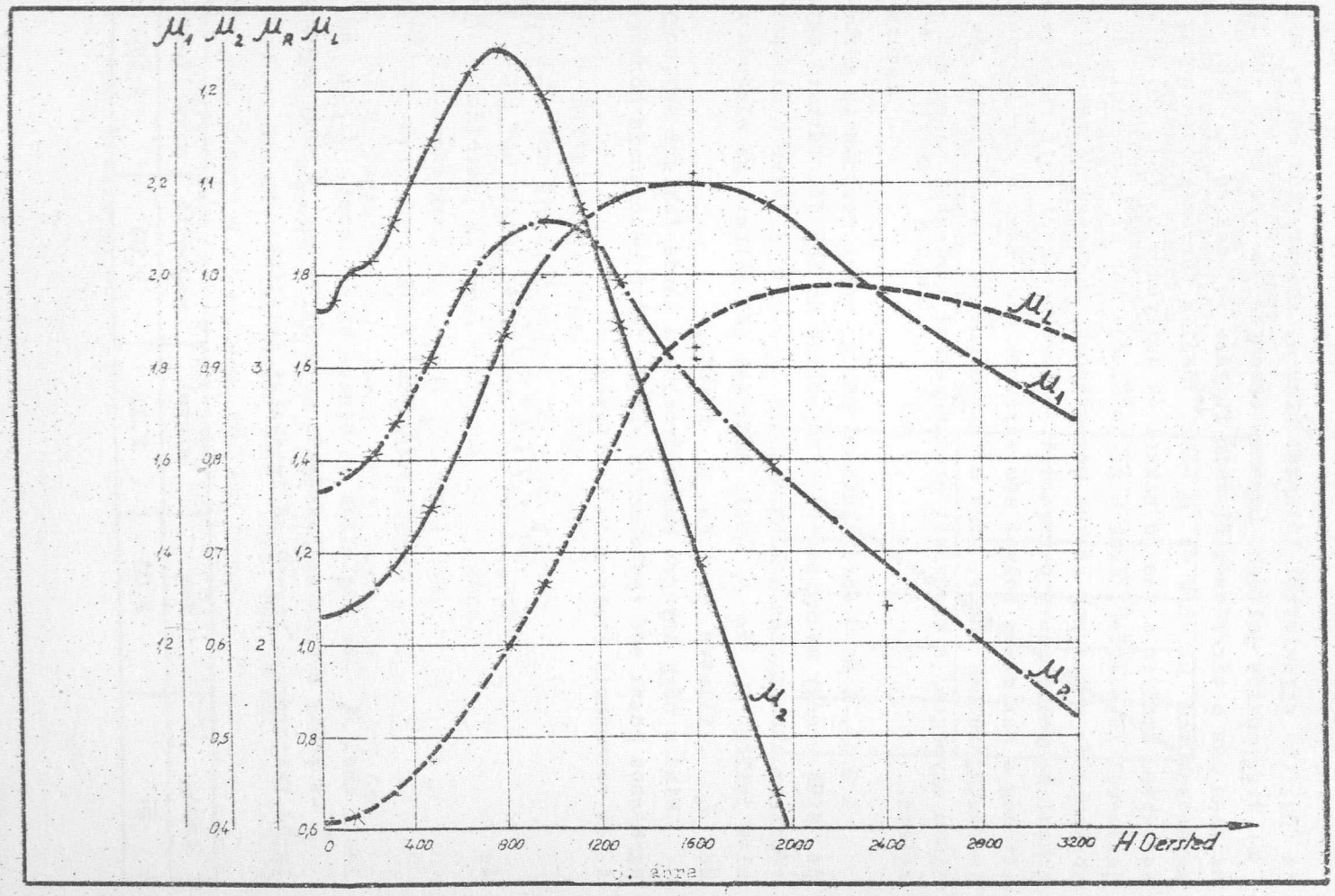

μ1 μ2 μR μL
2,7
2,6
2,5
0,22
0,20
0,18
0,16
0,14
0,12
0,10
2,9
2,8
0
400
800
1200
1600
2000
H Oersted
2400
μ1
μ2
μR
μ2

3. ábra

561336



4. ábra


μ1 μ2 μR μL
2,2
2,0
1,8
1,6
1,4
1,2
1,2
1,1
1,0
0,9
0,8
0,7
0,6
0,5
0,4
3
2
1,8
1,6
1,4
1,2
1,0
0,8
0,6
μL
μ1
μ2
μ2
0
400
800
1200
1600
2000
2400
2800
3200
H Oersted

1. ábra

Az (5), (6) egyenletből látható, hogy μ_2 abszorpciós görbe, mig μ_1 diszperziós jellegü. Ugyanez érvényes μ_R -re és μ_L -re is, azonban más a térerősségtől való függése μ_2 -nek és μ_R -nek, ugyancsak más μ_1 -nek és μ_2 -nek. Ideális ferromágneses anyag esetében, amilyen a vas és nikkel és amilyenre az (5), (6) kifejezéseket levezették, csak a görbe alakja tér el egymástól, de az abszorpciós maximumok helyei megegyeznek. Mágneses félvezetőknél sokkal bonyolultabb a permeabilitás térerősségtől való függése és itt még a maximumok helyei sem egyeznek meg. Ezek a körülmények is hozzájárulnak ahhoz, hogy a ferromágneses rezonanciának még ma sincs egységes, a kisérleti eredményekkel mindenben megegyező elmélete.

A 2, 3, 4 és 5 ábrán látható a négy anyag rezonancia görbéje. Mind a négy mennyiséget fölrajzoltuk és igy jól látható egyrészt az abszorpciós jelleg μ_2 és μ_R -nél, illetve a diszperziós jelleg μ_1 és μ_L -nél, másrészt jól látható az eltérés μ_2 és μ_R , illetve μ_1 és μ_L között.

Mind a négy anyagra meghatároztuk a Landé-faktort ugy, hogy egymáshoz közel eső frekvencián vettük fel a rezonancia görbéket. A két rezonancia frekvencia kifejezése

$$\omega_1^2 = \gamma^2 (H_0' + H_i)^2 + \frac{1}{T_1^2} \qquad (12)$$

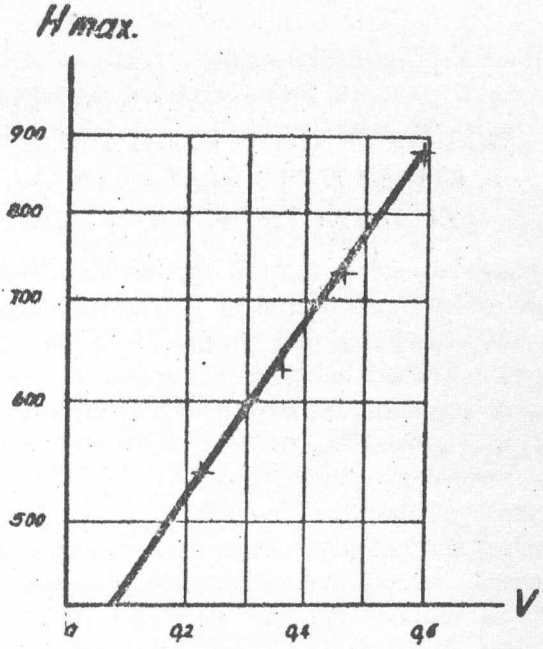
és

$$\omega_2^2 = \gamma^2 (H_0^2 + H_i)^2 + \frac{1}{T_2^2} \qquad (13)$$

lesz, ahol H_i -be foglaltuk az összes belső teret, $\frac{1}{T_1}$ -t és $\frac{1}{T_2}$ -t pedig a vonalszélességből határoztuk meg. A négy anyag Landé-faktorára a következő értékeket találtuk:

Anyag:	vas	nikkel	magnetit	nikkelferrit
g:	2,03	2,11	2,00	2,17

Néhány mérést végeztünk a belső térnek a próbatest koncentrációjától való függésének vizsgálatára. A mérést magnetitből készült próbatesten végeztük és azt találtuk, hogy a használható legnagyobb koncentrációig a rezonancia tér logaritmusa arányos a térfogati koncentrációval.



6. ábra.

I r o d a l o m

[1] C. Kittel, Phys. Rev. 73. 155. (1948)
[2] J.H. Van Vleck, Physica, 17. 234. (1951)
[3] J.H. Van Vleck, Phys. Rev. 78. 266. (1950)
[4] A.Achiezer, J. Phys. USSR, 10. 217. (1946)
[5] N.Bloembergen, Phys. Rev. 78. 572 (1950)
[6] D.W. Healy, Phys. Rev. 86. 1009.(1952)
[7] D.M.S. Bagguley, N.I. Hamik, Proc. Phys. Soc. A 67. 648. (1954)
[8] P.E. Tannenwald, Phys, Rev. 100. 1713. (1955)
[9] K.J. Standley, K.H. Reich, Proc. Phys. Soc. B 68. 713 (1955)
[10] L.R. Bickford, Phys. Rev. 78. 449 (1950)
[11] I.Nagy, D.Pallagi, L.Pál, KFKI Közl. 3.563. (1955)

KFKI Közl., 4, 450 /1956/

HEXAGONÁLIS SZERKEZETŰ KRISTÁLYSZEMCSÉKBŐL ÁLLÓ FERROMÁGNESES ANYAGOK DIFFERENCIÁLIS SZUSZCEPTIBILITÁSÁNAK TÉRERŐSSÉGTŐL VALÓ FÜGGÉSE ERŐS MÁGNESES TEREKBEN*

PÁL LÉNÁRD
KFKI, Ferromágneses Osztály

A mágneses telítettséghez közeli állapotban lévő ferromágneses anyagok differenciális szuszceptibilitása a legszorosabb kapcsolatban van a mágneses anizotrópiát jellemző állandókkal. Ha feltesszük, hogy a polikristályos anyag kristályszemcséi egymástól függetlenek és az anyag plasztikus deformációktól, külső és belső rugalmas feszültségektől mentes, akkor könnyen meghatározható a telítettséghez közeli állapotban a differenciális szuszceptibilitás értéke. Ebben a dolgozatban hexagonális szerkezetű kristályszemcsékből álló polikristályos ferromágneses anyagok differenciális szuszceptibilitásának a mágnesező térerősségtől való függésére vezetünk le egyszerű, erős mágneses terekre érvényes összefüggést.

1. §. A mágneses telítettséghez közeli állapotban a mágnesezési görbe alakját külső és belső mechanikai feszültségektől mentes polikristályos anyagokban csaknem kizárólag a mágneses anizotrópia határozza meg. Ennek alapján nyilvánvaló, hogy erős mágneses terekben a differenciális szuszceptibilitás is a legszorosabb kapcsolatban van a mágneses anizotrópiával.

Valóban, kimutatható, hogy a mágneses telítettséghez közeli állapotban a differenciális szuszceptibilitás egyszerűen a mágnesező térerősség negatív hatványai szerint haladó sorban állítható elő [1]. Ha eltekintünk a reális polikristályos anyagokban mindenkor meglévő (mikro és makro) belső feszültségek (plasztikus deformációk) hatásától és nem vesszük figyelembe az erős mágneses terekben mindig jelentkező „valódi" mágnesezést, akkor a sorfejtés első tagja $1/H$ harmadik hatványával kezdődik, az együtthatók pedig kizárólag a mágneses anizotrópia állandók algebrai kifejezései.

A mágneses telítettséghez közeli állapotban lévő, köbös szerkezetű kristályszemcsékből álló polikristályos anyagok differenciális szuszceptibilitásának térerősség-függését először *N. S. Akulov* [2] határozta meg. Számításaiban mechanikai feszültségektől mentes anyagra szorítkozott és feltételezte, hogy a texturamentes anyagban** a kristályszemcsék közötti mágneses kölcsönhatás

* Érkezett 1956. nov. 10.

** Texturamentesnek nevezzük azokat a polikristályos anyagokat, amelyekben a kristályszemcsék irány szerinti eloszlása kristálytanilag átlagosan izotróp.

elhanyagolható. Bár az utóbbi feltevés erősen vitatható [3], mégis sok kísérleti vizsgálat messzemenően igazolta *Akulov* számításait. Később *R. Gans* [4], *L. Kirenszkij* és *L. Szlobodszkij* [5], [6], [7] általánosították *Akulov* eredményeit.

Az a körülmény, hogy erős mágneses terekben a differenciális szuszceptibilitás bizonyos feltételek mellett a legszorosabb kapcsolatban van a mágneses anizotrópiával, felhasználható az anizotrópia állandó értékének megbecsülésére. Először *E. Czerlinsky* [8] kísérelte meg polikristályos nikkel és vas esetében a differenciális szuszceptibilitás térerősség-függésének felhasználásával az egykristályra jellemző anizotrópia állandó meghatározását. Ezeknek a vizsgálatoknak az ad különös jelentőséget, hogy a mágneses tulajdonságok kialakításában oly fontos szerepet játszó anizotrópia állandót polikristályos anyagokra vonatkozó mágneses mérések alapján határozhatjuk meg. Természetesen a mágneses anizotrópia legsikeresebben egykristályokon tanulmányozható, azonban egykristályok előállítása rendszerint körülményes, és így tájékoztató méréseket érdemes megfelelően kezelt polikristályos anyagokon végezni. *E. Czerlinsky* után *H. Polley* [9], *I. M. Puzei* [10] végeztek hasonló jellegű méréseket. Megállapítható, hogy a polikristályos anyagokra vonatkozó mérések alapján számított anizotrópia állandók nikkel, vas és néhány köbös szerkezetű, homogén nikkel-ötvözet esetében jól megegyeznek az egykristályokra vonatkozó mérésekből meghatározott anizotrópia állandókkal.

A plasztikus deformációk hatásával elméletileg *W. Brown* [11] és *L. Néel* [12], kísérletileg pedig *N. Z. Mirjaszov* [13] és *K. M. Balsova* [14] foglalkozott. Mivel az anizotrópia tulajdonságok vizsgálatára csak plasztikus deformációktól mentes próbatesteket használhatunk fel, jelen keretek között nem kívánjuk a plasztikus deformációk hatását figyelembe venni.

Néhány egyszerűsítő feltevés mellett (a kristályszemcsék közötti mágneses kölcsönhatás elhanyagolása esetében) a mágneses intenzitásra (s így a differenciális szuszceptibilitásra is) nagy térerősségek mellett könnyen vezethetünk le jól használható kifejezést. Csupán fel kell írni egyetlen tetszőleges helyzetű kristályszemcse szabad-energiájának mágneses részét, amelynek minimumára vonatkozó feltételből a telítettséghez közeli állapotban meghatározható a mágneses intenzitás-vektor helyzete.

Mivel feltevésünk szerint a kristályszemcsék egymástól függetlenek és térbeli eloszlásuk kristálytanilag izotróp, az egy kristályszemcsére vonatkozó eredményből a polikristályos anyag mágneses intenzitását egyszerű átlagolás révén kaphatjuk meg. (A differenciális szuszceptibilitást pedig a $\chi = \frac{dI}{dH}$ összefüggés alapján határozhatjuk meg.)

Az eljárásnak egyetlen kényes pontja az, hogy a kristályszemcsék közötti mágneses kölcsönhatást nem veszi figyelembe. Mivel minden egyes kristályszemcsében a mágneses intenzitás vektora más és más irányú (jóllehet az eltérés igen kicsi), még erős terekben is fennáll, hogy

$$div\vec{I} \neq 0, \tag{1}$$

azaz a mágneses intenzitás térbeli inhomogenitása

$$\vec{h} = -\operatorname{grad} \int_V \frac{div\vec{I}}{|\vec{r}-\vec{r}|}\, dv \tag{2}$$

belső „lemágnesező teret" hoz létre. Nyilvánvaló, hogy ez a belső lemágnesező tér erősen függ a kristályszemcsék nagyságától, alakjától, a szemcsék közötti határréteg tulajdonságaitól stb. Pontos meghatározása reális kristályokban kilátástalannak látszik, azonban bizonyos egyszerűsítő feltevésekkel minőségi szerepét tisztázni lehet. *T. Holstein* és *H. Primakoff* [5], valamint *L. Néel* [15] egy *W. Brown* [11] által ajánlott módszer segítségével számításokat végeztek a belső lemágnesező tér hatására vonatkozóan, azonban eredményeiket nagy óvatossággal kell kezelni, mert olyan fontos tényezőket, mint a kristályszemcsék alakja, nagysága stb., teljesen figyelmen kívül hagytak. Azok a polikristályos nikkelre és vasra vonatkozó kísérleti vizsgálatok, amelyek alapján számított anizotrópia állandók jól megegyeznek az egykristályokra vonatkozó mérések alapján számítottakkal, azt bizonyítják, hogy a belső lemágnesező tér hatásának sokkal kisebb jelentősége van, mint ahogy azt egyes szerzők [5], [15] állítják.

2. §. Míg a köbös szerkezetű kristályszemcsékből álló polikristályos anyagokkal kapcsolatban sok elméleti és kísérleti munka jelent meg, addig a hexagonális szerkezetű anyagokkal jóval kevesebben foglalkoztak. A telítettséghez közeli állapotban lévő hexagonális szerkezetű kristályszemcsékből álló polikristályos mágneses anyagok mágneses intenzitására először *R. Gans* [4] vezetett le egy hibás kifejezést, majd nemrégen *J. B. Kosztinyicin* [16] foglalkozott behatóan a hexagonális szerkezetű ferromágneses anyagok mágnesezési görbéinek elméletével. Azonban *R. Gans* kifejezésében a hibás tagra ő sem hívta fel a figyelmet.

Az eddig megjelent dolgozatokban, fölhasználva azt a körülményt, hogy erős mágneses terekben a mágneses intenzitás és a külső mágneses tér iránya közötti szög kicsi, a szabad-energia mágneses részét eme kis szög hatványai szerint haladó sorban állították elő és a mágneses intenzitás egyensúlyi helyzetének meghatározására az így nyert közelítő kifejezést használták fel. Az eljárás mindaddig jól használható, míg a közelítés magasabb rendű tagjaival nem kell számolni. A magasabb rendű tagok figyelembevétele igen elbonyo-

lítja az egyébként egyszerű számításokat. Mi itt egy szigorúbb s egyben igen egyszerű módszert mutatunk be.

Keressük a telítettséghez közeli állapotban lévő, plasztikus deformációktól mentes polikristályos anyag átlagos mágneses intenzitását H^{-1} szerint haladó hatványsorban:

$$\bar{I} = I_s \sum_{k=0}^{\infty} b_k H^{-k}, \tag{3}$$

$$(b_0 = 1).$$

Válasszuk ki a polikristályos anyag egy kristályszemcséjét és írjuk fel szabad-energiájának mágneses részét (a szomszédos kristályszemcsék lemágnesező hatásának elhanyagolásával) a következő alakban:

$$F_m = -HI_s \cos \vartheta + U(\theta, \vartheta), \tag{4}$$

ahol ϑ a mágneses intenzitás vektora és a külső mágneses tér iránya közötti szög, θ pedig a kristályszemcse hexagonális tengelye és a külső mágneses tér iránya közötti szög, míg

$$U(\theta, \vartheta) = K_1 \sin^2(\theta - \vartheta) + K_2 \sin^4(\theta - \vartheta), \tag{5}$$

ahol K_1 és K_2 az anizotrópia állandók.

Telítettséghez közeli állapotban a kiszemelt kristályszemcse mágneses intenzitását a (3) alatti kifejezéshez hasonlóan

$$I = I_s \sum_{k=0}^{\infty} a_k(\theta) H^{-k} \tag{6}$$

$$(a_0 = 1)$$

alakú hatványsorban állíthatjuk elő.

A mágneses intenzitás egyensúlyi helyzetét a

$$\frac{dF_m}{d\vartheta} = 0 \quad \text{és} \quad \frac{d^2F_m}{d\vartheta^2} > 0 \tag{7}$$

feltételekből határozhatjuk meg.

Elég erős terekben $\frac{d^2F_m}{d\vartheta^2} > 0$, úgyhogy a $\frac{dF_m}{d\vartheta} = 0$ feltételből valóban a mágneses intenzitás egyensúlyi helyzetének megfelelő mágnesezési görbét kapjuk. A (4) alatti kifejezésből következik, hogy

$$\sin \vartheta = -\frac{z}{I_s} \frac{dU}{d\vartheta}. \tag{8}$$

Ha $z = \frac{1}{H} \to 0$, akkor ϑ szintén nullához tart. Ezért ϑ-t z hatványai szerinti haladó sorban állíthatjuk elő:

$$\vartheta(z) = \vartheta(o) + \vartheta'(o) z + \frac{1}{2} \vartheta''(o) z^2 + \cdots \tag{9}$$

A (8) alatti kifejezésből könnyű meghatározni $\vartheta'(o)$-t. Valóban

$$\vartheta'(o) = -\frac{1}{I_s}\left(\frac{dU}{d\vartheta}\right)_{\vartheta=0}. \tag{10}$$

Vezessük be a következő jelölést:

$$\left(\frac{d^k U}{d\vartheta^k}\right)_{\vartheta=0} = U_k. \tag{10'}$$

Elemi számításokkal kapjuk a (9) alatti hatványsor többi együtthatóját is:

$$\left.\begin{aligned} \vartheta''(o) &= 2I_s^{-2}U_2^2 U_1, \\ \vartheta'''(o) &= -I_s^{-3}(U_1^3 + 6U_2U_1 + 3U_3U_1^2), \\ \vartheta^{(IV)}(o) &= I_s^{-4}(16U_2U_1^3 + 36U_3U_1^2 + 24U_2U_1 + 4U_4U_1^3), \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

Mivel erős terekben $\vartheta(z) \ll 1$, $\cos\vartheta(z)$-t sorba fejthetjük $\vartheta(z)$ hatványai szerint, azaz

$$\cos\vartheta(z) \sim 1 - \frac{1}{2!}\vartheta^2(z) + \frac{1}{4!}\vartheta^4(z) - \cdots \tag{12}$$

A $\vartheta(z)$-re nyert kifejezést felhasználva, meghatározhatók a (6) alatti hatványsor együtthatói:

$$\left.\begin{aligned} a_1 &= 0, \quad a_2 = \frac{1}{2}I_s^{-2}U_1^2, \quad a_3 = -I_s^{-3}U_1^2U_2, \\ a_4 &= I_s^{-4}\left(\frac{1}{8}U_1^4 + \frac{1}{2}U_1^3U_3 + \frac{3}{2}U_1^2U_2^2\right) \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

Ha feltételezzük, hogy a kristályszemcsék térbeli eloszlása kristálytanilag izotróp, akkor az

$$\bar{I} = I_s\sum_{k=0}^{\infty}H^{-k}\int_0^{\pi/2}a_k(\theta)\sin\theta\,d\theta \tag{14}$$

kifejezés szolgáltatja a polikristály átlagos mágneses intenzitását.

Jelöljük P_m^l-mel a $\sin^l\theta\cos^m\theta$ kifejezést. A (13) alatti együtthatók a következőképpen módosulnak:

$$\left.\begin{aligned} a_1 &= 0, \quad a_2 = I_s^{-2}(2K_1^2P_2^2 + 8K_1K_2P_2^4 + 8K_2^2P_2^6), \\ a_3 &= -I_s^{-3}\{8(P_4^2 - P_2^4)K_1^3 + 16(5P_4^4 - 3P_2^6)K_1^2K_2 + 32(7P_4^6 - \\ &\quad - 3P_2^8)K_1K_2^2 + 64(3P_4^8 - P_2^{10})K_2^3\}, \\ a_4 &= I_s^{-4}\{6(4P_6^2 + 4P_2^6 - 13P_4^4)K_1^4 + 48(10P_6^4 + 4P_2^8 - \\ &\quad - 19P_4^6)K_1^3K_2 + 48(56P_6^6 + 12P_2^{10} - 75P_4^8)K_1^2K_2^2 + \\ &\quad + 192(30P_6^8 + 4P_2^{12} - 31P_4^{10})K_1K_2^3 + 36(44K_6^{10} + 4P_2^{14} - \\ &\quad - 37P_4^{12})K_2^4\}, \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

Felhasználva a

$$\bar{P}_{2n}^{2k} = \int_0^{\pi/2} P_{2n}^{2k+1}(\theta)\,d\theta = \frac{2^k k!(2n-1)!!}{(2n+2k+1)!!} \tag{16}$$

összefüggést, hosszadalmas számítások után kapjuk, hogy

$$\left.\begin{aligned} b_1 &= 0, \\ b_2 &= I_s^{-2}\left(\frac{4}{15}K_1^2 + \frac{64}{105}K_1K_2 + \frac{128}{315}K_2^2\right), \\ b_3 &= I_s^{-3}\left(\frac{16}{105}K_1^3 + \frac{128}{315}K_1^2K_2 + \frac{512}{1155}K_1K_2^2 + \frac{8192}{45045}K_2^3\right), \\ b_4 &= 0, \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{aligned}\right\} \tag{17}$$

Ezek után könnyen felírhatjuk a differenciális szuszceptibilitást, hiszen

$$\chi = 2I_s^{-1}\left(\frac{4}{15}K_1^2 + \frac{64}{105}K_1K_2 + \frac{128}{315}K_2^2\right)H^{-3} + 3I_s^{-2}\left(\frac{16}{105}K_1^3 + \frac{128}{315}K_1^2K_2 + \frac{512}{1155}K_1K_2^2 + \frac{8192}{45045}K_2^3\right)H^{-4} + o(H^{-5}), \tag{18}$$

ahol $o(H^{-5})$ az $\frac{1}{H^5}$-nél magasabbrendű tagokat jelöli.

Elvileg elképzelhető, hogy abban a térerősségtartományban, ahol a (18) alatti összefüggés érvényes, a (18)-ból megalkotható $\chi H^4 = 2b_2I_s^{-1}H + 3b_3I_s^{-2}$ egyenes állandóit kísérletileg meghatározzuk és belőlük a K_1 és K_2 értékét kiszámítsuk. Azonban ez az eljárás igen nehézkes (és meglehetősen pontatlan) és így célszerűnek látszik a $K_c^2 = b_2$ összefüggés alapján valamilyen effektív anizotrópia állandót (K_c) meghatározni. Mivel a hexagonális szerkezetű ferromágneses anyagok anizotrópia állandói 10^6 erg/cm^3 nagyságrendűek, a (18) alatti kifejezés csak igen erős mágneses terekben válik érvényessé. Valószínűleg ezzel kapcsolatos az a körülmény, hogy eddig kísérleti vizsgálatok nem igazolták a (18) alatti kifejezés helyességét.

IRODALOM

[1] С. В. Вонсовский, Современное учение о магнетизме, Москва—Ленинград 1952. стр. 297.

[2] *N. S. Akulov*, Z. f. Phys. *69*, 822, 1931.

[3] *T. Holstein* and *H. Primakoff*, Phys. Rev. *59*, 388, 1941.

[4] *R. Gans*, Ann. d. Physik *15*, 28, 1932.

[5] Л. В. Киренский и Л. И. Слободский, ДАН СССР *69*, 639, 1949.

[6] Л. В. Киренский и Л. И. Слободский, ДАН СССР *70*, 809, 1950.
[7] Л. В. Киренский и Л. И. Слободский, ДАН СССР *74*, 457, 1950.
[8] *E. Czerlinsky*, Ann. d. Physik *13*, 80, 1932.
[9] *H. Polley*, Ann. d. Physik *36*, 625, 1939.
[10] Н. С. Акулов и К. М. Пузей, Изв. АН СССР сер. физ. *11*, 533, 1947.
[11] *W. F. Brown*, Phys. Rev. *58*, 736, 1940.
[12] *L. Néel*, J. de Phys. et Rad. *9*, 184, 1948.
[13] Н. С. Акулов и Н. З. Мирясов, ДАН СССР *66*, 29, 1949.
[14] Н. С. Акулов и К. М. Большова, ДАН СССР *71*, 633, 1950.
[15] *L. Néel*, J. de Phys. et Rad. *9*, 193, 1948.
[16] Ю. Б. Костянидин, Диссертация, 1953. Москва.

A FERROMÁGNESES OSZTÁLY KÖZLEMÉNYE

OSZTÁLYVEZETŐ: PÁL LÉNÁRD

Az atomreaktorok stochasztikus folyamatainak elméletéről

Irta: Pál Lénárd

Összefoglaló

A reaktorok folyamatait leiró alapegyenleteket fogalmazzuk meg a legáltalánosabb formában. Az alapegyenletekből levezetjük az átlagos neutronsürüségre, a neutronértékességre és a neutronsürüség fluktuációjára vonatkozó általános egyenleteket. Ilyenmódon a reaktorok exakt elméletének egyenleteit ismerve a különböző közelitő eljárások alkalmazhatósági köre pontosan megadható.

I.

Az atomreaktorok elméletének klasszikus része* a gázok kinetikus elméletéből jól ismert Boltzmann-féle egyenleten alapszik. Lényegében minden gyakorlati probléma ezen egyenlet különböző kezdő- és határfeltételeknek eleget tevő, közelitő megoldásainak felkeresésére vezethető vissza.

Az irodalomban [1] igen sok cikk jelent meg a különböző közelitő módszerekről és a közelitő módszerekkel elvégzett konk-

* Az atomreaktorok elméletének nem klasszikus része: a hatáskeresztmetszetek elmélete, stb. az elméleti magfizika feladatkörébe tartozik.

rét számitásokról. Megjelent néhány monográfia [2] is, amelyek az eddig nyilvánosságra hozott eredményeket rendszeresen összefoglalják. Mindezideig nem foglalkoztak azonban a reaktorokban lejátszódó folyamatok valószinüségszámitási tárgyalásával. Bizonyos kezdeti próbálkozások ezen a téren is történtek [3][4][5], azonban csak a legegyszerübb folyamatok esetében sikerült eredményeket elérni.

Az átlagos neutronsürüség időbeli és térbeli változását leiró Boltzmann-féle kinetikai egyenletnek egyik legáltalánosabb megfogalmazását L.N. Ussachoff [6] adta meg, aki a kinetikai egyenletet ugy általánositotta, hogy abban a neutronsokszorozás tényét és a késleltetett neutronok szerepét is figyelembe vette. Természetesen ennek az általánositott kinetikai egyenletnek a megoldását még inkább csak bizonyos erősen egyszerüsitő feltevések mellett lehet megadni.

A kinetikai egyenlet megoldási módszereinek kidolgozása során számosan [7][8] felhasználták a kinetikai egyenlet adjungáltját. Az adjungált egyenlet fizikai értelmére Ussachoff szerint először (1955-ben) B.B. Kadomtsev mutatott rá. Ussachof idézett cikkében a konjugált kinetikai egyenlet fizikai tartalmának igen világos megfogalmazását adta. Bevezette a "neutron-értékesség" fogalmát és megmutatta, hogy az adjungált kinetikai egyenlet ekvivalens a neutron-értékességre vonatkozó integro-differenciálegyenlettel. A neutron-értékesség definicióját legegyszerübben a következő módon adhatjuk meg. Tegyük fel, hogy valamilyen $t = 0$ időpontban a reaktor teljesitménye zérus, azaz, hogy a reaktorban neutronok nincsenek jelen. Ha most a reaktor valamilyen, az $\vec{r}_0$ vektor által meghatározott pontja körüli elemi tartományba $t = 0$ időpontban egy E_0 energiáju és $\vec{\Omega}_0$ sebességirányu neutron kerül, akkor ennek a neutronnak az értékességét valamely t időpontban az általa létrehozott neutronok átlagos száma határozza meg. Megjegyezzük, hogy a neutron-értékesség itt közölt definiciója némileg eltér az Ussachoff [6] által adott meghatározástól. Figyelemreméltó az a körülmény, hogy mind a neutronsürüségre, mind a neutron-értékességre vonatkozó egyenletek a legszorosabb kapcsolatban vannak a stochasztikus folyamatok elméletéből

jól ismert Kolmogoroff-Feller egyenletek [9] bizonyos általánosított formáival [10].

Jelen dolgozatnak az a célkitüzése, hogy a reaktorok stochasztikus folyamatait leiró alapegyenleteket a legáltalánosabb formában megfogalmazza és származtassa ezekből az egyenletekből az átlagos neutronsürüségre és a neutronértékességre, valamint a neutronsürüség fluktuációjára vonatkozó általános egyenleteket. A neutronsürüség fluktuációját leiró egyenlet származtatása a reaktorok stochasztikus folyamatainak általános elmélete nélkül különösen nehéz feladatnak bizonyulna.

II.

Mindenekelőtt induljunk ki abból, hogy az a közeg, amelyben a neutronok mozgásukat végzik, r fajta atommag keverékéből áll. Jelöljük az egyes atommagok térfogategységre eső átlagszámát $N_1, N_2, \ldots, N_r$ -vel. Ha a különböző atommagok térbeli eloszlása a közegben nem homogén, akkor jelöljék az egyes atommagok sürüségét az $\vec{\rho}_0$ vektor által meghatározott pontban az $N_1(\vec{\rho}_0), N_2(\vec{\rho}_0), \ldots, N_r(\vec{\rho}_0)$ mennyiségek. Legyenek továbbá $\sigma_1^s, \sigma_2^s, \ldots, \sigma_r^s$ $\sigma_1^a, \sigma_2^a, \ldots, \sigma_r^a$ az egyes atommagokra vonatkozó szóródási, és abszorpciós mikroszkópikus hatáskeresztmetszetek. Jelöljük $w_s^j(E_0, \vec{\Omega}_0; E, \vec{\Omega})dE\,d\Omega$ -val annak a valószinüségét, hogy a j -ik atommagon rugalmas vagy rugalmatlan szóródást szenvedett neutron energiája az $(E, E+dE)$ intervallumba, sebességének iránya pedig az $\vec{\Omega}$ vektor körüli $d\Omega$ térszögnyi nyilásu kupba esik; azon feltétel mellett, hogy az ütközés előtt energiája E_0, sebességének iránya pedig $\vec{\Omega}_0$ volt. Célszerü bevezetni a következő sürüség-függvényt:

$$w_s(\vec{\rho}_0, E_0, \vec{\Omega}_0; E, \vec{\Omega}) = \frac{\sum_{j=1}^{r} N_j \sigma_j^s w_s^j(E_0, \vec{\Omega}_0; E, \vec{\Omega})}{\sum_{j=1}^{r} N_j \sigma_j^s} .$$

Az egyszerüség kedvéért a makroszkópikus hatáskeresztmetszetek jelölésére vezessük be a következő mennyiségeket:

$$Q_s = \sum_{j=1}^{r} N_j \sigma_j^s \quad , \quad Q_a = \sum_{j=1}^{r} N_j \sigma_j^a .$$

Bár az általánosság érdekében többfajta hasadóképes maggal kellene számolnunk, azonban a gyakorlatban rendszerint az a helyzet, hogy csak egyfajta hasadó-anyag van jelen; ezért meggondolásainkban csak egyfajta hasadó magot veszünk figyelembe. Jelöljük $N_f = N_f(\vec{\varrho}_o)$ -al[+/] a hasadó-anyag atommagjainak sürüségét a $\vec{\varrho}_o$ vektor által meghatározott pontban és legyen $Q_f = N_f \sigma^f$ a makroszkópikus hasadási hatáskeresztmetszet. A teljes hatás keresztmetszet nyilván

$$Q_o = Q_s + Q_a + Q_f . \qquad /2.3/$$

A Q_o mennyiség általában bonyolult módon függ a neutron energiájától és ha az atommagok térbeli eloszlása inhomogén, akkor még a helykoordinátáktól is.

A hasadáskor keletkező neutronok számára, energiaeloszlására, stb. vonatkozóan igen általános feltevéseket kivánunk tenni. Legyen $p(E_o, k_o, \ldots, k_\ell)$ annak a valószinüsége, hogy egy E_o energiáju neutron által okozott hasadáskor k_o prompt-neutron és s csoportban $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_\ell$ bomlási állandókkal sorban $k_1, k_2, \ldots, k_\ell$ hasadási termék keletkezik. Az i -ik csoportba tartozó késleltetett neutronokat az i -ik csoportba tartozó hasadási termékek bocsájtják ki. Nyilván

$$\sum_{k_o,\ldots,k_\ell} p(E_o, k_o, \ldots, k_\ell) = 1 \quad , \qquad /2.4/$$

[+/] $N_f(\vec{\varrho}_o)$ nyilván az $N_1(\vec{\varrho}_o), \ldots, N_f(\vec{\varrho}_o)$ sürüségek valamelyike.

és

$$\sum_{k_0,\ldots,k_\ell} (k_0+k_1+\cdots+k_\ell)\,p(E_0,k_0,k_1,\ldots,k_\ell) = \sum_{i=0}^{\ell} \langle k_i \rangle \,, \qquad /2.5/$$

ahol $\langle k_n \rangle = \nu_0$ az egy hasadási aktusra eső prompt-neutronok átlagos száma, míg $\langle k_i \rangle$ az i -ik csoportba tartozó késleltetett neutronokat kibocsátó hasadási termékek átlagos száma, szintén egy hasadási aktusra vonatkoztatva. Minden további nélkül belátható, hogy

$$\langle k_i \rangle = \nu_i \,, \qquad /2.6/$$

ahol ν_i az i -ik csoportba tartozó késleltetett neutronok átlagos száma. A $\langle k_i^2 \rangle$ $(i = 0,\ldots,\ell)$ négyzetes átlagot jelöljük μ_i $(i = 0,\ldots,\ell)$ -el.

Tegyük fel, hogy mind a prompt-neutronok, mind a késleltetett neutronok függetlenek egymástól. Jelöljük $w_f^0(E_0,\vec{\Omega}_0\,;\,E,\vec{\Omega})\,dE\,d\Omega$-val annak a valószinüségét, hogy valamelyik prompt-neutron energiája az $(E, E+dE)$ energia intervallumba, sebességének iránya pedig az $\vec{\Omega}$ vektor körüli $d\Omega$ térszögnyi nyulásu kupba esik, azon feltevés mellett, hogy a hasitó neutron energiája E_0 , sebességének iránya $\vec{\Omega}_0$ volt.

Az i -ik csoportba tartozó késleltetett neutronokat az i tipusu hasadási termékek bocsájtják ki. Jelöljük $w_f^i(E_0,\vec{\Omega}_0\,;\,E,\Omega)\,dE\,d\Omega$ -val annak a valószinüségét, hogy az i tipusu hasadási termék által kibocsájtott késleltetett neutron energiája az $(E, E+dE)$ energia intervallumba, sebességének iránya pedig az $\vec{\Omega}$ vektor körüli $d\Omega$ térszögnyi nyilásu kupba esik, ismét azon feltevés mellett, hogy a hasitó neutron energiája E_0 , sebességének iránya pedig $\vec{\Omega}_0$ volt. A $w_f^i(E_0,\vec{\Omega}_0\,;\,E,\vec{\Omega})$ $(i = 0,1,\ldots,\ell)$ valószinüségi-sürüségfüggvények konkrét alakjának célszerü megválasztásával az alkalmazásokkal kapcsolatban foglalkozunk.

III.

A reaktorban lejátszódó stochasztikus folyamatok sok tekintetben messzemenő hasonlatosságot mutatnak a kozmikus kaszkád folyamatokhoz. Célszerünek látszik tehát felhasználni a kozmikus kaszkád-folyamatok elméletének megfelelő eredményeit a reaktorok stochasztikus folyamatainak elméletében is.

Tegyük fel, hogy valamely $t = 0$ időpontban ismeretes a neutronok térbeli, valamint energiák és irány szerinti eloszlása. Mivel minden egyes neutron a többitől függetlenül indit el bizonyos valószinüséggel láncreakciót, elegendő csupán egyetlen egy neutron által elinditott folyamattal foglalkoznunk. Legyen ennek a kiszemelt neutronnak az energiája E_0 , sebességének iránya $\vec{\Omega}_0$ és tartózkodjék $t = 0$ időpontban az $\vec{r}_0$ vektor által meghatározott helyen. Ezen neutron által elinditott láncreakció tárgyalására kitünően alkalmas Jánossy /11/ kaszkád-elmélete. Ez az elmélet bizonyos stochasztikus folyamatok (Markoff-folyamatok) ama jellegzetességét használja ki, hogy a folyamat lefolyása meghatározható célszerüen választott valószinüségi változók első ugrásszerü megváltozásával (az un. első ütközés módszere).

Ez az eljárás tulajdonképpen nem uj, hiszen a stochasztikus folyamatok elméletének alapegyenletei közül az un. első Kolmogoroff-Feller egyenlet éppen a valószinüségi változók első ugrásszerü megváltozására vonatkozik. Ennek a módszernek az előnye a részecskeszám megváltozással nem járó folyamatoknál nem is tünik ki annyira. Az előny azonban szinte felbecsülhetetlen a részecskeszám megváltozásával járó un. elágazó folyamatok /kaszkád folyamatok/ elméletében. Erre a körülményre viszont Jánossy [11] hivta fel először a figyelmet.

A következőkben lényegében mi is Jánossy [12] kaszkádelméletének eredményeit használjuk fel. Az általunk használt módszer azonban kissé különbözik Jánossy módszerétől. Az egyik különbség az, hogy mig Jánossy a folyamat leirására a térkoordináták valamelyikét /célszerüen a kaszkád tengelyével párhuzamos irányt/ választja ki paraméterként, addig mi természetesen az időt választjuk paraméternek. A tér-koordináták valamelyikének paraméterként való szerepeltetése a kaszkádelméletben is bizonyos nehézségeket okoz, mivel a folyamat kifejlődése közben a kivá-

7-056

lasztott tér-koordináta nemcsak nőhet, hanem csökkenhet is; bár a kozmikus kaszkádoknál rendkivül kicsiny annak a valószinüsége, hogy a részecskék a kaszkád tengelye mentén visszafelé szóródjanak. Ezért az esetleges visszaszóródásokat mint "katasztrófális ütközéseket" a folyamatból ki lehet zárni.

Azonban a neutronok lelassitásának és diffuziójának, valamint sokszorozásának elméletében ezt a kizárási módszert semmiesetre sem hasznosithatjuk, mivel eltérően a nagyenergiáju kozmikus kaszkád-folyamatoktól, itt döntő fontosságu a visszaszóródások pontos figyelembevétele.

Az általunk használt ut lehetőségére egyébként Jánossy [12] már korábban rámutatott, sőt részecskeszám változással nem járó folyamatok esetében bizonyos általánositásokkal [13] az emlitett nehézségeket kiküszöbölte és számitásainak eredményeit felhasználta magemulziókban lefékeződő részecskék energiájának meghatározására. A Jánossy által megadott egyenlet további általánositásával a szerző [10] is foglalkozott.

A másik különbség pedig abból adódik, hogy mig a kozmikus kaszkád-folyamatot végtelen térben lejátszódó folyamatként szokás tárgyalni, addig az atomreaktorok folyamatai természetesen végesméretü közegben játszódnak le és igy meg kell adnunk, hogy mi történik azokkal a neutronokkal, amelyek a közeg határfelületére érkeznek. Tegyük fel, hogy a reaktor konvex tartományt alkot és hogy e tartományt körülvevő tér üres. (A reaktor aktiv magját körülvevő reflektort és védő-réteget természetesen magához a reaktorhoz számitjuk hozzá.) Ha egy ilyen rendszerben a határfelületre érkezik egy neutron, akkor az kijut az üres térbe és onnan már nem térhet vissza a reaktorba. A határfeltételnek ezt a körülményt kell kifejeznie. A későbbiek során megmutatjuk, hogy az általunk választott tárgyalásmód különösen leegyszerüsiti a határfeltétel megfogalmazását.

Fogjunk ezek után hozzá a reaktor stochasztikus állapotának meghatározásához. Válasszuk koordináta-rendszerünk kezdőpontjának a sokszorozó és lassitó közeggel kitöltött V_R tartomány geometriai középpontját. Jelöljük $V_{\vec{r}}$ -vel az $\vec{r}$ rádiuszvektor végpontja köré vont konvex tartományt. Bár a tartomány

nagyságára nézve semmiféle kikötést nem kell tennünk és a $V_{\vec{r}}$ tartományhoz a reaktort körülvevő üres tér egy része is hozzátartozhat, mégis célszerű a $V_{\vec{r}}$ tartományt a reaktor által elfoglalt V_R tartomány egy részének tekinteni. Osztályozzuk t időpontban a neutronokat aszerint, hogy a tartományon belül, avagy kivül találhatók-e. (A pontosság kedvéért megjegyezzük, hogy azokat a neutronokat is a $V_{\vec{r}}$ tartományon belülieknek tekintjük, amelyek t időpontban éppen a tartomány burkoló felületén találhatók.) Jelöljük a $V_{\vec{r}}$ tartományon belül található neutronok számát m -el, mig a kivül találhatókét m' -el. A tartományon belül is és kivül is a következő definiciók szerint [14] osztályozhatjuk a neutronokat:

T_1 tipusunak nevezünk egy neutront, ha energiája E -nél kisebb, sebességének iránya pedig az $\vec{\Omega}$ irány köré vont $\Omega_{\vec{\Omega}}$ térszögnyi nyilásu kupon belül fekszik.

T_2 tipusunak nevezünk egy neutront, ha energiája kisebb E -nél és sebességének iránya az $\vec{\Omega}$ irány köré vont $\Omega_{\vec{\Omega}}$ térszögnyi nyulásu kupon kivül esik.

T_3 tipusunak nevezünk egy neutront, ha energiája E -nél nagyobb és sebességének iránya az $\vec{\Omega}$ irány köré vont $\Omega_{\vec{\Omega}}$ térszögnyi nyilásu kupon belül fekszik.

T_4 tipusunak nevezünk egy neutront, ha energiája nagyobb E -nél és sebességének iránya az $\vec{\Omega}$ irány köré vont $\Omega_{\vec{\Omega}}$ térszögnyi nyilásu kupon kivül esik.

Tegyük fel, hogy a $V_{\vec{r}}$ tartományon belül a T_1 tipusu neutronok száma m_1 , a T_2 tipusuaké m_2 , a T_3 tipusuaké m_3 és a T_4 tipusuaké m_4 . Jelentsék továbbá az m_1', m_2', m_3', m_4' nem negativ egészszámok a megfelelő tipusu neutronok számát a $V_{\vec{r}}$ térfogaton kivül.

A következőkben valamely t időpontban a rendszer állapotát két, nem negativ, egészszámu komponensekkel rendelkező négydimenziós vektorral az

$$\vec{m} = (m_1, m_2, m_3, m_4) , \qquad /3.1/$$

és az

$$\vec{m}' = (m_1', m_2', m_3', m_4') \qquad /3.2/$$

vektorral irjuk le, amelyek arra mutatnak, hogy t időpontban léteznek az

$$\gamma_{\vec{m}} = m_1 T_1 + m_2 T_2 + m_3 T_3 + m_4 T_4 \quad , \qquad /3.3/$$

és

$$\gamma_{\vec{m}'} = m_1' T_1 + m_2' T_2 + m_3' T_3 + m_4' T_4 \qquad /3.4/$$

összességek. Az $\gamma_{\vec{m}}$ összesség éppen azt fejezi ki, hogy t időpontban a $V_{\vec{r}}$ térfogaton belül a T_1 tipusu neutronok száma m_1, a T_2 tipusuaké m_2 és igy tovább. Az $\gamma_{\vec{m}'}$ jelentése pedig az, hogy a $V_{\vec{r}}$ térfogaton kivül t időpontban a T_1 tipusu neutronok száma, m_1' a T_2 tipusuaké m_2' és igy tovább.

Jelöljük most $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{m}, \vec{m}')$ -el annak a valószinüségét, hogy t időpontban az $\vec{m}$ és $\vec{m}'$ vektorok által meghatározott neutroneloszlás valósul meg azon feltétel mellett hogy $t = 0$ időpontban az $\vec{r}_0$ rádiuszvektor által meghatározott időpontban egy E_0 energiáju és $\vec{\Omega}_0$ sebességirányu neutron volt. Ennek a $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{m}, \vec{m}')$ eloszlásfüggvénynek a meghatározása képezi tulajdonképpeni feladatunkat. Egészen nyilvánvaló, hogy ismerve ezt az eloszlásfüggvényt, a neutronika minden kérdésére elvileg egzakt feleletet kaphatunk. Sajnos azonban, a $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{m}, \vec{m}')$ eloszlásfüggvény meghatározása a legtöbb esetben lehetetlennek bizonyul. Azonban nem is annyira az eloszlásfüggvényre, hanem annak különösen első, esetleg második momentumára van szükség. A momentumok származtatása pedig igen egyszerüen a $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{m}, \vec{m}')$ eloszlásfüggvény $G(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{q}, \vec{q}')$ generátorfüggvényéből történik.

IV.

Foglalkozzunk most már a $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}, E_0 ; \vec{m}, \vec{m}')$ eloszlásfüggvény meghatározásával. A $t = 0$ időpontban az $\vec{r}_0$ rádiuszvektor végpontjából $\vec{\Omega}_0$ irányban elinduló E_0 energiáju neutron (nevezzük ezt a neutront a továbbiakban δ -neutronnak) első ütközésekor vagy abszorpció, vagy szóródás (rugalmas vagy rugalmatlan szóródás), vagy hasadás következik be. Fennáll még az a

lehetőség is, hogy a $(0,t)$ időszakaszban a δ neutron egyáltalán nem ütközik. A folyamat ezen négy lehetséges és egymást kizáró elindulási módja alapján építjük fel a $H(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{m},\vec{m}')$ eloszlásfüggvényt. Tehát

$$H = H_0 + H_a + H_s + H_f \,, \qquad /4.1/$$

ahol a jobboldali eloszlásfüggvények jelentése sorban a következő: H_0 annak a valószinüsége, hogy a $t=0$ időpontban az $\vec{r}_0$ vektor végpontjából $\vec{\Omega}_0$ iránya elinduló E_0 energiáju neutron a $(0,t)$ időszakaszban nem ütközik és t időpontban a rendszer állapotát az $\vec{m}$ és $\vec{m}'$ vektorok határozzák meg. H_a, H_s, H_f pedig sorban annak a valószinüségei, hogy a $(0,t)$ időközben bekövetkező első ütközéskor a δ -neutron befogódik, szóródik, illetve maghasadást okoz és t időpontban a rendszer állapotát az $\vec{m}$ és $\vec{m}'$ vektorok határozzák meg.

Számitsuk ki most sorban a (4.1) kifejezés jobboldalán álló eloszlásfüggvényeket. Legyen $\Delta(V_R, P_{\vec{\varrho}_0}) = 1$, ha a $\vec{\varrho}_0$ vektor $P_{\vec{\varrho}_0}$ végpontja a V_R tartományon belül van és legyen zérus minden egyéb esetben. Célszerü a (2.1), (2.2) és (2.3) kifejezéseket a következőképpen általánositani:

$$w_s^*(\vec{\varrho}_0,E_0,\vec{\Omega}_0;E,\vec{\Omega}) = w_s(\vec{\varrho}_0,E_0,\vec{\Omega}_0;E,\vec{\Omega})\,\Delta(V_R,P_{\vec{\varrho}_0})$$

és

$$Q_i^*(\vec{\varrho}_0,E_0) = Q_i(\vec{\varrho}_0,E_0)\,\Delta(V_R,P_{\vec{\varrho}})$$

$$(i = s,a,f,c).$$

Határozzuk meg most annak a valószinüségét, hogy a $t=0$ időpontban az $\vec{r}_0$ vektor végpontjából $\vec{\Omega}_0$ irányban elinduló E_0 energiáju neutron a $(0,t)$ időszakaszban nem ütközik. Jelöljük ezt a valószinüséget $F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)$ -al. Nyilván

$$F(t+\Delta t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)\left\{1 - v_0 Q_0^*(\vec{r}_0 + v_0 t\,\vec{\Omega}_0,E_0)\right\} + o(\Delta t),$$

ahonnan azt kapjuk, hogy

$$F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)=\exp\left\{-\nu_0\int_0^t Q_0^*\left[\vec{\rho}_0(t'),E_0\right]dt'\right\},$$

ahol

$$\vec{\rho}_0(t')=\vec{r}_0+\nu_0 t'\vec{\Omega}_0 .$$

1. Ezek után fogjunk hozzá a $H_0(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{m},\vec{m}')$ eloszlásfüggvény meghatározásához. Vezessük be a következő függvényeket: legyen $\Delta(V_{\vec{r}},P_{\vec{\rho}_0})=1$, ha a $\vec{\rho}_0$ vektor $P_{\vec{\rho}_0}$ végpontja a $V_{\vec{r}}$ tartományon belül van és legyen zérus minden egyéb esetben. Legyen továbbá $\Delta(\Omega_{\vec{\Omega}},\vec{\Omega}_0)=1$ ha az $\vec{\Omega}_0$ vektor az $\vec{\Omega}$ vektor köré vont $\Omega_{\vec{\Omega}}$ térszögnyi nyilásu kupon belül fekszik és legyen zérus, ha az emlitett kupon kivül esik. Végül legyen $\Delta(E,E_0)=1$, ha $E\geq E_0$ és legyen $\Delta(E,E_0)=0$ ha $E<E_0$. Jelentsék a $\Delta^{-1}(V_{\vec{r}},P_{\vec{\rho}_0})$, $\Delta^{-1}(\Omega_{\vec{\Omega}},\vec{\Omega}_0)$ és $\Delta^{-1}(E,E_0)$ mennyiségek az előbbi mennyiségek ellenkezőjét. Legyen γ_i annak a valószinüsége, hogy egy δ -neutron I_i tipusu. Könnyen belátható, hogy

$$\gamma_1=\Delta(\Omega_{\vec{\Omega}},\vec{\Omega}_0)\Delta(E,E_0),\quad \gamma_2=\Delta^{-1}(\Omega_{\vec{\Omega}},\vec{\Omega}_0)\Delta(E,E_0)$$

$$\gamma_3=\Delta(\Omega_{\vec{\Omega}},\vec{\Omega}_0)\Delta^{-1}(E,E_0)\quad \gamma_4=\Delta^{-1}(\Omega_{\vec{\Omega}},\vec{\Omega}_0)\Delta^{-1}(E,E_0)$$

Vezessük még be a $\delta_{0\vec{m}}=\prod_{i=1}^{4}\delta_{0m_i}$ és $\delta_{0\vec{m}'}=\prod_{i=1}^{4}\delta_{0m_i'}$ általánositott Kronecker-féle szimbolumokat. Ezek után könnyen megszerkeszthetjük az erősen szinguláris H_0 eloszlásfüggvényt. Azt találjuk, hogy

$$H_0(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{m},\vec{m}')=\delta_{0\vec{m}}\,\delta_{0\vec{m}'}\left\{\Delta(V_{\vec{r}},P_{\vec{\rho}_0(t)})\sum_{i=1}^{4}\gamma_i\frac{\delta_{1m_i}}{\delta_{0m_i}}+\right.$$

$$\left.+\Delta^{-1}(V_{\vec{r}},P_{\vec{\rho}_0(t)})\sum_{i=1}^{4}\gamma_i\frac{\delta_{1m_i'}}{\delta_{0m_i'}}\right\}F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0),$$

ahol $\vec{\rho}_0(t)=\vec{r}_0+\nu_0 t\,\vec{\Omega}_0$.

2. Abban az esetben, amikor az első ütközéskor a δ neutron befogódik a következő kifejezést irhatjuk fel:

$$H_a(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{m},\vec{m}') = \delta_{o\vec{m}}\,\delta_{o\vec{m}'}\int_o^t Q_a^*[\varrho_o(t'),E_o]\,F(t,t',\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,dt'. \quad /4.7/$$

3. Ha a neutron első ütközésekor szóródik, akkor a szóródás után a megváltozott energiáju neutron a még rendelkezésre álló idő alatt ugyanolyan folyamatot indithat el, mint a δ -neutron. Tegyük fel, hogy a $(0,t')$ időszakaszban semmiféle ütközés nem történik, majd a $(t',t'+dt')$ időintervallumban szóródás következik be, aminek következtében a δ -neutron energiája E_o -ról az $(E',E'+dE')$ intervallumba eső értékre csökken és sebességének $\vec{\Omega}_o$ kezdeti iránya az $\vec{\Omega}'$ körüli $d\Omega'$ térszögnyi nyilásu kupban található irányra változik. A hátramaradó $t-t'$ idő alatt a szórást szenvedett neutron olyan folyamatot indit el, amelynek eredményeképpen t időpontban kialakul az $\vec{m}$ és $\vec{m}'$ vektorok által jellemzett neutroneloszlás. Az ütközési időpontnak, az energia és sebességirány változásnak összes lehetséges eseteit figyelembevéve azt találjuk, hogy

$$H_s(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{m},\vec{m}') = \nu_o\int_o^t\int_o^\infty\int_\Omega F(t,t',\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,Q_\varrho^*[\vec{\varrho}_o(t'),E_o]\times$$

$$\times\, w_s^*[\vec{\varrho}_o(t'),E_o,\vec{\Omega}_o;E',\vec{\Omega}']\,H(t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',E';\vec{m},\vec{m}')\,dt'\,dE'\,d\Omega'. \quad /4.8/$$

Ha figyelembe vesszük a lassitó közeg atomjainak hőmozgását, akkor különösen kis E_o energia-érték mellett számolnunk kell azzal, hogy a δ -neutron energiája az első ütközéskor nem csökken, hanem nő. A (4.8) kifejezésben a w_s^* valószinüségi sürüségfüggvényt ennek megfelelően választottuk meg.

4. Végül abban az esetben, amikor az első ütközés hasadásra vezet, a folyamat további sorsát a hasadáskor keletkezett prompt és késleltetett neutronok által elinditott ujabb "ágak" kifejlődése szabja meg. Tételezzük fel, hogy a $(0,t')$ időszakaszban semmiféle ütközés nem történik, majd a $(t',t'+dt')$ időintervallumban hasadás következik be, aminek eredményeképpen k_0 prömtneutron és $k_1,\ldots,k_\ell$ hasadási termék keletkezik. A promptneutronok és hasadási termékek által kibocsátott késleltetett

neutronok ujabb folyamatokat inditanak és a hátramaradó $t-t'$ idő alatt létrehozzák az $\vec{m}$ és $\vec{m}'$ vektorok által definiált neutroneloszlást. Legyen $K(t-t', \vec{\varrho}(t'), \vec{\Omega}_0, E_0, k_0; \vec{m}_0, \vec{m}_0')$ annak a valószinüsége, hogy $t-t'$ idő alatt a $\vec{\varrho}_0(t')$ vektor által meghatározott helyen bekövetkező hasadásból származó k_0 prompt-neutron létrehozza az $\vec{m}$ és az $\vec{m}'$ vektorok által definiált neutroneloszlást; azon feltétel mellett, hogy a hasitó neutron energiája E_0, sebességének iránya pedig $\vec{\Omega}_0$ volt. Jelöljük hasonlóan $K(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0, k_i; \vec{m}_i, \vec{m}_i')$ -el annak a valószinüségét, hogy $t-t'$ idő alatt a $\vec{\varrho}_0(t')$ vektor végpontjában bekövetkező hasadásból származó k_i i tipusu hasadási termék által kibocsátott késleltetett neutronok létrehozzák az $\vec{m}_i$ és $\vec{m}_i'$ vektorok által definiált neutroneloszlást, ismét azon feltétel mellett, hogy a hasitó neutron energiája E_0, sebességének iránya pedig $\vec{\Omega}_0$ volt. A K eloszlásfüggvény segitségével könnyen kifejezhető a H_f eloszlásfüggvény.

Hiszen:

$$H_f(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0; \vec{m}, \vec{m}') = \nu_0 \int_0^t F(t', \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0)\, Q_f'\left[\varrho_0^*(t'), E_0\right] \times$$

/4.9/

$$\sum_{k_0,\dots,k_\ell} p(E_0, k_0, \dots, k_\ell) \sum_{\vec{m}_0+\dots+\vec{m}_\ell=\vec{m}} \sum_{\vec{m}_0'+\dots+\vec{m}_\ell'=\vec{m}'} \prod_{i=0}^{\ell} K\left[t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0, k_i; \vec{m}_i, \vec{m}_i'\right] dt'.$$

Könnyen belátható, hogy $K\left[t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0, k_0; \vec{m}_0, \vec{m}_0'\right]$ eloszlásfüggvény visszavezethető a δ neutron által elinditott folyamatot leiró $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0; \vec{m}, \vec{m}')$ eloszlás függvényre. Ugyanis mivel mindegyik prompt-neutron a többitől függetlenül indit folyamatot, felirhatjuk, hogy

$$K(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0; \vec{m}_0, \vec{m}_0') =$$

$$\sum_{\vec{m}_1+\dots+\vec{m}_{k_0}=\vec{m}_0} \sum_{\vec{m}_1'+\dots+\vec{m}_{k_0}'=\vec{m}_0'} \prod_{j=0} \int_0^\infty \int_\Omega w_f^0(E_0, \vec{\Omega}_0; E', \vec{\Omega}') \times$$

$$\times H(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}', E'; \vec{m}_j, \vec{m}_j')\, dE'\, d\Omega'.$$

A $K(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0, k_i ; \vec{m}_i, \vec{m}_i')(i=1,2,\dots,\ell)$ eloszlásfüggvény meghatározása a következőképpen történhet. A k_i hasadási termék $t-t'$ idő alatt általában nem mind bomlik el. Tegyük fel, hogy $t-t'$ idő alatt k_i' elbomlik és $k_i'' = k_i - k_i'$ nem. A bomláskor keletkező neutronok a hasadás helyétől egy kissé távolabb és a hasadás idejéhez képest megkésve ugyanolyan folyamatot inditanak el, mint amilyen folyamatot a $t=0$ időpontban rendszerbe kerülő első δ -neutron elinditott. Legyen $K_i(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{m}_j, \vec{m}_j')$ annak a valószinüsége, hogy a k_i hasadási termék közül valamelyik, mondjuk az j -ik, a (t', t) időközben elbomlik és a keletkező neutron a $\vec{\varrho}_0(t')$ vektor végpontja körüli, gyakorlatilag végtelen kicsinynek tekinthető tartomány egy pontjából olyan folyamatot indit el, amelynek eredményeként $t-t'$ idő alatt az $\vec{m}_j$ és $\vec{m}_j'$ vektorokkal meghatározott neutroneloszlás alakul ki; ismét feltételezve, hogy a hasitó neutron energiája E_0 és sebességének iránya $\vec{\Omega}_0$ volt. A K_i eloszlásfüggvény birtokában most már felirhatjuk, hogy

$$K(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0, k_i ; \vec{m}_i, \vec{m}_i') = \sum_{k_i'=0}^{k_i} \binom{k_i}{k_i'} \exp\left\{-(k_i-k_i')(t-t')\right\} \times$$

$$\sum_{\vec{m}_1+\dots+\vec{m}_{k_i''}=\vec{m}_i} \sum_{\vec{m}_1'+\dots+\vec{m}_{k_i'}'=\vec{m}_i'} \prod_{j=1}^{k_i'} K_i(t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0, E_0 ; \vec{m}_j, \vec{m}_j') .$$

Mivel a hasadási termékek a hasadási aktus helyétől csak igen kis távolságra jutnak el, feltehetjük, hogy a késleltetett neutronok gyakorlatilag a hasadási aktus helyéről inditják (időben természetesen megkésve) az uj ciklust. Ilyen módon

$$K_i\left[t-t', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}_0 ; \vec{m}_j, m_j'\right] = \int_0^{t-t'} \int_0^{\infty} \int_{\Omega} \exp(-t''\lambda_i)\, \lambda_i\, w_f^i(E_0, \vec{\Omega}_0 ; E', \vec{\Omega}') \times$$

$$\times H\left[t-t'-t'', \vec{\varrho}_0(t'), \vec{\Omega}', E' ; \vec{m}_j, \vec{m}_j'\right] dt''\, dE'\, d\Omega' .$$

Valamivel gondosabb eljárással figyelembe vehetjük a hasadási termékek mozgását is. Erre azonban különösebb szükség nincsen.

Ilyen módon meghatároztuk a $H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0; \vec{m}, \vec{m}')$ eloszlásfüggvényt, amely a (4.1) nem lineáris integrálegyenletnek tesz eleget. A (4.1) általános megoldását megkeresni gyakorlatilag megoldhatatlan feladatnak látszik. Azonban, mint ahogy már emlitettük, a gyakorlat számára nem is annyira magára az eloszlásfüggvényre, mint inkább annak momentumaira van szükség. Ezért legyen a következő feladatunk az eloszlásfüggvény generátorfüggvényének meghatározása.

V.

Válasszunk két négydimenziós vektort. Jelöljük az egyik vektort $\vec{q} = (q_1, q_2, q_3, q_4)$ -el, a másikat $\vec{q}' = (q_1, q_2, q_3 q_4)$ -el. Alkossuk meg továbbá a következő skalárszorzatokat:

$$(\vec{m}.\vec{q}) = m_1 q_1 + m_2 q_2 + m_3 q_3 + m_4 q_4$$

$$(\vec{m}'.\vec{q}') = m_1' q_1' + m_2' q_2' + m_3' q_3' + m_4' q_4' \quad . \qquad /5.1/$$

Az eloszlásfüggvény generátorfüggvényét a következő végtelen sor adja:

$$G(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0; \vec{q}, \vec{q}') = \sum_{\vec{m}, \vec{m}'} \exp\left\{(\vec{m}.\vec{q}) + (\vec{m}'\vec{q}')\right\} H(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0; \vec{m}, \vec{m}') \ldots$$

Mindenekelőtt világos, hogy

$$G(t, \vec{r}_0, \vec{\Omega}_0, E_0; 0.0) = 1 \quad . \qquad /5.3/$$

Számunkra a generátorfüggvény egy speciális esete különösen fontos. Ez a $q_1 = q$ $q_i = 0 (i = 2,3,4)$ és $q_i' = 0$ $(i = 1,2,3,4)$

helyettesitésekkel származtatható. Vezessük be a következő jelölést:

$$G(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;p,0)=g(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;q)\ . \qquad /5.4/$$

A $g(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;q)$ generátorfüggvény q szerinti első deriváltja a $q=0$ helyen az eloszlásfüggvény egyik speciális, de számunkra fontos első momentumát adja.

$$\langle m_1\rangle=\left(\frac{\partial g(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;q)}{\partial q}\right)_{q=0}=M_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;V_{\vec{r}},\Omega_{\vec{\Omega}},E) \qquad /5.5/$$

nyilván megadja t időpontban azon neutronok átlagos számát, amelyek az $\vec{r}$ vektor végpontja köré vont $V_{\vec{r}}$ tartományon belül találhatók és amelyek sebesség-vektorai az $\vec{\Omega}$ irány köré vont $\Omega_{\vec{\Omega}}$ térszögnyi nyilásu kupon belül esnek, mig energiájuk E -nél kisebb; azon feltétel mellett, hogy $t=0$ időpontban az $\vec{r}_0$ vektor végpontjában egyetlen neutron tartózkodott és annak energiája E_0 , sebességének iránya pedig $\vec{\Omega}_0$ volt.

Az $M_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;V_{\vec{r}},\Omega_{\vec{\Omega}},E)$ függvényből könnyü meghatározni a gyakorlati szempontból fontosabb $u_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega},E')$ átlagos neutronsürüséget, hiszen

$$M_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;V_{\vec{r}},\Omega_{\vec{\Omega}},E)=\int_{V_{\vec{r}}}\int_{\Omega}\int_{0}^{E_0}n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega}',E')\,dV_{\vec{r}}\,d\Omega'\,dE'.$$

$n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega}',E')dV_{\vec{r}}d\Omega'dE'$ nyilván azon neutronok átlagos számával egyenlő, amelyek t időpontban az $\vec{r}$ vektor végpontja körüli $dV_{\vec{r}}$ elemi térfogatban találhatók és amelyek sebesség-vektorai az $\vec{\Omega}'$ irány köré vont $d\Omega'$ térszögnyi nyilásu kupba, mig energiájuk az $(E',E'+dE')$ intervallumba esik; azon feltevés mellett, hogy valamennyi neutron annak az egy E_0 energiáju és $\vec{\Omega}_0$ sebességirányu neutronnak a leszármazottja, amely $t=0$ időpontban az $\vec{r}_0$ vektor meghatározta pontból az egész folyamatot elinditotta.

7-056

A későbbiek során kiderül, hogy az $n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega},E)$ meghatározására szolgáló integro-differenciálegyenletben az $\vec{r},\vec{\Omega},E$ mennyiségekre semmiféle operáció nem vonatkozik. Ezért a kényelmesebb irásmód kedvéért a következőkben ezeket a mennyiségeket nem jelöljük. Szerepük ugyanis csupán a

$$\lim_{t\to 0} n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega},E) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\,\delta(\vec{\Omega}-\vec{\Omega}_0)\,\delta(E-E_0) \qquad /5.6/$$

kezdő feltételben jut kifejezésre.

A neutronsürüség

$$D^2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E) - n_1^2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) \qquad /5.7/$$

fluktuációjának meghatározásához az

$$\langle m_1^2\rangle = \left(\frac{\partial^2 g(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;q)}{\partial q^2}\right)_{q=0} = M_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;V_{\vec{r}},\Omega_{\vec{\Omega}},E) = \qquad /5.8/$$

$$\int_{V_{\vec{r}}}\int_{\Omega}\int_{0}^{E_0} n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega}',E')\,dV_{\vec{r}}\,d\Omega'\,dE'$$

összefüggés alapján származtatható második momentumra van szükségünk. A $G(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{q},\vec{q}')$ generátorfüggvény megszerkesztése után felirjuk az n_1 és n_2 függvényekre vonatkozó egyenleteket.

Az (5.2) alatti utasitás szerint könnyen megszerkeszthető az az egyenlet, amelynek a $G(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega},E_0)\,\vec{q},\vec{q}'$ generátorfüggvény eleget tesz. Egyszerü számitások után azt találjuk, hogy

$$G = G_0 + G_a + G_s + G_f\,, \qquad /5.9/$$

ahol

$$G_0(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{q},\vec{q}') =$$

$$F(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\left\{\Delta(V_{\vec{r}},P_{\vec{\varrho}_o(t)})\sum_{i=1}^{4}\gamma_i e^{q_i}+\Delta^{-1}(V_{\vec{r}},P_{\vec{\varrho}_o(t)})\sum_{i=1}^{4}\gamma_i e^{q_i}\right\}$$

és

$$G_a(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{q},\vec{q}')=v_o\int_o^t Q_a^*[\vec{\varrho}_o(t'),E_o]F(t',\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,dt',$$

továbbá

$$G_s(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{q},\vec{q}')=v_o\int_o^t\int_o^\infty\int_\Omega F(t',\vec{r}_o,\vec{\Omega},E_o)\,Q_s^*[\vec{\varrho}_o(t'),E_o]\times$$

$$\times w_s^*[\vec{\varrho}_o(t'),E_o,\vec{\Omega}_o;E',\vec{\Omega}']\,G[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',E';\vec{q},\vec{q}']\,dt'dE'd\Omega',$$

végül

$$G_f(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{q},\vec{q}')=v_o\int_o^t F(t',\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,Q_f^*[\vec{\varrho}_o(t'),E_o]\sum_{k_o,\dots k_\ell}p(E_o,k_o,\dots k_\ell)\times$$

$$\times G_f^p(t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o,E_o,k_o;\vec{q},\vec{q}')\prod_{i=1}^{\ell}G_f^d(t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o,E_o,k_i;\vec{q},\vec{q}')\,dt'$$

A G_f^p és G_f^d függvények egy-két lépésben visszavezethetők a G függvényre. Ugyanis

$$G_f^p=\left\{\int_o^\infty\int_\Omega w_f^o(E_o,\vec{\Omega}_o;E',\vec{\Omega}')\,G(t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',E';\vec{q},\vec{q}')\,dE'd\Omega'\right\}^{k_o} \qquad /5.14/$$

és

$$G_f^d=\left\{G_f^i[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o E_o;\vec{q},\vec{q}']+\exp[-(t-t')\lambda_i]\right\}^{k_i}, \qquad /5.15/$$

ahol

$$G_f^i\left[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{q},\vec{q}'\right]=\lambda_i\int_0^{t-t'}\int_0^{\infty}\int_{\Omega}\exp(-t''\lambda_i)\,w_f^i(E_o,\vec{\Omega}_o;E',\vec{\Omega}')\,x$$

$$x\,G\left[t-t'-t'',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',\vec{E}';\vec{q},\vec{q}'\right]dt''\,dE'\,d\Omega'.$$

Az (5.4), (5.5) és (5.5') összefüggések alapján az átlagos neutronsürüségre vonatkozó egyenlet a következő alakban irható fel:

$$n_f(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)=n_o(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)+\nu_o\int_0^{t}\int_0^{\infty}\int_{\Omega}Q_s^*\left[\vec{\varrho}_o(t'),E_o\right]F(t',\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,x$$

$$x\,w_s^*\left[\vec{\varrho}_o(t');E_o,\vec{\Omega}_o;E',\vec{\Omega}'\right]n_f\left(t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',E'\right)dt'\,dE'\,d\Omega'+$$

$$+\nu_o\sum_{i=o}^{\ell}\nu_i\int_0^{t}Q_f^*\left[\vec{\varrho}_o(t'),E_o\right]F(t',\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,a_i\left[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o,E_o\right]dt'$$

ahol

$$n_o(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)=\delta\left[\vec{r}-\vec{\varrho}_o(t)\right]\delta(\vec{\Omega}-\vec{\Omega}_o)\,\delta(E-E_o)\,F(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)$$

és

$$a_o\left[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o,E_o\right]=\int_0^{\infty}\int_{\Omega}w_f^o(E_o,\vec{\Omega}_o;E',\vec{\Omega}')\,n_f\left[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',E'\right]dE'\,d\Omega',$$

mig $i=1,2,\ldots,\ell$ esetben

$$a_i\left[t-t',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}_o,E_o\right]=\lambda_i\int_0^{t-t'}\int_0^{\infty}\int_{\Omega}\exp(-\lambda_i t'')\,w_f^i(E_o,\vec{\Omega}_o;E',\Omega')\,x$$

$$x\,n_f\left[t-t'-t'',\vec{\varrho}_o(t'),\vec{\Omega}',E'\right]dt'\,dE'\,d\Omega.$$

A neutronsürüség négyzetének átlagértékére pedig a következő egyenlet származtatható:

$$n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = n_0(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) + v_0 \int_0^t \int_0^\infty \int_\Omega Q_S^*[\vec{\varrho}_0(t'),E_0] F(t,\vec{r}_0,\Omega_0,E_0) \times$$

$$\times w_S^*(\vec{\varrho}_0(t'),E_0,\vec{\Omega}_0;E',\vec{\Omega}') n_2(t-t',\vec{\varrho}_0(t'),\vec{\Omega}',E')\,dt'\,dE'\,d\Omega' +$$

$$+ v_0 \int_0^t Q_f^*[\vec{\varrho}_0(t'),E_0] F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) \sum_{i=0}^{\ell} \nu_i\, b_i(t-t',\vec{\varrho}_0(t'),\vec{\Omega}_0,E_0)\,dt' +$$

$$+ v_0 \int_0^t Q_f^*[\varrho_0(t'),E_0] F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)\, C(t-t',\vec{\varrho}_0(t'),\vec{\Omega}_0,E_0)\,dt',$$

ahol b_i $(i = 0,1,\dots \ell)$ teljesen megegyezik a_i $(i = 0,1,\dots \ell)$ /6.18/ alatti kifejezésével, csak n_1 helyébe n_2 -t kell irnunk, mig

$$C = (\mu_0 - \nu_0) a_0^2 + 2\nu_0 a_0 \sum_{i=1}^{\ell} \nu_i a_i + \sum_{i=1}^{\ell} (\mu_i - \nu_i) a_i^2 + 2 \sum_{i \neq i'} \nu_i \nu_{i'} a_i a_{i'} .$$

Az (5.19) csaknem azonos szerkezetü az (5.17)-el. Az egyetlen különbség az inhomogénitásra vezető utolsó tagban van. Az (5.17) és (5.19) alatti egyenletek gyakran előnyösek az n_1 és n_2 meghatározására, mivel könnyen felhasználhatók iterációra.

Származtassuk végül az (5.17) és (5.19) egyenletekből a kinetikai egyenleteket. Kihasználva azt a körülményt, hogy $F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = F(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) F[t-t',\vec{\varrho}_0(t'),\vec{\Omega}_0,E_0]$ és néhány egyszerü átalakitást végrehajtva az (5.17)-ből azt kapjuk, hogy

$$\frac{\partial n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)}{\partial t} = Q_0^*(\vec{r}_0,E_0) v_0 n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = v_0 \vec{\Omega}_0 \cdot \operatorname{grad}_{\vec{r}_0} n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) +$$

$$+ v_0 Q_S^*(\vec{r}_0,E_0) \int_0^\infty \int_\Omega w_S^*(\vec{r}_0,E_0,\vec{\Omega}_0;E',\Omega') \times$$

$$\times n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}',E')\,dE'\,d\Omega' + v_0 Q_f^*(\vec{r}_0,E_0) \sum_{i=0}^{\ell} \nu_i a_i(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)$$

Az (5.19)-ből teljesen hasonló eljárással a következő integro-differenciálegyenlethez jutunk:

$$\frac{\partial n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)}{\partial t} + Q_0^*(\vec{r}_0,E_0)\,v_0\,n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = v_0\,\vec{\Omega}_0 \times$$

$$\times \operatorname{grad}_{\vec{r}_0} n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) + v_0 Q_s^*(\vec{r}_0,E_0)\int_0^{\infty}\int_{\Omega} w_s^*(\vec{r}_0,E_0,\vec{\Omega}_0;E',\vec{\Omega}')\times$$

$$n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}',E')\,dE'd\Omega' + v_0 Q_f^*(\vec{r}_0,E_0)\sum_{i=0}^{\ell} \nu_i b_i(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) +$$

$$+ v_0 Q_f^*(\vec{r}_0,E_0)\,C(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E).$$

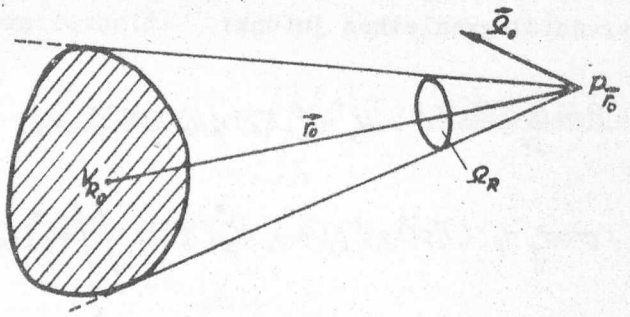
Az (5.17) és (5.19)-ből könnyen felirható az (5.21) és (5.22) kezdőfeltétele:

$$\lim_{t\to 0} n_1(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = \lim_{t\to 0} n_2(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = n_0(0,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)\,\delta(\vec{\Omega}-\vec{\Omega}_0)\,\delta(E-E_0).$$

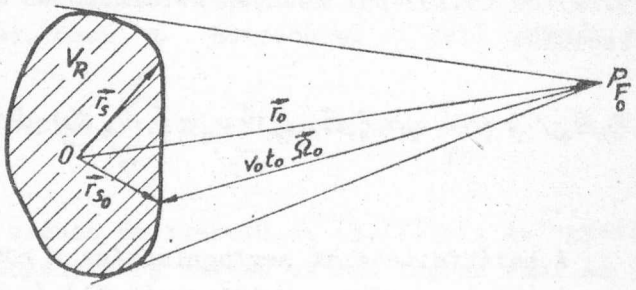
A határfeltételek megfogalmazása a következőképpen történhet. A V_r tartományon belül az (5.21) és (5.22) alatti egyenletek érvényesek, csak $Q_i^*(i=0,a,s,f)$ helyébe mindenütt $Q_i\ (i=0,a,s,f)$ irandó. A V_R tartományon kivül pedig, amint az a $Q_i^*(i=0,a,s,f)$ hatáskeresztmetszetek definiciójából következik, mind az n_1 -re, mind az n_2 -re a

$$\frac{\partial \varphi(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)}{\partial t} = v_0\,\vec{\Omega}\cdot\operatorname{grad}_{\vec{r}_0}\varphi(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0) \qquad /5.24/$$

egyenlet érvényes. Az (5.24)-re vonatkozó kezdőfeltétel megegyezik az (5.23)-al. Az (5.24) megoldásával kapcsolatban a következő megjegyzést kell tennünk. Tegyük fel, hogy az $\vec{r}_0$ vektor $P_{\vec{r}_0}$ végpontjából a V_R tartomány Ω_R térszögnyi nyilásu kupon belül



1.ábra. A V_R tartomány Ω_R térszögnyi nyilásu kupon belül látható.



2.ábra. $\vec{\Omega}_o$ az Ω_R nyilásu kupon belül esik.

látható. Ha $\vec{\Omega}_0$ ezen a kupon kivül esik, akkor az (5.24) megoldását a

$$\varphi(t,\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0,\vec{r},\vec{\Omega},E)=\delta(\vec{r}-\vec{r}_0-v_0t\vec{\Omega}_0)\delta(\vec{\Omega}-\vec{\Omega}_0)\delta(E-E_0) \qquad /5.25/$$

kifejezés adja. Ha $\vec{\Omega}_0$ az előbb definiált Ω_R nyilásu kupon belül esik, akkor a következőket mondhatjuk. Legyen t_0 az az idő, ami alatt a $P_{\vec{r}_0}$ pontból $\vec{\Omega}_0$ irányba elinduló E_0 energiáju neutron a V_R tartomány határfelületének az $\vec{r}_{S_0}$ vektor által meghatározott pontjába eljut. Könnyen belátható, hogy a $0\leq t<t_0$ időintervallumban az (5.24) megoldása is ugyancsak az (5.25) alatti kifejezéssel egyczik meg, mig minden $t\geq t_0$ időpontban $\varphi(t,\vec{r}_{S_0},\vec{\Omega}_0,E_0)=n_1(t,\vec{r}_{S_0},\vec{\Omega}_0,E_0)$

Kiegészitésül megjegyezzük, hogy

$$\lim_{\vec{r}\to\vec{r}_{S'}} n_1(t,\vec{r}_{S_0},\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r},\vec{\Omega},E)=\begin{cases} n_1(t,\vec{r}_{S_0},\vec{\Omega}_0,E_0;\vec{r}_{S'},\vec{\Omega},E) & 0\leq(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}_{S'})\leq 1 \\ & /5.26/ \\ 0 & -1\leq(\vec{\Omega}\cdot\vec{\Omega}_{S'})<0 \end{cases}$$

ahol $\vec{\Omega}_{S'}$ az $\vec{r}_{S'}$ vektor végpontjához tartozó kifele mutató normális. Az (5.26) alatti feltétel azt fejezi ki, hogy üres térből a V_R konvex tartományba nem kerülhet vissza neutron.

Ezek után világos, hogyha a V_R tartomány határfelületének $P_{\vec{r}_S}$ pontjába $t=0$ időpontban olyan neutront viszünk, amelynek $\vec{\Omega}_0$ sebesség-egységvektora a $P_{\vec{r}_S}$ ponthoz tartozó kifelé mutató $\vec{\Omega}_S$ normálissal hegyesszöget alkot, akkor ez a neutron nem indit el láncreakciót, hanem kirepül a V_R tartományt körülvevő üres térbe. Igy $n_1(t,\vec{r}_S,\vec{\Omega}_0,E_0)=0$, ha $0\leq(\vec{\Omega}_0\cdot\vec{\Omega}_S)\leq 1$ és $\varphi(t,\vec{r}_S,\vec{\Omega}_0,E_0)=\delta(\vec{r}-\vec{r}_S-v_0t\vec{\Omega}_0)\delta(\vec{\Omega}-\vec{\Omega}_0)\delta(E-E_0)$, mig ha $-1\leq(\vec{\Omega}_0\cdot\vec{\Omega}_S)<0$ akkor $n_1(t,\vec{r}_S,\vec{\Omega}_0,E_0)=\varphi(t,\vec{r}_S,\vec{\Omega}_0,E_0)$.

Legyen $Z(\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)\,dV_{\vec{r}_0}\,d\Omega_0\,dE_0$ annak a valószinüsége, hogy az $\vec{r}_0$ vektor végpontja körüli $dV_{\vec{r}_0}$ térfogatban találhatunk egy olyan neutront, amelynek energiája az (E_0,E_0+dE_0) intervallumba, sebességének iránya pedig az $\vec{\Omega}_0$ köré vont $d\Omega_0$ térszögnyi nyilásu kupba esik. A $Z(\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0,E_0)$ birtokában elvileg könnyen kiszámitható az

$$n_1(t,\vec{r},\vec{\Omega},E) = \int\int\int_{V_R\,o\,\Omega}^{\infty} Z(\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o)\,n_1(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{r},\vec{\Omega},E)\,dV_{\vec{r}_o}\,dE_o\,d\Omega \qquad /5.27/$$

tetszőleges kezdeti eloszlásra vonatkozó neutronsürüség.

Az Ussachoff [6] által bevezetett neutron értékesség pedig az

$$J(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o) = \int\int\int_{V_R\,o\,\Omega}^{\infty} n_1(t,\vec{r}_o,\vec{\Omega}_o,E_o;\vec{r},\vec{\Omega},E)\,dV_{\vec{r}}\,dE\,d\Omega \qquad /5.28/$$

kifejezéssel adható meg.

A reaktorok stochasztikus folyamatainak ezen általános elméleti alapvetése után az alkalmazásukra legközelebbi cikkünkben mutatunk néhány példát.

Irodalom

[1] R.E. Marshak, Rev. Mod. Phys. 19. 185. (1947)
A.M. Weinberg and L.C. Noderer, Theory of Neutron Chain Reactions, AECD-3471 (1951)
O. Olsson, Arkiv för Fysik, 10. 129. (1955)

[2] S. Glasstone and M.E. Edlund, The Elements of Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand, New York (1952)
H. Soodak and E.C. Campbell, Elementary Pile Theory, John Wiley and Sons, inc., New York (1950)
Selected Reference Material United States Atomic Energy Program, Vol. 2. Reactor Handbook: Physics (1955)

[3] V.V. Cavtanidze és C. Cejsvili: Zsetf 28, 3 /1955/

[4] L. Pál, Publications de l'Institut Mathématique de l'Academie des Sciences de Hongrie, 5. 41. 1956.

[5] L. Takács, Publications de l'Institut Mathématique de l'Academie des Sciences de Hongrie, 5. 55. 1956.

[6] L.N. Ussachoff, Proceedings of the International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Vol. 5.pp. 503.
[7] A. Weinberg, A. Jurn. Phys. 20. 401. (1952)
R. Ehrlich and H. Hurwitz, Nucleonics, 12.Nr.2.23. (1954)
[8] E.D. Pendlebury, Proc. Phys. Soc. A 68. 474. (1955)
[9] A. Kolmogoroff, Math. Ann. 104. 415. (1931)
W. Feller, Math. Ann. 113. 113. (1936)
[10] L. Pál, Zsetf 30, 362 /1956/
[11] L. Jánossy, Proc. Phys. Soc. A 63. 241. (1950)
L. Jánossy and H. Messel, Proc. Phys. Soc. A 63. 1101.(1950)
[12]
L. Jánossy, Acta Phys. Hung. 2. 289. (1953)
[13] L. Jánossy, Zsetf. 30, 351 /1956/
[14] V.A. Sevastjanov: Uszp. Mat. Nauk., 6, 47 /1951/

Érkezett 1956. szept. 26.

KFKI Közl., 6, 594 /1956/

A Matematikai Kutató Intézet Közleménye I./1-2.

A NEUTRONOK LELASSÍTÁSÁNAK NÉHÁNY KÉRDÉSÉRŐL

PÁL LÉNÁRD[1]

1. §.

A nagyenergiájú neutronok a lassító közeg atommagjaival ütköznek és közben energiájuk fokozatosan csökken. Tegyük fel, hogy az ütközések rugalmasak és hogy az ütköző partnerek tömegközéppontjához képest nyugvó koordináta rendszerben a szóródás izotóp [1]. Ezeknek a feltevéseknek alapján könnyen meghatározhatjuk annak a valószínűségét, hogy egyetlen ütközési aktusban egy E_0 energiájú neutron energiacsökkenése éppen akkora legyen, hogy ütközés után energiája az $(E, E + dE)$ energia-intervallumba essék. Jelöljük ezt a valószínűséget $w(E_0, E)\,dE$-vel. Mivel a neutron energiája egyetlen ütközési aktusban nem csökkenhet αE_0-nál kisebb értékre,

$$w(E_0, E)\,dE = \begin{cases} \dfrac{1}{1-\alpha}\dfrac{dE}{E_0} & \text{ha } \alpha E_0 \leqq E \leqq E_0 \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \tag{1.1}$$

Az α mennyiség a lassító közeg A atomsúlyával igen egyszerű kapcsolatban van, ugyanis

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2. \tag{1.2}$$

Az (1.1) alatti kifejezés sokkal kényelmesebben használható formába írható át, ha az

$$u = \log \frac{E_0}{E} \tag{1.3}$$

összefüggés segítségével új változót vezetünk be: Az u mennyiséget letargiának nevezzük. Értéke annál nagyobb, minél nagyobb az energiacsökkenés. Rövid számolás után azt találjuk, hogy

$$w(u)\,du = \begin{cases} \dfrac{1}{1-\alpha} e^{-u}\,du, & \text{ha } 0 \leqq u \leqq \varepsilon \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \tag{1.4}$$

[1] Központi Fizikai Kutató Intézet.

annak a valószínűsége, hogy a letargia értéke egyetlen ütközés után az $(u, u + du)$ intervallumba esik; függetlenül attól, hogy mi volt az ütközés előtt a neutron energiája. Az ε mennyiség nem más, mint az egyetlen ütközés aktusban bekövetkező maximális letargia-növekedés, azaz

$$\varepsilon = \log \frac{1}{\alpha}. \tag{1.5}$$

Tegyük fel, hogy a lassító közeg csak egyfajta atommagból áll és neutronokat nem fog be. Jelöljük $p_n(u)\,du$-val annak a valószínűségét, hogy az n-ik ütközés után a letargia az $(u, u + du)$ intervallumba esik. Mivel az egyes ütközésekhez tartozó letargia-növekedések függetlenek,

$$p_n(u) = \int_0^u p_{n-1}(u')\, w(u - u')\, du'. \tag{1.6}$$

Mivel $p_1(u) = w(u)$,

$$\Pi_n(z) = \{\omega(z)\}^n, \tag{1.7}$$

ahol

$$\Pi_n(z) = \int_0^\infty e^{-uz} p_n(u)\, du \quad \text{és} \quad \omega(z) = \int_0^\infty e^{-uz} w(u)\, du. \tag{1.8}$$

Az (1.4) alatti függvény Laplace-transzformáltjának kiszámítása segítségével a következő kifejezést kapjuk:

$$\Pi_n(z) = \left\{ \frac{1 - \alpha e^{-\varepsilon z}}{(1 - \alpha)(z + 1)} \right\}^n. \tag{1.9}$$

(1.9)-ből könnyen kiszámítjuk a $p_n(u)$ függvényt (lásd: [2]):

$$p_n(u) = \left(\frac{1}{1 - \alpha}\right)^n \frac{e^{-u}}{(n-1)!} \sum_{m=0}^{n} \binom{n}{m} (-1)^m (u - m\varepsilon)^{n-1} A(u - m\varepsilon), \tag{1.10}$$

ahol

$$A(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x \geqq 0 \\ 0, & \text{ha } x < 0. \end{cases}$$

A valószínűségszámítás centrális határeloszlástétele szerint nagy n esetén (1.10) jól közelítő a normális eloszlás sűrűségfüggvényével:

$$p_n(u) \sim \{2\pi n[\xi + (1 - \xi)(\xi - \varepsilon)]\}^{-1/2} \exp\left\{ - \frac{(u - n\xi)^2}{n[\xi + (1 - \xi)(\xi - \varepsilon)]} \right\}, \tag{1.11}$$

ahol

$$\xi = 1 + \frac{\alpha}{1 - \alpha} \log \alpha. \tag{1.12}$$

Az n-edik ütközés utáni letargia várható értékére azt az eredményt kapjuk, hogy

$$M_n = n\xi, \tag{1.13}$$

mivel minden egyes ütközésnél átlagosan ξ értékkel nő a letargia. Az n-edik ütközés utáni letargia szórásnégyzetre pedig a következő kifejezés vezethető le :

$$D_n^2 = n[\xi + (1 - \xi)(\xi - \varepsilon)] = n\left[1 - \frac{\alpha}{(1-\alpha)^2}\log^2\alpha\right]. \tag{1.14}$$

Ha a lassító közeg atomsúlya nem túl kicsi, akkor a letargia egy ütközést aktura vonatkozó növekedése és szórása kicsiny lesz. Ez a magyarázata annak, hogy nagy atomsúlyú lassító közegben a neutronok energiacsökkenését (letargia növekedését) jó közelítéssel folytonos folyamatként kezelhetjük.

Hidrogén atommagokkal történő ütközések esetében $\alpha = 0$ és így a $\Pi_n(z) = (z+1)^{-n}$ összefüggésből könnyen meghatározhatjuk a jól ismert

$$p_n(E_0, E) = \frac{\left(\log\frac{E_0}{E}\right)^{n-1}}{(n-1)!\,E_0} \tag{1.15}$$

formulát [3]. Ezeket az eredményeket korábban is jól ismerték, azonban azok a módszerek, amelyekkel ezekhez az eredményekhez jutottak, feleslegesen bonyolultak voltak. Az eddigiekben csak olyan ütközéseket vizsgáltunk, ahol az ütközések szóródásra vezetett (az elnyelés lehetőségét kizártuk).

2. §.

Könnyen általánosíthatjuk az eddigi meggondolásokat többféle atommagból álló lassító közegre is. Tegyük fel, hogy k különféle atommag tökéletes homogén keveréket alkot. Jelöljük N_i-vel az i-edik fajta atommagok számát a lassító közeg egy cm³-ében. Legyen továbbá σ_s^i az i-edik atommagra vonatkozó rugalmas szóródási hatáskeresztmetszet. Tegyük fel azt is, hogy bizonyos valószínűséggel minden atommag abszorbeál neutronokat. Jelöljük az i-edik magra vonatkozó abszorpciós hatáskeresztmetszetet σ_a^i-vel. Annak a valószínűsége, hogy egy ütközés az i magon való szóródásra vezet,

$$r_i = \frac{N_i\sigma_s^i}{N_1\sigma_t^1 + N_2\sigma_t^2 + \ldots + N_k\sigma_t^k}, \tag{2.1}$$

ahol $\sigma_t^i = \sigma_s^i + \sigma_a^i$ az úgynevezett teljes hatáskeresztmetszet. A σ_a^i abszorpciós (befogási) keresztmetszetek általában függnek a letargia értékétől. Ez a számításokat megnehezíti. Jelöljük $p_n(u)du$-val annak a valószínűségét, hogy az n-edik ütközés után a neutron letargiája az $(u, u+du)$ intervallumba esik és az első n ütközés nem vezet abszorpcióra. Természetesen

$$\int_0^\infty p_n(u)\,du < 1, \tag{2.2}$$

mivel a neutron közben abszorbeálódhat is. $p_n(u)$-ra a következő rekurziós kifejezés írható fel:

$$p_n(u) = \int_0^u p_{n-1}(u') \sum_{i=1}^{k} r_i(u')\, w_i(u-u')\, du' . \tag{2.3}$$

Abban az esetben, ha feltételezzük, hogy az r_i mennyiségek nem függnek a letargiától, (2.3) Laplace-transzformáltjára, $\Pi_n(z)$-re egyszerű kifejezés vezethető le. Azt kapjuk, hogy

$$\Pi_n(z) = \left\{ \sum_{i=1}^{k} r_i\, \omega_i(z) \right\}^n \tag{2.4}$$

3. §.

A neutronok lelassításának elméletében igen fontos szerepet játszik az ütközési sűrűség. Jelöljük az ütközési sűrűséget $f(u)$-val. $f(u)du + o(du)$ annak a valószínűsége, hogy az $(u, u+du)$ letargia intervallumból ütközés révén (legyen az akár abszorpcióra vezető ütközés is) a neutron kikerül. Stacionárius esetben, amikor is az $(u, u+du)$ letargia-intervallumba kerülő és onnan kilépő neutronok száma megegyezik, $f(u)\,du$-nak egyenlőnek kell lennie annak a valószínűségével, hogy a neutron az $(u, u+du)$ intervallumba bekerül. Ez utóbbi nyilván $\sum_{n=1}^{\infty} p_n(u)\,du$, tehát stacionárius esetben

$$f(u) = \sum_{n=1}^{k} p_n(u) . \tag{3.1}$$

Az $f(u)$ fizikai jelentése az, hogy megadja az u körüli egységnyi intervallumban egy neutron ütközéseinek átlagos számát.

Foglalkozzunk először a legegyszerűbb esettel, amikor a lassító közeg csak egyfajta atommagot tartalmaz és a neutron-befogás lehetőségét kizárjuk. Ebben az esetben könnyen előállíthatjuk $f(u)$ Laplace-transzformáltját. Azt találjuk, hogy

$$\varphi(z) = \frac{\omega(z)}{1-\omega(z)} , \tag{3.2}$$

ahol

$$\varphi(z) = \int_0^{\infty} e^{-uz} f(u)\, du . \tag{3.3}$$

Ha a lassító közeg többfajta atommagot tartalmaz és bizonyos, de állandó valószínűséggel neutronokat abszorbeál, akkor $f(u)$ Laplace-transzformáltja a következő lesz:

$$q(z) = \frac{\sum_{i=1}^{k} r_i \omega_i(z)}{1 - \sum_{i=1}^{k} r_i \omega_i(z)} \tag{3.4}$$

A legáltalánosabb esetben (3.1)-ből megkaphatjuk $f(u)$-ra a már más szerzők [4] által levezetett

$$f(u) = \sum_{i=1}^{k} r_i(0)\, w_i(u) + \int_0^u f(u') \sum_{i=1}^{k} r_i(u')\, w_i(u - u')\, du' \tag{3.5}$$

integrál-egyenletet. Ennek az egyenletnek a megoldását az $r_i(u')$ fellépte nehezíti meg. A fenti egyenletnek különböző közelítő módszerekkel történő megoldásával később foglalkozunk.

A neutronok lelassításának elméletében további fontos mennyiség a befogás elkerülésének valószínűsége. Jelöljük ezt a mennyiséget $p(u)$-val. $p(u)$ annak a valószínűsége, hogy valamilyen lassító közegben a neutron letargia az u érték fölé emelkedik, és közben maga a neutron nem abszorbeálódik. Könnyen belátható, hogy

$$p(u) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{k} \int_0^u p_{n-1}(u')\, r_i(u') \,[1 - W(u - u')]\, du' , \tag{3.6}$$

ahol

$$W_i(u) = \int_0^u w_i(u')\, du' . \tag{3.7}$$

(3.6)-ból rövid számolás után a

$$p(u) = \sum_{i=1}^{k} r_i(0)\,[1 - W_i(u)] + \int_0^u f(u') \sum_{i=1}^{k} r_i(u')\,[1 - W_i(u - u')]\, du' \tag{3.8}$$

összefüggéshez jutunk. $p(u)$ és $f(u)$ között a következő egyszerű összefüggés áll fenn:

$$\frac{dp(u)}{du} = -\left[1 - \sum_{i=1}^{k} r_i(u)\right] f(u) . \tag{3.9}$$

Ha (3.5) alapján valamilyen közelítő módszerrel meghatározzuk az $f(u)$-t akkor $p(u)$ (3.9)-ből közvetlenül kiszámítható.

Ismét tegyük fel, hogy $r_i = \text{konst.}$ $(i = 1, 2, \ldots, k)$. Ekkor $p(u)$ Laplace-transzformációval határozható meg. Felhasználva a (2.4) alatti összefüggést, rövid számolással azt találjuk, hogy

$$\Pi(z) = \frac{1}{z} \frac{\sum_{i=1}^{k} r_i [1 - \omega_i(z)]}{1 - \sum_{i=1}^{k} r_i \omega_i(z)}, \tag{3.10}$$

ahol

$$\Pi(z) = \int_0^\infty e^{-zu} p(u)\, du. \tag{3.10'}$$

Nem abszorbeáló lassító közegben $p(u) \equiv 1$. A (3.10) alatti kifejezésből nagy u értékekre a következő közelítő formula vezethető le:

$$p(u) \sim \frac{\bar{\xi}}{1 - r + \bar{\xi}} \exp\left\{ - \frac{(r-1)u}{1 - r + \bar{\xi}} \right\}, \tag{3.11}$$

ahol

$$\bar{\xi} = \sum_{i=1}^{k} r_i \xi_i \quad \text{és} \quad r = \sum_{i=1}^{k} r_i. \tag{3.11'}$$

A neutronok lelassításának elméletében gyakran használatos mennyiség a lassítási sűrűség. Ha másodpercenként Q_0 gyors neutron keletkezik, akkor stacionárius esetben másodpercenként

$$q(u) = Q_0 p(u) \tag{3.12}$$

neutron letargiája emelkedik az u érték fölé. A $q(u)$ mennyiséget nevezzük lassítási sűrűségnek.

A (3.5) alatti egyenlet egy közelítő megoldását a következő eljárással kaphatjuk meg. Tegyük fel, hogy $u \gg u_r \gg \varepsilon_{\max}$, ahol u_r az utolsó rezonancia energiához tartozó letargiaérték és $\varepsilon_{\max}$ az $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_k$ számok legnagyobbika. Ekkor a (3.5) alatti kifejezésből, ha az $u - \varepsilon_{\max} \gg u_r$ feltétel is teljesül, az

$$\left[1 - \sum_{i=1}^{k} r_i(u)\right] f(u) = - \sum_{i=1}^{k} \frac{d\,[f(u)\, r_i(u)]}{du} \xi_i \tag{3.13}$$

egyenletet kapjuk. Fejtsük ugyanis sorba a (3.5) jobboldalán álló integrál alatti kifejezésben $f(u')$-t és $r_i(u')$-t $u - u'$ hatványai szerint, és rekesszük be a sorfejtést a lineáris tagokkal, akkor a (3.13) alatti kifejezéshez jutunk. Ez a közelítés jogosult, mivel a $w_i(u - u')$ függvény tulajdonságai miatt az integrál az $f(u')$ és $r_i(u')$ függvények csupán gyengén változó szakaszára terjesztendő ki. Helyettesítsük a (3.13) kifejezést a (3.9)-be; azt kapjuk, hogy

$$p(u) - f(u) \sum_{i=1}^{k} r_i(u) \xi_i = \text{konst}. \tag{3.14}$$

A (3.14) felhasználásával nagy u értékekre WIGNER jól ismert formulája származtatható. Nevezetesen azt találjuk, hogy

$$p(u) \sim \text{konst.} \exp\left\{ - \int_{u_0}^{u} \frac{r(u') - 1}{\xi(u')} du' \right\}, \tag{3.15}$$

$$(u_0 < u_r)$$

ahol

$$r(u') = \sum_{i=1}^{k} r_i(u') \quad \text{és} \quad \xi(u') = \sum_{i=1}^{k} r_i(u') \xi_i . \tag{3.15'}$$

Az itt közölt levezetés világosan mutatja, hogy (3.15) csak olyan u értékekre érvényes, amelyek elég távol vannak a legutolsó rezonancia energiának megfelelő u_r értéktől.

4. §.

G. Placzek [4] részletesen foglalkozott a lassítási sűrűség aszimptotikus értékének meghatározásával. Az általunk közölt módszer alapján mind az aszimptotikus érték, mind pedig a nagy letargia-értékekre vonatkozó kifejezés könnyűszerrel meghatározható. Egyfajta atommagot tartalmazó, nem abszorbeáló lassító közegben az ütközési sűrűség Laplace-transzformáltját, mint ahogy már láttuk, a következőképpen állíthatjuk elő:

$$q(z) = \frac{\omega(z)}{1 - \omega(z)} . \tag{4.1}$$

Ha a $\lim_{u \to \infty} f(u)$ határérték létezik, akkor

$$\lim_{z \to 0} z q(z) = \lim_{u \to \infty} f(u) \tag{4.2}$$

tehát

$$\lim_{u \to \infty} f(u) = - \frac{1}{\omega'(z)}\Big|_{z=0} = \frac{1}{\xi} \tag{4.3}$$

szolgáltatja a végtelen nagy letargiához tartozó asszimptotikus értéket.[2] Megmutatható, hogy az $1 - \omega(z) = \Omega(z)$ egyenletnek egyetlen egy olyan gyöke van, amelynek a valós része nem negatív, éspedig $z_0 = 0$; az összes többi gyök a képzetes tengelytől balra esik. Legyen x olyan valós szám, amely nagyobb a képzetes tengelytől balra eső első gyök valós részénél. Ekkor $q(z)$ az $x \leq \Re e\, z \leq y$ szakaszon a $z_0 = 0$ pont kivételével analitikus. A $z_0 = 0$ pontban pedig $q(z)$-nek, amint az könnyen megmutatható, elsőrendű pólusa van. Doetsch [5] könyvében idézett Abel-féle tételek egyike (488. oldal 1. tétel) alkalmazható, amely szerint $u \to \infty$ esetben

$$f(u) = \frac{1}{\xi} + o(e^{-\varepsilon u}) ,$$

[2] Megjegyzendő, hogy a $\lim_{u \to \infty} f(u)$ határérték létezését külön kell bizonyítani. Lásd erre vonatkozóan: Doetsch [5], p. 458., 3. tétel.

alol $x < 0$ és

$$\frac{1}{\xi} = \lim_{z \to 0} z\,q(z),$$

illetve pontosabban

$$f(u) = \frac{1}{\xi} + a\,e^{-bu}, \tag{4.4}$$

ahol

$$a = \frac{2\xi - \varepsilon}{\varepsilon\,\xi} \quad \text{és} \quad b = \frac{2\xi}{\varepsilon(1-\xi)}. \tag{4.5}$$

A (3.4) alatti kifejezésből teljesen hasonló módszerrel vezethető le a PLACZEK által nagy nehézségek árán meghatározott aszimptotikus formula, valamint a kvázi-aszimptotikus tartományban érvényes kifejezés. Rövid számítás után azt találjuk, hogy

$$\lim_{z \to 0} q(z) = \int_0^\infty f(u)\,du = \frac{\sum_{i=1}^{k} N_i \sigma_s^i}{\sum_{i=1}^{k} N_i \sigma_a^i}, \tag{4.6}$$

illetve

$$f(u) \sim \frac{r}{1 - r + \xi} \exp\left\{ -\frac{(r-1)\,u}{1 - r + \xi} \right\}. \tag{4.7}$$

Ha abszorpció nincs, akkor $\sum_{i=1}^{k} r_i = 1$. Ebben az esetben vissza kell nyúlni a (3.4) alatti formulához, hogy az asszimptotikus értéket megkaphassuk. Rövid számolás után

$$\lim_{u \to \infty} f(u) = \frac{1}{\bar{\xi}}, \tag{4.8}$$

ahol most

$$\bar{\xi} = \frac{\sum_{i=1}^{k} N_i \sigma_s^i \xi_i}{\sum_{i=1}^{k} N_i \sigma_s}. \tag{4.8'}$$

A kvázi-aszimptotikus tartományban pedig a (4.4)-hez hasonlóan

$$f(u) = \frac{1}{\bar{\xi}} + \frac{1}{\bar{\xi}} \left\{ \frac{2(1-\bar{\xi})\,\bar{\xi}}{\sum_{i=1}^{k} r_i \varepsilon_i (1 - \xi_i)} - 1 \right\} \exp\left\{ -\frac{2\bar{\xi}\,u}{\sum_{i=1}^{k} r_i \varepsilon_i (1 - \xi_i)} \right\}. \tag{4.9}$$

Állandó hatáskeresztmetszetek esetén nem okoz különösebb nehézséget a pontos megoldás előállítása sem. Foglalkozzunk először a (3.2) alatti kifejezéssel. Egyszerű átalakítások után

$$\varphi(z) = \frac{1}{(1-\alpha)\left(z - \frac{\alpha}{1-\alpha}\right)} + \tag{4.10}$$

$$+\left\{1 + \frac{1}{(1-\alpha)\left(z - \frac{\alpha}{1-\alpha}\right)}\right\} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right)^j \frac{e^{-j\varepsilon z}}{\left(z - \frac{\alpha}{1-\alpha}\right)^j}.$$

A (4.10) alatti kifejezés inverz transzformáltját az

$$f(u) = \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \left(\frac{\alpha}{1-\alpha}\right)^j \times \tag{4.11}$$

$$\times \exp\left\{\frac{\alpha}{1-\alpha}(u - j\varepsilon)\right\} \frac{(u-j\varepsilon)^j}{j!} \Delta(u - j\varepsilon) \left\{\frac{1}{1-\alpha} + \frac{j}{u - j\varepsilon}\right\} +$$

$$+ \frac{1}{1-\alpha} \exp\left\{\frac{\alpha}{1-\alpha} u\right\}$$

végtelen sor adja meg. A valóságban (4.11) nem végtelen sor, mert minden véges u értékéhez maximálisan olyan j tartozhat, amelyre teljesül az $u \geq j\varepsilon$ kikötés. A (4.11)-ből könnyűszerrel leszármaztathatjuk az $f(u)$ függvényt a $(0, \varepsilon)$, $(0, 2\varepsilon)$, ..., $(0, j\varepsilon)$, ... intervallumokban. Így pl. a $(0, \varepsilon)$ intervallumban az

$$f(u) = \frac{1}{1-\alpha} \exp\left\{\frac{\alpha}{1-\alpha} u\right\} \tag{4.12}$$

megoldás, míg a $(0, 2\varepsilon)$ intervallumban az

$$f(u) = \frac{1}{1-\alpha} \exp\left\{\frac{\alpha}{1-\alpha} u\right\} - \alpha \exp\left\{\frac{\alpha}{1-\alpha}(u - \varepsilon)\right\} \left(u - \varepsilon + \frac{1}{1-\alpha}\right) \tag{4.13}$$

megoldás érvényes. Könnyen megmutatható, hogy $f(u)$-nak az $u = \varepsilon$ pontban elsőfajú szakadása van, ugyanis

$$f(\varepsilon + 0) - f(\varepsilon - 0) = \frac{\alpha}{1-\alpha}.$$

Az is egyszerűen belátható, hogy bármely $u = j\varepsilon$ pontban az $f(u)$ $(j+1)$-edik differenciálhányadosa szakadást mutat. Természetesen ez azzal a feltevéssel kapcsolatos, hogy monoenergetikus neutronforrásból származó neutronok lassulnak le. A valóságban a neutronforrások sohasem monoenergetikusak és így ez a jelzett tulajdonság elmosódik.

A (3.4) kifejezésből a (4.11)-hez hasonlóan kaphatjuk meg az $f(u)$-ra vonatkozó pontos megoldást, állandó hatáskeresztmetszetek esetében.

A (4.10)-ből JENSEN [6], vagy (3.5)-ből RÉNYI módszere segítségével is bebizonyítható a $\lim_{n\to\infty} f(u)$ aszimptotikus kifejezés létezése, amit fentebb az $f(u)$ Laplace-transzformált inverziója útján az előbb levezettünk.

5. §.

Számítsuk még ki annak a valószínűségét, hogy egy tetszőlegesen kiválasztott $(0, u)$ letargia-intervallumban éppen n ütközés következik be. Jelöljük ezt a valószínűséget $v_n(u)$-val. Mivel

$$\sum_{j=0}^{n-1} v_j(u) = \int_u^\infty p_n(u')\,du' \tag{5.1}$$

$v_n(u)$-ra egyszerűen a következő kifejezést írhatjuk fel:

$$v_n(u) = \int_0^u \{p_n(u') - p_{n+1}(u')\}\,du', \tag{5.2}$$

amiből pedig Laplace-transzformációval a

$$\psi_n(z) = \frac{1}{z}\{H_n(z) - H_{n+1}(z)\} \tag{5.3}$$

összefüggésre jutunk, ahol $\psi_n(z) = \int_0^\infty e^{-u} v_n(u)\,du$. Használjuk mindenekelőtt az egyfajta atommagot tartalmazó, nem abszorbeáló közegre vonatkozó (1.7) alatti eredményünket. Ekkor az (5.3)-ból

$$\psi_n(z) = \frac{1-\omega(z)}{z}\{\omega(z)\}^n \tag{5.4}$$

formulához jutunk. Többfajta atommagot tartalmazó és energiától független hatáskeresztmetszettel abszorbeáló lassító közegben ez a kifejezés a következőképpen módosul:

$$\psi_n(z) = \frac{1-\sum_{i=1}^{k} r_i\,\omega_i(z)}{z}\left\{\sum_{i=1}^{k} r_i\,\omega_i(z)\right\}^n. \tag{5.5}$$

Ha a hatáskeresztmetszetek függnek az energiától, akkor $v_n(u)$ meghatározására vissza kell nyúlnunk a (2.3) alatti kifejezésre.

Számunkra különösen fontos az n átlagértékének meghatározása, vagyis annak ismerete, hogy átlagban hány ütközés után nő a letargia u értékre.

Az n átlagértékét egyszerű módon határozhatjuk meg az (5.3) alatti egyenletből kiindulva. Vezessük be a

$$\gamma(x,z) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(z)\, e^{nx} \tag{5.6}$$

generátorfüggvényt. A $\gamma(x,z)$ függvényből az n átlagértékének Laplace-transzformáltjára az (5.5) felhasználásával a következő kifejezés vezethető le:

$$\mu(z) = \frac{1}{z} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{k} r_i\, \omega_i(z)}{1 - \sum_{i=k}^{k} r_i\, \omega_i(z)}, \tag{5.7}$$

ahol

$$\mu(z) = \int_0^{\infty} m(u)\, e^{-u}\, du$$

Ebből nagy u értékekre meghatározhatjuk az $m(u)$ aszimptotikus alakját. Mivel $m(u)$ monoton függvény, alkalmazható VAN DER POL és BREMMER [7] könyvében idézett Tauber-féle tétel (163. oldal, IV. tétel), és azt találjuk, hogy

$$\lim_{u\to\infty} m(u) = \frac{\sum_{i=1}^{k} N_i\, \sigma_s^i}{\sum_{i=1}^{k} N_i\, \sigma_a^i}, \tag{5.8}$$

illetve

$$m(u) \sim m(\infty)\left\{1 - \exp\left[-\frac{(r-1)\,u}{1-r+\bar{\xi}}\right]\right\}. \tag{5.9}$$

Ha az abszorpciótól eltekintünk, azaz felteszük, hogy $\sum_{i=1}^{k} r_i = 1$, akkor az (5.7)-ből az

$$m(u) \sim \frac{u}{\bar{\xi}} + \frac{1}{2}\left\{\frac{2\,\bar{\xi}(1-\bar{\xi}) - \sum_{i=1}^{k} r_i\, \varepsilon_i(1-\xi_i)}{\bar{\xi}^2}\right\} + \chi(u) \tag{5.10}$$

kifejezésre jutunk.

Igen figyelemreméltó az abszorbeáló lassító közegre érvényes (5.8) alatti kifejezés, amely szerint a teljes lelassuláshoz szükséges ($u \to \infty$) ütközések számának várható értéke véges.

A nem abszorbeáló lassító közegre érvényes (5.10) alatti kifejezésben fellépő, letargiától nem függő korrekció igen kicsiny és könnyen megmutat-

4*

ható, hogy a letargiától függő $\chi(u)$ korrekció pedig exponenciálisan csökken. Ez az eredmény általános formában TAKÁCS [8] egy korábbi dolgozatában megtalálható.

Annak illusztrálására, hogy kis letargia-értékek mellett az átlagos ütközési szám mennyire eltér az irodalomban használatos közelítő kifejezéstől, számítsuk ki egyfajta atommagot tartalmazó, nem abszorbeáló közegben a $(0, \varepsilon)$ intervallumban érvényes átlagos ütközések számát. Az (5.4) alatti kifejezésből azt kapjuk, hogy

$$m(u) = \frac{1}{\alpha}\left\{\exp\left(\frac{\alpha}{1-\alpha}u\right) - 1\right\} \qquad (0 \leq u \leq \varepsilon). \tag{5.11}$$

Ha u helyett ismét energiát használunk, akkor ez a kifejezés a következőképpen módosul:

$$m(E_0, E) = \frac{1}{\alpha}\left\{\left(\frac{E_0}{E}\right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} - 1\right\} \qquad (E_0 \geq E \geq \alpha E_0). \tag{5.12}$$

Az ütközési szám szórásnégyzetére abszorbeáló lassító közeg esetében az (5.5) alatti kifejezés felhasználásával a következő aszimptotikus formula vezethető le:

$$\lim S^2(u) = A(A+1) = S^2(\infty) \tag{5.13}$$

illetve nagy u értékekre

$$S^2(u) \sim A(A+1)\left\{1 - \exp\left|-\frac{(r-1)u}{1-r+\xi}\right|\right\} - 2A^2\frac{(r-1)u}{1-r+\xi}\exp\left|-\frac{(r-1)u}{1-r+\xi}\right|, \tag{5.14}$$

ahol

$$A = \frac{\sum_{i=1}^{k} N_i \sigma_s^i}{\sum_{i=1}^{k} N_i \sigma_a^i}. \tag{5.14'}$$

Nem abszorbeáló közegben pedig a korrekciók figyelembevétele nélkül a következő aszimptotikus kifejezés származtatható:

$$S^2(u) \sim \frac{u^2}{\xi^2}. \tag{5.15}$$

Szembetűnő a szórás magas értéke.

IRODALOM

[1] S. GLASSTONE—M. E. EDLUND: *The elements of nuclear reactor theory.* van Nostrand, New York, 1952.

[2] R. E. MARSHAK: „Theory of the slowing down of neutrons by elastic collision with atomic nuclei." *Review of Modern Physics* **19** (1947) 185–238.

[3] Л. Арцимович—И. Курчатов и другие, *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики* **5** (1935) 659–664.

[4] G. Placzek: „On the theory of the slowing down of neutrons in heavy substances." *Physical Review* **69** (1946) 423—438.
[5] G. Doetsch: *Handbuch der Laplace-Transformation.* Birkhäuser, Basel, 1950.
[6] J. L. W. V. Jensen: „Sur une identité d'Abel et sur d'autres formules analogues." *Acta Mathematica* **26** (1902) 307—318.
[7] Б. ван дер Пол — Х. Бреммер: *Операционное исчисление на основе двухстороннего преобразования Лапласа.* Издательство Иностранной Литературы, Москва, 1952.
[8] L. Takács: „Egy új módszer rekurrens sztochasztikus folyamatok tárgyalására." *A Magyar Tudományos Akadémia Alkalmazott Matematikai Intézetének Közleményei* **2** (1955) 135—151.

(Beérkezett. 1956. II. 3.)

О НЕКОТОРЫХ ВОПРОСАХ ЗАМЕДЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ

Л. ПАЛ

Резюме

Применение хорошо обоснованных теоретико-вероятностных методов для изучения процессов замедления нейтронов существенно облегчает решение целого ряда важных проблем. В данной работе выводятся точные выражения для плотности столкновений и для вероятности избежать резонансного захвата нейтронов при стационарных условиях.

Прежде всего определим вероятность того, что летаргия нейтрона (1.3) после n столкновений находится в интервале $(u, u+du)$. Обозначим эту вероятность через $p_n(u)du$ (1.6). Выражение (1.10) является точным решением задачи в случае неповлощающей однородной замедляющей среды. (В дальнейшем однородной будем называть такую среду, которая состоит лишь из одного типа атомов. Неоднородная среда, наоборот, состоит из гомогенной смеси разного типа атомов.) Формулы (1.13) и (1.14) определяют среднее значение и дисперсию летаргии после n столкновений.

Обобщение выражения (1.16) для поглощающей и неоднородной замедляющей среды дается уравнением (2.3), решение которого в случае независящего от энергии сечения поглощения легко может быть найдено с помощью преобразования Лапласа (2.4).

Для определения плотности столкновений используем выражение (3.1) и после несложных операций выводим для $f(u)$ самое общее уравнение (3.5), решение которого в некоторых частных случаях легко получается. Общее решение уравнение (3.5) трудно получить, но при определенных условиях из (3.5) может быть выведено приближенное уравнение (3.13), решение которого дается формулой (3.14).

Уравнением (3.9) устанавливается связь между плотностью столкновений и вероятностью избежать резонансного захвата. (3.10) определяет вероятность избежать резонансного захвата в случае поглощающей и неоднородной среды при условии, что сечения поглощения постоянны, а (3.15) в более общем случае.

Характер функции плотности столкновений для больших значений летаргии имеет важное значение для целого ряда вопросов. Используя некоторые теоремы типа Таубера и Абеля, определили ассимптотическое поведение плотности столкновений в разных случаях (4.4), (4.7) и (4.9). В самом простейшем случае (случай однородной неповлощающей среды) выписали точное выражение для $f(u)$ в любом интервале $(0, u)$.

В литературе часто дается неправильный метод для вычисления среднего числа столкновений, необходимого для увеличения летаргии на определенную величину. Выражение (5.2) является вероятностью того, что в интервале летаргии $(0, u)$ происходит n столкновений. Вводя производящую функцию (5.6), в простых случаях легко может быть вычислено среднее значение числа столкновений в интервале $(0, u)$ при больших значениях u. В случае поглощающей среды выражение (5.9), для неповлощающей среды (5.10) успешно могут быть применены для определения среднего значения числа столкновений. Дисперсия определяется формулами (5.14) и (5.15).

SOME PROBLEMS CONCERNING THE SLOWING DOWN OF NEUTRONS

L. PÁL

Summary

The process of slowing down of neutrons may be simply treated in the stationary case by means of well founded methods of the calculus of probability. In the following expressions for collision density and resonance escape probability will be deduced which are more accurate than those given up to now in the literature.

To start with, the lethargy u of a neutron is defined by (1.3), and in (1.5) the maximum of the increase in lethargy of the neutron during a collision, denoted by ε is defined. Subsequently in assuming the collisions to be elastic and that scattering with respect to the center of the mass system may to be isotropic, the probability, represented by $w(u)\,du$ that the neutron lethargy increases in course of a single collision by a value lying in the letarghy interval $(u, u + du)$ is given.

Let us denote by $p_n(u)\,du$ the probability that the lethargy of a neutron fall in the interval $(u, u + du)$ after the n-th collision. We assume first that the moderator is homogeneous and non-absorbing. After having found the precise expression (1.10 of $p_n(u)$, an approximate value (1.11) of $p_n(u)$ for great values of n is given. Subsequently the average change in lethargy (1.13) and dispersion (1.14) for n collisions is calculated.

Let $r_i(u)$ be the probability (2.1) that the neutron will not be absorbed when colliding with the i--th nucleus. [In (2.1) σ_a^i is the cross section for absorption of the nucleus of type i and σ_t^i is the total cross section of the nucleus of type i; the number of the nuclei of type i in 1 cm^3 is represented by N_i.] In § 2. a general recursion formula (2.3) is given for $p_n(u)$ with help of the r_i.

In §. 3. the collision density $f(u)$ is introduced. The general relation between $f(u)$ and $p_n(u)$ is given by (3.1). The Laplace-transform of $f(u)$ is calculated postulating homogeneous, non-absorbing media (3.2) as well as heterogeneous media with an absorption cross section independent of the energy (3.4). From (3.1) the known integral equation for $f(u)$ is obtained. Further a relation is given between the resonance escape probability represented by $p(u)$ and $f(u)$ (3.9) and assuming that r_i = constant, we obtain the Laplacetransform of $p(u)$ (3.10). From (3.10) we obtain (3.11) for great values of u.

In §. 4. the asymptotic and quasi-asymptotic value of $f(u)$ is given by using (3.2) and (3.4) with the postulates mentioned when deriving (3.2) and (3.4).

For heterogeneous, non-absorbing media the asymptotic and quasi-asymptotic values of $f(u)$ are given by (4.8) and (4.9), Subsequently the precise value of $f(u)$ is also given by means of (3.2) for homogeneous, non-absorbing media (4.11), and it is shown that the function obtained and its derivatives possess the known discontinuities.

In §. 5. the probability that in the lethargy interval $(0, u)$ exactly n collisions occur (5.2) which is denoted by $v_n(u)$ is considered. The Laplace-transform of $v_n(u)$ is given by (5.3) for the general case and by (5.4) with respect to homogeneous, nonabsorbing media; finally (5.5) gives the transform of the function when assuming heterogeneous moderators. If r_i = constant, we can define by using (5.5) the Laplace-transform of the average number of collisions necessary to attain the value u of lethargy concerning the moderator in question. Thus we may calculate the asymptotic (5.8) and quasi-asymptotic value (5.9) of the mean. (5.10) gives the average asymptotic value for heterogeneous non-absorbing media. (5.11) gives also the average value looked for but referring to homogeneous, non-absorbing media in the lethargy range $0 \leq u \leq \varepsilon$.

Finally the asymptotic value of the dispersion of the number of collisions necessary to attain the lethargy u is given first for heterogeneous, absorbing moderators (5.14). then for heterogeneous non-absorbing media.

A KOBALT DIFFERENCIÁLIS SZUSZCEPTIBILITÁSÁNAK HŐMÉRSÉKLETTŐL VALÓ FÜGGÉSE ERŐS MÁGNESES TEREKBEN*

PÁL LÉNÁRD és TARNÓCZI TIVADAR
Magyar Tudományos Akadémia Központi Fizikai Kutató Intézete

A kobalt differenciális szuszceptibilitásának hőmérséklettől való függésére erős mágneses terekben sajátos kettős maximummal rendelkező görbét kaptunk, amelynek különböző szakaszait a forgási folyamatok elmélete alapján pontosan értelmeztük. A két maximum közötti minimumhoz tartozó hőmérsékletet Sucksmith és Thompson [13] egykristály-okra vonatkozó mérési adatai alapján meghatároztuk és a polikristályos próbatest differenciális szuszceptibilitásának kísérletileg meghatározott minimumához tartozó hőmérséklettel egybevetettük s igen jó egyezést találtunk. Ugyancsak megvizsgáltuk az $\alpha \rightleftarrows \beta$ fázis-átalakulásnak a differenciális szuszceptibilitásra gyakorolt befolyását.

Bevezetés

A mágneses telítettséghez közeli állapotban a mágnesezési görbe alakját külső és belső mechanikai feszültségektől mentes polikristályos anyagokban csaknem kizárólag a mágneses anizotrópia határozza meg. Ennek alapján nyilvánvaló, hogy erős mágneses terekben a differenciális szuszceptibilitás is a legszorosabb kapcsolatban van a mágneses anizotrópiával. A differenciális szuszceptibilitás hőmérséklettől való függését a Curie-hőmérsékletnél lényegesen alacsonyabb hőmérsékleti tartományban várhatóan az anizotrópia állandók hőmérséklettől való függése határozza meg, mivel általában az anizotrópia állandók sokkal nagyobb mértékben változnak a hőmérséklettel, mint a telítési mágneses intenzitás. Ilyen módon a differenciális szuszceptibilitás hőmérséklettől való függésének erős mágneses terekben való tanulmányozása értékes felvilágosítással szolgálhat a mágneses anizotrópia állandók hőmérséklettől való függésére. Bár jóllehet, hogy a mágneses anizotrópia állandókat és azok hőmérséklettől való függését a legmegbízhatóbb módon egykristályokon végzett mérések alapján határozhatjuk meg, mégis sok esetben hasznos polikristályos anyagokon végzett mérésekkel kiegészíteni az egykristályokon végzett méréseket. A köbös szerkezetű ferromágneses anyagok esetében a példák egész sora [1] bizonyítja, hogy az egykristályokon mért anizotrópia állandókkal jól megegyeznek a polikristályos anyagokon mért anizotrópia állandók.

* Érkezett 1955. XII. 29

Míg a mágneses telítettséghez közeli állapotban lévő köbös szerkezetű polikristályos anyagok (vas, nikkel és ötvözeteik) differenciális szuszceptibilitásának térerősségtől és hőmérséklettől való függésével a szerzők egész sora foglalkozott, addig a hexagonális szerkezetű kobaltra vonatkozóan jóval kevesebb közleményt találunk. Bloch [2], Weiss és Forrer [3], valamint Allen és Constant [4] a kobalt telítési mágneses intenzitásának hőmérséklettől való függését tanulmányozták. Azonban méréseik nem tekinthetők megbízhatóknak, amint erre Myers és Sucksmith [5] rámutattak, mivel a kobalt mágneses tulajdonságai nagymértékben függnek az átalakulási hőmérséklet közelében alkalmazott hőkezeléstől. Myers és Sucksmith [5] Edwards és Lipson [6], valamint Troiano és Tokich [7] vizsgálatai alapján célszerűbbnek látták a hexagonális szerkezetű kobalt telítési mágneses intenzitásának pontos értékét egykristályon meghatározni. Edwards és Lipson [6] röntgenstrukturanalitikai módszerekkel kimutatták, hogy szobahőmérsékleten is a hexagonális fázisban lapcentrált köbös szerkezetű zárványok vannak jelen, amelyek koncentrációja a hőkezelés körülményeitől függ.

Myers és Sucksmith [5] előtt kobalt egykristályon Kaya [8], valamint Honda és Masumoto [9] végeztek méréseket. Az általuk meghatározott mágnesezési görbék hőmérséklettől való függése alapján határozta meg Bozorth [10] a hexagonális szerkezetű kobalt első és második anizotrópia állandóinak hőmérséklettől való függését. 1936-ban Nishiyama [11] vizsgálatai alapján tisztázódott a kobalt $\alpha \rightleftarrows \beta$ allotróp átalakulásának mechanizmusa. Nishiyama [11] megállapította, hogy a lapcentrált köbös módosulat (111) síkja a hexagonális módosulat (0001) bázis-síkjával, míg az $[1\bar{1}0]$ irány az $[11\bar{2}0]$ iránnyal képződik párhuzamosan. Az $\alpha \rightarrow \beta$ átalakulás során egy hexagonális kristályból csak egy lapcentrált köbös kristály képződhet, míg a fordított folyamatnál minden lapcentrált kristályból négy különböző, de jól definiált irányítottságú kristályt kaphatunk. Azonban az egy köbös kristályból keletkezett négy hexagonális kristály mindig egy köbös kristállyá alakul vissza. Nishiyama [11] megállapításait később Kehrer és Leidheiser [12] is igazolták. Ilyen módon hexagonális szerkezetű kobalt egykristályból ismert irányítottságú köbös szerkezetű kristály állítható elő, amely akárhányszori fázisátalakulás után is reprodukálhatóan képződik. Sucksmith és Thompson [13] kihasználták ezt a lehetőséget és először határozták meg a köbös szerkezetű kobalt anizotrópia állandóinak hőmérséklettől való függését.

Méréseik szerint a köbös szerkezetű kobalt anizotrópia állandói egy nagyságrenddel kisebbek, mint a hexagonális szerkezetű kobalté és meglepő módon a második anizotrópia állandó abszolút értéke nagyobb, mint az elsőé. Ennek alapján várható, hogy a polikristályos kobalt differenciális szuszceptibilitása erős mágneses térben a fázisátalakulás környezetében erősen csökken,

mivel a nagyságrendjét megszabó egyik legfontosabb tényező, a mágneses anizotrópia is jelentősen csökken.

Már Honda és Masumoto [9] mérései alapján ismeretes volt, hogy hexagonális fázisban 220 C° körül az első anizotrópia állandó előjelet vált, míg a második lassan változva állandóan pozitív marad. Ennek alapján várható, hogy 220 C°-nál valamivel magasabb hőmérsékleten a polikristályos kobalt differenciális szuszceptibilitása erős minimumot mutat.

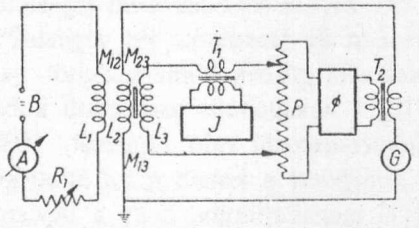
Vizsgálatainknak az volt a célja, hogy ezeknek a jelenségeknek tanulmányozásával kiegészítsük a kobalt mágneses tulajdonságaira vonatkozó ismereteinket.

Mérési módszer

A differenciális szuszceptibilitás meghatározására jól használható a Czerlinsky [14] által javasolt ballisztikus módszer. Azonban kis próbatestek esetében, különösen magas hőmérsékleten, a ballisztikus módszer felette nehézkessé és érzéketlenné válik. (10^{-2}—10^{-3} G/Oe szuszceptibilitásértékeknek 1—10% pontossággal való meghatározására vékony próbatestek esetében a ballisztikus módszer gyakorlatilag már nem használható.)

Balsova [15] váltakozó áramú indukciómérő híd alkalmazását javasolta. Eljárása azonban néhány elvi hibát tartalmaz, amint erre a szerzők egyike [16] rámutatott és így pontos mérésekre az általa javasolt módszer nem használható.

Az általunk használt mérési eljárás lényegében az üres és a próbatesttel megtöltött mérőtekercsben indukált feszültségek amplitudóinak nagypontosságú összehasonlításán alapszik. Az 1. ábrán látható a mérőberendezés elvi kapcsolási rajza.

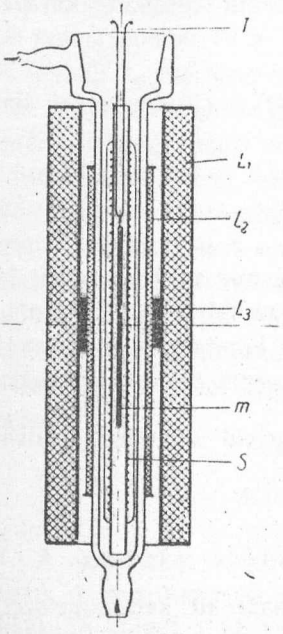


1. ábra. A mérőberendezés elvi kapcsolási rajza. *B* akkumulátortelep, L_1, L_2 szolenoi-dok, L_3 mérőtekercs, T_1, T_2 transzformátorok, Φ fázistoló-híd, *P* potenciométer, *I* nullindikátor, *G* generátor, R_1 szabályozó ellenállás, *A* amperměrő; M_{12}, M_{13}, M_{23} az L_1, L_2 és L_3 a tekercsek induktív csatolását jelölik

A *B*-akkumulátortelepről táplált L_1 szolenoid az állandó mágneses teret (*H*), míg a *G* hanggenerátorról (EMG tip. 1113) táplált L_2 szolenoid a váltakozó mágneses teret (*h*) szolgáltatta. A váltakozó mágneses tér maximális amplitudóját úgy választottuk meg, hogy kb. 1%-a volt az állandó mágneses tér intenzitásának. A T_2 transzformátor a Φ fázistoló hídon [17] a *P* tisztán ohmos ellenállású potenciométerre adja az L_3 mérőtekercsben indukált feszültség kompenzálásához szükséges összehasonlító feszültséget. Az L_3 tekercs árammentességét a T_1 transzformátoron át csatlakozó *I* nullindikátor jelzi. A nullindikátor a *G* generátor frekvenciájára (332 Hz) hangolt nagy erősítésű ($k = 10^6$) és nagy szelektivitású

(± 9 Hz) erősítő. A G generátor frekvenciáját úgy választottuk meg, hogy a mágnesesen majdnem telített állapotban lévő próbatest szkineffektusa által okozott hiba elhanyagolható legyen. Megmutattuk [16], hogy az általunk használt 4 mm átmérőjű henger alakú próbatestek esetében kb. 500 Hz-ig az okozott hiba jelentéktelen.

Az L_3 10 mm magas, 21 mm átmérőjű és $n_3 = 600$ menetszámú mérőtekercset a 80 mm hosszú és 4 mm átmérőjű próbatest középső részén helyeztük el. Ilyen módon a lemágnesező tér hatását a ballisztikus lemágnesező tényező segítségével korrigálhattuk. Mivel a mérőtekercs nem illeszkedett szorosan a mérendő próbatesthez, szükségesnek mutatkozott a próbatest és a mérőtekercs közötti légrés hatásának ellenőrzése. Az ellenőrző mérések azt bizonyították, hogy az általunk használt geometriai méretek mellett a légrés hatása elhanyagolható. A próbatestet 5 mm belső átmérőjű, mintegy 30 cm hosszú porceláncső belsejében vékony wolfram-huzallal függesztettük fel, míg magára a porceláncsőre mintegy 20 cm szakaszon 0,1 mm átmérőjű platinahuzalból bifiláris fűtőtekercset rögzítettünk. A próbatestet a felmelegítésére szolgáló kályhával együtt sajátosan kiképzett kettősfalú üvegedénybe helyeztük, amelyre kívülről 180 mm hosszú szakaszon a váltakozó mágneses teret szolgáltató $n_2 = 838$ menetszámú L_2 szolenoidot tekercseltük fel. Az L_3 mérőtekercset az L_2 szolenoidtól gondosan szigetelve úgy helyeztük el, hogy a középpontja az L_1 és L_2 tekercsek középpontjával egybeessen. A 2. ábrán láthatjuk az L_2 szolenoid, az L_3 mérőtekercs, az S kályha és az m próbatest elrendezését. Az S kályha és a kettősfalú üvegedény belső fala közötti teret hőszigetelő anyaggal töltöttük ki, az L_2 és L_3 tekercseket pedig az üvegedényen átáramoltatott vízzel hűtöttük. A próbatest hőmérsékletét Pt/Pt-Rh termopárral mértük. A termopár behelyezésénél gondoskodtunk arról, hogy forrasztási pontja a próbatesttel jól érintkezzen. Az S kályhát wolfram-diodás feszültségstabilizátorról (tip. Tr.—500) tápláltuk.



2 ábra. A próbatest és a tekercsek elrendezésének sémája. L_1, L_2 szolenoidok, L_3 mérőtekercs, S kályha, T termopár, m próbatest

Az L_1 szolenoid mintegy 80 mm szakaszon 2%-nál kisebb inhomogénítással rendelkező állandó mágneses teret szolgáltatott. A szolenoid hűtőrendszere biztosította, hogy maximálisan 10 000 Oe térerősséget kaphassunk. A szolenoid műszaki részleteire vonatkozó adatokat a szerzők egyike [18] korábban ismertette.

Legyen a mérőtekercsbe helyezett henger alakú próbatest keresztmetszete q, a mérőtekercsé pedig Q, legyen továbbá a mérőtekercs menetszáma $n_3 = n$. Próbatest nélkül

$$E_0 = -nQ\frac{dh}{dt}, \qquad (1)$$

míg próbatesttel

$$E_1 = -n\left\{Q\frac{dh'}{dt} + 4\pi q\frac{dI}{dt}\right\} \qquad (2)$$

feszültség indukálódik az L_3 mérőtekercsben. A (2) alatti kifejezésben $I = I(H+h')$ a mágneses intenzitás. A $h' \leq h$, mivel a próbatest még majdnem telített állapotban is megnöveli az M_{12} kölcsönös indukciós együtthatót (lásd az 1. ábrát), ami pedig arra vezet, hogy az L_1-ben indukált áram mágneses tere, amely csökkenti az L_2 tekercs mágneses terét, megnő. Ugyancsak megnő az L_2 tekercs önindukciós együtthatója is, ami állandó generátorfeszültség mellett az L_2 tekercsen átfolyó áram csökkenésére vezet. Az MTA Matematikai Intézetében Freud Géza [19] számításokat végzett a várható effektusra vonatkozóan és azt találta, hogy az általunk megvalósított geometriai viszonyok mellett $h \sim h'$.

Mivel $\frac{dI}{dt} = \frac{dI}{d(H+h)} \frac{dh}{dt} \sim \chi(H) \frac{dh}{dt}$, az (1) és (2) egyenletek alapján felírhatjuk, hogy

$$\chi(H) = \frac{Q}{4\pi q} \frac{E_1 - E_0}{E_0}. \tag{3}$$

Látható, hogy az E_1, E_0 feszültségeknek egymáshoz való viszonyát kell csupán nagy pontossággal mérni, ami jóval egyszerűbb feladat, mint az abszolút feszültségmérés. Annak ellenére, hogy ez a könnyebbség kihasználható, kis χ értékek pontos mérésével kapcsolatban mégis szigorú követelményeket kell támasztanunk a $\frac{\Delta E}{E}$ relatív hiba nagyságával szemben. Nyilvánvaló, hogy a

$$\frac{\Delta E}{E} \leq \frac{4\pi q \chi}{Q} \tag{4}$$

egyenlőtlenségnek teljesülnie kell, ami az általunk használt keresztmetszetek mellett pl. $\chi \sim 10^{-3}$ esetben azt jelenti, hogy $\frac{\Delta E}{E}$-nek 10^{-3}-nál kisebbnek kell lennie. Ebből világosan következik, hogy gondosan ellenőrizni kell azokat a tényezőket, amelyek az E_1 és E_0 feszültségek viszonyának mérési pontosságát csökkentik.

Az előzőkben említett hibalehetőségeken kívül nagy figyelmet kell fordítani a Φ fázistoló egység által okozott hibára is. Igen körülményes olyan fázistoló egységet megvalósítani, amely alkalmas a fázisszög nagymértékű amplitudó-független szabályozására. Ha az E_0 feszültség mérésétől az E_1-re való áttérésnél nagy fázisszög változtatásra volna szükség, akkor az $\frac{E_1}{E_0}$ viszony meghatározásánál jelentős hibát követnénk el. Szerencsére a mi esetünkben nem volt szükség a fázisszög nagymértékű megváltoztatására, mivel erős polarizáló mágneses térben a próbatest alig befolyásolja az L_3 tekercsben indukált feszültség fázisát. Ellenőrző mérésekkel igazoltuk, hogy a méréseinknél szükséges fázistolások 0,1%-nál mindig kisebb amplitudó hibát okoztak.

Nagy figyelmet fordítottunk arra is, hogy az L_2 tekercs ohmos ellenállásának hőmérséklettől való függését minimálisra csökkentsük, mivel a véletlenszerű ellenállás-változások nagyon megnehezítik a mérést. Az L_2 tekercset éppen ezért 0,3 mm átmérőjű manganinhuzalból tekercseltük. Az L_2 tekercset és a T_2 összehasonlító feszültséget szolgáltató transzformátort wolframdiódás feszültségstabilizátorról (tip. Tr.-500) táplált hanggenerátorhoz kapcsoltuk, hogy a feszültségingadozásokat minimálisra csökkenthessük. Végeredményben biztosítottuk, hogy 10^{-3} G/Oe nagyságrendű differenciális szuszceptibilitás értékeket $\pm 10\%$ pontossággal nehézség nélkül határozhattunk meg.

A mérés menete a következő volt. Mindenekelőtt a H polarizáló mágneses tér értékét állítottuk be az R_1 szabályozó ellenállás segítségével, majd a P potenciométer és a Φ fázistoló egység állításával kompenzáltuk a próbatest nélküli L_3 mérőtekercsben indukált E_0 feszültséget. Ezután behelyeztük az m próbatestet az L_3 mérőtekercsbe és megvárva, amíg az S kályhában a hőmérsékleti egyensúly beáll, ismét kompenzáltuk az L_3 tekercsben indukált E_1 feszültséget. Mivel feltételeztük, hogy a Φ fázistoló egység alkalmas amplitudó-független fázisszabályozásra, a P potenciométeren az E_0 és E_1 feszültségek abszolút értékét olvashattuk le tetszőleges egységekben. Újabb hőmérsékletekre való áttérés után gondosan megvártuk a hőmérsékleti egyensúly beállását. Egy teljes hőmérsékleti ciklus befejezése után újabb polarizáló mágneses teret állítottunk be és a próbatest nélküli mérőtekercsben indukált E_0 feszültséget újból meghatározva, az előzőkben leírt módon folytattuk a mérést.

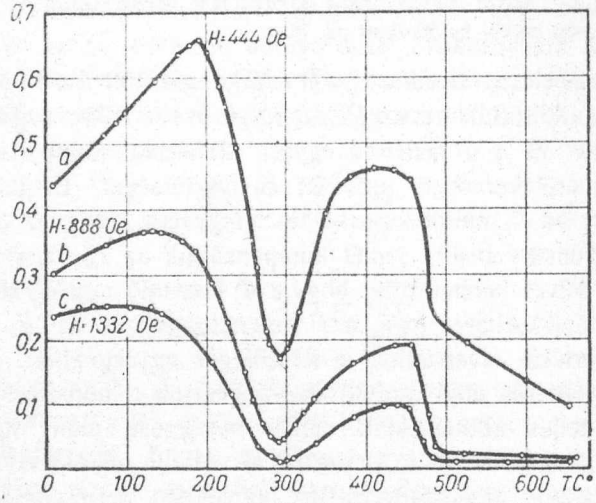
Mérési eredmények és értelmezésük

A méréseket elektrolitikus úton tisztított kobaltból készített 80 mm hosszú, 4 mm átmérőjű próbatesten végeztük el. A kémiai analízis szerint a felhasznált kobalt a következő szennyezéseket tartalmazta: 0,08% C, 0,27% Fe (Cu és Ni nem volt kimutatható).

A mérések előtt a próbatestet 1000 C°-on vákuumban 2 órán át izzítottuk, majd lassan lehűtöttük. Ennek a hőkezelésnek egyrészt az volt a célja, hogy a próbatestet a mechanikai feszültségektől megszabadítsa, másrészt pedig az, hogy a hexagonális fázis metastabilis köbös szerkezetű „zárványait" minimálisra csökkentse.

Az így előkészített próbatest differenciális szuszceptibilitásának hőmérséklettől való függését mutatják a 3. ábra *a*, *b* és *c* görbéi különböző térerősségek mellett. A görbéket alacsonyabb hőmérsékletről magasabb hőmérséklet felé egyensúlyi állapotokon át haladva vettük fel. Látható, hogy a differenciális szuszceptibilitás 290—300 C° körül jól kifejezett lokális minimumot mutat, majd 450 C° közelében hirtelen egészen kis értékre esik. Különösen erősebb terekben éles a 450 C° közelében bekövetkező szuszceptibili-

tás-csökkenés. A minimumhoz tartozó hőmérséklet értéke láthatóan csak igen gyengén függ a polarizáló mágneses tér erősségétől. Az *a* görbe kezdőszakasza világosan mutatja, hogy a szuszceptibilitás mintegy 195 C°-ig nő. Az első maximumhoz tartozó hőmérséklet növekvő térerősséggel csökken és amint a 3. ábrán látható, maga a maximum is elmosódottabbá válik.



3. ábra. A kobalt differenciális szuszceptibilitásának hőmérséklettől való függése különböző térerősségek mellett

A kobalt differenciális szuszceptibilitásának eme sajátos hőmérséklet-függését könnyen megmagyarázhatjuk, ha meggondoljuk, hogy a mágnesezés mechanizmusában az általunk alkalmazott térerősség mellett a forgási folyamatok játsszák a főszerepet. Tételezzük fel, hogy próbatestünk mentes volt minden belső és külső mechanikai feszültségtől. Jelöljük $K_1(T)$-vel a kobalt első anizotrópia állandóját és $I_s(T)$-vel telítési mágneses intenzitását T hőmérsékleten. Elegendő nagy mágneses tér (H) esetében, amely mellett azonban még a $\frac{HI_s}{K_1} < 1$ feltétel teljesül, a forgási folyamatokhoz tartozó differenciális szuszceptibilitás Gans [20] szerint a következőképpen írható fel:

$$\chi \simeq \frac{I_s^2}{3K_1}\left\{1-\frac{9}{16}\frac{I_s}{K_1}H+\frac{3}{10}\left(1-4\frac{K_2}{K_1}\right)\frac{I_s^2}{K_1^2}H^2-\cdots\right\}, \qquad (5)$$

ahol $K_2(T)$ a kobalt második anizotrópia állandója. Mivel az $\frac{I_s(T)}{K_1(T)}$ hányados az abszolút zérus foktól mintegy 150—200 C°-ig 10^{-3} nagyságrendű, a H értékét még a $\frac{HI_s}{K_1} < 1$ feltétel mellett is elég nagynak választhatjuk ahhoz,

hogy a mágnesezési folyamatok közül a forgási folyamatoké legyen az alapvető szerep. Mivel a hőmérséklet növekedésével $K_1(T)$ sokkal gyorsabban csökken, mint $I_s(T)$,* a differenciális szuszceptibilitásnak adott mágnesező tér mellett a hőmérséklet emelkedésével növekednie kell mindaddig, amíg a $\frac{HI_s}{K_1} < 1$ feltétel teljesül. Az *a* és *b* görbéken különösen jól látható a kezdeti emelkedő szakasz. A térerősség növekedésével az emelkedő szakasz egyre alacsonyabb hőmérsékleti tartományba tolódik el. A 3. ábrán jól látható ez az eltolódás.

Elég erős mágneses térben, vagy megfelelően magas hőmérsékleten a $\frac{HI_s}{K_1} < 1$ feltétel helyett éppen az ellenkezője, a $\frac{HI_s}{K_1} > 1$ feltétel teljesül. Ebben az esetben a differenciális szuszceptibilitás, amint többek között a szerzők egyike [21] megmutatta, a következőképpen írható fel:

$$\chi = 2I_s^{-1}\left(\frac{4}{15}K_1^2 + \frac{64}{105}K_1K_2 + \frac{128}{315}K_2^2\right)H^{-3} + \tag{6}$$

$$+3I_s^{-2}\left(\frac{16}{105}K_1^3 + \frac{128}{315}K_1^2K_2 + \frac{512}{1155}K_1K_2^2 + \frac{8192}{45045}K_2^3\right)H^{-4} + 0(H^{-5}).$$

Ez a kifejezés természetesen csak mechanikai feszültségektől mentes próbatestre érvényes azzal a kikötéssel, hogy a kristályszemcsék közötti mágneses kölcsönhatás elhanyagolható és a valódi mágnesezés szuszceptibilitása (a parafolyamat szuszceptibilitása) rendkívül kicsiny. Ezek közül a feltételek közül a leginkább vitatható a kristályszemcsék közötti mágneses kölcsönhatásra vonatkozó kikötés, azonban eredményeink értelmezését ez a kérdés nem befolyásolja. A (6) alatti kifejezésből rögtön következik, hogy a χ csökken, ha a K_1 és K_2 anizotrópia állandók abszolút értéke a hőmérséklet növekedésével csökken. A 3. ábrán látható görbéknek az első maximum utáni erősen csökkenő szakasza minden bizonnyal ezzel függ össze.

A kobalt egykristályokra vonatkozó mérésekből ismeretes, hogy a K_1 állandó 260 C° körül előjelet vált, míg K_2 a hőmérséklet növekedésével lassan csökken, de pozitív előjelét megtartja. Tegyük fel, hogy 250—350 C° közötti tartományban a (6) alatti kifejezésnek már az első tagja jó közelítést jelent, ha a mágneses tér elég erős. Könnyen belátható, hogy az

$$f(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0 \tag{7}$$

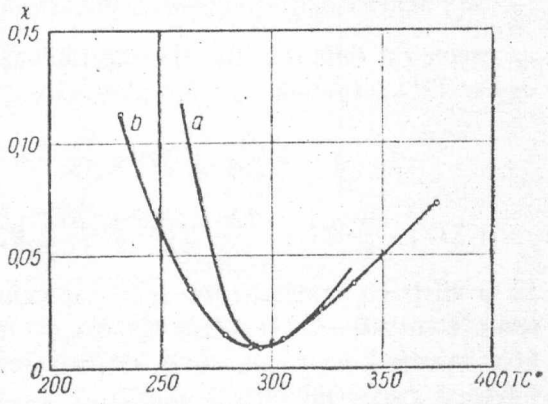
függvény, ahol $x = \frac{K_1}{K_2}$ és $a_2 = \frac{4}{15}, a_1 = \frac{64}{105}, a_0 = \frac{128}{315}$, x valós értékei mel-

* Míg a $K_1(T)$ 45,6%-ot változik 0-tól 100 C°-ig, addig ugyanebben az intervallumban az $I_s(T)$ megváltozása mindössze 1,1%.

lett sehol sem zérus, míg $x = -\frac{a_1}{2a_2}$ helyen felveszi minimális értékét. Ha kihasználjuk azt a körülményt, hogy K_2 ebben a hőmérsékleti tartományban alig változik, akkor a

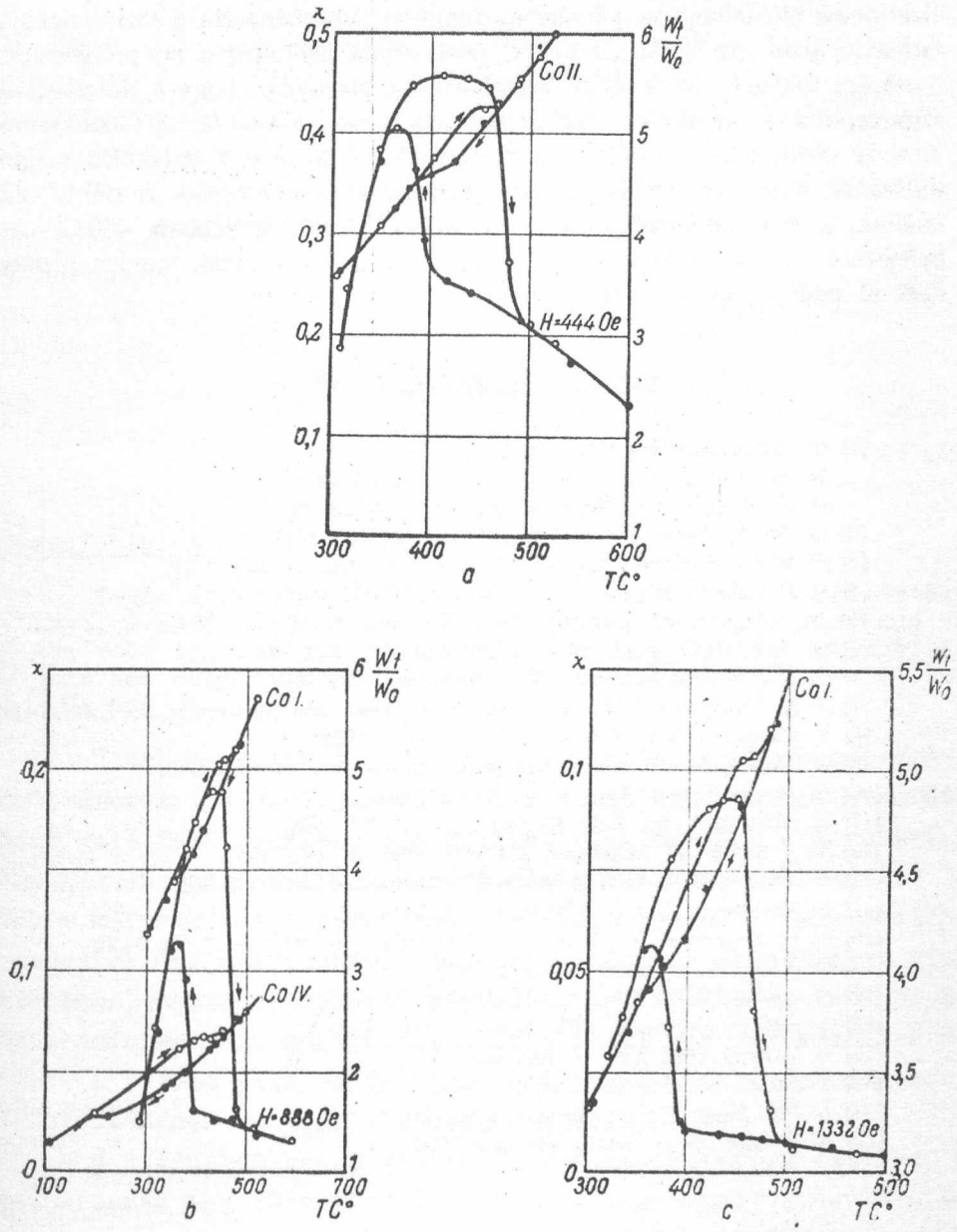
$$K_1 = -1{,}14\, K_2 \tag{8}$$

feltételt kielégítő hőmérséklethez a differenciális szuszceptibilitás minimuma tartozik. Sucksmith és Thompson [13] mérési adatai alapján meghatároztuk azt a hőmérsékletet, amelyhez tartozó K_1 és K_2 értékek kielégítik a (8) alatti feltételt és azt találtuk, hogy $T_k = 293{,}0$ C°. A differenciális szuszceptibilitás általunk észlelt minimuma 294,0 C°-hoz tartozik. Amint látható, az egyezés kitűnőnek mondható. Sucksmith és Thompson [13] mérési adatainak felhasználásával a (6) alatti kifejezés alapján kiszámítottuk a differenciális szuszceptibilitás hőmérséklettől való függését 1332 Oe térerősség mellett a T_k körül és összehasonlítottuk az általunk kísérletileg meghatározott görbével. A 4. ábrán látható, hogy az elméleti és kísérleti görbe minimumhelyei egybeesnek és a két görbe, különösen magasabb hőmérsékleten, meglepően jól egyezik. A T_k-nál kisebb hőmérsékleten az eltérés azért nagyobb, mert a K_2 elég nagy ahhoz, hogy az általunk alkalmazott mágnesező tér mellett a (6) alatti kifejezés csak durva közelítés legyen.



4. ábra. A differenciális szuszceptibilitás hőmérséklettől való függése 300 C° környékén: *a)* a (6) alatti kifejezés alapján számított elméleti görbe. A K_1 és K_2 értékeit Sucksmith és Thompson [13] mérési adataiból vettük *b)* a kísérletileg meghatározott görbe

Mivel K_1 abszolút értéke 390 C° körül lassan változik, a differenciális szuszceptibilitás görbe meredeksége is csökken. Mintegy 440 C° körül a differenciális szuszceptibilitás értéke lokális maximumot mutat, majd gyorsan csökken. A gyors csökkenés azonban annak következtében lép fel, hogy a hexagonális módosulatú kobalt köbös módosulatúvá válik. A differenciális szuszceptibilitásnak a fázisátalakulással kapcsolatos jelentős megváltozását célszerű felhasználni magának a fázisátalakulásnak a tanulmányozására. Az 5. ábrán láthatók a felmelegítés és lehűtés során meghatározott differenciális szuszceptibilitás görbék különböző térerősségek mellett. Az ábrán Schultze [22] mérési adatait is feltüntettük. Schultze különböző tisztaságú kobaltminták



5. ábra. A kobalt $\alpha \rightleftarrows \beta$ átalakulásának hatása a differenciális szuszceptibilitásra és az elektromos ellenállásra. A körök ○ a felmelegítéshez, a pontok ● pedig a lehűtéshez tartozó egyensúlyi differenciális szuszceptibilitás és ellenállás értékeket ábrázolják. Az ábrán látható Co I, Co II és Co IV-gyel jelölt görbék Schulzenak [22] az elektromos ellenállás megváltozására vonatkozó mérési adatait ábrázolják

elektromos ellenállásának hőmérsékletfüggését tanulmányozta a fázisátalakulás tartományában. Az általa Co I.-gyel jelölt minta felel meg a mi próbatestünk tisztasági fokának. Az 5. ábra szemléletesen bizonyítja, hogy a differenciális szuszceptibilitás mennyivel érzékenyebb jellemzője a kobalt fázisátalakulásának, mint az elektromos ellenállás. Méréseink alapján az $\alpha \rightarrow \beta$ átalakulás megindulásának hőmérsékletét 445 C°-nak, befejezésének hőmérsékletét 490 C°-nak találtuk; a $\beta \rightarrow \alpha$ átalakulás megindulásának hőmérsékletét pedig 400 C°-nak, befejezésének hőmérsékletét 340 C°-nak. Ezek az eredmények minden bizonnyal az eddigi legpontosabb eredmények közé tartoznak.

IRODALOM

[1] *H. Polley*, Ann. der Phys. *36*, 625, 1938.
И. М. Пузей, Х. Техн. Физ. *19*, 653, 1949.
И. З. Мирясов, Вестник МГУ № *5*, 65, 1951.
[2] *O. Bloch*, Vjschr. Naturf. Ges., Zürich, *56*, 415, 1911.
[3] *P. Weiss R. Forrer*, Ann. de Phys, *5*, 153, 1926; *12*, 279, 1929.
[4] *R. I. Allen, F. W. Constant*, Phys. Rev. *44*, 228, 1933.
[5] *H. P. Myers, W. Sucksmith*, Proc. Roy. Soc. A *207*, 427, 1951.
[6] *O. S. Edwards, H. Lipson*, J. Inst. Mat. *69*, 177, 1943.
O. S. Edwards, H. Lipson, Proc. Roy. Soc. 180, 268, 1942.
[7] *A. R. Troiano, J. L. Tokich*, Tech. Publ. Amer. Inst. Min. Engrs. No. 2348. (1948).
[8] *S. Kaya*, Sci. Rep. Tôhoku Univ. *17*, 1157, 1928.
[9] *K. Honda, M. Masumoto*, Sci. Rep. Tôhoku Univ. *20*, 323, 1931.
[10] *R. M. Bozorth*. J. Appl. Phys. *8*, 575. 1937.
[11] *Z. Nishiyama*, Sci. Rep. Tôhoku Univ. *25*, 79, 1936.
[12] *V. J. Kehrer, H. Leidheiser*, J. Chem. Phys. *21*, 570, 1953.
[13] *W. Sucksmith, J. E. Thompson*, Proc. Roy. Soc. *225*, 362, 1954.
[14] *E. Czerlinsky*. Ann. der Phys. *13*, 80, 1932.
[15] Н. С. Акулов, К. М. Большова, Вестник МГУ № *9*, 79, 1950.
[16] Л. Пал, Диссертация, Москва, 1953.
[17] *D. Pallagi*. KFKI Közl. (sajtó alatt).
[18] *L. Pál, G. Zsigmond*, KFKI Közl. *3*, 300, 1955.
[19] *G. Szilvay* KFKI Közl. *4*, 102, 1956.
[20] *R. Gans*, Ann. der Phys. *15*, 28, 1932.
[21] *L. Pál*, Magy. Fiz. Folyóirat *4*, 539, 1956.
[22] *A. Schulze*, Zf. f. Metallk. *22*, 308, 1930.

A DIFFUZIÓS ÉS A LELASSULÁSI-HOSSZ MÉRÉSE VIZBEN

Irta: Ádám András és Bata Lajos
Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

Meghatároztuk a diffúziós és a lelassulási-hossz értékét vizben. A diffuziós-hosszra L = 2,81±0,009 cm, a termikus energiára való lelassulási hosszra L_s = 7,93 ± 0,08 cm adódott. A relaxációs hossz vizben Po-Be neutronforrásra $\lambda /E_0/$ = 11,16 ± 0,01 cm.

Ujabban széleskörü érdeklődés nyilvánul meg a szerves moderátorok iránt. Ilyen anyagoknak hütőközegként és moderátorként való felhasználása energetikai reaktorokban előnyökkel biztat. Mivel ezek az anyagok hidrogéntartalmuak, célszerünek láttuk a méréseket a természetes viz diffuziós és a lelassulási-hosszának meghatározásával elkezdeni. Ezeket az adatokat vizben különböző neutronforrással már sokan megmérték. Azonban Po-Be neutronforrással, amelyet mi használtunk, még nem közöltek mérést. A vizben való mérés igazi célja azonban mérési módszerünk alkalmazásának és megbizhatóságának ellenőrzése.

A diffuziós-hossz vizben Po-Be neutronforrás esetében nem határozható meg közvetlenül a termikus neutronok eloszlásából, mivel a forrás által kibocsátott neturonok energiája nagy [1] /átlagban 4,36 MeV/, ezért a méréseket a Fermitől származó differenciál módszerrel végeztük el [2].

Helyezzünk el vizsgálandó lassitó közegünk középpontjában neutronforrást. A lassitó közeg méretei legyenek megfelelően

alapjai körül bizonyos tisztázatlanság tapasztalható. Ezért a továbbiakban részletesen foglalkozunk ezeknek az elvi alapoknak tisztázásával. Mindenekelőtt definiálni fogjuk a lassitó közeg jellemzésére szolgáló neutronfizikai makroparamétereket.

2. Definició

Valamely lassitó közeg neutronfizikai makrotulajdonságait adott hőmérsékleten a moderátor makroszkópikus szórási és befogási hatáskeresztmetszete / Σ_s, Σ_a/ és a moderátort felépitő atomok tömege határozza meg. A fenti mennyiségek helyett velük egyértelműen összefüggő mennyiségeket /paramétereket/ vezetnek be, amelyek a moderátor lassitási és diffuziós tulajdonságait szemléletesebben jellemzi.

Egy ilyen paraméter az ugynevezett lelassulási-hossz. Ez közvetlen kapcsolatban áll azon átlagos távolsággal, amelyre az $E_0 > E$ energiával keletkező neutronok keletkezési helyüktől eldiffundálnak, mialatt energiájuk eléri az E értéket.

A lelassulási-hossz pontos definiciója érdekében tekintsünk egy pontszerü minden irányban egyenlő intenzitással emmittáló stacionárius neutronforrást. Tegyük fel, hogy ez a pontforrás végtelen homogén közegben foglal helyet. Jelöljük $q(r,E)$-vel azon neutronok átlagszámát, amelyet egy, a forrástól r távolságban lévő pont körüli egységnyi térfogatban, egységnyi idő alatt E -nél kisebb energia értékre lassulnak le. $q(r,E)$ az un. lelassulási sürüségfüggvény.

Az E energiára való lelassuláshoz tartozó lelassulási-hosszat a következőképpen definiálják:

$$L_s(E) = +\sqrt{\frac{\overline{r_q^2(E)}}{6}} \qquad /2,1/$$

ahol

$$\overline{r_q^2(E)} = \frac{\int_0^\infty r^4 q(r,E)\,dr}{\int_0^\infty r^2 q(r,E)\,dr} \qquad /2,2/$$

azaz a $4\pi r^2 q(r,E)$ radiális sürüség második momentuma.

A definicióban a második momentum négyzetgyöke szerepel, habár a szemléletes jelentésnek jobban megfelelne, ha $L_s(E)$ -t az $\overline{r_q(E)}$ első momentum segitségével definiálnánk. A második momentum bevezetésének egyik oka az, hogy a neutrongáz adott közegben való viselkedését leiró kinetikai egyenletből származó közelitő formulákban a második momentum szerepel és igy célszerü ezt a mennyiséget moderátor paramétererként bevezetni. Ezenkivül az is a második momentum felhasználása mellett szól, hogy - mint látni fogjuk - $\overline{r_q(E)}$ ellentétben $\overline{r_q^2(E)}$-al nem minden energián mérhető mennyiség. Megjegyzendő, hogy nehéz magokból álló moderátor esetén $r_q(E) \approx \sqrt{\overline{r_q^2(E)}}$.

Foglalkozzunk ezután a diffuziós-hossz definiciójával. Ez azon átlagos távolsággal kapcsolatos, amelyre egy, már keletkezéskor termikus neutron eldiffundál, anélkül, hogy elnyelődne.

Tekintsünk ismét egy végtelen közegbe ágyazott, minden irányban egyenletes intenzitással termikus neutronokat emittáló stacionárius pontforrást. Jelöljük $\Psi(r)$-el a termikus forrás által létrehozott neutronsürüséget a forrástól r távolságban. Ebben az esetben $\Sigma_a v_{th} \Psi(r)$ /itt v_{th} a termikus neutronok sebessége/ jelenti a forrástól r távolságban egységnyi térfogatban, egységnyi idő alatt abszorbeálódó termikus neutronok átlagos számát. Diffuziós-hosszon a következő mennyiséget értik:

$$L_D = +\sqrt{\frac{\overline{r_\Psi^2}}{6}} \qquad /2,3/$$

ahol

$$r_\Psi^2 = \frac{\int_0^\infty r^4 \Sigma_a v_{th} \Psi(r) dr}{\int_0^\infty r \Sigma_a v_{th} \Psi(r) dr} = \frac{\int_0^\infty r^4 \Psi(r) dr}{\int_0^\infty r^2 \Psi(r) dr} \qquad /2,4/$$

A definicióhoz ismét a második momentumot használjuk fel. Ennek oka egyrészt ujra a neutrongáz-fizikai formulák egyszerübbé tétele, másrészt az, hogy $L_s(E_{th})$ (E_{th} -val a termikus energiát jelöljük, méréséhez, mint látni fogjuk, $\overline{r_\Psi^2}$ -ra lesz szükség. Az $\overline{r_\Psi}$ mérésének itt nincs semmi elvi akadálya, ugyhogy ez a szempont itt nem indokolja a második momentum használatát. Könnyü belátni, hogy jelen esetben moderátor fajtától függetlenül elhanya-

golhatóan kicsiny az első momentum és a második momentum négyzetgyöke közötti különbség.

Ha a termikus sürüség nem termikus, hanem gyors forrástól származik, akkor a migrációs-hossz /L_M / jellemző arra, hogy a gyors forrástól átlagosan mekkora távolságra abszorbeálódnak a termikus neutronok. L_M definiciója a következő:

$$L_M = + \sqrt{\frac{\overline{r_q^2}}{6}} \qquad /2,5/$$

ahol

$$\overline{r_q^2} = \frac{\int_0^\infty r^4 \Sigma_a v_{th} \rho(r)\,dr}{\int_0^\infty r^2 \Sigma_a v_{th} \rho(r)\,dr} = \frac{\int_0^\infty r^4 \rho(r)\,dr}{\int_0^\infty r^2 \rho(r)\,dr} \qquad /2,6/$$

Itt $\rho(r)$ a gyors forrás által létesitett termikus neutronsürüség értéke az r helyen.

Nem nehéz belátni, hogy

$$L_M^2 = L_s^2(E_{th}) + L_D^2 \qquad /2,7/$$

3. A lelassulási-hossz mérése

A $q(r,E)$függvény ismeretében /2,1/ és /2,2/ segitségével egyszerü numerikus integrálással meghatározhatjuk $r_q^2(E)$-t, majd ebből $L_s(E)$-t.

A lelassulási-hossz mérésével kapcsolatban fel lépő problémákat aszerint fogjuk osztályozni, hogy az $E > E_{th}$ vagy az $E = E_{th}$ esetről van-e szó, azaz a termikusnál nagyobb energiára, vagy éppen a termikus energiára való lefékeződéshez szükséges átlagos uthosszat akarjuk-e meghatározni. Tegyük fel, hogy a forrás $E_o > E$ energiáju neutronokat bocsát ki.

a./ Vizsgáljuk először az $E > E_{th}$ esetet. Itt a következő probléma lép fel:

A $q(r,E)$ függvény nem közvetlenül mérhető mennyiség. A mérés által szolgáltatott számérték /pl. az indiumfólia aktivitása/ nem $q(r,E)$-vel, hanem $n(r,E)$-vel, azaz az E energiáju neutronok sürüségével arányos. Igy a mérési eredményekből képezve a térbeli második momentumot nem $\overline{r_q^2(E)}$ -t, hanem a következő mennyiséget kapjuk:

$$\overline{r_n^2(E)} = \frac{\int_0^\infty r^4\, n(r,E)\, dr}{\int_0^\infty r^2\, n(r,E)\, dr} \qquad /3,1/$$

Látjuk, hogy a mérési adatokból nem $\overline{r_q^2(E)}$-t, hanem az $\overline{r_n^2(E)}$ mennyiséget határozzuk meg. $\overline{r_q^2(E)}$ és $\overline{r_n^2(E)}$ közt azonban egy közelitő összefüggés áll fenn, amelynek segitségével az egyik ismeretében a másik számolható [1]. Nevezetesen a térbeli problémáknál szokásos diffuziós közelitést és a lassitás-elmélet Greuling-Goertzel közelitését egyszerre alkalmazva, továbbá feltéve, hogy a lassitás tartományában nincs befogás, az $E > E_{tk}$ esetben a kinetikai egyenletből az adódik, hogy:

$$\overline{r_q^2(E)} = \overline{r_n^2(E)} - \frac{2\epsilon}{\Sigma_s(E)\,\Sigma_{tr}(E)} \qquad /3,2/$$

Itt ϵ a Greuling-Goertzel közelités paramétere. A /3,2/ formula csak homogén közegre vonatkozik, azonban a számitást nem nehéz arra az esetre módositani, amikor a közeg többfajta atommagot tartalmaz.

A számitás során felhasználjuk azt a tényt, hogy $q(r,E)$ és a kinetikai egyenlet $E > E_{tk}$ esetre érvényes formájából számitott $n(r,E)$ a következőképpen függenek össze:

$$q(r,E) = \int_E^\infty \Sigma_s(E')\, v(E')\, n(r,E')\; W(E',E)\, dE' \qquad /3,3/$$

ahol $W(E',E)$ annak valószinüsége, hogy egy E' energiáju neutron energiája szóródáskor E -nél kisebbé válik.

Különböző moderátorok esetén különbözőképpen kell ϵ -t megválasztani. Ha $\epsilon \to 0$, akkor a Greuling-Goertzel közelités átmegy a Fermi-féle közelitésbe, amely szerint a lelassulás folytonosan történik. Ebben a közelitésben $\overline{r_q^2(E)} = \overline{r_n^2(E)}$, ami természetes is, hiszen a folytonos lelassulási modell szerint a $q(r,E)$ és $n(r,E)$ függvények arányosak egymással.

A Fermi-közelités csak nehéz magokból álló moderátorok esetén alkalmazható. Már grafitnál, igen jó közelitést jelent és igy a korrekciót csak könnyebb magokból álló moderátorok esetében kell alkalmazni. Természetes vizben $E = 1,46\ eV$ -nál

/indium rezonancia/ a korrekció 2,5 cm^2-nek adódik. Hogy ez menynyire jelentős az attól függ, milyen energia spektrumu forrást használunk. Nagy energiáju neutronokat emittáló forrás esetében az $r_n^2(1,46)$ mennyiség hibája rendszerint nagyobb, mint 2,5 cm^2, és igy nincs értelme a korrekciónak. Például, hasadási neutronokra [2], [3] $\overline{r_n^2(1,46)} = 17{,}6 \pm 9 cm^2$ látható, hogy a mérés hibája nagyobb mint a 2,5 cm^2.

Nagy energiáju neutronokat emittáló forrás alkalmazása esetén tehát ez a korrekció elhanyagolhatóan kicsi. Más a helyzet pl. a Barkov és társai [4] által használt Sb+Be fotoneutron forrással végrehajtott méréseknél. Az általuk mért

$$\overline{r_n^2(1,46)} = 32{,}88 \pm 0{,}9\ cm^2$$

értéket az $\overline{r_q^2(1,46)}$-ra való áttéréssel kapcsolatban korrigálni kellett volna, azonban a szerzők ezt elmulasztották.

Ettől az esettől eltekintve az irodalomban nem találunk olyan mérést, amelynél a /3,2/ korrekció figyelembe vétele lényeges változást hozott volna a lelassulási hossz értékében. Az egész kérdésnek inkább fogalmi jelentősége van. Hogy ezen a téren az irodalomban fogalmi zavar uralkodik, azt mutatja pl. [2] is, ahol a szerzők azt állitják, hogy aktivitásméréssel természetes vizben lelassulási-sürüséget mértek.

b./ Vizsgáljuk meg ezekután, hogy kell $L_s(E_{th})$ -t, azaz a termikus energiára való lefékeződéshez szükséges lelassulási hosszt mérni. Evvel a méréssel kapcsolatban két probléma vetődik fel:

bi./ $L_s(E_{th})$ méréséhez $q(r,E_{th})$ -t kellene mérni. Mint láttuk, ez nem mérhető. Előbb ezen ugy segitettünk, hogy az $n(r,E)$ mennyiséget megmérve, meghatároztuk ennek második momentumát és ezt hoztuk kapcsolatba $q(r,E)$ második momentumával. Termikus energián azonban $n(r,E)$ sem mérhető. Ezt könnyen beláthatjuk, ha meggondoljuk, hogy /3,2/ levezetéséhez a lassitás tartományában érvényes kinetikai egyenletet használtuk fel. A /3,1/-ben szereplő $n(r,E_{th})$ csak a lelassulási folyamat eredményeképpen keletkező termikus neutronok térbeli eloszlását adja meg. A moderátorban azonban azt a termikus sürüséget, mérjük, amit a lelassulás során képződő, termikus neutronok diffuziója alakit ki. Ezt a sürüséget $\rho(r)$ -el jelöltük. A 2. fejezetben mondottak

szerint, tehát a mérésekből nem $\overline{r_n^2(E_{th})}$ -t vagy $\overline{r_q^2(E_{th})}$ -t, hanem a /2,6/-al definiált $\overline{r\varrho^2}$ -t kapjuk, amely az L_M migrációs hosszal függ össze.

Azonban L_M -et és L_D -t mérve $L_s(E_{th})$ -t igen egyszerüen számolhatjuk a /2,7/ összefüggés alapján. Igy látható, hogy $L_s(E_{th})$ mérése azon alapszik, hogy a 2. fejezetben definiált hosszak négyzetei, illetve az ugyanott szereplő második momentumok additivek. Ugyanez nem igaz az első momentumokra. $\overline{r_q(E_{th})}$ a $\varrho(r)$ és $\psi(r)$ sürüségek ismeretében nem határozható meg, tehát $\overline{r_q(E)}$ nem minden energián mérhető. Éppen ez az egyik oka annak, hogy a lelassulási hosszt nem az első, hanem a második momentum segitségével definiálják.

bii./ Látjuk, hogy $L_s(E_{th})$ meghatározásához L_M-et kell mérni. L_M mérése nem probléma mentes, ugyanis L_M definiciójában 0 -tól ∞ -ig vett integrálok szerepelnek, és igy a migrációs-hossz meghatározásához szükségünk van a $\varrho(r)$ termikus neutronsürüség asszimptotikus viselkedésének ismeretére.

$\varrho(r)$ asszimptotikájának megállapitása céljából tekintsünk ismét egy végtelen moderátorba ágyazott gyors stacionárius neutronforrást, amely minden irányban egyenlő intenzitással emittál. Ez a forrás valamilyen $q(r,E_{th})$ termikus lelassulási sürüséget hoz létre. Ahhoz, hogy a $\varrho(r)$ függvényt megkapjuk, ezt a $q(r,E_{th})$ függvényt kell betenni a termikus tartományban érvényes kinetikai egyenlet forrástagjába és az igy kapott egyenletet kell megoldani. Szerencsére bennünket csak $\varrho(r)$ asszimptotikus viselkedése érdekel. Ezért a termikus kinetikai egyenlet helyett megelégedhetünk a diffuziós egyenlet alkalmazásával. Evvel számolva és a $q(r,E_{th})=q(r)$ jelölést alkalmazva az adódik, hogy

$$\varrho(r) = (const)\cdot\left\{\frac{e^{-\frac{r}{L_D}}}{r}\int_0^r r' s k \frac{r'}{L_D}\, q(r')\,dr + \frac{sk\frac{r}{L_D}}{r}\int_r^\infty r' e^{-\frac{r}{L_D}} q(r')\,dr'\right\}$$

/3,4/

Ennek a függvénynek az asszimptotikus viselkedését kell tehát megállapitani. Ebből a célból ugy szokás eljárni /lásd pl. [7] -et/, hogy $q(r)$ helyébe a Fermi-egyenlet megoldását irjuk és az igy nyert függvény asszimptotikáját vizsgáljuk. Evvel

az eljárással az adódik, hogy nagy r -ekre $\varrho(r)$ ugy viselkedik, mint $\frac{e^{-r/L_D}}{r}$ azaz a forrástól nagy távolságban egy pontszerü gyorsforrás ugy hat, mint egy pontszerü termikus forrás.

A fenti eljárás nem helyes hidrogén tartalmu moderátorok esetében, hiszen ekkor a Fermi-elmélet nem alkalmazható. Ez az eljárás azonban nem megnyugtató, nehéz magokból álló moderátorok esetén sem, ugyanis a Fermi-egyenlet, mint ismeretes, a forrástól nagy távolságban ezeknél sem érvényes és igy a Fermi-elmélet eredményeit felhasználva nem lehet az asszimptotikus viselkedésre következtetni.

Ha a befogási hatáskeresztmetszet zérus a lassitás tartományában és a szórási hatáskeresztmetszet monoton csökken növekvő energiával, akkor nagy r -ekre, mint ismeretes [5] [6] [9]

$$n(r,E) \sim n(E) \frac{e^{-\frac{r}{\lambda_s(E_o)}}}{r^K} \qquad /3,5/$$

/3,5/-ben $\lambda_s(E_o)$az E_o energiáju neutronok szórási szabaduthossza /a forrás E_o energiáju neutronokat emittál/. K értéke attól függ, milyen moderátorról és milyen energiáju forrásról van szó. /Minden esetben igaz az, hogy $K<2$ /.

/3,5/-öt /3,3/-ba téve, a $q(r,E)$ függvényre a

$$q(r,E) \sim q(E) \frac{e^{-r/\lambda_s(E_o)}}{r^K} \qquad /3,6/$$

asszimptotikus formulát nyerjük.

/3,5/ és /3,6/ egyaránt asszimptotikus formulák, és mint ilyenek csak egy bizonyos r_o értéktől kezdve érvényesek./

/3,4/-et és /3,6/-ot felhasználva, $r > r_o$ -ra $\varrho(r)$ igy irható

$$\varrho(r) = \frac{e^{-r/L_D}}{r} \left[\alpha + \beta(r)\right] + \frac{Sk}{r} \gamma(r) \qquad /3,7/$$

Itt

$$\alpha = \alpha_1 \int_0^{r_o} r' Sk \frac{r'}{L_D} q(r')\, dr' = const.$$

$$\beta(r) = \beta_1 \int_{r_o}^{r} r' sk \frac{r'}{L_D} \left(\frac{e^{-r'/\lambda_s(E_o)}}{r'^K} \right) dr'$$

$$\gamma(r) = \gamma_1 \int_r^\infty r' e^{-\frac{r'}{L_D}} \left(\frac{e^{-\frac{r'}{\lambda_s(E_0)}}}{r'^K} \right) dr'$$

α_1, β_1, γ_1 *konstansok.*

/Megjegyezzük, hogy az α -ban szereplő $q(r)$ függvényt nem ismerjük, de erre nem is lesz szükségünk./

/3,7/ asszimptotikus viselkedését megvizsgálva azt találjuk, hogy $r \gg r_0$ -ra

$$\varphi(r) \sim \begin{cases} \dfrac{e^{-r/L_D}}{r} & , \text{ha} \quad L_D > \lambda_s(E_0) \\ \dfrac{e^{-r/\lambda_s(E_0)}}{r^K} & , \text{ha} \quad L_D < \lambda_s(E_0) \end{cases} \qquad /3,8/$$

Látjuk tehát, hogy az, hogy egy gyors neutronokat emittáló forrást a tőle távol elhelyezett detektor termikusnak "érez-e" vagy sem, az egyrészt a szóbanforgó közegtől, másrészt a forrás által emittált neutronok energiájától függ. Az a gyakori állitás, amely szerint gyors forrástól elég távol a gyors forrást mindig termikusnak tekinthetjük, nem helyes.

/3,8/-at a mérések igazolják [10] . Az L_M meghatározásához szükséges numerikus integrálásokat tehát /3,8/ segitségével lehet elvégezni. Meg kell még jegyeznünk, hogy bár $K < 2$, mivel a forrástól távol már csak az exponenciális faktor viselkedése döntő, mégis $K=2$ -t irhatunk a /3,8/ alatti kifejezésben.

4. Diffuziós-hossz mérés

A termikus forrásból kilépő neutronok térbeli eloszlását a diffuziós egyenlet irja le, amelyben az L_D paraméter szerepel. Termikus forrás esetén a moderátorban létrejövő térbeli eloszlás mérése alapján lehetne L_D -t meghatározni.

A neutronforrások azonban mindig termikusnál nagyobb energiáju neutronokat szolgáltatnak. Igy a diffuziós-hossz kiértékelésére /3,4/-et használhatnánk, mivel ebben is szerepel L_D . Azonban ez a formula egyrészt bonyolult, másrészt a benne szereplő $q(r)$ függvényt sem ismerjük. Ha $L_D > \lambda_s(E_0)$, akkor a diffuziós-hosszt a /3,8/ asszimptotikus kifejezés alapján határoz-

hatjuk meg. Ha viszont $L_D < \lambda_s(E_o)$, akkor az asszimptotikus formulában L_D nem szerepel és igy közvetlenül a termikus neutronok eloszlásából nem határozhatjuk meg a diffuziós-hosszt.

Például Ra-Be, hasadási, vagy más nagy energiáju forrást alkalmazva, természetesen vizben $L_D < \lambda_s(E_o)$. Ugyanekkor kis energiáju neutronokat emittáló fotoneutronforrás esetén $L_D > \lambda_s(E_o)$ és igy az ilyen forrás által létrehozott termikus asszimptotikus viselkedésből L_D -t meghatározhatjuk természetes vizben is. Ezt használták fel Barkov és társai [4], akik Sb-Be forrással mérve /30 KeV, 10^5 neutron/sec/ a forrástól 15 cm-nél nagyobb távolságban természetes vizben $\frac{e^{-r/L_D}}{r}$ alaku eloszlást találtak. A szerzők ezt azzal magyarázták /amint a cikkből kivehető/, hogy ilyen távolságban már nincsenek termikusnál nagyobb energiáju neutronok jelen, tehát nem is keletkeznek termikus neutronok és gömbszimetrikus elrendezés esetén olyan térrészekben, ahol nincs termikus forrás, a diffuziós egyenlet megoldása éppen a fenti alaku. Az előző paragrafusban végzett számitás mutatja, hogy ez a meggondolás nem kielégitő. Ugyanis ugyanigy gondolkozva, azt lehetne mondani, hogy minden anyagban bármilyen energiáju forrás esetén $\frac{e^{-r/L_D}}{r}$ alaku az asszimptotikus formula. Ez azonban, amint láttuk, nem igaz.

Grafitban L_D nagy értéke miatt ilyen problémák nem lépnek fel. Itt minden forrás esetén $\frac{e^{-r/L_D}}{r}$ alaku az eloszlás. Az $\frac{e^{-r/L_D}}{r}$ asszimptotikus kifejezés alkalmazhatóságát nem az dönti el, hogy a moderátor magjai könnyüek-e vagy sem; ebben a kérdésben csupán L_D és $\lambda_s(E_o)$ viszonya döntő, pedig egyáltalán nem függ a lassitó közeg atommagjainak tömegétől. Erre jó példa az, hogy nehézviznél az asszimptotikus kifejezés alakja $\frac{e^{-r/L_D}}{r}$, mivel $L_D > \lambda_s(E_o)$.

A diffuziós-hossz meghatározására az $L_D < \lambda_s(E_o)$ és az $L_D > \lambda_s(E_o)$ esetekben egyaránt alkalmas a Fermi-féle [8] differenciás módszer. Az eljárásnak az a lényege, hogy megmérik egy pontszerü gyors forrás által létesitett termikus sürüséget / $\varrho_1(r)$ /. Ezután körülveszik a forrást egy kadmiumból készitett gömbfelülettel, amely negativ termikus neutronforrást jelent. Ezután ismét kimérve a termikus neutronsürüséget, most már a negativ forrás jelenlétében / $\varrho_2(r)$ /, képezik a két mérési eredmény különbségét. A diffuzió egyenlet linearitása miatt viszont

$$\varrho_1(r) - \varrho_2(r) = \frac{e^{-r/L_D}}{r} \qquad /4,1/$$

Ennekaz összefüggésnek alapján L_D könnyen meghatározható.

I r o d a l o m

[1] Reactor Handbook, 2, 365, /1955/ Geneva.

[2] J.E.Hill, L.D.Roberts, T.E.Fitch
Jorun.Appl.Phys. 26, 1013, /1955/

[3] L.M.Barkov, V.K.Makarin, K.N.Mukhin
J.Nucl.Energy, 4, 94, /1956/

[4] L.M.Barkov, K.N.Mukhin
J.Nucl.Energy, 4, 91, /1956/

[5] G.C.Wick, Phys.Rev. 75, 738, /1949/

[6] S.Flügge, Phys.Zeitschrift, 44, 445, /1943/

[7] P.R.Wllace-J.LeCaine
MT-12, NRC-1480

[8] E.Amaldi, E.Fermi
Phys.Rev. 50, 899 /1936/

[9] G.Holte, Ark.f.Phys. 3, 209 /1951/

[10] M.Goldhaber, R.D.O'Neal
Phys.Rev. 60, 834 /1941/

Érkezett 1958 április 24.

A DIFFUZIÓS ÉS LELASSULÁSI-HOSSZ MEGHATÁROZÁSÁNAK NÉHÁNY KÉRDÉSÉRŐL

Irta: Ádám András és Kosály György

Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

A lelassulási hossz /$L_s(E)$/, diffuziós hossz /L_D/ és migrációs-hossz /L_M/ definiciójának ismertetése után az $L_s(E), E>E_{th}$ mérése során felvetődő kérdéseket vizsgáljuk meg. E kérdések azzal kapcsolatosak, hogy hidrogén tartalmu anyagokban a lelassulási sürüség nem arányos a neutron sürüséggel. L_M Mérésével kapcsolatban a gyors forrás által létesitett termikus neutron sürüség asszomptotikus viselkedésének kérdését vizsgáljuk meg. Ennek ismeretében utmutatást kapunk arra, hogy hogyan kell hidrogén tartalmu közegben L_D -t mérni.

1. Bevezetés

Különböző szerves vegyületek előnyösen használhatók lassitó és hütő közegként. Kiderült, hogy különösen a ciklikus organikus anyagok közöttük a difenil és néhány származéka /Pl. az izopropildifenil/ mutatnak előnyös tulajdonságokat.

A szerves moderátorok hidrogén tartalmu anyagok és ezért ahhoz, hogy ezek neutronfizikai makrotulajdonságait tanulmányozhassuk, foglalkoznunk kell a hidrogén tartalmu moderátorok vizsgálata során felvetődő kérdésekkel. Természetes viz neutronfizikai makroparamétereinek meghatározására sok mérést végeztek, azonban a hidrogén tartalmu moderátorokban végzett mérések elvi

nagyok, hogy a neutronkifolyástól eltekinthessünk. A termikus neutronok térbeli eloszlását jelöljük $n_1/r/$-rel, ahol r a forrástól mért távolság. A forrástól a távolságra helyezzünk el egy 1 mm vastagságu kadmium sikot. Ez a sik gyakorlatilag minden termikus neutront elnyel, s ezért ugy foghatjuk fel, mint egy negativ termikus sikforrást. A kadmium sik jelenlétében a termikus neutronok térbeli eloszlását az

$$n_2(r) = n_1(r) - A e^{-\frac{r}{L_D}}$$

összefüggés adja meg, ahol L_D a diffuziós-hossz és A a konstans. Tehát a két eloszlás különbségéből $n_1/r/-n_2/r/$-ből meghatározható a negativ sikforrás által létrehozott eloszlás, amiből a diffuziós-hossz értékét kiszámithatjuk.

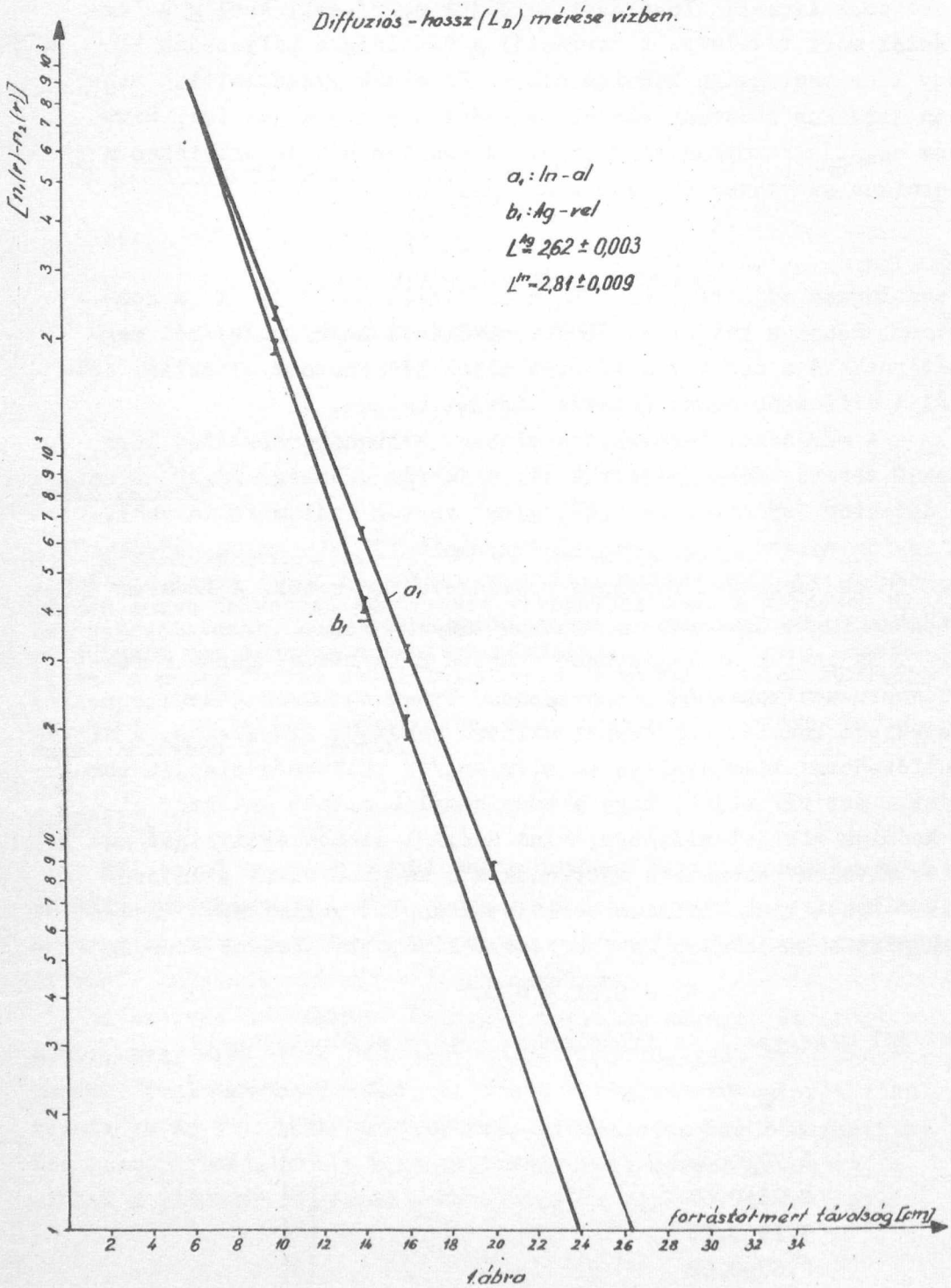
A méréseket természetes vizben, szobahőmérsékleten 16ox 8ox90 méretü kádban végeztük el. A forrás erőssége 18.10^6 n/sec, a detektor 3x5 cm-es és 0,092 g/cm^2 vastag indium fólia volt. A regisztrálást ólomtoronnyal árnyékolt IGV tipusu GM-csővel és 256-os leosztásu impulzus számlálóval végeztük. A kadmium sikot a Po-Be forrástól 3 cm-re helyeztük el.

Az indium aktiválásában nemcsak a termikus, hanem a rezonancia neutronok is résztvesznek. Ezt a szokásos módon, a detektort kadmium boritással ellátva vehetjük figyelembe. A diffuziós-hossz kiértékelése az $n_1/r/-n_2/r/$ különbség alapján történt. Azt várhatjuk, hogy a kadmiummal boritott detektor mind a kadmium sik jelenlétében, mind anélkül azonos aktivitást mutat, mivel a rezonancia neutronokra a kadmium sikot átlátszónak tekinthetjük. Kadmium boritással kapott aktivitások kiesnek. Ezt a kisérletek is igazolták. Elvégzett mérések alapján

$$L_D = 2{,}81 \pm 0{,}009 \text{ cm},$$

ami jól megegyezik az irodalomban közölt eredményekkel:

L_D cm	Mérési módszer
3,00±0,3	[3]
2,77±0,04	[4]
2,76±0,03	[5]
3,25±0,13	[6]
2,67±0,02	[7]


Diffuziós - hossz (L_D) mérése vízben.
a_1 : ln - al
b_1 : Ag - rel
$L^{Ag} = 2,62 \pm 0,003$
$L^{In} = 2,81 \pm 0,009$
a_1
b_1
$[n_1(r) - n_2(r)]$
forrástól mért távolság [cm]

1.ábra

2,72±0,04	[8]
2.69±0,08	[9]
2,85±0,05	[10]
2,88	[11]

Az 1. ábrán log $n_1/r/-n_2/r/$ látható a távolság függvényében.

A lelassulási-hossz mérése. $/L_s/$

A lelassulási-hossz termikus energiánál közvetlenül nem mérhető, azonban a termikus neutronok eloszlása, illetve annak második momentuma alapján meghatározhatjuk az un. migrációs-hosszt

$$L_M^2 = \frac{\overline{r^2}}{6} = \frac{1}{6} \cdot \frac{\int_0^\infty r^4 n(r)\,dr}{\int_0^\infty r^2 n(r)\,dr}$$

és mivel a migrációs, a lelassulási- és a diffuziós-hossz között

$$L_M^2 = L_s^2 (E_{th}) + L_D^2$$

alaku összefüggés áll fenn, ebből $L_s^2(E_{th})$ kiszámitható.

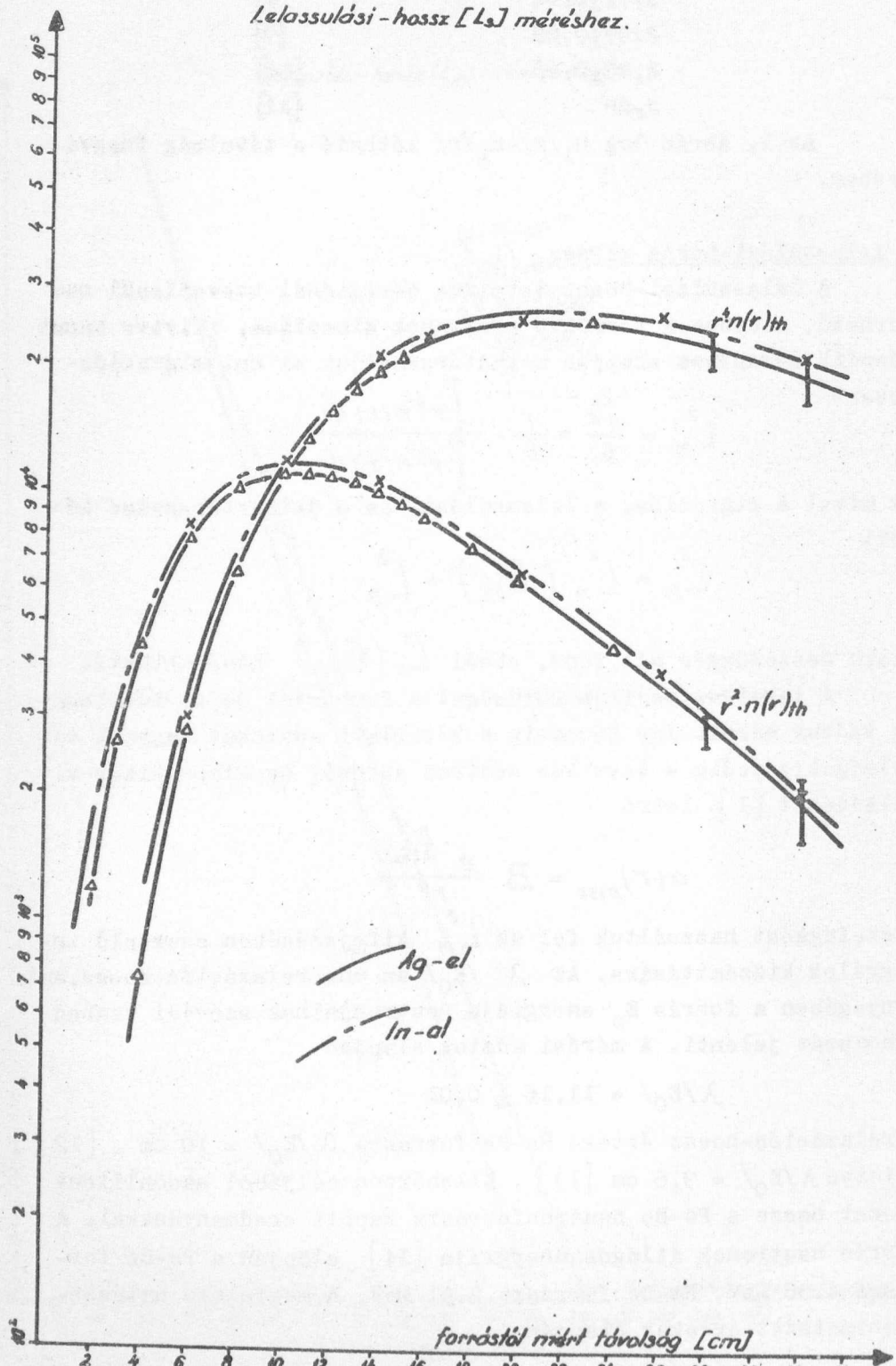
A termikus neutron sürüséget a forrástól 36 cm távolságig tudtuk mérni. Igy 36 cm-ig a kisérleti adatokat nagyobb távolságokra pedig a termikus neutron sürüség asszimptotikus viselkedését [1] leiró

$$n(r)_{assz} = B \frac{e^{-\frac{r}{\lambda(E_0)}}}{r^2}$$

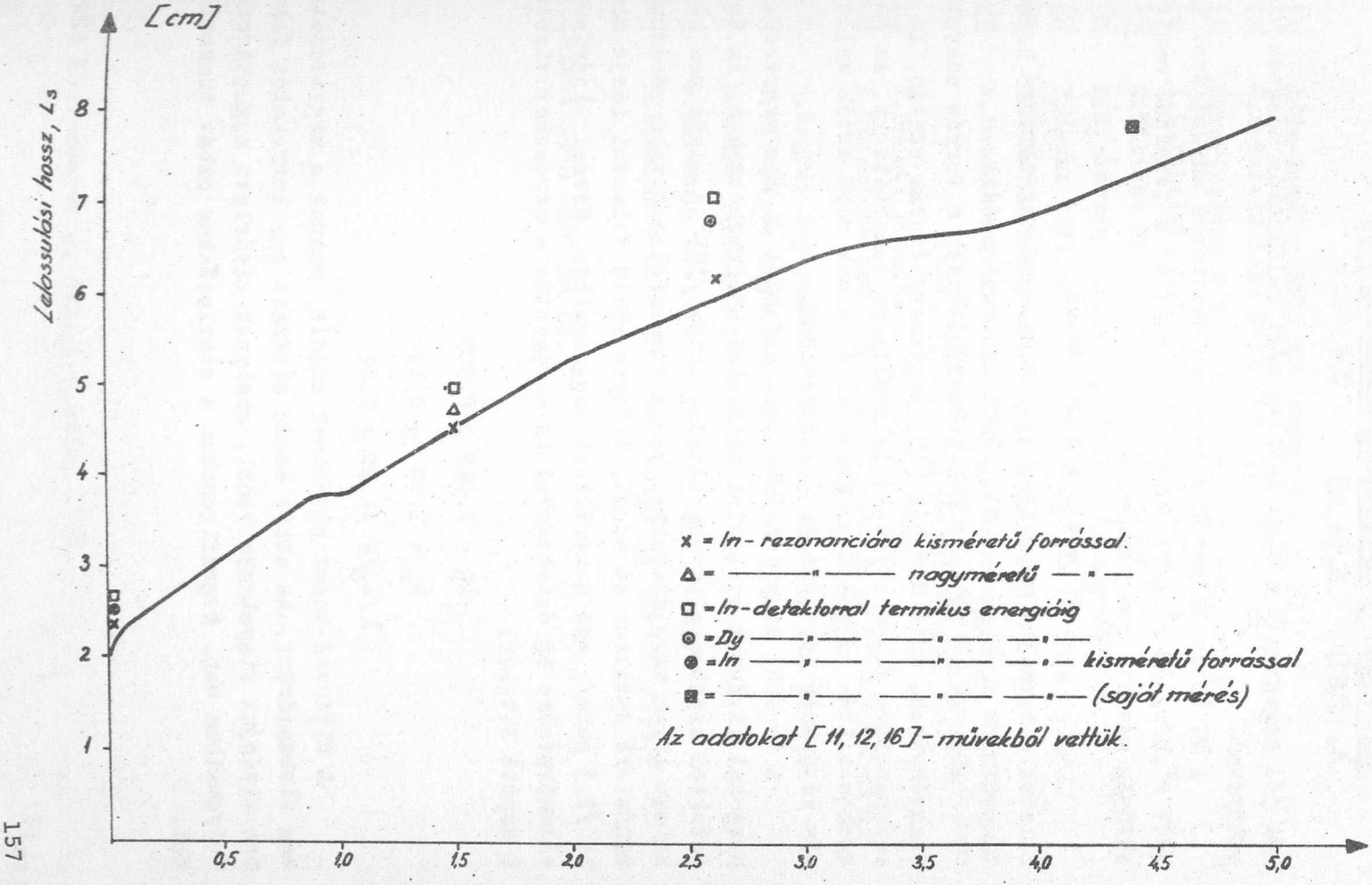
összefüggést használtuk fel az L_M^2 kifejezésében szereplő integrálok kiszámitására. Az $\lambda /E_0/$ az un. relaxációs-hossz, ami lényegében a forrás E_0 energiáju neutronjainak szórási szabad uthosszát jelenti. A mérési adatok alapján

$$\lambda /E_0/ = 11{,}16 \pm 0{,}01$$

A relaxációs-hossz értéke Ra-Be forrásra $\lambda /E_0/ = 10$ cm [12], illetve $\lambda /E_0/ = 9{,}6$ cm [13]. Ellenőrzés céljából hasonlitsuk ezeket össze a Po-Be neutronforrásra kapott eredményünkkel. A forrás neutronok átlagos energiája [14] alapján a Po-Be forrásra 4,36 MeV, Ra-Be forrásra 2,61 MeV. A megfelelő hatáskeresztmetszet értékek alapján


Lelassulási - hossz [Ls] méréshez.
r⁴.n(r)th
r².n(r)th
Ag-el
In-al
forrástól mért távolság [cm]
2 4 6 8 10 12 14 16 18 20 22 24 26 28 30 32 34

2. ábra


[cm]
Lelassulási hossz, Ls
8
7
6
5
4
3
2
1
0,5
1,0
1,5
2,0
2,5
3,0
3,5
4,0
4,5
5,0
x = In - rezonanciára kisméretű forrással.
△ = ——— nagyméretű — · —
□ = In - detektorral termikus energiáig
⊙ = Dy ——— kisméretű forrással
● = In ——— kisméretű forrással
■ = ——— (saját mérés)
Az adatokat [11, 12, 16] - művekből vettük.

3.ábra

$$\frac{\lambda_s(4,36)}{\lambda_s(2,61)} = \frac{\sigma_s(2,61)}{\sigma_s(4,36)} = \frac{6,1}{5,4} = 1,13$$

ami jól megegyezik a kisérletileg mért relaxációs hosszak viszonyával.

A 2. ábrán láthatók a termikus neutronok sürüségével képzett $r^2.n/r/$ és $r^4.n/r/$ függvények. Ezekből a termikus neutronsürüség második momentumára az

$$\overline{r^2} = 431 \pm 8 \text{ cm}^2 \text{ érték}$$

illetve a termikus energiára való lelassuláshoz tartozó hosszra pedig az $L_s/E_{th}/ = 7,93 \pm 0,08$ cm érték adódik.

A 3. ábrán látható a lelassulási-hossz a forrás energia függvényében, amit Marshak [15] pontszerü forrás esetén, In rezonanciára /1,46 eV/ való lelassulásra számitott ki. Az összehasonlitás céljából az ábrán az általunk mért érték mellett más kisérleti adatokat is feltüntettünk.

A további kisérleteink során difenilt és más szerves anyagokat kivánunk vizsgálni különböző hőmérsékleteken. Az In detektor azonban alacsony olvadáspontja /156°C/ miatt nem alkalmas ilyen vizsgálatokra. Magas hőmérsékleten való méréshez megfelelő detektor az ezüst. Előnyös rövid felezési ideje miatt is /2,3 perc/, ami a méréseket meggyorsitja. Mérési eljárásunk ellenőrzésére Ag detektorral is elvégeztük a méréseket vizben. A kapott értékek:

$$L_D = 2,622 \pm 0,003$$

$$L_s = 7,90 \pm 0,13$$

$$\lambda/E_0/ = 11,20 \pm 0,02$$

A diffuzió-hossz kisebbnek adódik, aminek a magyarázatára még visszatérünk. Az ebből adódó eltérést egy korrekciós faktorral kivánjuk figyelembe venni, amelynek kisérleti meghatározása folyamatban van. A grafikonokon a statisztikus hibát tüntettük fel.

Irodalom

[1] Ádám-Kosály: KFKI Közlemények 6 3. /1958/

[2] E.Fermi-Amaldi: Phys.Rev. 51. 896. /1937/

[3] Gamertselder G.R.: Phys.Rev. 62. 556. /1942/

[4] A.Berthelot, C.R. 225. 406. /1947/

[5] C.Tittle: Phys.Rev. 80. 756. /1950/

[6] K.E. Larson: Arkiv für Fysik, 2. 47. /1950/

[7] F.Sisk: Bull.Amer.Phys.Soc. 26. No 1. 58/A. /1951/

[8] G.E.Dardel: Phys.Rev. 96. 1245 /1954/

[9] A.Antonov: Proceedings of the International Conference on the Peaceful uses of Atomic Energy,Geneva 1955. Vol.Sp. 3. United Nation 1956.

[10] F.Scott: Phys.Rev. 95. 583. /1954/

[11] E.Glasstone and N.Edlund: Elements of Nuclear Reactor Theory /1952/

[12] E.Segré: Experimental Nuclear Physics II. /1953/

[13] J.Tittmann: Phys.Rev. 80. 756. /1950/

[14] Reactor Handbook I. /1955/

[15] E.Marshak: Rev.Mod.Phys. 19. 185. /1947/

[16] L.M.Barkov: J.of Nuclear Energy 4. 91-102 /1957/

Érkezett 1958 április 24.

NEUTRONSOKSZOROZÁS STATISZTIKUS INGADOZÁSAI*

Irta: Pál Lénárd

Neutronfizikai Osztály

Összefoglaló

A neutronsokszorozás statisztikus ingadozásai egyrészt a hasadási folyamatban keletkező neutronok számának, másrészt a láncfolyamat hosszának statisztikus ingadozásaival kapcsolatosak. Igen általános feltevés mellett sikerült meghatároznunk a neutronok statisztikus viselkedését leiró eloszlásfüggvény generátorfüggvényét.

Meghatároztuk különböző reaktivitásu sokszorozó rendszerekre a késő neutronok hatásának figyelembevételével a szórásnégyzet időfüggését.

Szubkritikus rendszerek neutronsokszorozásának kisérleti vizsgálatához kiszámitottuk a rendszerben célszerüen elhelyezett neutrondetektor által bizonyos idő alatt regisztrált neutronok számának relativ szórását pulzált neutronforrás használata esetében. A számitásoknál feltételeztük, hogy egy-egy neutronimpulzusban a neutronok száma Poisson-eloszlást követ és hogy a neutronimpulzus szélessége elhanyagolható a detektálási időhöz képest.

A mérési adatokból ezen elméleti meggondolások alapján meghatározhatjuk az egy hasadási aktusban keletkező neutronok (prompt és késő) számának szórását.

I.

A neutronsokszorozás statisztikus ingadozásai egyrészt a hasadási folyamatban keletkező neutronok számának, másrészt a láncfolyamat hosszának fluktuációjával kapcsolatosak. Hoffmann[1] számitásai szerint reaktorok neutronintenzitásának fluktuációjára vonatkozó mérésekből könnyen meghatározható az egy hasadási aktús-

* Az 1958.évi genfi II.Nemzetközi Atomenergia Konferencián elfogadott előadás.

ban keletkező neutronok számának szórásnégyzete. Ilyen mérésekről számolnak be Feynmann, Hoffmann és Serber [2]. A következőkben Hoffmann [1] módszerénél általánosabb eljárással származtatjuk a neutronsokszorozás statisztikus ingadozásait megadó összefüggéseket és rámutatunk azokra a korrekciókra, amelyek a Hoffmann által közölt kisérleti eredmények helyes felhasználásához szükségesek.

Mindenekelőtt bizonyos egyszerüsitő feltevésekkel élünk, hogy számitásaink könnyebben áttekinthetők legyenek. Tételezzük fel, hogy a sokszorozó közeg végtelen kiterjedésünek tekinthető és benne a különböző atommagok térbeli eloszlása egyenletes. Tegyük fel azt is, hogy a neutronok energiája keletkezésük és abszorpciójuk pillanatában ugyanaz. Ez utóbbi feltevés azt jelenti, hogy a lelassulás folyamatától eltekintünk.

Jelölje egy adott sokszorozó közegre vonatkozóan $\tau_f = \alpha_f^{-1}$ a neutronok átlagos hasadási élettartamát. Legyen $\tau_a = \alpha_a^{-1}$ a neutronok átlagos abszorpciós, mig $\tau_o = \alpha_o^{-1}$ az átlagos teljes élettartama. Nyilván $\alpha_o = \alpha_a + \alpha_f$.

Jelöljük $H_m(t)$ -vel annak valószinüségét, hogy t időpontban a sokszorozó közegben pontosan m neutron található, azon feltevés mellett, hogy $t=0$ időpontban egyetlen-egy neutron volt a közegben. Másszóval

$$H_m(t) = P\{\zeta(t) = m / \zeta(0) = 1\} \qquad (1.1)$$

ahol $\zeta(t)$ a neutronok száma t időpontban.

A $t=0$ időpontban a sokszorozó közegbe injektált neutron t időpontig vagy semmiféle reakciót nem vált ki, vagy ha kivált, akkor az első végbemenő reakció vagy abszorpció, vagy maghasadás. (A szórás lehetőségét nem vesszük figyelembe.) A $H_m(t)$ eloszlásfüggvényt a folyamat ezen három lehetséges és egymást kizáró elindulási módja alapján épithetjük fel. Nevezetesen felirhatjuk, hogy $H_m(t) = H_m^o(t) + H_m^a(t) + H_m^f(t)$, ahol $H_m^o(t)$ annak a valószinüsége, hogy a $t=0$ időpontban a rendszerbe injektált neutron t idő alatt semmiféle reakciót nem vált ki és t időpontban a rendszerben található neutronok száma éppen m , azon feltevés mellett, hogy a sokszorozó közegben $t=0$ időpontban csupán egyetlen (az injektált) neutron volt található. A $H_m^a(t)$ és $H_m^f(t)$ pedig annak a valószinüségei, hogy a $(0,t)$ időközben bekövetkező első reakció

abszorpció, illetve maghasadás és t időpontban a rendszerben található neutronok száma m, ismét azon feltevés mellett, hogy $t=0$ időpontban csak az injektált neutron tartózkodott a rendszerben. Könnyen belátható, hogy $H_m^o(t) = e^{-\alpha_o t}\delta_{1m}$ és $H_m^a(t) = \frac{\alpha_a}{\alpha_o}\left(1-e^{-\alpha_o t}\right)\delta_{om}$ ahol $\delta_{m,m'}$, a Kronecker-féle szimbólum.

A $H_m^f(t)$ meghatározása valamivel körülményesebb. Tételezzük fel, hogy a $t=0$ időpontban a sokszorozó rendszerbe injektált neutron a $(0,t)$ időszakaszban $(t' \leq t)$ semmiféle reakciót nem vált ki, majd a $(t', t'+dt')$ időintervallumban hasadást okoz, aminek eredményeképpen k_o promt-neutron és l csoportban $k_1, k_2, \ldots, k_l$ hasadási termék keletkezik. (Természetesen kettőnél több hasadási termék egy hasadásnál a legritkább esetben keletkezik. A keletkezett hasadási termékeket l csoportba sorolhatjuk aszerint, hogy mekkora időkieséssel emittálnak neutronokat.) Jelöljük $p(k_o, k_1, \ldots, k_l)$ -lel annak valószinüségét, hogy egy hasadási aktusban k_o prompt-neutron és l csoportban $k_1, k_2, \ldots, k_l$ hasadási termék keletkezik. Az i -ik csoportba tartozó hasadási termékek λ_i bomlási állandóval i -tipusu késő-neutronokat emittálnak.

A $(t', t'+dt')$ időközben keletkező prompt-neutronok és a később kibocsátott késő-neutronok a hátramaradó $t-t'$ idő alatt biztositják, hogy t időpontban éppen m neutron legyen a sokszorozó rendszerben. Legyen $K_{m_o}(t-t', k_o)$ annak a valószinüsége, hogy a $(t', t'+dt')$ időközben bekövetkező hasadásnál keletkezett k_o prompt-neutron által létrehozott neutronok száma t időpontban pontosan m_o. $K_{m_i}(t-t', k_i)$ pedig legyen annak a valószinüsége, hogy a $(t', t'+dt')$ időszakaszban bekövetkezett hasadásnál keletkezett k_i i-tipusu hasadási termék által emittált késő-neutronok annyi további neutront hoznak létre, hogy számuk t időpontban éppen m_i. Igy felirhatjuk, hogy

$$H_m^f(t) = \alpha_f \int_o^t e^{-\alpha_o t'} \left\{ \sum_{k_o, k_1, \ldots, k_l} p(k_o, k_1, \ldots, k_l) \sum_{m_o + \cdots + m_l = m} \prod_{i=0}^{l} K_{m_i}(t-t', k_i) \right\} dt' \qquad (1.2)$$

Az is könnyen belátható, hogy

$$K_{m_o}(t-t', k_o) = \sum_{n_1 + \cdots + n_{k_o} = m_o} \prod_{j=1}^{k_o} H_{n_j}(t-t') \qquad (1.3)$$

A $K_{m_i}(t-t', k_i)$ meghatározásához tegyük fel, hogy a k_i hasadási termék közül $t-t'$ idő alatt csak k_i' emittál neutront, mig $k_i - k_i'$ nem bomlik el. Ha $L_{m_i}(t-t', k_i')$ -vel jelöljük annak a valószinüségét, hogy $t-t'$ idő alatt pontosan k_i hasadási termék bomlik el (ami azzal ekvivalens, hogy k_i' i-tipusu késő-neutron keletkezik) és hogy a bomlás eredményeként keletkező késő-neutronok által létrehozott neutronok száma t időpontban m_i , akkor felirhatjuk,hogy

$$K_{m_i}(t-t', k_i) = \sum_{k_i'=0}^{k_i} \binom{k_i}{k_i'} \exp\left\{-\lambda_i (t-t')(k_i - k_i')\right\} L_{m_i}(t-t', k_i'). \qquad (1.4)$$

Egyszerü meggondolásokkal belátható, hogy

$$L_{m_i}(t-t', k_i') = \lambda_i^{k_i'} \sum_{n_1+\dots+n_{k_i'}=m_i} \prod_{j=1}^{k_i'} \int_0^{t-t'} e^{-\lambda_i t''} H_{n_j}(t'-t'')\, dt''. \qquad (1.5)$$

Vezessük most be az

$$f(t, x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mx} H_m(t) \qquad (1.6)$$

generátorfüggvényt. Rövid számolás után megmutatható, hogy $f(t,x)$ az

$$f(t, x) = e^{-\alpha_0 t + x} + \frac{\alpha_a}{\alpha_0}\left(1 - e^{-\alpha_0 t}\right) + \alpha_f \int_0^t e^{-\alpha_0 t'} \pi\left\{\vec{\varphi}(t-t', x)\right\} dt'. \qquad (1.7)$$

egyenletnek tesz eleget, ahol

$$\pi\left\{\vec{\varphi}(t-t', x)\right\} = \sum_{k_0, k_1, \dots k_l} p(k_0, k_1, \dots k_l)\left[\varphi_0(t-t', x)\right]^{k_0} \dots \left[\varphi_l(t-t', x)\right]^{k_l} \qquad (1.8)$$

és

$$\varphi_0(t-t', x) = f(t-t', x), \qquad (1.9)$$

mig

$$\varphi_i(t-t', x) = e^{-\lambda_i (t-t')} + \lambda_i \int_0^{t-t'} e^{-\lambda_i t''} f(t-t'-t'', x)\, dt''. \qquad (1.10)$$

$$(i = 1, 2, \dots, l)$$

Megjegyzendő, hogy az (1.7) alatti egyenlet korábban levezetett (3) általános egyenletünkből közvetlenül is származtatható. Az (1.7)-ből t szerinti differenciálással a

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} = \alpha_a + \alpha_f \pi\left\{\vec{\varphi}(t, x)\right\} - \alpha_0 f(t, x) \qquad (1.11)$$

egyenlet állitható elő. Az utóbbi egyenletet gyakrabban használjuk a momentumok származtatására.

Vezessük még be a következő jelöléseket:

$$\nu = \sum_{k_0,\dots,k_l} (k_0 + \dots + k_i + \dots + k_l)\, p(k_0, \dots, k_i, \dots, k_l) \qquad (1.12)$$

és

$$\mu = \sum_{k_0,\dots,k_l} (k_0^2 + \dots + k_i^2 + \dots + k_l^2)\, p(k_0, \dots, k_i, \dots, k_l), \qquad (1.13)$$

$$\nu = \sum_{i=0}^{l} \nu_i \quad , \quad \mu = \sum_{i=0}^{l} \mu_i \, . \qquad (1.13')$$

ν nyilván az egy hasadási aktusban keletkező neutronok számának átlagát, míg μ a négyzetátlagát jelenti. A neutronok átlagos számát t időpontban az

$$m_1(t) = \left[\frac{\partial f(t,x)}{\partial x} \right]_{x=0} \qquad (1.14)$$

összefüggés alapján származtatott

$$\frac{dm_1(t)}{dt} = -\alpha m_1(t) + \alpha_f \sum_{i=1}^{l} \nu_i \lambda_i \int_0^t e^{-\lambda_i t'} m_1(t-t')\, dt' \qquad (1.15)$$

egyenletből, az $m_1(0) = 1$ kezdőfeltétellel határozhatjuk meg, ahol

$$\alpha = \alpha_a + (1 - \nu_0)\, \alpha_f \, . \qquad (1.16)$$

A neutronok számának négyzetátlagát pedig az

$$m_2(t) = \left[\frac{\partial^2 f(t,x)}{\partial x^2} \right]_{x=0} \qquad (1.17)$$

összefüggésből nyert

$$\frac{dm_2(t)}{dt} = -\alpha m_2(t) + \alpha_f \sum_{i=1}^{l} \nu_i \lambda_i \int_0^t e^{-\lambda_i t'} m_2(t-t')\, dt' +$$

$$+ \alpha_f \left[\sum_{i=0}^{l} (\mu_i - \nu_i)\, a_i^2(t) + 2 \sum_{i \neq i'}^{l} \nu_i \nu_{i'} a_i(t)\, a_{i'}(t) \right] \qquad (1.18)$$

egyenlet alapján, az $m_2(0) = 1$ kezdőfeltétel figyelembevételével számíthatjuk ki. Az (1.18)-ban egyszerűségi okokból a következő jelöléseket vezettük be:

$$a_0(t) = m_1(t) \, , \qquad a_i(t) = \lambda_i \int_0^t e^{-\lambda_i t'} m_1(t-t')\, dt' . \qquad (1.18')$$

$$(i = 1, 2, \dots, l)$$

Az (1.15)-ből könnyen felirhatjuk $m_1(t)$

$$\phi(z) = \left[z + \alpha - \alpha_f \sum_{i=1}^{l} \frac{\nu_i \lambda_i}{z + \lambda_i} \right]^{-1} \tag{1.19}$$

Laplace-transzformáltját. Mivel $m_1(t)$ argumentumának monoton függvénye, legalábbis $t > t_k$ értékekre, ahol $t_k \neq 0$ $\lim_{z \to 0} z\, \phi(z) = \lim_{t \to \infty} m_1(t)$. Könnyen megmutatható az (1.19) alapján, hogy

$$\alpha_a = (\nu - 1)\, \alpha_f \tag{1.20}$$

a szükséges és elégséges feltétele annak, hogy $\lim_{t \to \infty} m_1(t)$ zérustól különböző, véges érték legyen. Egyszerüen belátható, hogy

$$\lim_{t \to \infty} m_1(t) = \begin{cases} 0, & ha \quad \alpha_a > (\nu - 1)\, \alpha_f \\ \left[1 + \alpha_f \sum_{i=1}^{l} \nu_i / \lambda_i \right]^{-1}, & ha \quad \alpha_a = (\nu - 1)\, \alpha_f \\ \infty, & ha \quad \alpha_a < (\nu - 1)\, \alpha_f \end{cases} \tag{1.21}$$

A továbbiakban az (1.15) egyenlet néhány egyszerü változatával még foglalkozunk.

Az (1.18) egyenlettel kapcsolatban általánosságban egy megjegyzést kivánunk tenni. Jelöljük $r(t)$ -vel az egyenlet jobboldalán álló $\alpha_f \left[\sum_{i=0}^{l} (\mu_i - \nu_i)\, a_i^2(t) + 2 \sum_{i \neq i'}^{l} \nu_i\, \nu_{i'}\, a_i(t)\, a_{i'}(t) \right]$ kifejezést. Könnyen belátható, hogy $m_2(t)$ az $m_1(t)$ és $r(t)$ függvények konvolúciójából könnyen képezhető, azaz

$$m_2(t) = m_1(t) + \int_0^t m_1(t - t')\, r(t')\, dt' = m_1(t) + m_1(t) * r(t) . \tag{1.22}$$

A neutronok számának szórásnégyzetét egyszerüen a

$$d^2(t) = m_1(t) \left[1 - m_1(t) \right] + m_1(t) * r(t) \tag{1.23}$$

összefüggés alapján számithatjuk.

Az eddigiek során azt az esetet vizsgáltuk meg, hogyan alakul ki egy láncfolyamat végtelen kiterjedésünek tekinthető sokszorozó közegben, ha abba egyetlen-egy neutront injektálunk. A következőkben arra a kérdésre kivánunk választ adni, hogyan határozható meg a neutronok átlagos száma és szórásnégyzete valamely sokszorozó közegben, ha abba bizonyos valószinüségi törvény szerint emittáló neutronforrást helyezünk. Legyen $P_k(t)$ annak valószinü-

sége, hogy a neutronforrás a $(0,t)$ időközben éppen k neutront emittál. A legtöbb neutronforrás esetében teljesül az a kikötés, hogy

$$P_k(t) = e^{-S(t)} \frac{[S(t)]^k}{k!}, \tag{1.24}$$

ahol

$$S(t) = \int_0^t S_0(t')\,dt' \tag{1.25}$$

$S_0(t)$ a neutronforrás átlagos aktivitása t időpontban. ($S_0(t)dt$ a $(t, t+dt)$ időközben emittált neutronok átlagos számát adja meg.) Határozzuk meg most annak a valószínüségét, hogy t időpontban a sokszorozó közegben éppen m neutron legyen, azon feltevés mellett, hogy a neutronforrás $t=0$ időpontban került a sokszorozó közegbe. Jelöljék a $0 \le t_1 \le t_2 \le \cdots \le t_k \le t$ időpontok az egyes neutronok kibocsátásának időpontját. Ha $\zeta(t-t_i)$ -vel jelöljük azon neutronok számát, amelyeket a t_i időpontban kibocsátott neutron a $t > t_i$ időpontig létrehozott, akkor feladatunk egyszerüen a

$$\zeta_k(t) = \sum_{i=1}^{k} \zeta(t-t_i) \tag{1.26}$$

független valószinüségi változók összegével kapcsolatos $P[\zeta_k(t) = m] = R_m^k(t)$ eloszlásfüggvény meghatározására vezethető vissza, mivel az általunk keresett eloszlásfüggvény az

$$R_m(t) = \sum_{k=0}^{\infty} R_m^k(t) \tag{1.27}$$

összefüggés alapján származtatható.

Könnyü belátni, hogy annak a valószinüsége, hogy a $(0,t)$ időintervallumban kibocsátott neutron éppen a $(t', t'+dt')$ időközben jelenjen meg $S_0(t')\,dt'/S(t)$. Igy annak a valószinüsége, hogy a $(0,t)$ intervallumban kibocsátott neutron által létrehozott neutronok száma t időpontban éppen m , nem más, mint

$$A_m(t) = \frac{1}{S(t)} \int_0^t H_m(t-t')\,S_0(t')\,dt'. \tag{1.28}$$

Ezekután világos, hogy

$$R_m(t) = e^{-S(t)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{[S(t)]^k}{k!} \sum_{m_1+\cdots+m_k=m} \prod_{i=1}^{k} A_{m_i}(t) \tag{1.29}$$

Vezessük be az

$$F(t,x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mx} \cdot R_m(t) \tag{1.30}$$

generátorfüggvényt. Az (1.29)-ből azt kapjuk, hogy

$$F(t,x)=\exp\left\{-s(t)+\int_0^t f(t-t',x)\,s_0(t')\,dt'\right\}, \tag{1.31}$$

ahol $f(t,x)$ nem más, mint (1.6).

Az $F(t,x)$ függvényből az

$$M_1(t)=\left[\frac{\partial F(t,x)}{\partial x}\right]_{x=0}=\int_0^t s_0(t')\,m_1(t-t')\,dt' \tag{1.32}$$

összefüggés alapján könnyen kiszámithatjuk a neutronok számának átlagát t időpontban. Hasonlóan járhatunk el a neutronok számának négyzetátlaga meghatározásánál is. Ugyanis

$$M_2(t)=\left[\frac{\partial^2 F(t,x)}{\partial x^2}\right]_{x=0}=M_1^2(t)+\int_0^t s_0(t')\,m_2(t-t')\,dt'. \tag{1.33}$$

A szórásnégyzetre pedig egyszerüen a

$$D^2(t)=\int_0^t m_2(t-t')\,s_0(t')\,dt' \tag{1.34}$$

összefüggés adódik. Az $M_1(t), M_2(t)$ és $D^2(t)$ mennyiségek az $m_1(t)$ és $m_2(t)$ birtokában könnyen kiszámithatók.

II.

Foglalkozzunk most azzal a kérdéssel, hogyan határozhatjuk meg a hasadás folyamán keletkező neutronok számának szórásnégyzetét neutronforrással ellátott sokszorozó közegbe helyezett neutrondetektor által bizonyos idő alatt regisztrált neutronok számának ingadozásából. Mindenekelőtt tételezzük fel, hogy olyan neutrondetektor rendszerrel dolgozunk, amelyre vonatkozóan a sokszorozó közeg bármely pontjából elinduló neutron regisztrálásának valószinüsége ugyanakkora. Ez a feltevés megegyezik Hoffmann [1], [2] számitásaiban alkalmazott feltevéssel. Legyen $\varepsilon\,dt$ annak a valószinüsége, hogy a $(t,t+dt)$ intervallumban valamely kiszemelt neutron regisztrálódik. Jelöljük $W_n(t_0,t)$ -vel annak a valószinüségét, hogy a (t_0, t_0+t) időközben a detektorrendszer éppen n neutront regisztrál azon feltevés mellett, hogy a neutronforrást t_0 idővel a regisztrálás elkezdése előtt helyeztük el a sokszorozó közegben. Ha ismét feltételezzük, hogy a neutronforrás az (1.24) eloszlás szerint emittál, akkor könnyü megmutatni, hogy a

$$G(t_o, t, x) = \sum_{n=0} W_n(t_o, t)\, e^{nx} \qquad (2.1)$$

generátorfüggvényt a

$$G(t_o, t, x) = \exp\left\{ - S(t_o + t) + \int_o^{t_o} g(t_o - t_o', t, x)\, S_o(t_o')\, dt_o' + \right.$$

$$\left. + \int_o^{t} g(t - t', x)\, S_o(t' + t_o)\, dt' \right\} \qquad (2.2)$$

összefüggés szolgáltatja, ahol

$$g(t_o, t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n(t_o, t)\, e^{nx}, \qquad (2.3)$$

míg

$$g(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n(t)\, e^{nx}. \qquad (2.4)$$

A (2.3) és (2.4) alatti generátorfüggvények megalkotásánál felhasznált $w_n(t_o, t)$ és $w_n(t)$ eloszlásfüggvények jelentését a következőképpen adhatjuk meg: $w_n(t_o, t)$ annak a valószínüsége, hogy a $(t_o, t_o + t)$ időközben a detektorrendszer éppen n neutront regisztrál, azon feltevés mellett, hogy a regisztrálás elkezdése előtt t_o idővel a sokszorozó rendszerben mindössze egyetlen neutron volt; $w_n(t)$ viszont annak a valószinüsége, hogy t idő alatt detektorrendszerünk éppen n neutront regisztrál, azon feltevés mellett, hogy a regisztrálás elkezdésekor a sokszorozó közegben mindössze egy neutron volt található. Nyilván $w_n(t_o = 0, t) = w_n(t)$.

Az (1.7) egyenlet megalkotásánál közölt gondolatmenet felhasználásával megmutatható, hogy

$$\frac{\partial g(t_o, t, x)}{\partial t_o} = \alpha_a + \varepsilon + \alpha_f\, \pi\left[\vec{\psi}(t_o, t, x)\right] - \alpha_o r_o\, g(t_o, t, x), \qquad (2.5)$$

és

$$\frac{\partial g(t, x)}{\partial t} = \alpha_a + \varepsilon e^{x} + \alpha_f\, \pi\left[\vec{\psi}(t, x)\right] - \alpha_o r_o\, g(t, x), \qquad (2.6)$$

ahol $\pi(\vec{\psi})$ a $p(k_o, \ldots, k_l)$ eloszlásfüggvény generátorfüggvénye. A $\vec{\psi} = \left[\psi_o, \psi_1, \ldots, \psi_2\right]$ vektor komponenseit meghatározó összefüggések ugyanazok, mint az (1.9) és (1.10) alatt, csak az $f(t,x)$ függvény helyébe a megfelelő $g(t_o, t, x)$, illetve $g(t,x)$ függvényt kell irnunk. Az $r_o = 1 + \varepsilon/\alpha_o$ korrekciós tényező a detektorrendszer abszorpcióját veszi figyelembe. Természetesen $g(t_o = 0, t, x) = g(t, x)$.

A(2.5) alatti kifejezésből a

$$\left[\frac{\partial g(t_o,t,x}{\partial x}\right]_{x=0} = n_1(t_o,t) \qquad (2.7)$$

összefüggés alapján könnyen származtathatjuk a (t_o, t_o+t) időközben regisztrált neutronok átlagos számát megadó egyenletet azon feltétel mellett, hogy a regisztrálás elkezdése előtt t_o idővel a sokszorozó közegben mindössze egy neutron volt található. A neutronok számának négyzetátlagát pedig a

$$\left[\frac{\partial^2 g(t_o,t,x)}{\partial x^2}\right]_{x=0} = n_2(t_o,t) \qquad (2.8)$$

összefüggés alapján származtatható egyenletből határozhatjuk meg. (Ismét rámutatunk arra a körülményre, hogy $n_1(t_o=0,t)=n_1(t)$ és $n_2(t_o=0,t)=n_2(t)$ ahol $n_1(t)$ és $n_2(t)$ a $g(t,x)$ generátorfüggvényből származtatható momentumok.)

A (2.2) alatti kifejezésből hasonlóan mint az (1.31)-ből származtatható az

$$N_1(t_o,t)=\int_o^{t_o} S_o(t'_o)\,n_1(t_o,t'_o,t)\,dt'_o+\int_o^{t} S_o(t_o+t')\,n_1(t-t')\,dt' \qquad (2.9)$$

és az

$$N_2(t_o,t)=N_1^2(t_o,t)+\int_o^{t_o} S_o(t'_o)\,n_2(t_o-t'_o,t)\,dt'_o+\int_o^{t} S_o(t_o+t')\,n_2(t-t')\,dt' \qquad (2.10)$$

momentum. $N_1(t_o,t)$ a (t_o, t_o+t) időközben regisztrált neutronok számának átlagát, míg $N_2(t_o,t)$ pedig négyzetátlagát adja meg, figyelembevéve, hogy a regisztrálás elkezdése előtt t_o idővel (1.24) szerint emittáló neutronforrás került a sokszorozó rendszerbe. A teljesség kedvéért irjuk még fel a

$$D_c^2(t_o,t)=\int_o^{t_o} S_o(t'_o)\,n_2(t_o-t'_o,t)\,dt'_o+\int_o^{t} S_o(t_o+t')\,n_2(t-t')\,dt' \qquad (2.11)$$

szórásnégyzetet is. Származtassuk mindenekelőtt a (2.7) alapján az $n_1(t_o,t)$ -t meghatározó egyenletet. Rövid számitás után azt találjuk, hogy

$$\frac{\partial n_1(t_o,t)}{\partial t_o} = -\alpha r\, n_1(t_o,t)+\alpha_f \sum_{i=1}^{l} \nu_i \lambda_i \int_o^{t_o} e^{-\lambda_i t'_o}\, n_1(t_o-t'_o,t)\,dt'_o \qquad (2.12)$$

A (2.12) egyenlet $n_1(0,t)=n_1(t)$ kezdőfeltételét a

$$\frac{dn_1(t)}{dt} = \varepsilon-\alpha r\, n_1(t)+\alpha_f \sum_{i=1} \nu_i \lambda_i \int_o^{t} e^{-\lambda_i t'}\, n_1(t-t')\,dt' \qquad (2.13)$$

egyenlet határozza meg. Az r korrekciós faktor most $1+\varepsilon/\alpha$.

A (2.12) alatti egyenlet pontosan olyan alaku, mint az (1.15) alatti. Igy

$$n_1(t_0,t) = m_1^*(t_0)\, n_1(t) \qquad (2.14)$$

ahol $m_1^*(t)$ az (1.15) alatti egyenlet megoldásából ugy adódik, hogy α helyébe mindenütt αr -t és t helyébe t_0 -át irunk, mig $n_1(t)$ a (2.13)-nak $n_1(0)=0$ kezdőfeltétel melletti megoldása.

A második momentumra a

$$\frac{\partial n_2(t_0,t)}{\partial t_0} = -\alpha r\, n_2(t_0,t) + \alpha_f \sum_{i=1}^{l} \nu_i \lambda_i \int_0^{t_0} e^{-\lambda_i t_0'}\, n_2(t_0-t_0',t)\, dt_0' + h(t_0,t) \qquad (2.15)$$

egyenlet adódik, ahol

$$h(t_0,t) = \alpha_f n_1^2(t)\left[\sum_{i=0}^{l}(\mu_i-\nu_i)a_i^{2*}(t_0) + 2\sum_{i\neq i'}^{l}\nu_i\,\nu_{i'}\,a_i^*(t_0)a_{i'}^*(t_0)\right]. \qquad (2.16)$$

A (2.16)-ban szereplő $a_i^*(t_0)$ mennyiségek az (1.18') alatti $a_i(t)$ mennyiségből egyszerüen ugy származtathatók, hogy $m_1(t)$ helyébe mindenütt $m_1^*(t_0)$ -át irunk. A (2.15) egyenlet $n_2(0,t)=n_2(t)$ kezdőfeltételét a

$$\frac{d\,n_2(t)}{dt} = \varepsilon - \alpha r\, n_2(t) + \alpha_f \sum_{i=1}^{l} \nu_i \lambda_i \int_0^{t} e^{-\lambda_i t'}\, n_2(t-t')\, dt' + h(t) \qquad (2.17)$$

egyenletből határozhatjuk meg, figyelembevéve, hogy $n_2(0)=0$. A (2.17)-ben szereplő $h(t)$ a következőképpen fejezhető ki:

$$h(t) = \alpha_f\left[\sum_{i=0}^{l}(\mu_i-\nu_i)\,b_i^2(t) + 2\sum_{i\neq i'}^{l}\nu_i\,\nu_{i'}\,b_i(t)\,b_{i'}(t)\right], \qquad (2.18)$$

ahol $b_0(t)=n_1(t)$ és $b_i(t)=\lambda_i\int_0^t e^{-\lambda_i t'}\, n_1(t-t')\,dt'$ $(i=1,2,\ldots,l)$. Rövid számolás után belátható, hogy

$$n_2(t_0,t) = m_1^*(t_0)\left[n_2(t) - n_1^2(t)\right] + n_1^2(t)\, m_2^*(t_0), \qquad (2.19)$$

ahol

$$m_2^*(t_0) = m_1^*(t_0) + m_1^*(t_0) * r^*(t_0)$$

és

$$n_2(t) = n_1(t) + m_1^*(t_0) * h(t). \qquad (2.20)$$

A * szimbólum itt is a konvolució-alkotást jelzi. Az $r^*(t_0)$ ugyanugy származtatható az $r(t)$ -ből, mint $m_1^*(t)$ az $m_1(t)$ -ből.

A (2.14) és (2.19) összefüggések alapján könnyen kiszámithatjuk a minket érdeklő $N_1(t_o,t), N(t_o)$ és $D_c^2(t_o,t)$ mennyiségeket. Különösen fontos számunkra a $D_c^2(t_o,t)/N_1(t_o,t)$ hányados, ugyanis Hoffmann, Serber és Feynmann mérései éppen ennek a hányadosnak a meghatározását teszik lehetővé. Rövid számolás után azt találjuk, hogy

$$\frac{D_c^2(t_o,t)}{N_1(t_o,t)} =$$

$$= 1 + \frac{n_1^2(t)\int_o^{t_o} m_1^*(t_o')*r^*(t_o')dt_o' + m_1^*(t)*h(t)\int_o^{t_o} m_1^*(t_o')dt_o' + \int_o^{t} m_1^*(t')*h(t')dt'}{n_1(t)\int_o^{t_o} m_1^*(t_o')dt_o' + \int_o^{t} n_1(t')dt'} \qquad (2.21)$$

Ez a kifejezés általánosabb a Hoffmann [1] által levezetettnél. Lehetővé teszi a késő neutronok hatásának pontos figyelembevételét, amire a Hoffmann által közölt ad hoc eljárás nem ad módot.

III.

Az előzőkben elmondottakat illusztráljuk néhány példával.

a/

Először foglalkozzunk a legegyszerűbb esettel; tekintsünk el a késő neutronok hatásától.

1. Az (1.15) és (1.18) alatti egyenletekből az (1.14)-re és (1.23)-ra igen egyszerű kifejezések adódnak. Irjuk fel a szórásnégyzet és a neutronok átlagos számának hányadosát. Azt találjuk, hogy

$$\frac{d^2(t)}{m_1(t)} = \left(1 + \frac{\mu_o - \nu_o}{\alpha \tau_f}\right)\left(1 - e^{-\alpha t}\right) \qquad (3.1)$$

Egyszerüen belátható, hogy az (1.16) alatt definiált paramétert a prompt-neutronokra vonatkozó ρ_o reaktivitással, illetve ugyancsak a prompt-neutronokra vonatkozó χ_o sokszorozási tényezővel az $\alpha = \frac{1-\chi_o}{\tau_o} = \frac{\rho_o}{l_o}$ összefüggés kapcsolja össze, ahol $l_o = \frac{\tau_o}{\chi_o} = \frac{\tau_o}{\nu_o}$ a prompt-neutronok effektiv átlagos élettartama. A neutronok számának szórásnégyzete kritikus esetben $(\alpha = 0)$, amint ez a sokszorozással járó folyamatok elméletéből ismeretes a

$$d_k^2(t) = \frac{\mu_o - \nu_o}{\tau_f}\, t \qquad (3.1')$$

törvény szerint az idővel lineárisan nő.

2. Ha a sokszorozó közegbe neutronforrást helyezünk, amely az (1.24) szerint emittál, akkor a neutronok számának átlagát és szórását t időpontban az (1.32) és (1.34) összefüggések alapján számithatjuk. Célszerü a szórásnégyzet és a neutronok átlagos számának hányadosát kiszámitani, mivel ez a mennyiség független a neutronforrás intenzitásától. Ha $s(t) = ct$, azt találjuk, hogy

$$\frac{D^2(t)}{M_1(t)} = 1 + \frac{1}{2}\,\frac{\mu_o - \nu_o}{\alpha \tau_f}\left(1 - e^{-\alpha t}\right) \qquad (3.2)$$

Kritikus rendszerben $\alpha = 0$:

$$\frac{D_k^2(t)}{M_1^k(t)} = 1 + \frac{1}{2}\,\frac{\mu_o - \nu_o}{\tau_f}\, t \qquad (3.2')$$

3. A (2.21) alatti összefüggésből a késő neutronok hatásának figyelembevétele nélkül megkapjuk a Hoffmann által bevezetett összefüggést, ha feltesszük, hogy $s(t) = ct$ és $t_o \longrightarrow \infty$. Tehát ebben az esetben

$$\frac{D_c^2(\infty, t)}{N_1(\infty, t)} = 1 + \frac{\varepsilon_o(\mu_o - \nu_o)}{(\alpha r \tau_f)^2}\left(1 - \frac{1 - e^{-\alpha r t}}{\alpha r t}\right), \qquad (3.3)$$

ahol a teljes azonosság kedvéért a detektorrendszer hatásfokát, ugyanugy mint Hoffmann, az időegység alatt bekövetkező hasadások átlagos számával fejezzük ki, azaz az $\varepsilon = \varepsilon_o \alpha_f$ irásmódot használtuk.

b/

Vegyük most figyelembe a késő neutronokat. A számitások egyszerüsitése érdekében csupán egyetlen (átlagolt) késő csoport hatásával törödjünk. Jelöljük β_i -vel a ν_i/ν hányadost. Az átlagolt késő csoport bomlási állandójául a

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^{l} \beta_i \lambda_i}{\beta}\,, \qquad \beta = \sum_{i=1}^{l} \beta_i \qquad (3.4)$$

mennyiséget választjuk. Jelölje végül $\nu_d = \sum_{i=1}^{l} \nu_i = \beta \nu$ a késő neutronok átlagos számát. Számitsuk ki most az a/ alatti 1., 2. és 3. esetre érvényes megfelelő mennyiségeket.

1. Az (1.15)-ből ebben az esetben a jólismert

$$m_1(t) = \frac{\lambda - \omega_1}{\omega_2 - \omega_1}\, e^{-\omega_1 t} - \frac{\lambda - \omega_2}{\omega_2 - \omega_1}\, e^{-\omega_2 t}\,, \qquad (3.5)$$

összefüggést származtathatjuk, ahol

$$\omega_{1,2} = \frac{1}{2}\left[\alpha + \lambda \mp \sqrt{(\alpha+\lambda)^2 - 4\lambda\omega}\right], \qquad (3.6)$$

és

$$\omega = \alpha_a - (\nu - 1)\alpha_f = \alpha - \nu_d \alpha_f \,. \qquad (3.7)$$

Felirhatjuk még, hogy $\omega = \varrho/l$ és $\alpha = \frac{\beta - \varrho}{l}$, ahol ϱ a reaktivitás és $l = \frac{\zeta_f(1-\beta)}{\nu_0} + \frac{\zeta_f \beta}{\nu_d}$ a neutronok effektiv átlagos élettartama az adott rendszerben.

Az (1.23)-ból az (1.15) alatti egyenlet megoldását, valamint az $r(t)$ -re származtatott kifejezést felhasználva, a neutronok számának szórásnégyzetére a következő kifejezést kapjuk:

$$d^2(t) = d_1 e^{-\omega_1 t} + d_2 e^{-\omega_2 t} + d_3 e^{-(\omega_1+\omega_2)t} + d_4 e^{-2\omega_1 t} + d_5 e^{-2\omega_2 t}, \qquad (3.8)$$

ahol

$$d_1 = \frac{\lambda-\omega_1}{\omega_2-\omega_1}\left(1 + \frac{r_1}{\omega_1} + \frac{r_2}{\omega_2} + \frac{r_3}{2\omega_2-\omega_1}\right), \quad d_2 = -\frac{\lambda-\omega_2}{\omega_2-\omega_1}\left(1 + \frac{r_1}{2\omega_1-\omega_2} + \right.$$

$$\left. + \frac{r_2}{\omega_1} - \frac{r_3}{\omega_2}\right), \quad d_3 = 2\frac{(\lambda-\omega_1)(\lambda-\omega_2)}{(\omega_2-\omega_1)^2} + \left(\frac{\lambda}{\omega_1\omega_2} - \frac{1}{\omega_1} - \frac{1}{\omega_2}\right) r_2 \,, \qquad (3.9)$$

$$d_4 = -\left(\frac{\lambda-\omega_1}{\omega_2-\omega_1}\right)^2 + \frac{\lambda-2\omega_1}{\omega_1(2\omega_1-\omega_2)} r_1 \,, \quad d_5 = -\left(\frac{\lambda-\omega_2}{\omega_2-\omega_1}\right)^2 + \frac{\lambda-2\omega_2}{\omega_2(2\omega_2-\omega_1)} r_3 \,,$$

mig

$$r_1 = \alpha_f \left(\frac{\omega_1}{\omega_2-\omega_1}\right)^2 \left(\frac{\lambda}{\omega_1^2}\Omega_0 - 2\frac{\lambda}{\omega_1}\Omega_1 - \Omega_2\right)$$

$$r_2 = -2\alpha_f \frac{\omega_1\omega_2}{(\omega_2-\omega_1)^2}\left(\frac{\lambda^2}{\omega_1\omega_2}\Omega_0 - \lambda\left(\frac{1}{\omega_1} + \frac{1}{\omega_2}\right)\Omega_1 + \Omega_2\right) \qquad (3.10)$$

$$r_3 = \alpha_f \left(\frac{\omega_2}{\omega_2-\omega_1}\right)^2 \left(\frac{\lambda^2}{\omega_2^2}\Omega_0 - 2\frac{\lambda}{\omega_2}\Omega_1 + \Omega_2\right)$$

A (3.1o) alatti kifejezésekben az $\Omega_0 = \mu - \nu + 2\nu_0\nu_d$ $\Omega_1 = \mu_0 - \nu_0 + \nu_0\nu_d$ és $\Omega_2 = \mu_0 - \nu_0$ jelöléseket vezettük be. Irjuk fel a szórásnégyzetet az $\omega = 0$ kritikus állapotra is. Rövid számolás után azt kapjuk, hogy

$$d_k^2(t) = d_k^0 + d_k^1 e^{-(\lambda+\beta/l)t} + d_k^2 e^{-2(\lambda+\beta/l)t} , \qquad (3.11)$$

ahol

$$d_k^0 = \Delta + \Delta^2\left(\frac{\Omega_2}{2\lambda\tau_f} - 1\right) + \Delta^3 \frac{\Omega_0+\Omega_1}{\lambda\tau_f} - \frac{5}{2}\Delta^4 \frac{\Omega_0}{\lambda\tau_f} + \Delta^3 \Omega_0 t/\tau_f ,$$

$$d_k^1 = 1 + \Delta\left(\frac{\Omega_2}{\lambda\tau_f} - 3\right) + 2\Delta^2\left(1 - \frac{\Omega_1 + \tfrac{1}{2}\Omega_2}{\lambda\tau_f}\right) + 2\Delta^4 \frac{\Omega_0}{\lambda\tau_f} + \qquad (3.12)$$

$$+ 2\Delta(1-\Delta)(\Omega_1 - \Delta\Omega_0)t/\tau_f ,$$

$$d_k^2 = -1 + \Delta\left(1 - \frac{\Omega_2}{2\lambda\tau_f}\right) + \Delta^2\left(\frac{4\Omega_1+\Omega_2}{2\lambda\tau_f} - 1\right) - \Delta^3 \frac{\Omega_0+\Omega_1}{\lambda\tau_f} +$$

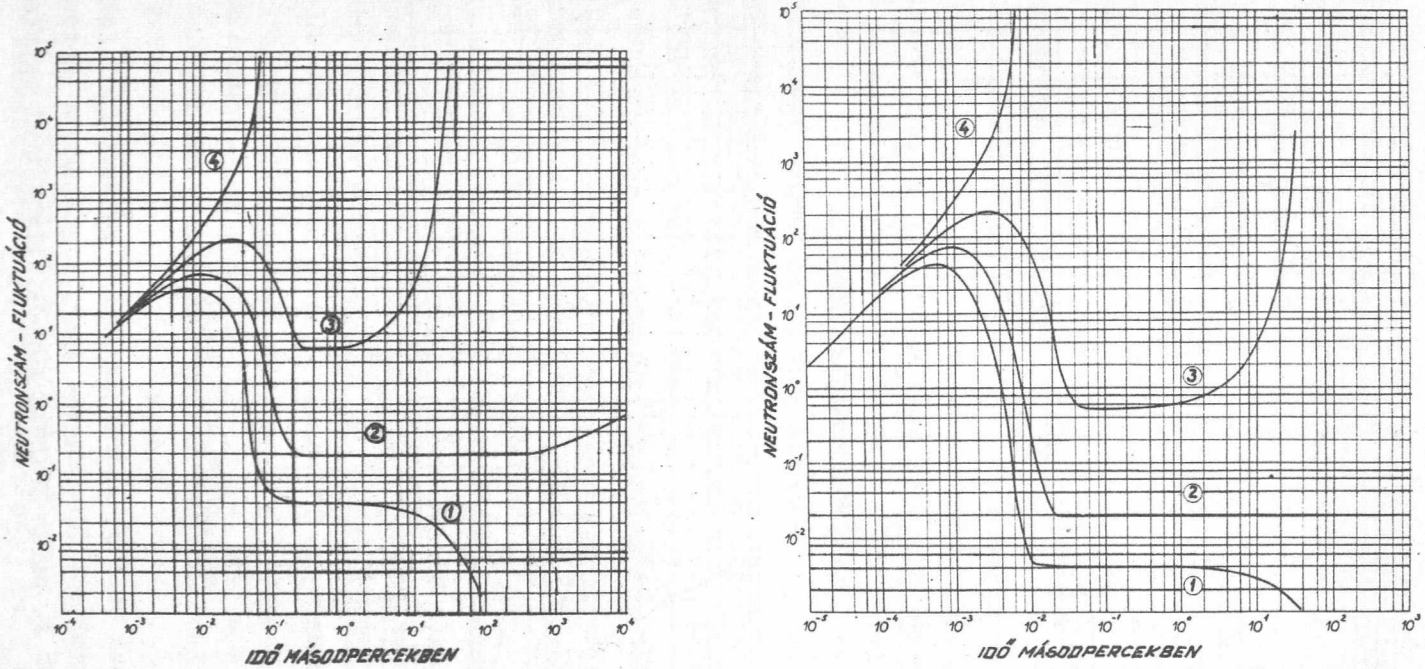
$$+ \frac{1}{2}\Delta^4 \frac{\Omega_0}{\lambda\tau_f}$$

A (3.12)-ben szereplő $\Delta = \frac{l}{1+\beta/\lambda\, l}$

Az 1.sz. (a és b) ábrán láthatjuk különböző reaktivitások esetében a szórásnégyzet időtől való függését, a prompt-kritikus esetre vonatkozó görbétől eltekintve a neutronok átlagos élettartamától függően ($l = 10^{-5}$ sec a/ ábra és $l = 10^{-4}$ sec b/ ábra) néhány milliszekundumnyi, illetve néhány századszekundumnyi idő után a kezdetben erősen növekedő szórásnégyzet hirtelen csökkenő tendenciát mutat, majd bizonyos időn át a késő neutronok hatásának megjelenéséig állandó marad s végül aszerint, hogy $\rho > 0$ vagy $\rho < 0$ növekedni, illetve csökkenni kezd. A $\rho = 0$ és $l = 10^{-5}$ sec esetben a szórásnégyzet csaknem lineárisan nő az idővel, ha már $t > 10^3$ sec. Ha $l = 10^{-4}$ sec, a lineáris növekedés csak $t > 10^4$ sec időértékeknél válik jelentőssé. Prompt-kritikus esetben a szórásnégyzet rendkivül gyorsan bekövetkező monoton növekedést mutat.

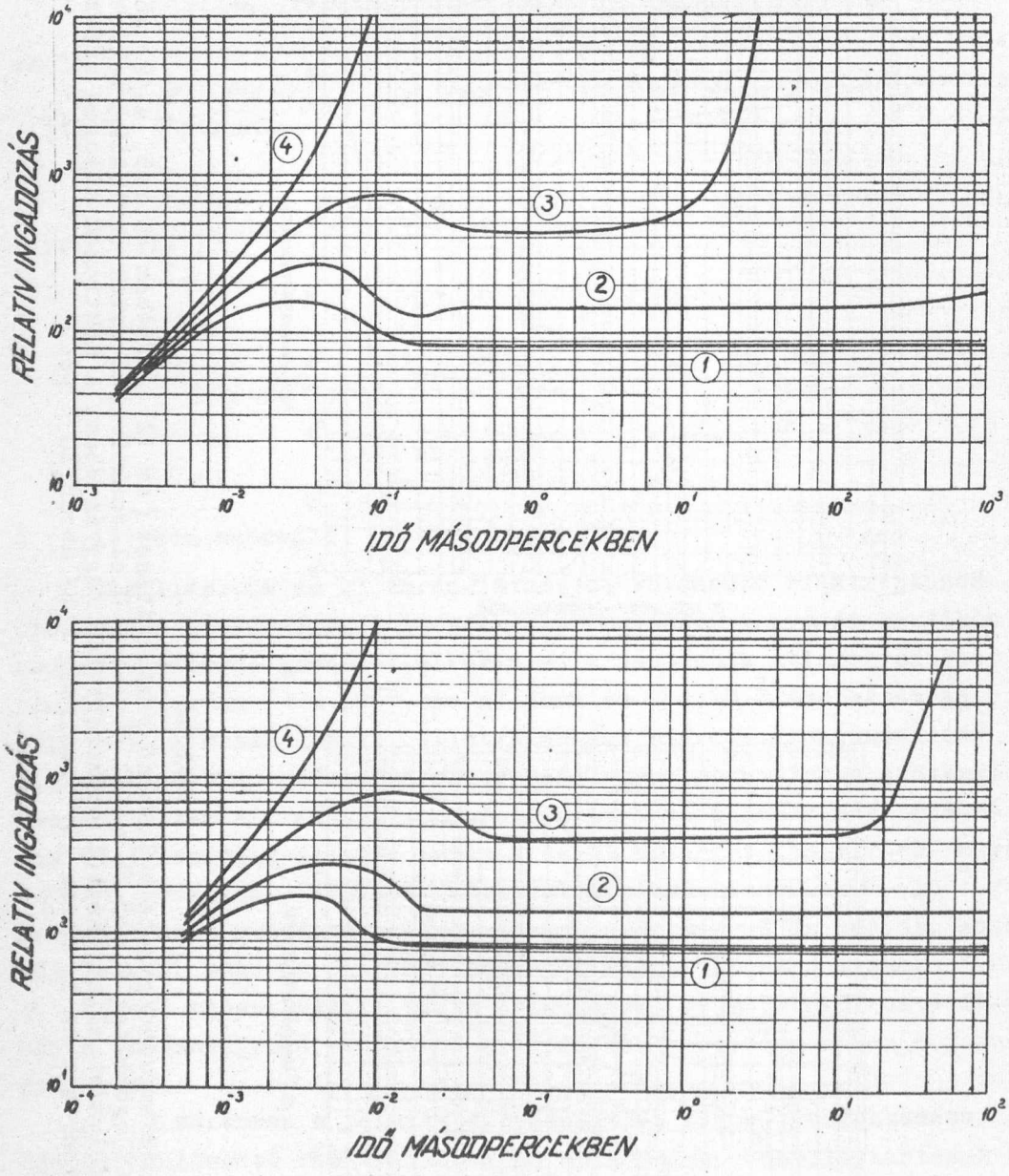
A 2.sz.ábrán a relativ szórásnégyzet időbeli viselkedése látható különböző reaktivitások és átlagos neutron élettartamok mellett.

2. Könnyedén meghatározhatjuk az (1.32) és (1.34) összefüggések alapján a neutronforrással ellátott sokszorozó közegekre vonatkozó relativ-szórásnégyzet időtől való függését a késő neutronok szerepének figyelembevételével is. Tekintettel azonban arra, hogy a (3.2)-höz képest ujszerü eredményt nem várhatunk, a számi-



1. ábra

Neutronok számának szórásnégyzete különböző reaktivitások (az (1) görbéhez -0,oo5, a (2) görbéhez zérus, a (3) görbéhez 0,oo5 és a (4) görbéhez 0,ol reaktivitás érték tartozik) mellett a sokszorozási folyamat elinditásától számitott idő függvényében. A neutronok átlagos effektiv élettartama az a/ ábrán 10^{-4} sec, mig a b/ ábrán 10^{-5} sec.



2.ábra

Neutronok számának relativ szórásnégyzete a sokszorozási folyamat elindulásától számitott idő függvényében. A görbékhez tartozó fizikai állandók az 1. ábrán látható görbék állandóival egyeznek meg.

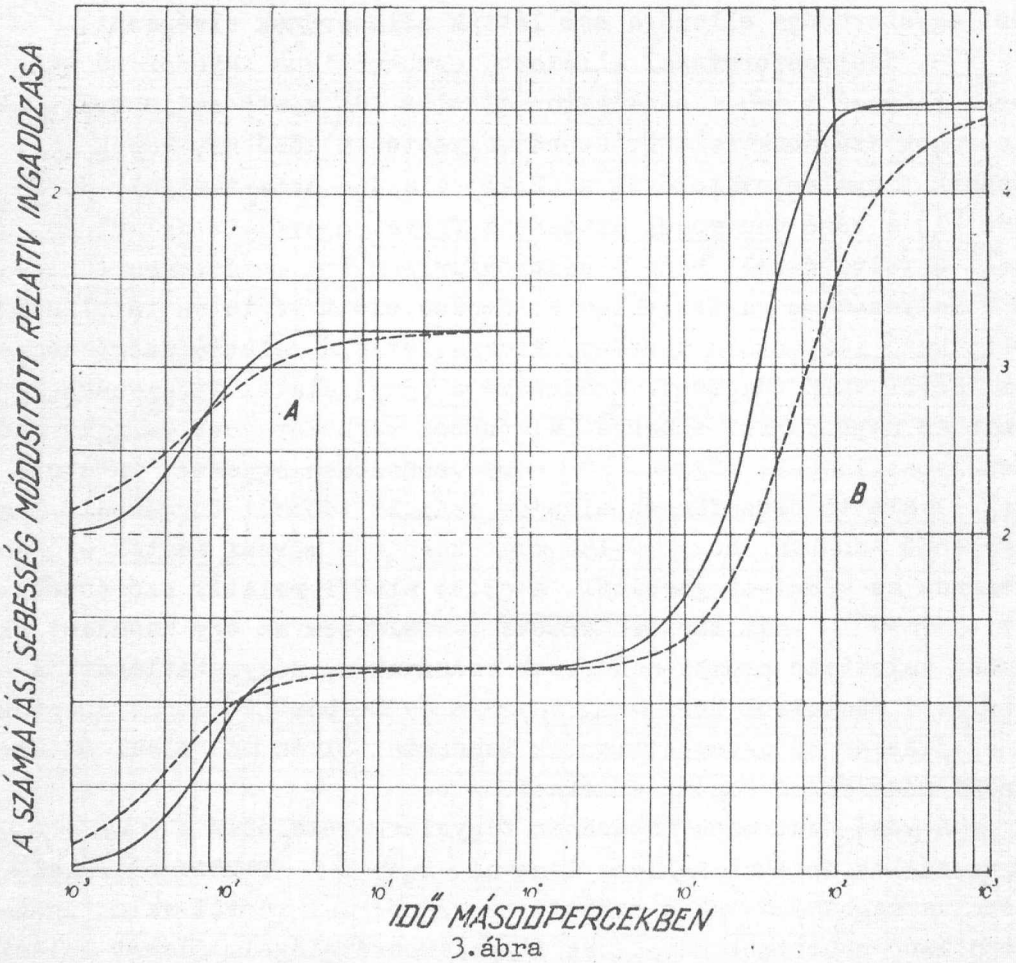
tást egyszerüsége ellenére sem láttuk célszerünek elvégezni.

3. Neutronforrással ellátott, szubkritikus sokszorozó közegbe helyezett neutron-detektor által t idő alatt regisztrált neutronok számának relativ szórásnégyzetét a késő neutronok hatásának figyelembevételével a (2.21) alapján számithatjuk. Hoffmann [1] a késő neutronok hatásának figyelembevétele nélkül és azzal a feltevéssel, hogy a neutronforrásnak a rendszerbe történő behelyezése a regisztrálás elkezdése előtt végtelen távolinak tekinthető időpontban történt, kiszámitotta a relativ szórásnégyzet időtől való függését. Eredménye a (3.3) alatti kifejezéssel pontosan megegyezik. A mérési adatokból meghatározott relativ szórásnégyzet időbeli függése [2] nagy vonásokban egyezést mutatott a (3.3) alatti összefüggés alapján számolt időbeli függéssel. Megjegyzendő azonban, hogy 50-150 msec között a mérési adatok erősen eltérnek az elméleti görbétől. A (3.3) alatti relativ szórásnégyzet $t \to \infty$ -hez tartozó értéke tartalmazza az egy hasadási aktusban keletkező prompt-neutronok számának μ_o négyzetátlagát. A kisérleti adatokból Hoffmann, Feynman és Serber [2] meghatározták μ_o értékét és jó egyezést kaptak Leachman, Diven [4] által μ_o -ra direkt módszerrel kapott értéknél.

A késő neutronok hatásának figyelembevételéhez a $\mu = \mu_o + \mu_d$ négyzetátlag értéket kellene ismerni. $\mu_d \sim 0,1$ fiktiv értékkel számolva meghatároztuk a relativ szórásnégyzet időtől való függését a késő neutronok hatásának figyelembevételével. (Ismét feltettük, hogy a neutronforrást a regisztrálás elkezdése előtt végtelen távolinak tekinthető időpontban helyeztük el a sokszorozó rendszerben.) A 3.sz.ábrán látható a módositott* relativ szórásnégyzet időtől való függése a $\varrho = -0,0084$ és $l = 5,36.10^{-5}$, valamint $\tau_f = 1,33.10^{-4}$ paraméterekkel jellemzett rendszerre vonatkozóan. A szaggatott A görbe arra az esetre vonatkozik, amikor a késő neutronok hatását nem vesszük figyelembe, mig a szaggatott B görbe a késő neutronok hatásának figyelembevételével számitott időfüggést szemlélteti.

---

* A módositás azt jelenti, hogy mind az A, mind a B ábrán a (2.21) alatti relativ szórásnégyzetből csak a Poisson-eloszlás relativ szórásnégyzetétől (ami éppen egy) való eltérést tüntettük fel.

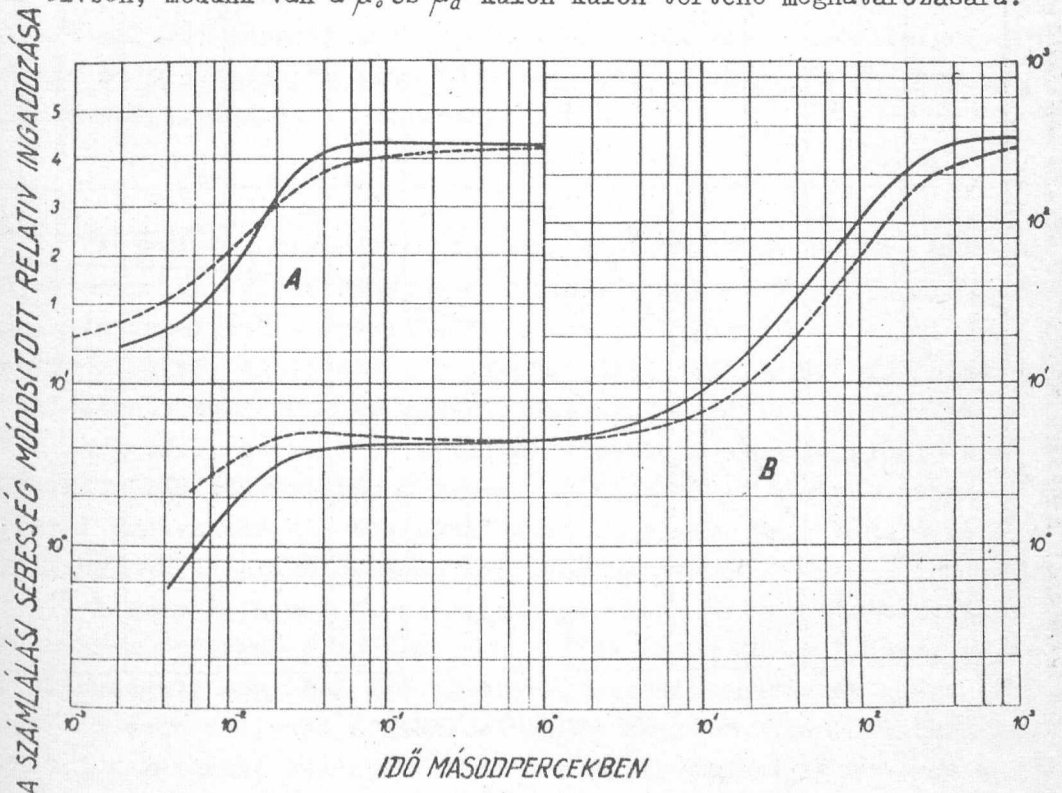


3.ábra

Neutronforrással ellátott szubkritikus sokszorozó közegbe helyezett neutrondetektor által regisztrált neutronok számának módositott relativ szórásnégyzete, a regisztrálás idő függvényében. A kihuzott görbék impulzus üzemben, mig a szaggatott görbék stacionárius üzemben müködő neutronforrással ellátott sokszorozó közegre vonatkoznak. A B görbéket a késő neutronok hatásának figyelembevételével, mig az A görbéket csak a prompt neutronok figyelembevételével számitottuk. A számitásoknál a szubkritikus sokszorozó közeg reaktivitását -0,0084-nek, a neutronok átlagos effektiv élettartamát $5{,}36.10^{-5}$ sec-nak, az átlagos hasadási élettartamot $1{,}33.10^{-4}$ sec-nak, a detektor hatásfokát $3{,}51.10^{-4}$ sec-nak választottuk.

A szaggatott B görbe első szakasza pontosan megegyezik a szaggatott A görbével. A szaggatott B görbe első lapos szakaszához tartozó ordináta érték nagy pontossággal megegyezik a szaggatott A görbe $t \longrightarrow \infty$ -hez tartozó (de gyakorlatilag már kisebb

t értékekre is kellő pontossággal kiadódó) ordináta értékével. Figyelemreméltó az a körülmény. hogy a szaggatott B görbe $t \to \infty$ - hez tartozó ordináta értékéből a $\mu = \mu_0 + \mu_d$ állandót meghatározhatjuk. A szaggatott B görbét meghatározó kisérleti adatokból tehát egyszerre két jellemző adatot (az első és a második lapos szakaszhoz tartozó ordináta értéket) nyerhetünk és igy legalább is elvben, módunk van a μ_0 és μ_d külön-külön történő meghatározására.

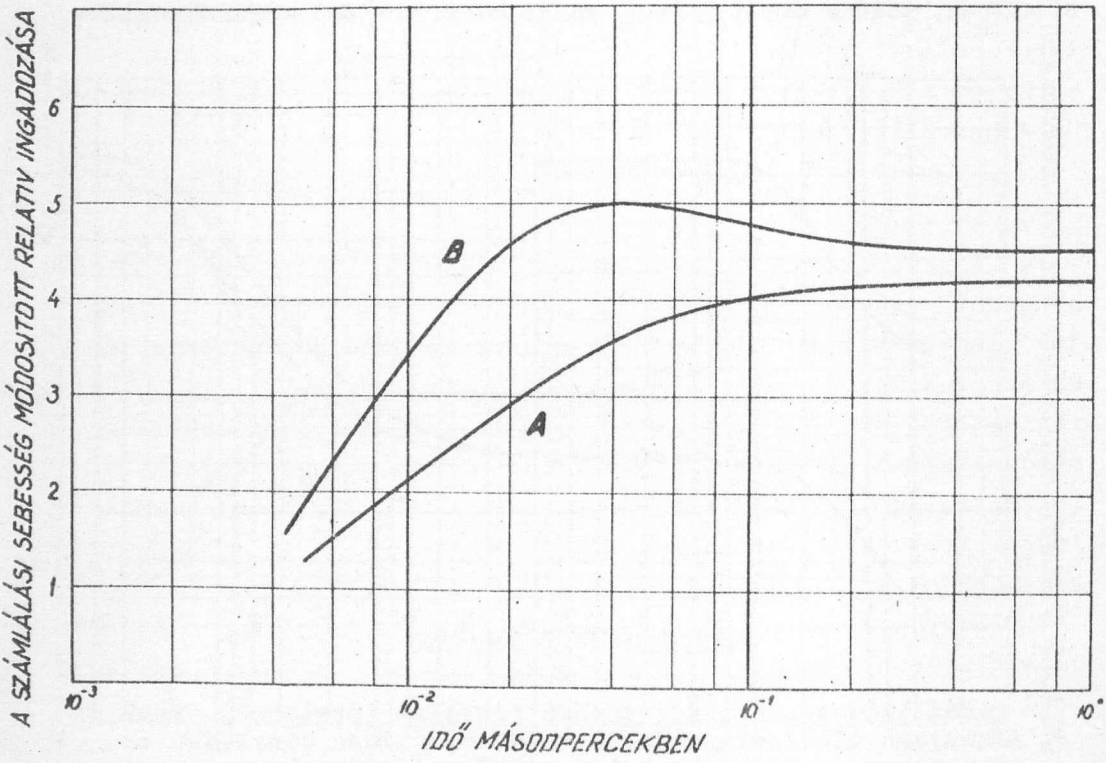


4.ábra

Ugyanaz mint a 3.számu, csak a sokszorozó közeg reaktivitása -0,00096, a neutron átlagos effektiv élettartama $5{,}40.10^{-4}$ sec, átlagos hasadási élettartama pedig $1{,}35.10^{-4}$ sec.

A 4.sz.ábrán a -0,00096 reaktivitásu és $l = 5{,}42.10^{-4}$ valamint $\tau_f = 1{,}35.10^{-4}$ paraméterekkel jellemzett sokszorozó rendszerre vonatkozó módositott relativ szórásnégyzet időtől való függését láthatjuk. A Hoffmann, Feynman és Serber [2] által vizsgált

sokszorozó rendszer paraméter értékei alig különböznek az előbbi értékektől. Figyelemreméltó, hogy a kritikus állapothoz közelebb lévő sokszorozó rendszerekben a késő-neutronok hatásának figyelembevételével számitott módositott relativ szórásnégyzet az első lapos szakasza előtt kis lokális maximummal rendelkezik. A köny-



5.ábra

A 4.ábrán látható A és B szaggatott vonalu görbék első szakasza.

nyebb összehasonlithatóság kedvéért az 5.sz.ábrán feltüntettük a késő-neutronok figyelembevételével, illetve figyelembevétele nélkül számitott görbék első szakaszát. Ha Hoffmann, Feynman és Serber nagy statisztikus hibával rendelkező mérési adatait [2] az 5.sz. ábra görbéivel összehasonlitjuk, láthatjuk, hogy a késő neutronok hatását figyelembevevő B görbe menete nagyobb hasonlóságot mutat a kisérleti adatokból szerkeszthető görbével, mint a késő neutronok hatását ignoráló A görbe.

A 4.sz.ábra szaggatott vonalu A és B görbéinek összehasonlitása viszont arról győz meg bennünket, hogy a kritikushoz közeli állapotban lévő rendszerekre (mint amilyen a Hoffmann, Feynman és Serber által tanulmányozott rendszer is volt) meglehetősen pontatlan az a kijelentés, hogy 300 msec körül a módositott relativ szórásnégyzet felveszi a prompt neutronokra vonatkozó módositott relativ szórásnégyzet aszimptotikus értékét. Kis reaktivitások mellett azonban ennek a kijelentésnek van jogosultsága, mint ahogy ez a 3.sz.ábrán látható szaggatott vonalu A és B görbék összehasonlitásából is kiderül.

c/

A neutronsokszorozás fluktuációját impulzus üzemben müködő neutronforrás felhasználásával különösen egyszerüen vizsgálhatjuk. Injektáljunk a vizsgálandó sokszorozó közegbe neutront és határozzuk meg az injektálás időpontjától számitott t idő alatt regisztrált neutronok számának eloszlásfüggvényét. Tegyük fel mindenekelőtt, hogy az injektálás időtartama elhanyagolható a regisztrálás időtartamához képest. A neutron-impulzusok ismétlődési frekvenciáját válasszuk olyan kicsinek, hogy mindig eltekinthessünk az előző neutron-impulzus hatásától.

Legyen P_k annak a valószinüsége, hogy az injektált neutron csomagban pontosan k neutron van. Jelöljük $w_n^k(t)$ -vel annak a valószinüségét, hogy a t idő alatt regisztrált neutronok száma éppen n , azon feltevés mellett, hogy $t=0$ időpontban k neutron került a sokszorozó közegbe. Mivel mindegyik injektált neutron a többitől függetlenül indit el bizonyos valószinüséggel láncreakciót, felirhatjuk, hogy

$$w_n^k(t) = \sum_{n_1+\cdots+n_k=n} \prod_{i=1}^{k} w_{n_i}(t) , \qquad (3.13)$$

ahol $w_{n_i}(t)$ a korábban már definiált eloszlásfüggvényt jelenti. A minket érdeklő eloszlásfüggvényt a

$$V_n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} P_k \, w_n^k(t) \qquad (3.14)$$

összefüggés határozza meg. Vezessük be a $\Gamma(t,x) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n(t) e^{nx}$ generátorfüggvényt. Azt kapjuk, hogy

$$\Gamma(t,x) = \gamma\left[g(t,x)\right], \tag{3.15}$$

ahol

$$\gamma(x) = \sum_{k=0}^{\infty} P_k x^k ,$$

mig $g(t,x)$ a $w_n(t)$ eloszlásfüggvény generátorfüggvénye. Jelöljük a P_k eloszlásfüggvény első és második momentumát s_1 -gyel, illetve s_2 -vel. A neutroncsomag injektálásától számított t idő alatt regisztrált neutronok átlagos számát az

$$\mathcal{N}_1(t) = s_1 n_1(t) , \tag{3.15'}$$

mig relativ szórásnégyzetét a

$$\frac{\mathcal{D}_c^2(t)}{\mathcal{N}_1(t)} = \frac{s_2 - s_1^2}{s_1} \cdot n_1(t) + \frac{n_2(t) - n_1^2(t)}{n_1(t)} \tag{3.16}$$

kifejezés adja meg. Ha $s_2 - s_1^2 = s_1$ azaz ha P_k Poisson-eloszlást mutat, akkor az $n_2(t) = n_1(t) + m_1^*(t) * h(t)$ összefüggés figyelembevételével a

$$\frac{\mathcal{D}_c^2(t)}{\mathcal{N}_1(t)} = 1 + \frac{m_1^*(t) * h(t)}{n_1(t)} \tag{3.17}$$

kifejezéshez jutunk.

1. A késő neutronok hatásától tekintsünk el. Rövid számolás arra vezet, hogy

$$\frac{\mathcal{D}_c^2(t)}{\mathcal{N}_1(t)} = 1 + \frac{\varepsilon_0(\mu_0 - \nu_0)}{(\tau_f \alpha r)^2}\left[1 + e^{-\alpha r t}\left(1 - \frac{2\alpha r t}{1 - e^{-\alpha r t}}\right)\right]. \tag{3.18}$$

Látható, hogy

$$\frac{\mathcal{D}_c^2(\infty)}{\mathcal{N}_1(\infty)} = 1 + \frac{\varepsilon_0(\mu_0 - \nu_0)}{(\tau_f \alpha r)^2} .$$

2. Ha a késő neutronok hatását is figyelembe akarjuk venni, akkor a (3.16) alatti kifejezésből bonyolult összefüggés származtatható. A szubkritikus sokszorozó rendszerre vonatkozóan ugyanolyan paraméter értékekkel számolva mint az előbb, a 3. és 4.sz. ábrán látható kihuzott görbékhez jutunk. A kihuzott A görbe a (3.16) alatti módositott relativ szórásnégyzet időtől való függését mutatja, mig a kihuzott B görbe a késő neutronok figyelembevételével számitott összefüggés időbeli képét szemlélteti. A kihuzott és szaggatott görbék összehasonlitásából láthatjuk, hogy pulzált neutronforrással történt mérésnél kedvezőbbek a viszonyok, mivel a lapos görbeszakaszok élesebb fordulattal jelentkeznek.

Befejezésül két megjegyzést kívánunk tenni. Az egyik megjegyzésünk az, hogy a (2.1) és a (3.15) alatti generátorfüggvényekből a magasabbrendü momentumok (harmadik, negyedik stb.) is származtathatók. Igy a kisérleti adatokból képzett magasabbrendü momentumokból meghatározhatjuk az egy hasadási aktusban keletkező neutronok számának magasabbrendü momentumait is. A másik megjegyzésünk a kisérleti adatok statisztikus hibájának becslésével kapcsolatos. Mivel az egy hasadási aktusban keletkező neutronok számának valószinüségi eloszlásfüggvényét ismeretlennek tekintjük, a matematikai statisztika nyelvén szólva ugynevezett nem-paraméteres problémával állunk szemben. A mérési adatokból számolt momentumoknak a valódi momentumoktól való eltérésére, pontosabban az adott eltérés valószinüségére mégis tehetünk bizonyos kijelentéseket. Ezekkel a kérdésekkel a kisérleti eredmények ismertetésénél részletesebben foglalkozunk.

Irodalom

[1] de Hoffmann, F., The Science and Engineering of Nuclear Power, Vol. II., Addison Wesley Press, Cambridge, Mass. (1949)

[2] Feynmann, R.P., de Hoffmann F. and Serber, R., J.Nucl.Energy, 3. 64. (1956)

[3] Pál, L.I., Nuovo Cimento Suppl., 7. 25. (1958)

[4] Diven, B.C. et.al., Phys. Rev., lol. lol2. (1956)
Leachaman, R.B., Phys. Rev., lol. loo5. (1956)

NAGYENERGIÁJU RÉSZECSKÉKKEL BESUGÁRZOTT SZILÁRD TESTEK RÁCSSÉRÜLÉSEINEK STATISZTIKUS ELMÉLETE

Irta: Pál Lénárd és Németh Géza*

Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

Exakt valószinüségszámitási módszerekkel meghatároztuk nagyenergiáju részecskékkel besugárzott szilárd testben keletkező rácssérülések számának eloszlásfüggvényét. Az eloszlásfüggvény generátorfüggvényéből leszármaztattuk a rácssérülések számának átlagát és szórását meghatározó egyenleteket. Ezeket az egyenleteket megoldottuk azon feltevés mellett, hogy a primer bombázó részecskék neutronok és hogy a kiszakitott atomok, valamint a rácspontokban rezgő atomok közötti ütközéseket ideális szilárdságu golyók között lejátszódó ütközéseknek tekinthetjük. Azt találtuk, hogy a rácshibák számának szórása hasadási neutronokkal történő besugárzás esetén nagyobb, mint a Poisson-eloszlás szórása. Ha a besugárzásnak alávetett minta vastagsága a neutronok átlagos szabad uthosszához képest kicsiny, akkor a relativ szórásra a

$$\frac{D(t)}{N_1(t)} \sim \sqrt{\left(\frac{2,1667}{Q_S\, b} + \frac{D_*^2(t)}{S_1(t)}\right)\frac{1}{S_1(t)}} + O\left(\frac{E_d}{E_f}\right)$$

összefüggés adódik, ahol Q_S a besugárzás hatásának alávetett anyag makroszkópikus szórási hatáskeresztmetszete, b az anyagminta vastagsága, $S_1(t)$ a t ideig tartó besugárzás alatt a minta egységnyi felületén áthaladt neutronok átlagos száma, míg D_*^2 a szórás négyzete, E_d a kiszakitási energia eV-okban és $E_f = 0,5 \cdot 10^6\, eV$. $N_1(t)$ pedig a minta egységnyi felületén át, t ideig tartó besugárzás hatására kiszakitott atomok átlagos számát jelenti.

1. Bevezetés

Nagyenergiáju részecskékkel /pl. gyors neutronokkal/ besugárzott szilárd testben a kristályrács egyes atomjai kiszakadnak egyensulyi helyzetükből és hosszabb vagy rövidebb ut megtétele

* Az 1958.évi genfi II.Nemzetközi Atomenergia-Konferencián elfogadott előadás.

után - amelynek során esetleg ujabb atomokat szakitanak ki - a kristályrács valamelyik "nem törvényes" helyén mint beékelt atomok helyezkednek el. A kristályrácsban ilyen módon lyukak és beékelt atomok keletkeznek. A kiszakitott atomok mozgásuk során részben ionizáció, részben rugalmatlan (rácsrezgések gerjesztése), részben pedig rugalmas ütközések révén veszitik el energiájukat. A kristályrácsnak ilyen módon átadott energia nagyobbik része forditódik rácsrezgések gerjesztésére és csak kisebbik része atomok kiszakitására.

A besugárzás hatására előálló rácssérülés kvantitativ jellemzésére kivánatos volna kellő gondossággal kiszámitani a kiszakitott atomok számának átlagát és lehetőség szerint a szórását is. Bár a sérült rácshelyek átlagos számának kisérleti meghatározására megbizható módszerek nem állnak rendelkezésre, mégis biztonsággal állithatjuk, hogy az eddigi elméleti becslések és kisérleti eredmények között jelentős eltérés van. Az elméleti meggondolásokból a kiszakitott atomok számának átlagára öt-hatszorosa adódik annak az értéknek, ami a kisérleti adatok alapján valószinünek látszik. Feltehető, hogy ennek az eltérésnek valódi okát a kiszakitás elemi folyamatai között kell keresnünk, mégis szükségesnek látszik általános elméleti módszer kidolgozása az összetett folyamat valószinüségszámitási tárgyalására.

Az eddig ismeretes számitási módszerek [1], [2], [3] nem adnak lehetőséget a besugárzás hatására előálló rácssérülések valószinüségszámitási tárgyalására. A következetes (legalábbis egy adott modellre vonatkozóan) számitási módszerre márcsak szért is szükség van, hogy megbecsülhessük az azonos körülmények között besugárzott vizsgálati mintákban a kiszakitott atomok számának szórását és igy elválaszthassuk a folyamat valószinüségi jellegéből adódó ingadozásokat a tényleges fizikai változásoktól.

Az általunk kidolgozott módszer [4] segitségével a kiszakitott atomok számának eloszlásfüggvényét határozhatjuk meg, illetve az eloszlásfüggvény generátorfüggvényéből az eloszlást jellemző félinvariánsokat (átlagérték, szórás stb.) számithatjuk ki. Módszerünk figyelembeveszi a kiszakitás elemi aktusának valószinüségi jellegét is és igy az a törekvés, ami A.E.Fein [5] számitásaiban e jelleg figyelembevételére irányul, az általunk kö-

vetett meggondolásokban következetesen érvényesül.

A továbbiakban felépitjük a rácssérülések következetes valószinüségszámitási elméletét és rámutatunk a korábbi módszerekhez való kapcsolatára.

2. Az alapegyenletek levezetése

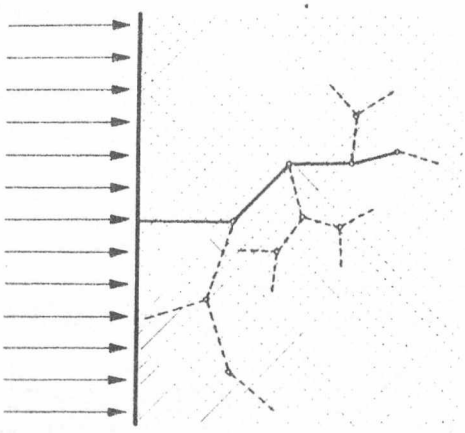
Jelöljük V_{E_0} -lal egy E_0 energiáju bombázó részecske által közvetve, vagy közvetlenül kiszakitott atomok tényleges számát. Határozzuk meg annak a valószinüségét, hogy $V_{E_0} = n$ azaz határozzuk meg a

$$\mathcal{P}(V_{E_0} = n) = P_n(E_0) \tag{2.1}$$

eloszlásfüggvényt. A $P_n(E_0)$ eloszlásfüggvény meghatározásához induljunk ki a következő feltevésekből. Tekintsük a besugárzás hatásának alávetett anyagot a tér egyik felében végtelen kiterjedésünek. A tér üres felét és a besugárzandó anyagot határolja az (x,y) végtelen sik (lásd az 1.ábrán). A tárgyalás egyszerüsitése érdekében tegyük fel, hogy a bombázó részecskék által kiszakitott atomok közül egyesek, vagy maguk a bombázó részecskék, nem juthatnak ki a besugárzandó anyagból az üres térbe. Természetesen véges méretü testekre is érvényesek meggondolásaink, mivel a kiszakitott atomok kicsiny közepes szabad uthossza miatt meglehetősen kis térfogatra koncentrálódik az általuk kiváltott hatás. A rácshibák térbeli eloszlására természetesen nem vonhatunk le következtetéseket. A $P_n(E_0)$ eloszlásfüggvény csupán arra ad felvilágositást, mekkora valószinüséggel hoz létre egy E_0 energiáju bombázó részecske n kiszakitott atomot a besugárzás hatásának alávetett minta egész térfogatában.

Számitásaink során nem vesszük figyelembe a kiszakitott atomok diffuzió utján történő beépülését szabad rácshelyekre (rekombináció), csupán a kiszakitó atomnak az általa kiszakitott atom helyére történő esetleges befogását vesszük számitásba. Igy várható, hogy a kiszakitott atomok átlagos számának általunk meghatározott értéke nagyobb lesz a valódinál. Egyszerüség kedvéért tételezzük fel azt is, hogy a besugárzandó anyag csupán egyfajta atomot tartalmaz.

Jelöljük $w_p(E_o, E)\,dE$ -vel annak a valószínüségét, hogy a bombázó részecske E_o energiája egyetlen ütközés révén az $(E, E+dE)$ intervallumba eső értékre csökken. Egyelőre semmiféle kikötést nem



1.ábra

teszünk arra vonatkozóan, hogy ez az energiacsökkenés milyen módon következik be. A bombázó részecske által eltalált atom $E_o - E$ energiát nyer az ütközés során. Ez az energia forditódhat pl. ionizációra, rácsrezgések gerjesztésére, de kedvező esetben előidézheti a kérdéses atomnak a kristályrácsból való kiszakadását is. Jelöljük $K(E_o - E)$ -vel annak a valószinüségét, hogy a kiszakadás tényleg bekövetkezik, ha egy atom a bombázó részecskétől $E_o - E$ energiát nyer. Legyen továbbá $q(E_o - E, E')\,dE'$ annak a valószinüsége, hogy a kiszakitott atom kinetikus energiája az $(E', E'+dE')$ intervallumba esik, azon feltevés mellett, hogy a kiszakitás előtt $E_o - E$ energiát nyert ütköző partnerétől. Az E' energiáju kiszakitott atom természetesen további atomokat szakithat ki. Legyen $\varrho_{E'}$ azon kiszakitott atomok száma, amelyeket a bombázó részecske által közvetlenül kiszakitott atom mozgása során utódaival együtt létrehoz. Jelöljük $p_m(E')$-vel annak a valószinüségét, hogy $\varrho_{E'} = m$, azaz legyen

$$\mathcal{P}(\varrho_{E'} = m) = p_m(E') \qquad (2,2)$$

Könnyen belátható, hogy a $P_n(E_o)$ eloszlásfüggvény az elő-

zőkben bevezetett valószinüségek segitségével a következőképpen épithető fel:

$$P_n(E_o) = \int_0^{E_o} w_p(E_o, E)\left[1 - K(E_o - E)\right] P_n(E)\,dE + \tag{2.3}$$
$$+ \int_0^{E} w_p(E_o, E) K(E_o - E)\left\{ \sum_{m=0}^{n} P_m(E) \int_0^{E_o - E} q(E_o - E, E')\, p_{n-m}(E'')\,dE'' \right\} dE$$

A $P_m(E)$ eloszlásfüggvény pedig az alábbi integrálegyenlet megoldásaként adódik:*

$$P_m(E) = \int_0^{E} w_s(E, E')\left[1 - K(E - E')\right] p_m(E')\,dE' + \tag{2.4}$$
$$+ \int_0^{E} w_s(E - E') K(E - E') \left\{ \sum_{m'=0}^{m} p_{m'}(E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'')\, p(E'')\,dE'' \right\} dE',$$

ahol $w_s(E, E')\,dE'$ annak a valószinüsége, hogy egy kiszakitott atom energiája egy másik atommal elszenvedett ütközés során az $(E', E' + dE')$ intervallumba eső értékre csökken, azon feltevés mellett, hogy az ütközés előtt energiája E volt. Mivel nem kivánunk foglalkozni a kiszakitott atomok térbeli eloszlásával, nem vesszük figyelembe a kiszakitás anizotrópiáját.

A (2.3) és a (2.4) alatti egyenleteket a

$$G(E_o, x) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{nx} P_n(E_o), \qquad g(E, x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mx} p_m(E) \tag{2.5}$$

generátorfüggvények bevezetésével a következőképpen irhatjuk fel:

$$G(E_o, x) = \int_0^{E_o} w_p(E_o, E) G(E, x) \left\{ 1 - K(E_o - E) + K(E_o - E) \int_0^{E_o - E} q(E_o - E, E')\, g(E', x)\,dE' \right\} dE \tag{2.6}$$

és

$$g(E, x) = \int_0^{E} w_s(E, E') g(E', x) \left\{ 1 - K(E - E') + K(E - E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'')\, g(E'', x)\,dE'' \right\} dE'. \tag{2.7}$$

A kiszakitott atomok számát csökkenti az a lehetőség, hogy a kiszakitást végző atomok bizonyos valószinüséggel befogódhatnak az általuk kiszakitott atomok helyére. Ezért a (2.4) illetve (2.7) alatti egyenletek nem tekinthetők egészen pontos egyenleteknek.

* $p_m(E) = \delta_{1m}$ ha E kisebb annál a legkisebb határenergiánál, amelynél csak nagyobb energiamennyiség átadásakor következhet be kiszakadás.

Jelöljük $l(E')$ -vel annak a valószinüségét, hogy a kiszakitást végző atom, amelynek energiája a kiszakitás után E', a szabaddá vált rácshelyen befogódik. Legyen $p_m^o(E)$ annak a valószinüsége, hogy egy E energiáju atom mozgása során a befogás lehetőségének figyelembevételével m kiszakitást hoz létre. Egyszerüen belátható, hogy a $g_o(E,x) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{mx} p_m^o(E)$ generátorfüggvény a

$$g_o(E,x) = \int_0^E w_s(E,E')\left[1-K(E-E')\right] g_o(E',x)\,dE' + \tag{2.7'}$$
$$+ \int_0^E w_s(E,E') K(E-E') \left\{\left[1-l(E')\right] g_o(E',x) + l(E')\right\} \int_0^{E-E'} q(E-E',E'') g_o(E'',x)\,dE''dE'$$

egyenletnek tesz eleget. A (2.7')-ből a w_s, K, q és l függvények ismeretében a $p_m^o(E)$ eloszlásfüggvény összes fontos jellemzője kiszámitható. Továbbiakban azonban számitásainkat a (2.6) és (2.7) alatti egyenletekre alapozzuk, mivel az $l(E')$ függvényre csak erősen kvalitativ jellegü kijelentéseket tehetünk.

Tegyük fel, hogy a besugárzás hatásának alávetett minta minden felület-darabját azonos intenzitásu és energia-spektrumu sugárzás éri. Jelöljük $R(t,E_1,\dots,E_k)\,dE_1\dots dE_k$ -vel annak a valószinüségét, hogy t ideig tartó besugárzás alatt a szilárd anyag egységnyi felületén k az $(E_1,E_1+E_1),\dots,(E_k,E_k+dE_k)$ intervallumokba eső bombázó részecske hatol át. Ha most $L_n(t)$ -vel jelöljük annak a valószinüségét, hogy egységnyi felületen át t ideig tartó besugárzás hatására n kiszakitott atom keletkezzék, akkor felirhatjuk, hogy

$$L_n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty}\cdots\int_0^{\infty} R(t,E_1,\dots,E_k) \sum_{n_1+\dots+n_k=n} P_{n_1}(E_1)\cdots P_{n_k}(E_k)\,dE_1\dots dE_k . \tag{2.8}$$

Az általánosság különösebb megsértése nélkül feltehetjük, hogy

$$R(t,E_1,\dots,E_k) = R_k(t) \prod_{i=1}^{k} h(E_i) . \tag{2.8'}$$

Vezessük be a $H(t,x) \sum_{k=0}^{\infty} e^{kx} R_k(t)$ és az $F(t,x) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{nx} L_n(t)$ generátorfüggvényeket. Segitségükkel az

$$F(t,x) = H\left\{t,\ln \int_0^{\infty} h(E_o) G(E_o,x)\,dE_o\right\} \tag{2.9}$$

összefüggéshez jutunk, amiből könnyen származtathatjuk a minket érdeklő összes mennyiséget.

3. A kiszakitott atomok átlagos számának és szórásának meghatározása

a/ A (2.9)-ből a kiszakitott atomok átlagos számát a

$$\left[\frac{\partial F(t,x)}{\partial x}\right]_{x=0} = N_1(t) \qquad (3.1)$$

Vezessük be a következő jelöléseket

$$\left[\frac{\partial H(t,x)}{\partial x}\right]_{x=0} = S_1(t)\,, \qquad \left[\frac{\partial G(E_0,x)}{\partial x}\right]_{x=0} = M_1(E_0) \qquad (3.1')$$

Az $S_1(t)$ mennyiség megadja a t ideig tartó besugárzás alatt a szilárd test egységnyi felületén áthaladt bombázó részecskék átlagos számát, mig $M_1(E_0)$ egy E_0 energiáju bombázó részecske által létrehozott rácshibák számának átlagát jelöli. Végül is az egységnyi felületen át történő, t ideig tartó besugárzás alatt kiszakitott atomok számát az

$$N_1(t) = S_1(t)\int_0^{\infty} h(E_0)\,M_1(E_0)\,dE_0 \qquad (3.2)$$

kifejezés segitségével határozhatjuk meg, ahol $M_1(E_0)$ az

$$M_1(E_0) = \int_0^{E_0} w_p(E_0,E)\left\{M_1(E) + K(E_0-E)\int_0^{E_0-E} q(E_0-E,E')\,m_1(E')\,dE'\right\}dE \qquad (3.3)$$

egyenletből számitható. A (3.3) alatti egyenletben szereplő $m_1(E)$ függvényt a (2.7) generátorfüggvényből az $m_1(E) = \left[\frac{\partial g(E,x)}{\partial x}\right]_{x=0}$ szabály szerint származtathatjuk. Meghatározására az alábbi egyenlet szolgál:

$$m_1(E) = \int_0^{E} w_S(E,E')\left\{m_1(E') + K(E-E')\int_0^{E-E'} q(E-E',E'')\,m_1(E'')\,dE''\right\}dE\,. \qquad (3.4)$$

b/ A (2.9) egyenletből minden nehézség nélkül meghatározhatjuk a kiszakitott atomok számának szórását, amit az eloszlásfüggvény ismerete nélkül közvetlenül körülményes volna kiszámitani. Jelöljük $D^2(t)$-vel az egységnyi felületen át történő, t ideig tartó besugárzás alatt kiszakitott atomok számának szórásnégyzetét. $D^2(t)$ nyilván a következő összefüggés alapján adható meg:

$$D^2(t) = \left[\frac{\partial^2 \ln F(t,x)}{\partial x^2}\right]_{x=0}\,. \qquad (3.5)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$M_2(E_0) = \left[\frac{\partial^2 G(E_0,x)}{\partial x^2}\right]_{x=0}\,, \qquad S_2(t) = \left[\frac{\partial^2 H(t,x)}{\partial x^2}\right]_{x=0}\,, \qquad (3.6)$$

továbbá

$$D_d^2 = \int_0^\infty h(E_0) M_2(E_0)\, dE_0 - \left\{ \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0)\, dE_0 \right\}^2 \qquad (3.7)$$

és

$$D_r^2 = S_2(t) - S_1^2(t). \qquad (3.7')$$

A (3.5)-ből azt kapjuk, hogy

$$D^2(t) = S_1(t) D_d^2 + D_r^2 \left\{ \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0)\, dE_0 \right\}^2. \qquad (3.8)$$

A (3.8) meghatározásához ki kell számitani az $M_1(E_0)$, $M_2(E_0)$ momentumokat és ismerni kell a $h(E_0)$, $S_1(t)$, $S_2(t)$ függvényeket. Könnyen belátható, hogy $M_2(E_0)$ az

$$M_2(E_0) = \int_0^{E_0} w_p(E_0, E) \left\{ M_2(E) + K(E_0 - E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E')\, m_2(E')\, dE' \right\} dE + \\ + 2 \int_0^{E_0} w_p(E_0, E) K(E_0 - E) M_1(E) \int_0^{E_0 - E} q(E_0 - E, E')\, m_1(E')\, dE'\, dE \qquad (3.9)$$

egyenletnek tesz eleget. $m_2(E)$ -re a (2.7)-ből a következő egyenlet adódik:

$$m_2(E) = \int_0^{E} w_S(E, E') \left\{ m_2(E') + K(E - E') \int_0^{E - E} q(E - E', E'')\, m_2(E'')\, dE'' \right\} dE' + \\ + 2 \int_0^{E} w_S(E, E') K(E - E')\, m_1(E') \int_0^{E - E'} q(E - E', E'')\, m_1(E'')\, dE''\, dE'. \qquad (3.10)$$

A tulajdonképpeni feladat a (3.3) és a (3.4), valamint a (3.9) és a (3.1o) alatti egyenletek megoldása. Ehhez mindenekelőtt ismernünk kell a w_S, w_p és q sürüségfüggvényeket, valamint a K kiszakitási valószinüséget. Ezeknek a függvényeknek a meghatározása a kvantumelmélet feladata. Sajnos a folyamat bonyolultsága miatt ezen a téren számottevő eredmény nincsen. Amint látni fogjuk, bizonyos egyszerü esetekben meghatározhatjuk ezeket a függvényeket és a számitásokat elvégezhetjük.

4. A neutronokkal besugárzott szilárd testekben keletkező rácshibák számának átlaga és szórása

Ha a primer bombázó részecskék neutronok, akkor (legalábbis nem tul nagy energiák mellett)

$$w_p(E_0, E) = \begin{cases} (1-\alpha)^{-1} E_0^{-1} , & \text{ha} \quad E_0 \geq E \geq \alpha E_0 \\ 0 , & \text{ha} \quad \alpha E_0 > E , \end{cases} \tag{4.1}$$

ahol

$$\alpha = \left(\frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \right)^2 \tag{4.2}$$

A (4.2) alatti kifejezésben M_2 a nyugvónak tekintett atom és M_1 pedig a bombázó neutron tömege. A neutronok által kiszakitott atomok ujabb atomokat szakithatnak ki.

Ismeretes, hogy ionizált atomok közötti ütközéseket bizonyos energiaérték alatt az atomok elektronhéjának árnyékoló hatása miatt ideális szilárdságu golyók ütközéseként kezelhetjük. A továbbiakban feltesszük, hogy a primer bombázó részecskék által kiszakitott atomok közötti ütközéseket ilyen tipusu ütközéseknek tekinthetjük. Az azonos atomok ütközésekor lejátszódó energiaátadásra ekkor a következő összefüggés érvényes:

$$w_s(E, E') = E^{-1} \quad (E \geq E' \geq 0). \tag{4.3}$$

Az egyszerüség kedvéért tételezzük fel, hogy az ütközések mindig kiszakitásra vezetnek, ha az ütközés előtt mozdulatlannak tekinthető atomnak átadott energia felülmulja az E_d kiszakitási határenergiát. Ebben az esetben könnyen belátható, hogy

$$K(E) = \begin{cases} 1, & \text{ha} \quad E \geq E_d \\ 0, & \text{ha} \quad E < E_d \end{cases} \tag{4.4}$$

és

$$q(E, E') = \delta(E - E' - E_d). \tag{4.5}$$

a/ Számitsuk ki most az

$$N_1(t) = S_1(t) \int_0^\infty h(E_0) M_1(E_0) \, dE_0 \tag{4.6}$$

átlagértéket a felsorolt feltételek figyelembevételével. Mindenekelőtt irjuk fel az $M_1(E_0)$ függvényt meghatározó egyenletet. A (4.1), (4.3), (4.4) és a (4.5) alapján a (3.3) és (3.4) alatti egyenletek kisebb átalakitás után a következő alakba irhatók:

$$(1-\alpha)\,E_0\,M_1(E_0) = \int_{\alpha E_0}^{E_0} M_1(E)\,dE + \int_0^{(1-\alpha)E_0-E_d} m_1(E)\,dE \qquad (4.7)$$

$$M_1(E_0) = 0, \quad ha \quad 0 \le E_0 \le \frac{E_d}{1-\alpha}$$

és

$$E\,m_1(E) = \int_0^{E} m_1(E')\,dE' + \int_0^{E-E_d'} m_1(E')\,dE'. \qquad (4.8)$$

$$m_1(E) = 1, \quad ha \quad 0 \le E \le E_d$$

A (4.8) pontosan megegyezik a Seitz és Harrison [1], valamint Snyder és Neufeld [2] által levezetett egyenlettel. A (4.7) viszont eltér Snyder és Neufeld cikkében szereplő (6.2) alatti egyenlettől. Ha azonban feltesszük, hogy a bombázó neutron a besugárzás hatásának alávetett anyagban csak egyetlen ütközést szenved, akkor a (4.7) alatti egyenlet egyszerübbé válik. Az igy módositott egyenlet már pontosan megegyezik Snyder és Neufeld idézett egyenletével. E feltevés alapján azonban modositani kell a (4.6) alatti egyenletet, mivel a mintán áthaladó neutronok nagy valószinüséggel csak egyetlen egyszer ütköznek. (A minta végtelen vastagságunak tekinthető a kiszakitott atomok átlagos szabad uthosszához képest, de igen vékony a bombázó neutronok átlagos szabad uthosszához viszonyitva.) Jelöljük $Q_S(E_0)$-lal az E_0 energiáju neutronok makroszkópikus szórási hatáskeresztmetszetét a besugárzás hatásának kitett, b vastagságu anyagban. A (4.6) helyett a következő kifejezés irandó:

$$\mathcal{N}_1(t) = S_1(t) \int_0^{\infty} h(E_0)\,M_1(E_0)\,dE_0, \qquad (4.8')$$

ahol $\mathcal{M}_1(E_0)$ az

$$\mathcal{M}_1(E_0) = \frac{Q_S(E_0)\,b}{(1-\alpha)\,E_0} \int_0^{(1-\alpha)E_0-E_d} m_1(E)\,dE \qquad (4.8'')$$

egyenlet megoldása.

b/ A szórásnégyzetre bevezetett (3.8) alatti kifejezés különösen egyszerü alaku, ha feltételezzük, hogy $S_2(t) - S_1^2(t) = S_1(t)$. Ekkor

$$D^2(t) = S_1(t) \int_0^\infty h(E_o)\, M_2(E_o)\, dE_o , \qquad (4.9)$$

illetve a relativ szórásnégyzet

$$\frac{D^2(t)}{N_1(t)} = \frac{\int_0^\infty h(E_o)\, M_2(E_o)\, dE}{\int_0^\infty h(E_o)\, M_1(E_o)\, dE_o} \qquad (4.10)$$

A tulajdonképpeni feladat $M_2(E_o)$ meghatározása. Irjuk át a (3.9) és a (3.lo) egyenleteket a (4,1), (4.3), (4.4) és a (4.5) összefüggések figyelembevételével. Rövid számitás után azt kapjuk, hogy

$$(1-\alpha)\, E_o\, M_2(E_o) = \int_{\alpha E_o}^{E_o} M_2(E)\, dE + \int_0^{(1-\alpha)E_o - E_d} m_2(E)\, dE + 2 \int_0^{(1-\alpha)E_o - E_d} m_1(E)\, M_1(E_o - E_d - E)\, dE, \qquad (4.11)$$

$$M_2(E_o) = 0 \quad , \quad ha \quad 0 \le E_o \le \frac{E_d}{1-\alpha}$$

és

$$E\, m_2(E) = \int_0^E m_2(E')\, dE' + \int_0^{E-E_d} m_2(E')\, dE' + 2 \int_0^{E-E_d} m_1(E - E_d - E')\, m_1(E')\, dE', \qquad (4.12)$$

$$m_2(E) = 1 \quad , \quad ha \quad 0 \le E \le E_d .$$

Ha ismét feltesszük, hogy a b vastagságu anyagban a bombázó neutronok mindössze egyetlen ütközést szenvednek, akkor a (4.11) az

$$M_2(E_o) = \frac{Q_S(E_o)\, b}{(1-\alpha)E_o} \int_0^{(1-\alpha)E_o - E_d} m_2(E)\, dE) \qquad (4.12')$$

egyenlettel helyettesithető. A szórásnégyzetet pedig a (4.9) helyett a

$$\mathcal{D}^2(t) = S_1(t) \int_0^\infty h(E_o)\, \mathcal{M}_2(E_o)\, dE_o \qquad (4.13)$$

formula segitségével számithatjuk. (Általánosságban a (3.8)-ból a megfelelő kifejezést ugy kapjuk meg, hogy $M_1(E_o)$ -t és $M_2(E_o)$-t $\mathcal{M}_1(E_o)$ -lal és $\mathcal{M}_2(E_o)$ -lal helyettesitjük.)

c/ A (4.6) és (4.lo) alatti kifejezések hasznositásához ki kell számitanunk a $g(E,x)$ generátorfüggvény első, illetve második momentumát. Célszerünek látszik ezért megvizsgálni a (4.1), (4.3), (4.4) és (4.5) feltételek figyelembevételével származtatható

$$E\,g(E,x) = \int_0^E g(E',x)\,dE' - \int_0^{E-E_d} g(E',x)\left[1 - g(E-E_d-E')\right]dE' \qquad (4.14)$$

egyenletet és megkeresni megoldását. Legyen

$$U(z,x) = \int_0^\infty e^{-zE}\, g(E,x)\,dE\,. \qquad (4.15)$$

Rövid számolás után azt találjuk, hogy

$$U(z,x) = z^{-1}\left\{1 - (1-e^{-x})\, e^{E_1(zE_d)}\right\}^{-1}, \qquad (4.16)$$

ahol $E_1(zE_d) = \int_{zE_d}^\infty e^{-y}/y\,dy$

Ebből minden nehézség nélkül megkaphatjuk a $p_m(E)$ eloszlásfüggvényt* is, azonban számunkra fontosabb az $m_1(E)$ és $m_2(E)$ momentumok meghatározása. Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\mu_1(z) = \int_0^\infty e^{-zE}\, m_1(E)\,dE \qquad \text{és} \qquad \mu_2(z) = \int_0^\infty e^{-zE}\, m_2(E)\,dE \qquad (4.16')$$

A (4.16) alatti kifejezésből a

$$\mu_1(z) = \left[\frac{\partial U(z,x)}{\partial x}\right]_{x=0} \qquad \text{és} \qquad \mu_2(z) = \left[\frac{\partial^2 U(z,x)}{\partial x^2}\right]_{x=0}$$

összefüggések alapján felirhatjuk, hogy

$$\mu_1(z) = \frac{1}{z}\exp\left\{E_1(zE_d)\right\} \qquad (4.17)$$

és

$$\mu_2(z) = 2z\,\mu_1^2(z) - \mu_1(z)\,. \qquad (4.18)$$

A (4.17) és (4.18) felhasználásával előállithatjuk $m_1(E)$ és $m_2(E)$ aszimptotikus kifejezését $E \gg E_d$ értékekre. Egyszerü meggondolásokkal az

$$m_1(E) = e^{-C}\left(\frac{E}{E_d} + 1\right) + \cdots \qquad (4.19)$$

és

$$m_2(E) \sim e^{-2C}\,\frac{E^2}{E_d^2} + e^{-C}\left(4e^{-C} - 1\right)\frac{E}{E_d} + e^{-C}\left(3e^{-C} - 1\right) + \ldots \qquad (4.20)$$

---

* Ha $E \gg E_d$, akkor aránylag egyszerü eljárással a $p_m(E) \sim (1-e^{C})^{m-1}\, e^{C - E/E_d}\, L_{m-1}\left(\frac{1}{1-e^{-C}}\,\frac{E}{E_d}\right)$ összefüggéshez jutunk, ahol C = 0,577 és $L_{m-1}(y)$ a Laguerre polinom.

asszimptotikus kifejezéseket kapjuk. A (4.19) és (4.2o) formulában szereplő C állandó az un. Euler-féle állandó ($C = 0{,}577$). A $d^2(E) = m_2(E) - m_1^2(E)$ szórásnégyzetre azt találjuk, hogy

$$d^2(E) \sim (2e^{-C} - 1)e^{-C}\left(\frac{E}{E_d} + 1\right) + \dots \qquad (4.20')$$

Leibfried [6] nem pontosan erre az eredményre jutott, mivel nem veszi következetesen figyelembe egyenletei összeállításánál az E_d kiszakitási határenergia szerepét. Leibfried formulája és a (4.2o') közötti különbség a főtagban is jelentkezik, bár értéke nem jelentős. Leibfriednél a főtag $0{,}15\, m_1(E)$, mig a (4.2o') szerint $0{,}123\, m_1(E)$.

Az $m_1(E)$ és $m_2(E)$ birtokában a (4.7) és (4.11) felhasználásával kiszámithatjuk az $M_1(E_o)$ és $M_2(E_o)$ momentumokat.

A (4.7) alatti egyenletből $E_o/E_d = e^{u_o}$ és $M_1(E_d e^{u_o}) = F(u_o)$ helyettesitéssel a $V(z) = \int_o^\infty e^{-u_o z} F(u_o)\, du_o$ Laplace-transzformáltra a

$$V(z) = V_o(z)\, V_1(z) \qquad (4.21)$$

összefüggés származtatható, ahol

$$V_o(z) = \frac{(1-\alpha)^{z+1}}{(1-\alpha)(z+1) - 1 + \alpha^{z+1}} \qquad (4.22)$$

és

$$V_1(z) = \frac{1}{\Gamma(z+1)} \int_o^\infty u^{z-1} e^{-u + E_1(u)}\, du \qquad (4.23)$$

Ahhoz, hogy $F(u_o)$ nagy u_o értékekhez tartozó alakját meghatározhassuk, ismernünk kell a $V(z)$ függvény mindazon polusait, amelyek valós része nem negativ. A $V(z)$ egyik tényezője, a $V_o(z)$, a neutronok lassitásának elméletéből jól ismert. A $V_1(z)$ nem negativ valós részü pólusait Németh Géza határozta meg. A $V_o(z)$-re és a $V_1(z)$-re vonatkozó ismereteink birtokában a

$$V(z) = \frac{e^{-C}}{z-1} - \frac{1-e^{-C}}{\xi z} + V_2(z) \qquad (4.23')$$

előállitásához jutunk, ahol $V_2(z)$ a $Re\, z > -1$ tartományban holomorf függvény. A (4.23')-ból $M_1(E_o)$ -ra a következő asszimptotikus formulát kapjuk:

$$M_1(E_o) \sim e^{-C} \frac{E_v}{E_d} - \frac{1-e^{-C}}{\xi} + \dots \qquad (4.24)$$

A (4.11)-ből a (4.7)-re alkalmazott eljárás megismétlésével $M_2(E_o)$-ra a következő asszimptotikus formulát származtathatjuk:

$$M_2(E_o) \sim e^{-2c}\left(\frac{E_o}{E_d}\right)^2 + \left[2\left(e^{-c} - \frac{1-e^{-c}}{\xi}\right) - 1\right] e^{-c}\frac{E_o}{E_d} + \cdots \qquad (4.25)$$

A szórásnégyzet főtagja pedig

$$D^2(E_o) \sim (2e^{-c} - 1)e^{-c}\frac{E_o}{E_d} + \cdots\cdots \qquad (4.26)$$

alakban irható fel. Láthatjuk, hogy a primer bombázó neutron ütközéseinek számitásbavétele a rácshibák számának relativ szórásnégyzetét (legalábbis annak nagy E_o értékekhez tartozó főtagját) nem befolyásolja.

Ha a besugárzásnak alávetett minta a bombázó neutronok átlagos szabad uthosszához képest vékonynak tekinthető, akkor nagyon valószinü, hogy minden egyes neutron csupán egyszer ütközik a mintán való áthaladása közben. Ekkor a (4.8") és a (4.12') egyenletek alapján számithatjuk ki az $M_1(E_o)$ és $M_2(E_o)$ momentumokat. Rövid számolás után a következő eredményt kapjuk:

$$M_1(E_o) \sim Q_s b\left[\frac{1-\alpha}{2}e^{-c}\frac{E_o}{E_d} + \cdots\right] \qquad (4.27)$$

$$M_2(E_o) \sim Q_s b\left[\frac{(1-\alpha)^2}{3}e^{-2c}\frac{E_o^2}{E_d^2} + \frac{1-\alpha}{2}(2e^{-c}-1)e^{-c}\frac{E_o}{E_d} + \cdots\right] \qquad (4.28)$$

A szórásnégyzetre a

$$D^2(E_o) \sim Q_s b(1-\alpha)^2 e^{-2c}\frac{E_o^2}{E_d^2}\left(\frac{1}{3} - \frac{Q_s b}{4}\right) + \frac{Q_s b}{2}(1-\alpha)(2e^{-c}-1)e^{-c}\frac{E_o}{E_d} + \cdots \qquad (4.29)$$

formula adódik. Figyelemreméltó, hogy ebben az esetben a relativ szórásnégyzet igen jelentős lehet, hiszen

$$\frac{D^2(E_o)}{M_1(E_o)} \sim 2(1-\alpha)e^{-c}\frac{E_o}{E_d}\left(\frac{1}{3} - \frac{Q_s b}{4}\right) + 2e^{-c} - 1 + \cdots \qquad (4.30)$$

Végezetük tegyük fel, hogy a bombázó neutronok energiaspektruma a hasadási neutronok energia-spektrumával egyezik meg, azaz legyen

$$h(E_o) = \frac{1}{E_f\sqrt{2\pi e}}\, e^{-E_o/2E_f}\, sh\sqrt{\frac{E_o}{E_f}}\,, \qquad (4.31)$$

$$E_f = 0{,}5 \cdot 10^6\ eV\ .$$

A (3.8) alapján a (4.31) felhasználásával végtelen kiterjedésünek tekinthető mintában a rácssérülések számának relativ szórására a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{D(t)}{N_1(t)} \sim \sqrt{\left(0{,}625 + \frac{D_r^2(t)}{S_1(t)}\right)\frac{1}{S_1(t)}} + O\left(\frac{E_d}{E_f}\right), \qquad (4.32)$$

ahol $O\left(\frac{E_d}{E_f}\right)$ az $\frac{E_d}{E_f}$ hányados zérusnál magasabb hatványait tartalmazó kifejezés.

Ha a besugárzásnak alávetett mintát a bombázó neutronok átlagos szabad uthosszához képest vékonynak tekintjük, akkor a (3.8) alatti kifejezésben M_1 és M_2 helyett $\mathcal{M}_1$ és $\mathcal{M}_2$ értékeivel kell számolnunk.

Tegyük fel, hogy Q_s nem függ E_0 -től. Ebben az esetben a (4.27) és (4.28) alapján azt kapjuk, hogy

$$\frac{D(t)}{\mathcal{N}_1(t)} \sim \sqrt{\left(\frac{2{,}1667}{Q_s b} + \frac{D_r^2(t)}{S_1(t)} - 1\right)\frac{1}{S_1(t)}} + O\left(\frac{E_d}{E_f}\right), \qquad (4.33)$$

ahol $O\left(\frac{E_d}{E_f}\right)$ jelentése mint a (4.32)-ben.

A (4.32) és a (4.33) alatti formulák azt mutatják, hogy a rácshibák számának relativ szórása az $S_1(t)$ növekedésével sokkal lassabban csökken, mint a Poisson-eloszlás relativ szórása.

Fein [5] megkisérelte az elméleti becslések és a kisérleti adatok közötti eltérést csökkenteni. Feltette, hogy az E_d kiszakitási határenergia nem állandó, hanem valamilyen valószinüségi törvény szerint bizonyos határok között változhat.

Jelöljük Fein után $f(E_d)\,dE_d$ -vel annak a valószinüségét, hogy a kiszakitási energia E_d és $E_d + dE_d$ közötti értéket vegyen fel. Fein [5] megmutatta, hogy a kisérleti adatokkal való egyezés érdekében az $f(E_d)$ sürüségfüggvény maximumához olyan nagy E_d értéket kellene rendelni, ami felette valószinütlen.

Véleményünk szerint a jobb egyezés érdekében az általunk levezetett (2.6) és (2.7) alatti egyenletekben szereplő q és K függvények mikrofizikai elméletére kellene a legfőbb figyelmet irányitani és a kisérleti adatok összehasonlitásánál pedig óvatossággal kellene eljárni.

I r o d a l o m

[1] Seitz, F. and Harrison, W.A., Phys. Rev., 98. 153o. (1955)
Seitz, F. and Koehler, J.S., Solid State Physics, (Academic Press Inc., New York, 1956) Vol. 2. pp. 381. ff

[2] Snyder, W.S. and Neufeld, J., Phys. Rev., 97. 1636. (1955)

[3] Snyder, W.S. and Neufeld, J., Phys. Rev., 1o3. 862. (1956)

[4] Pál, L., Energia és Atomtechnika, 1o. 255. (1957)

[5] Fein, A.E., Phys. Rev., 1o9. 1o76. (1958)

[6] Leibfried, G., Nukleonik, 1. 57. (1958)

KFKI Közlemények 6.évf. 4.szám, 1958.

RENDEZŐDÉSI FOLYAMATOK VIZSGÁLATA VAS-ALUMINIUM ÖTVÖZETEKBEN*

Irta: Pál Lénárd és Tarnóczi Tivadar
Szilárdtestfizikai Labóratórium

Összefoglalás

A Fe-Al ötvözet "order-disorder" átalakulását vizsgáltuk mágneses paraméterek utján. Magyarázzuk a Sykes és Evans [5] által először tapasztalt un. kettős Curie-pont jelenséget. Eredményeink alátámasztják a Taylor és Jones [3] által kimutatott $Fe_{13}Al_3$ struktura létezését.

1. §

A vas-aluminium ötvözetek termikus, elektromos és mágneses tulajdonságaiban jelentkező anomáliák azzal magyarázhatók, hogy bizonyos feltételek mellett ezekben az ötvözetekben a vas és aluminium atomok elrendeződése szabályossá válik.

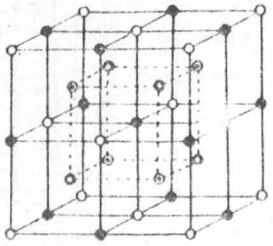
A várható strukturák jellemzésére nyolc tércentrált cellából alkossunk egy uj cellát /1. ábra/. Soroljuk négy alrácsba, Bradley és Jay [1] szerint a nyolc illeszkedő tércentrált cella rácspontjait. Jelöljék sorban az 1, 2, 3 és 4 számok az egyes alrácsokat. Legyen $f_i(c_{Al},T)$ az i-tipusu alrácsban található aluminium atomok koncentrációja az egész rácsra vonatkozó c_{Al} aluminium koncentráció mellett, T hőmérsékleten. Az aluminium atomok eloszlása a különböző alrácsok között általában nem egyenletes, sőt ez az eloszlás érzékenyen függ az egész rácsra vonatkozó aluminium koncentrációtól.

A 18 atomsuly százalék aluminiumnál kevesebb aluminiumot tartalmazó ötvözetekben az aluminium atomok a négy alrács között statisztikusan oszlanak meg. Ez azt jelenti, hogy a kristályrács bármely pontjában egyenlő valószinüséggel találhatunk aluminium atomot. Az ilyen szerkezetü ötvözeteket rendezetlen szerkezetü ötvözeteknek nevezzük. A 18-25 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó, egyensulyi állapotban lévő ötvözetekben az aluminium atomok előszeretettel az 1-tipusu alrácsban koncentrálódnak. Ez arra vezet, hogy az aluminium atomok a kristályrács különböző pontjaiban különböző valószinüséggel találhatók. Az ilyen ötvözeteket részben, vagy egészben rendezett szerkezetü ötvözeteknek nevezzük.

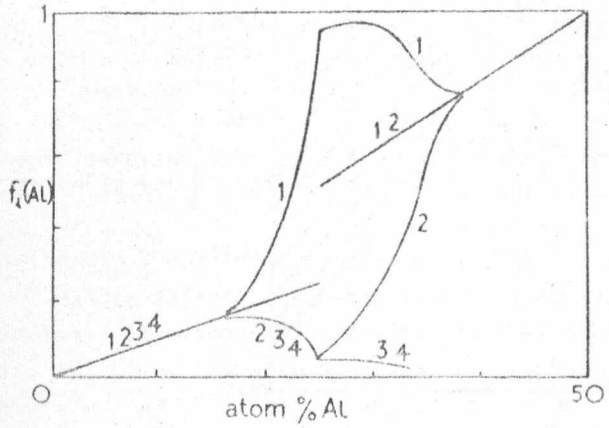
Ha azonban magas hőmérsékletről, viszonylag gyorsan hütjük le a 18-25 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó ötvözeteket, akkor - mint ahogy az az ábrán látható - nem alakul ki rendezett szerkezet. Az aluminium atomoknak

---

* 1959. szeptember hóban a szilárdtestfizikai kollokviumon elhangzott előadás



(a)



(b)

1. ábra

A vas-aluminium ötvözet szerkezete

a) Az ötvözet elemi cellája. b) A négy különféle alrácsot alkotó rácspontokban található aluminium atomok koncentrációjának függése az ötvözési aluminium koncentrációtól.

ez az eloszlása természetesen nem felel meg az egyensulyi állapotnak, mivel egyensulyi állapotban az aluminium atomoknak az 1-tipusu alrácsban kell koncentrálódniuk.

Egyensulyi állapotban lévő ötvözetekben 25 atomsuly százaleknál nagyobb aluminium tartalom mellett az ábrán látható módon csökken az aluminium atomok koncentrációja az 1-tipusu alrácsban, mig a 2-tipusuban nő. Gyors hütéssel befagyasztott ötvözetekben viszont csakis az 1- és 2-tipusu alrácsokban találhatók aluminium atomok, amelyek koncentrációja azonban azonos.

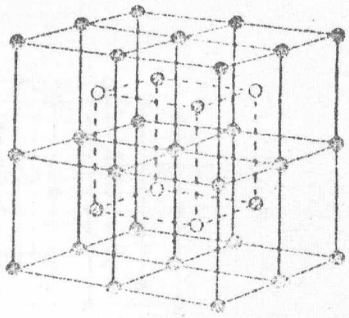
2. §

Számunkra különösen a 18-33 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó ötvözetek érdekesek, mivel ezek mágnesesek.

A rendeződési folyamatokat különösen részletesen tanulmányozták a Fe_3Al összetételhez közeleső ötvözetekben. Megállapitották, hogy ezekben az ötvözetekben a rendeződési folyamatokban csaknem kizárólag azok az atomok vesznek részt, amelyek az 1- és 2-tipusu alrácsokhoz tartoznak. Ennek megfelelően a rendeződés tulajdonképpen egy kősó-tipusu alrács kialakulásához vezet (2. ábra). Ha elfogadjuk ezekre az ötvözetekre a rendeződési folyamat emlitett modelljét, akkor egyszerü számitásokkal megmutatható [2], hogy a rendeződési folyamat másodrendü fázisátalakulásnak tekintheto. Szelinszkij és Bennett kisérleti adatai igazolták, hogy az Fe_3Al összetételü ötvözetben lejátszódó átalakulás valóban másodrendü.

Egészen az utóbbi évekig a vas-aluminium ötvözetek szerkezetéről a Bradley és Jay [1] által kifejtett elképzelést tartották helyesnek. Nemrégen

Taylor és Jones [3] igen gondos rácsparaméter méréseket végeztek különböző összetételü, nagytisztaságu vas-aluminium ötvözeteken. Méréseik eredményét szemlélteti a 3. ábrán látható görbesereg. Megállapitották, hogy az Fe_3Al összetételü, rendezett szerkezetü fázis sokkal szükebb koncentráció intervallumban alakulhat ki, mint hogy ez Bradley és Jay mérései alapján közismertté vált. A kisebb aluminium tartalmu ötvözetekben lehetséges rendezett strukturák közül kimutatták az $Fe_{13}Al_3$ struktura létezését, amely lassu hütés mellett az Fe_3Al strukturával együtt jelenik meg. Az $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett ötvözet elemi celláját a 4.ábrán láthatjuk. Összehasonlitásul az 5. ábrán ugyanebben az ábrázolásban, bemutatjuk az Fe_3Al rendezett ötvözet szerkezetét is. A 6. ábrán láthatjuk Taylor és Jones mérési adatai alapján finomitott egyensulyi fázisdiagrammot. Láthatjuk, hogy a 20-24 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó, egyensulyi állapotban lévő ötvözetekben két rendezett fázis van jelen, amelyek közül az egyik (az $Fe_{13}Al_3$) vasban gazdagabb.



● A vas atom
◎ D vas atom
○ B aluminium atom

2. ábra

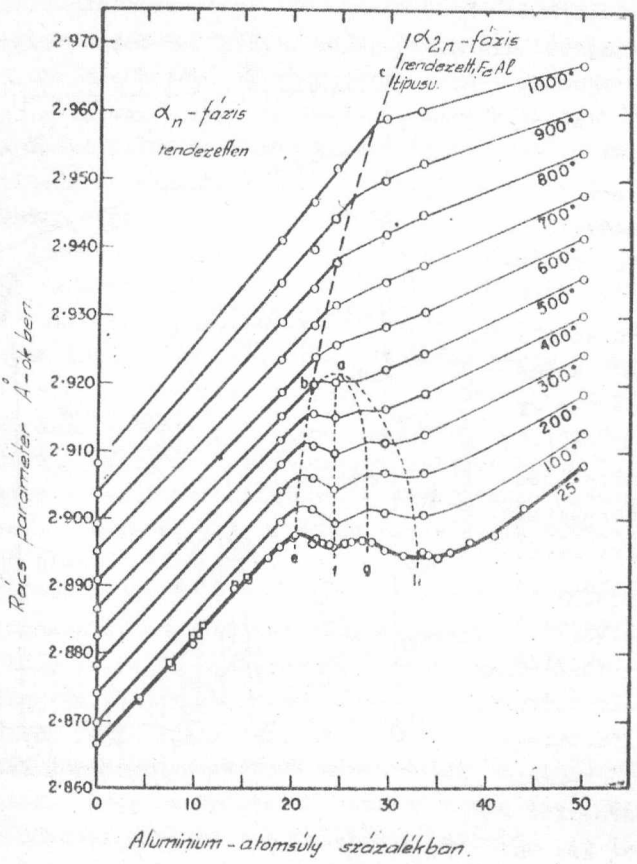
A rendezett Fe_3Al ötvözet szerkezete Bradley és Jay [1] szerint.

3. §

Szükségesnek láttuk, hogy a 20-24 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó ötvözetek mágneses tulajdonságainak vizsgálatával kiegészitsük a vas-aluminium ötvözetekben lejátszódó rendeződési folyamatra vonatkozó ismereteinket és hogy megkisérejük az $Fe_{13}Al_3$ rendezett struktura létezését mágneses mérésekkel is bizonyitani.

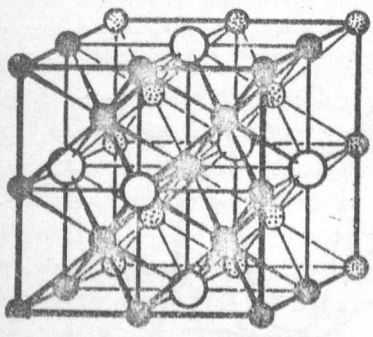
A rendeződési folyamat sok esetben igen jelentősen módositja a ferromágneses állapot kialakulásáért felelős kicserélődési kölcsönhatást. Egyes ötvözetek a rendeződési folyamat során elveszitik mágnesességüket, mig mások mágnesessé válnak. Vonszovszkij [4] elméleti meggondolások alapján meghatározta a kétkomponensü, rendeződésre hajlamos ötvözetek Curie-hőmérsékletének függését a lokális rendparaméterektől.

Célszerünek látjuk mindenekelőtt összefoglalni és értelmezni azokat az eredményeket, amelyek az Fe_3Al összetételü ötvözetek mágneses tulajdonságaira vonatkoznak. Mivel a vas-aluminium atomok közötti kicserélődési integrál értéke jóval kisebb, mint a vas-vas atomok közötti kicserélődési integrálé, várható, hogy a rendezett szerkezetü Fe_3Al Curie-pontja kisebb, mint a rendezetlen szerkezetüé. A kisérletek valóban igazolták, hogy az Fe_3Al össze-



3. ábra

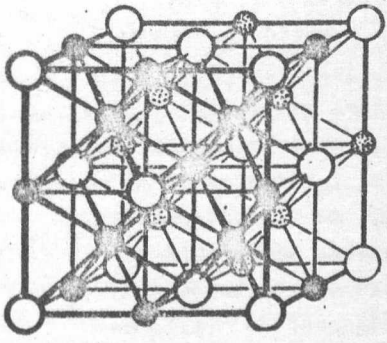
A vas-aluminium ötvözet rács-paraméterének függése az ötvözési aluminium koncentrációtól különböző hőmérsékleten, Taylor és Jones [3] szerint



● vas atom
⊛ vas atom
○ aluminium atom

4. ábra

A rendezett $Fe_{13}Al_3$ ötvözet szerkezete Taylor és Jones [3] szerint



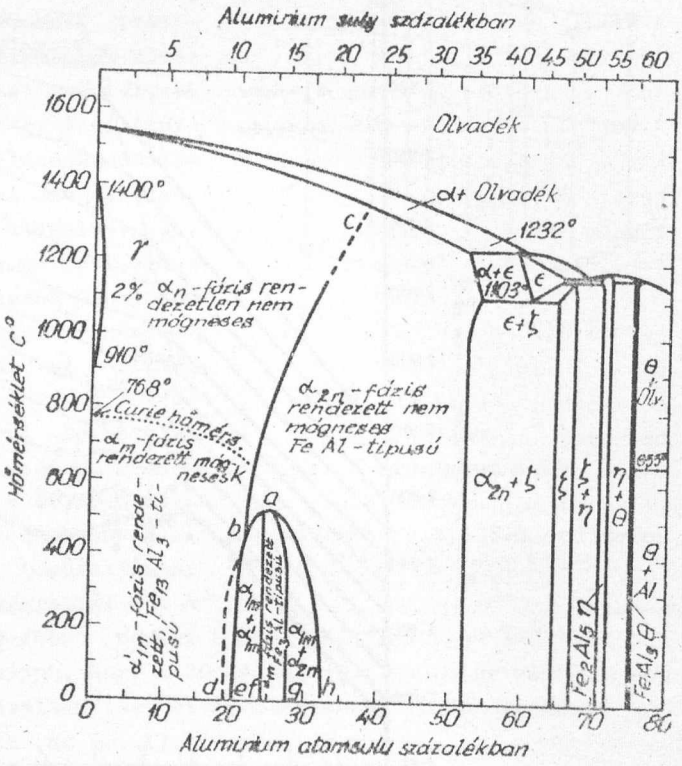
● vas atom
⊛ vas atom
○ aluminium atom

5. ábra

A rendezett Fe_3Al ötvözet szerkezete Taylor és Jones [3] szerint

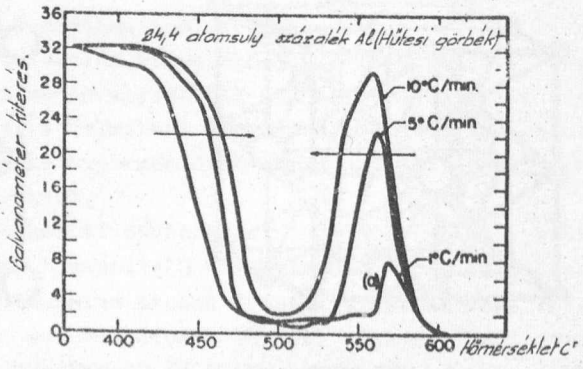
tételü ötvözet Curie-hőmérséklete alacsonyabb a rendezetlenénél. Ugyanakkor a rendeződési hőmérséklet kisebb, mint a rendezetlen szerkezetü ötvözet Curie-hőmérséklete, de valamivel nagyobb, mint a rendezett szerkezetüé. Ez a körülmény magyarázza azokat a mágneses anomáliákat, amelyeket még Sykes és Evans [5] észleltek az Fe_3Al összetételhez közeleső összetételü ötvözetekben. Azt találták, hogy megfelelően választott hütési sebesség mellett az általuk vizsgált 24,4 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó ötvözet kezdő permeabilitásának hőmérséklet - től való függése két Curie-pont felléptére enged következtetni. Sykes és Evans mérési eredményeit szemlélteti a 7. ábra.

A kezdő permeabilitás jelentős csökkenését azzal magyarázhatjuk, hogy a rendezetlen szerkezetü ferromágneses fázisban a lehütés során rendezett szerkezetü - keletkezésük pillanatában nem mágneses - tartományok alakulnak ki. A nem mágneses tartományoknak a rendezetlen szerkezetü mágneses fázisban létrejövő erősen diszperz eloszlása nagy belső lemág-



6. ábra

A vas-aluminium ötvözet-rendszer egyensulyi fázis-diagrammja Taylor és Jones [3] szerint.



7. ábra

Kettős Curie-pont vas-aluminium ötvözetben Sykes és Evans [5] szerint

nesező tér kialakulásához vezet. Ez okozza a kezdő permeabilitás erős csökkenését. Ugyanakkor várható, hogy a kezdő permeabilitás lecsökkenésével egyidőben a koercitiv erő értéke nagymértékben megnő. Ivanovszkij [6] vizsgálatai meggyőzően mutatták, hogy az Fe_3Al ötvözet koercitiv ereje éppen abban a hőmérsékleti intervallumban mutat be nem fagyasztható maximumot, ahol a kezdő permeabilitás értéke minimális. A maximális koercitiv erejü állapot azért nem fixálható, mert a rendezett szerkezetü, nem mágneses tartományok minden atomi átrendeződés nélkül mágnesessé válnak és igy bármilyen gyors lehülés mellett is megszünik a nagy koercitiv erőt okozó diszperz szerkezet.

Ezzel kapcsolatban nem érdektelen talán rámutatni,hogy a Ni_3Mn összetételü ötvözetben Komar és Volkenstein [7] által észlelt hasonló jelenségnél éppen forditott a helyzet. A koercitiv erő nagymértékü megnövekedését ebben az esetben az okozza, hogy a nem mágneses, rendezetlen szerkezetü fázisban mágneses, rendezett szerkezetü tartományok keletkeznek a hütés folyamán. Mivel a rendezetlen állapot befagyasztható és az még szobahőmérsékleten sem válik mágnesessé, várható, hogy a Ni_3Mn összetételü ötvözetben a maximális koercitiv erejü állapot fixálható.

Az Fe_3Al összetételü ötvözetben lejátszódó rendeződési folyamatról alkotott felfogásunkat megerősitették Ivanovszkij és Denyiszov [8] mérései. Azt találták, hogy az Fe_3Al összetételü ötvözet magnetokalorikus effektusa a hőmérséklet függvényében kettős maximumot mutat, jelezvén a két különböző Curie-hőmérsékletü fázis felléptét.

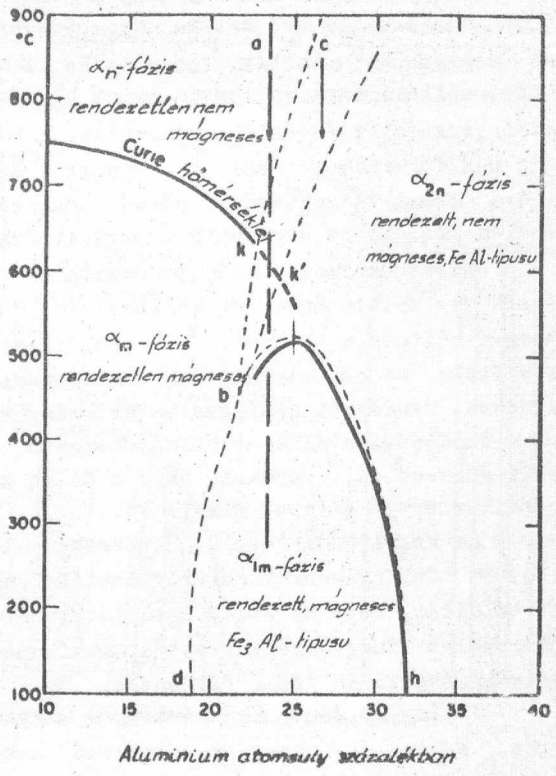
Taylor és Jones [3] másképpen magyarázták a kettős Curie-pont jelenségét. Feltették, hogy a keletkező nem-mágneses fázis szerkezete az FeAl összetételü rendezett ötvözet szerkezetéhez hasonló, azzal a különbséggel, hogy az 1- és 2-tipusu alrácsban az alumínium atomok koncentrációja valamivel kisebb, mint ami az FeAl összetételnek megfelel. Ennek a nem-mágneses, rendezett szerkezetü fázisnak a fellépte azonban csak akkor várható, ha az egyensulyi fázisdiagrammon Taylor és Jones által feltüntetett nem-valódi fázishatár a hütési sebesség függvényében jobbra elhajlik. A 8. ábrán látható, hogy ennek az elhajlásnak a következtében a rendezetlen mágneses fázisban az FeAl összetételü ötvözet szerkezetéhez hasonló, nem-mágneses fázis válik ki, amelyből mágneses fázis azonban csak ugy alakulhat ki, hogy előbb a 2-tipusu alrács alumínium atomokban erősen elszegényedik, azaz létrejön az Fe_3Al összetételnek megfelelő rendezett szerkezet. Taylor és Jones felfogását azonban elfogadhatatlanná teszi az a körülmény, hogy - mint ismeretes - a nem mágneses fázis nem fagyasztható be. Márpedig a Taylor és Jones által javasolt mechanizmus elfogadása esetén a nem-mágneses fázisnak fixálhatónak kellene lennie,mivel belőle mágneses fázis csak atomi átrendeződéssel keletkezhetne.

Mindezek alapján ugy véljük, hogy Taylor és Jones felfogása ellentmond a kisérleti tényeknek. Jogosultabbnak látszik az a felfogás, amely szerint a rendezetlen mágneses fázisban mindjárt az Fe_3Al összetételnek megfelelő, rendezett szerkezetü, keletkezése pillanatában nem mágneses,de alacsonyabb hőmérsékleten spontánul mágnesessé váló fázis diszpergálódik.

4. §

Az Fe_3Al összetételtől eltérő, kisebb aluminium koncentrációju aluminium ötvözetek vizsgálatával, amelyekben Taylor és Jones szerint az $Fe_{13}Al_3$ és az Fe_3Al struktúrák egymás mellett fordulnak elő, mindezideig alig foglalkoztak.

Az általunk vizsgált ötvözet 22,5 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazott. Az ötvözetet nagyfrekvenciás olvasztóberendezésben, argon védőgáz alatt állitottuk elő. Hogy minél homogénabb ötvözetet kapjunk, az olvadékot hütött kokillákba eresztettük, le, majd a megszilárdult öntecseket kovácsoltuk és 80 órán át 1100 C°-on homogénizáltuk. A homogénizált öntecseket 6 mm vastag lemezekké lapitottuk, amelyekből 80 mm hosszu, 4 mm átmérőjü forgási ellipszoidokat munkáltunk ki. A lemez különböző helyeiről vett minták kémiai analizise azt mutatta, hogy ötvözetünkben 0,05 %-nál nagyobb aluminium koncentrációingadozás nem fordult elő. Vizsgálatainkat a leghomogénebbnek bizonyult ötvözeten végeztük el.



8. ábra
A kettős Curie-pont értelmezése Taylor és Jones [3] szerint

Meghatároztuk a telitési mágneses intenzitás temperatura koefficiensének hőmérséklettől való függését különbözőképpen hőkezelt mintán.

Az egyik hőkezelési eljárás szerint ötvözetünket 700 C°-on két órán keresztül izzitottuk, majd 20 C°/h sebességgel lehütöttük 530 C°-ra és végül erről a hőmérsékletről 20 C° hőmérsékletü térbe kiemeltük. Ennek a hőkezelésnek az volt a célja, hogy lehetővé tegye a magasabb hőmérsékleten képződő Fe_3Al összetételü rendezett fázis kiválását (vagy legalábbis e fázis kiválásának megindulását), de megakadályozza az alacsonyabb hőmérsékleten képződő $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett fázis keletkezését.

A másik hőkezelési eljárás szerint ötvözetünket 700 C°-on ismét két órán keresztül izzitottuk, majd igen lassan 20 C°-ra lehütöttük. Az alkalma-

zott hütési sebességek értékei sorban a következők voltak: 26,0, 13,5, és 7,5 C^o/h. Ennek a hőkezelésnek viszont az volt a célja, hogy lehetővé tegye az alacsonyabb hőmérsékleten viszonylag kis sebességgel képződő $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett fázis kiválását is.

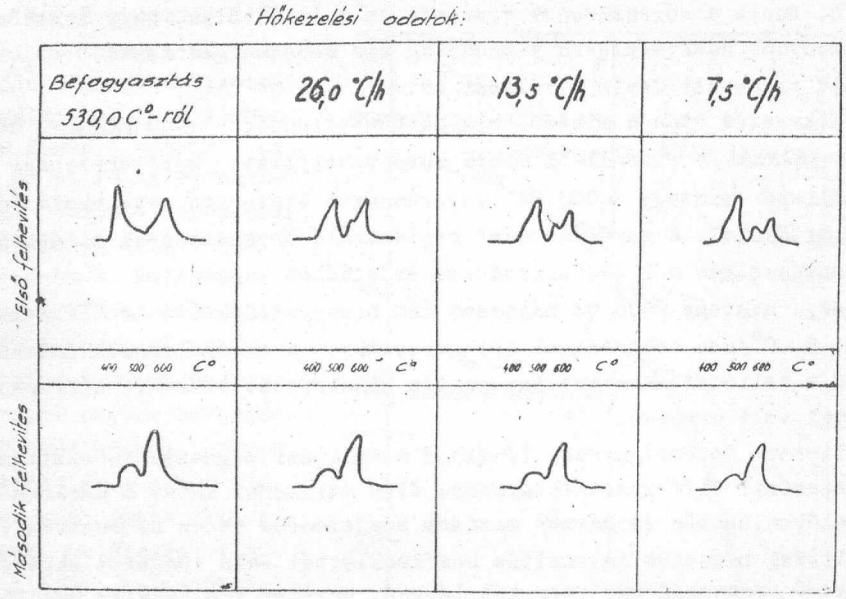
Hőkezelés után a mintát kis hőtehetetlenségü vákuumkályhába helyeztük. A vákuum-kályhát, a vizsgálati minta köré elhelyezett mérőtekercsel együtt, a maximálisan mintegy 6000 Oe térerősséget biztositó szolenoid légrésébe függesztettük fel. A mérőtekercset regisztráló berendezéssel ellátott, fotokompenzációs elven müködő, egyenáramu erősitőhöz kapcsoltuk. A mágnesezéshez szükséges, mintegy 2000 Oe mágneses tér bekapcsolása után a hőkezelt mintát mintegy 5 C^o/sec sebességgel felhevitettük. A mérőtekercsen indukált feszültség a telitési mágneses intenzitás hőmérséklet szerinti differenciálhányadosával volt arányos.

Tiszta ferromágneses fémekben a telitési mágneses intenzitás hőmérséklet szerinti differenciálhányadosa éles maximumot mutat a Curie-hőmérséklet közelében. Kettős és hármas maximum megjelenése abban az esetben várható, ha a telitési mágneses intenzitás hőmérséklettől való függését ábrázoló görbe csökkenő szakaszán egy vagy két lépcső, esetleg kis lokális maximum mutatkozik.

Az Fe_3Al összetételü ötvözetben a rendeződési hőmérséklet környezetében a telitési mágneses intenzitás hőmérsékleti függését ábrázoló görbén fellép ilyen lépcső. A jelenség egyszerüen értelmezhető. A rendeződési hőmérséklet közelében a felhevités során képződő rendezetlen fázis fajlagos mágneses intenzitása nagyobb, mint a rendezetté. Ennek megfelelően a kiváló rendezetlen fázis nagyobb mágneses intenzitása kompenzálja a rendezett fázis-mágneses intenzitásának a növekvő hőmérséklet hatására előálló csökkenését.

Várakozásunknak megfelelően abban az esetben, amikor megakadályoztuk az $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett fázis keletkezését, a mágneses intenzitás hőmérséklet szerinti deriváltja valóban kettős maximumot mutat. A 9. ábrán láthatjuk az általunk regisztrált kettős maximumot mutató görbét. Az első felhevités után a kis hőtehetetlenségü vákuumkályhában viszonylag gyorsan hütöttük le vizsgálati mintánkat. A lehütés után ismét regisztráltuk a telitési mágneses intenzitás temperatura koefficiensének hőmérsékleti függését. A kapott görbéből, amely az ábrán látható, azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a rendezetlen fázis 2-3 C^o/sec sebességü hütés mellett nem fagyasztható be tökéletesen.

Abban az esetben viszont, amikor a hőkezelés során mind az Fe_3Al, mind pedig az $Fe_{13}Al_3$ összetételnek megfelelő rendezett fázisok kialakultak, a telitési mágneses intenzitás temperatura koefficiensének hőmérséklettől való függését ábrázoló görbén, várakozásunknak megfelelően, három maximum látható, amelyek közül a középsőnek intenzitása annál nagyobb, minél lassabban hütöttük le mintánkat. Az első felhevités után rendezetlenné vált, gyorsan lehülő mintában nem alakulhat ki az $Fe_{13}Al_3$ összetételnek megfelelő rendezett szerkezet, csupán az várható, hogy az Fe_3Al összetételnek megfelelő rendezett fázis válik ki kis mennyiségben. Ennek megfelelően a második felhevitéskor re-



9. ábra

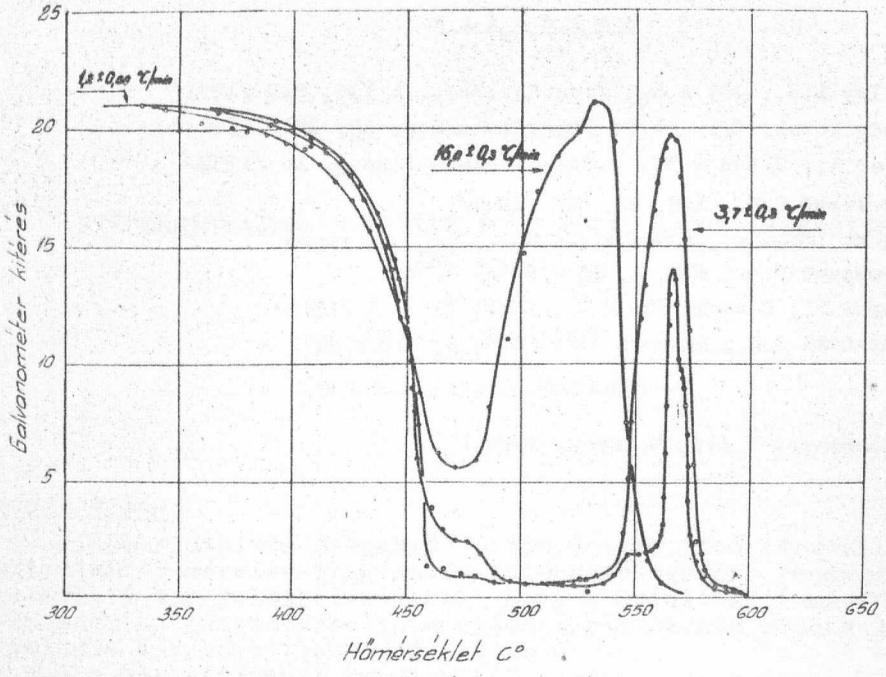
A telitési mágneses intenzitás temperatura koefficiensének hőmérséklettől való függése

gisztrált görbéknek azonosaknak kell lenniök. A görbék azonossága jól látható ábránkon. Ilyen módon egyértelműen bizonyitottuk a telitési mágneses intenzitás hőmérsékleti függését ábrázoló görbén az $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett fázis elbomlása következtében kialakuló második lépcső létezését.

Mivel az általunk vizsgált összetételü ötvözet kezdő permeabilitásának hőmérsékleti függése különböző hütési sebességek mellett nem volt ismeretes, célszerünek láttuk a kezdő permeabilitás hőmérséklet függését néhány jól kiválasztott lineáris hütési sebesség mellett meghatározni. A 10. ábrán láthatók mérési eredményeink. Észrevehető, hogy a nagyobb hütési sebességek mellett a nem-mágneses rendezett fázis képződése lefékeződik és ezért a kezdő permeabilitás nem csökken olyan erősen a rendeződési hőmérséklet környezetében, mint a kisebb hütési sebességek alkalmazása esetében.

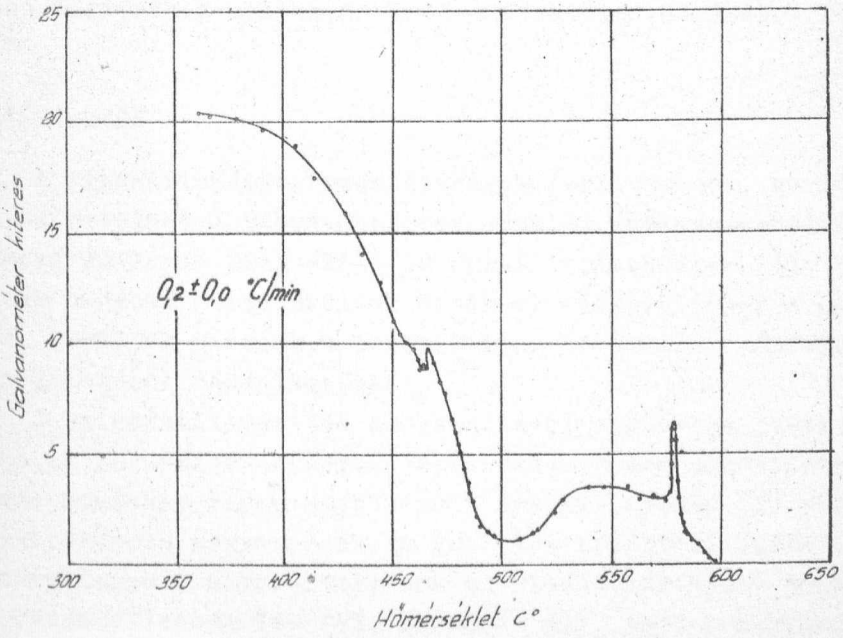
Különösen figyelemreméltó a 11. ábrán látható görbe. A 0,2 C°/min hütési sebesség mellett felvett görbén jól látható, hogy a kezdő permeabilitás csökkenésének első szakaszát egy viszonylag elég jelentős plato megjelenése követi. A további csökkenés akkor következik be, amikor jelentőssé válik az $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett fázis kiválása.

Összegezve vizsgálataink eredményét, meggyőződéssel mondhatjuk, hogy a Taylor és Jones által röntgen vizsgálati módszerekkel felfedezett $Fe_{13}Al_3$ összetételü rendezett fázis létezését az Fe_3Al összetételü rendezett fázis mellett mágneses mérésekkel is bizonyitottuk.



10. ábra

A 22,5 atomsuly százalék aluminiumot tartalmazó vas-aluminium ötvözet kezdő-permeabilitásának hőmérséklettől való függése különböző hütési sebességek mellett



11. ábra

A kezdő permeabilitás hőmérsékletfüggése igen kis hütési sebesség mellett

I r o d a l o m

[1] Bradley A.J., Jay A.H., Proc.Roy.Soc., A 136, 210 /1932/

[2] Wojciechowski K.F., Acta Phys. Polonica, 18, 15 /1959/

[3] Taylor A., Jones R.M., J.Phys. Chem.Solids 6, 16 /1958/

[4] Вонсовский С.В., ДАН, 26, 564 /1940/

[5] Sykes C., Evans H., J.Iron Steel Inst., 131, 225 /1935/

[6] Ивановский В.И., ФММ, 4, 70 /1957/

[7] Комар А.Г., Волкенштейн Н.В., ЖЭТФ, 11, 711 /1941/

[8] Ивановский В.И., Денисов П.П., ФММ, 4, 550 /1957/

KFKI Közlemények 7.évf. 5. szám, 1959.

FINOMKRISTÁLYOS SZÉNFÉLESÉGEK ÁLTAL SZÓRT INTENZITÁS SZÁMITÁSÁRÓL

Irta: Szabó Pál

Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

Finomkristályos szenekről szórt intenzitást tárgyaljuk, mint a krisztallit-méretek függvényét különböző mértékü rendezetlenségeknél. A tárgyalásból kiderül, hogy a krisztallit-méretek meghatározásában használatos intenzitás-képletek nem veszik helyesen figyelembe a rendezetlenség fajtáját és mértékét. Emiatt a szokásos módon meghatározott krisztallit-méretek nem egészen helyesek. Tárgyalásunk a rendezetlenségeket kellő módon figyelembeveszi, és igy lehetőséget nyujt a rendezetlenség mértékének kisérleti meghatározására és ezzel - a krisztallit-méretek helyesebb meghatározásán tulmenően - a finomkristályos szenek szerkezetének az eddiginél jobb megismerésére. Vázoljuk, hogy ennek a lehetőségnek a kihasználásához milyen neutron-diffrakciós méréseket kell végezni.

I. Előzmények

A finomkristályos szénféleségek /aktivszenek, kormok/ krisztallitméreteinek a Debye-Scherrer vonalak szélességéből való meghatározásával már 1941 előtt is sokat foglalkoztak [1]. Az ilyen mérések nagyban hozzájárultak annak az elképzelésnek a kialakitásához, amellyel ezeknek a technikailag is fontos szénféleségeknek a szerkezetéről rendelkezünk.

A krisztallitméretek csökkenésével együtt az interferenciaképben az intenzitás-arányok jellegzetes módon megváltoznak. Az interferenciakép ilyen sajátságait Arnfelt nyomán [2] röviden a következőképpen magyarázzák. A grafitok krisztallitméreteinek csökkenésével együtt a krisztallitok szerkezetében egyre nagyobb mértékü rendezetlenség lép fel. Ez abban áll, hogy a hexagonális $\bar{a}_3$ krisztallográfiai tengelyre merőleges rácssikok - párhuzamosságukat megtartva - a grafitszerkezetben meghatározott helyzetükhöz

képest rendezetlenül eltolódnak és elfordulnak. A rendezetlenség annál nagyobb mértékü, minél kisebbek a krisztallitok.

Az ilyen grafitféleségek krisztallitméreteinek a Debye-Scherrer vonalak szélességéből való meghatározásához ugyanazokat a számitásokat alkalmazták, mint a rendezetlenség-mentes krisztallitok méreteinek a meghatározására. Ez az eljárás természetesen legalábbis indokolásra szorult.

II. Warren módszere

1941-ben Warren közölt számitásokat [3], amelyek bizonyos módositással igazolni látszanak ezt az eljárást. A finomkristályos szénféleségek krisztallitméreteinek a Debye-Scherrer vonalak szélességéből való meghatározását azóta Warren számitásai alapján végzik [4].

Warren N_3 darab egyforma, $N_1\bar{a}_1$ és $N_2\bar{a}_2$ élvektoru, egymással párhuzamos és egymástól a_3 távolságban elhelyezkedő rácssikból álló krisztallitok röntgenszórását tárgyalja azzal a feltételezéssel, hogy ezek a sikok a grafitszerkezetben meghatározott helyzetükhöz képest $\bar{a}_1$- és $\bar{a}_2$-vel párhuzamosan teljesen rendezetlenül eltolódva fordulnak elő az egyes krisztallitokban. /$\bar{a}_1$, $\bar{a}_2$, $\bar{a}_3$ a grafit ortohexagonális elemi cellájának élvektorai, N_1, N_2 és N_3 egész számok./

Rendezetlen krisztallit-halmazok által valamely irányban szórt intenzitást ugy kapjuk meg, hogy az egy krisztallit által szórt intenzitást integráljuk a krisztallit összes lehetséges térbeli helyzeteire. Ezt az integrálást az A_1, A_2, A_3 derékszögü reciprok-rács koordináták mint változók szerint az

$$\left(\frac{A_1}{a_1}\right)^2+\left(\frac{A_2}{a_2}\right)^2+\left(\frac{A_3}{a_3}\right)^2=\left(\frac{2\sin\vartheta}{\lambda}\right)^2$$

feltételnek eleget tevő felületen kell képezni, ahol ϑ az un. reflexiós szög, λ a röntgenfény hullámhosszusága. A következőkben - rövidség kedvéért - integrálon az ilyen integrálokat fogjuk érteni.

Warren számitásai a következő állitásokból indulnak ki:

1. A grafit reflexiói közül a finomkristályos szeneknél csak két tipusu reflexió lép fel. a/ Az egyik fajta olyan, mint amilyet a mondott rácssikok teljesen rendezetlen halmazától le-

hetne várni. Ezek a reflexiók tehát két indexszel /hk/ jellemezhetők, és intenzitásukat az

$$|F|^2 \frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{\sin^2 \pi A_1} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{\sin^2 \pi A_2} \qquad /x/$$

függvény integrálja adja, ahol $|F|^2$ a grafit-térrács szerkezeti faktora. b/ A másik fajta pedig megfelel a grafit /00ℓ/ tipusu reflexióinak, és az ilyen reflexiók intenzitását az

$$|F|^2 \frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{\sin^2 \pi A_1} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{\sin^2 \pi A_2} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_3 A_3}{\sin^2 \pi A_3} \qquad /xx/$$

függvény integrálja szolgáltatja, ahol $|F|^2$ ugyanazt jelenti, mint előbb.

2. Ha a rácssikok a fent mondott eltolódásokon kivül még rendezetlenül el is fordulnak, ez már nem változtatja meg a fellépő reflexiókat.

III. A Warren-féle számitás hiányosságai

A következő megfontolásokból látni fogjuk, hogy $|F|^2$ helyébe - Warren állitásával /lád id.mü, /4o/ egyenlet/ ellentétben - nem a grafitrács kristályszerkezeti faktorát, hanem a mondott sikokhoz tartozó sikrács szerkezeti faktorát kell tennünk; az 1/a állitás még igy is csak akkor helyes, ha a rendezetlen eltolódási lehetőség igen nagy, sokkal nagyobb, mint a_1, illetve a_2; a 2/ állitás még ekkor sem exakt; az 1/b állitás éppen annál kevésbé exakt, minél nagyobbak az eltolódások.

Az igen nagy eltolódási lehetőségek feltevése önmagában véve fizikailag megengedhetetlennek látszik. Hiszen a Warren-féle számitások alapján meghatározott N_1-, N_2-, N_3-ra gyakran /pl. bizonyos kormoknál/ igen kis egész számok adódnak, és a krisztallitok igen kicsi volta egyéb /pl. adszorpciós/ vizsgálatokkal is összhangban áll. Kis rácssikok nagy eltolódásainak feltételezése azonban nyilván ellentétben áll a rácssikok párhuzamosságának és egymástól való meghatározott távolságának a számitásokban kihasznált feltevésével.

Ezért a következőkben - fenti állitásaink igazolásán tulmenően - megkisérelj̈ük megállapitani, milyen eltérésekre vezet a Warren-féle képletektől az, ha az igen nagy eltolódási lehetősé-

gek feltevése helyett kisebb, plauzibilis, pl. az $\bar{a}_1$, ill. $\bar{a}_2$ irányban legfeljebb a_1, ill. a_2 nagyságu eltolódási lehetőséggel számolunk.

IV. Számitások

Jelölje

$$\bar{r}_c = x_1\bar{a}_1 + x_2\bar{a}_2 + x_3\bar{a}_3 \qquad /1/$$

az egyes elemi cellák helyvektorát. Azokat a tényezőket, amelyek az emlitett integrálásnál gyakorlatilag konstansnak vehetők /és amelyeket Warren is igy kezelt/ egyszerüen elhagyva, az intenzitást az

$$\left|\sum e^{2\pi i(X_1A_1 + X_2A_2 + X_3A_3)}\right|^2 \qquad /2/$$

összeg átlagértékének integrálja adja. /i a képzetes egység./ Az összegezés a krisztallit összes elemi celláira, az átlagolás x_1, x_2, x_3 összes lehetséges értékeire vonatkozik.

1. Kis eltolódási lehetőség

Jelöljük a krisztallitbeli szóbanforgó /egymástól n_3 indexszel megkülönböztetett/ rácssikok eltolódásait $\delta_{n_3}\bar{a}_1$ - ill. $\varepsilon_{n_3}\bar{a}_2$-vel. Ekkor a /2/ kifejezés átlaga nyilván igy irható:

$$\left|\sum_{n_1=1}^{N_1}\sum_{n_2=1}^{N_2}\sum_{n_3=1}^{N_3} e^{2\pi i[(n_1+\delta_{n_3})A_1+(n_2+\varepsilon_{n_3})A_2+n_3A_3]}\right|^2_{\text{átlag}} =$$

$$= \frac{\sin^2\pi N_1A_1}{\sin^2\pi A_1}\cdot\frac{\sin^2\pi N_2A_2}{\sin^2\pi A_2}\left|\sum_{n_3=1}^{N_3} e^{2\pi i(n_3A_3+\delta_{n_3}A_1+\varepsilon_{n_3}A_2}\right|^2_{\text{átlag}} =$$

$$= \frac{\sin^2\pi N_1A_1}{\sin^2\pi A_1}\cdot\frac{\sin^2\pi N_2A_2}{\sin^2\pi A_2}\left\{N_3 + \right. \qquad /3/$$

$$\left. + \sum_{\substack{n_3=1\\ n_3\neq n_3'}}^{N_3}\sum_{n_3'=1}^{N_3} e^{2\pi i[(n_3-n_3')A_3+(\delta_{n_3}-\delta_{n_3'})A_1+(\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_{n_3'})A_2]}\right\}_{\text{átlag}} \equiv$$

$$\equiv \frac{\sin^2\pi N_1A_1}{\sin^2\pi A_1}\cdot\frac{\sin^2\pi N_2A_2}{\sin^2\pi A_2}\cdot\overline{f(A_3)}.$$

Ha most feltételezzük pl., hogy $0 \leq \delta_{n_3} \leq 1$, valamint $0 \leq \varepsilon_{n_3} \leq 1$, akkor az f/$A_3$/-ban szereplő kettős összeg általános tagjának átlaga:

$$\int_0^1\int_0^1\int_0^1\int_0^1 e^{2\pi i[(n_3-n_3')A_3+(\delta_{n_3}-\delta_{n_3'})A_1+(\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_{n_3'})A_2]}\, d\delta_{n_3}\, d\delta_{n_3'}\, d\varepsilon_{n_3}\, d\varepsilon_{n_3'} = \quad /4/$$

$$= \frac{1}{\pi^4 A_1^2 A_2^2}\, e^{2\pi i(n_3-n_3')A_3} \cdot \sin^2 \pi A_1 \cdot \sin^2 \pi A_2 .$$

Tehát f/A_3/ átlagértéke:

$$\overline{f(A_3)} = N_3 + \frac{1}{\pi^4 A_1^2 A_2^2} \sin^2 \pi A_1 \cdot \sin^2 \pi A_2 \cdot \sum_{\substack{n_3=1 \\ n_3 \neq n_3'}}^{N_3} \sum_{n_3'=1}^{N_3} e^{2\pi i(n_3-n_3')A_3} = \quad /5/$$

$$= N_3 - \frac{N_3}{\pi^4 A_1^2 A_2^2} \cdot \sin^2 \pi A_1 \cdot \sin^2 \pi A_2 - \frac{1}{\pi^4 A_1^2 A_2^2} \cdot \sin^2 \pi A_1 \cdot \sin^2 \pi A_2 \cdot \frac{\sin^2 \pi N_3 A_3}{\sin^2 \pi A_3}$$

$\overline{f/A_3}$/-at /5/-ből /3/-ba helyettesitve

$$N_3 \frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{\sin^2 \pi A_1} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{\sin^2 \pi A_2} - \frac{N_3}{\pi^4} \frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{A_1^2} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{A_2^2} + \quad /6/$$

$$+ \frac{1}{\pi^4} \frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{A_1^2} \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{A_2^2} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_3 A_3}{\sin^2 \pi A_3} -$$

ra jutunk. Az intenzitást tehát ennek integrálja adja meg, és könnyen belátható, hogy ez különbözni fog akár /x/, akár /xx/ integráljától.

A fenti levezetés tökéletes analógiájára tárgyalható az intenzitás a δ_{n_3} és ε_{n_3} tartományra vonatkozó bármilyen más feltétel esetén is. A különböző feltételek a /6/-tal analóg különböző képletekre vezetnek.

Abban a határesetben, amikor ezeknek a tartományoknak a kiterjedése 0, ami a tökéletesen rendezett grafitrácsnak felel meg, /6/ természetesen átmegy a térrácsokra vonatkozó /xx/ képletbe.

2. Igen nagy eltolódási lehetőségek

Ha δ_{n_3}- és ε_{n_3}-nak nem 0-tól 1-ig, hanem sokkal nagyobb tartományban való változását engedjük meg, akkor a fentivel analóg módon elvégzett átlagolás az $A_1 \neq 0$ és $A_2 \neq 0$ esetben /tehát a (hk) tipusu reflexióknál/ tényleg /x/-ra vezet.

A /00ℓ/ tipusu reflexiókra megadott /xx/ képlet azonban

éppen az igen nagy eltolódási lehetőség esetében alkalmazható a legkevésbé. Ugyanis ebben az esetben, ha A_1 és A_2 nem tul kevéssel eltér 0-tól, a δ_{n_3} A_1 és ε_{n_3} A_2 fáziseltolódások teljesen bizonytalanok lesznek. Igy ilyenkor a /3/-ban jelölt átlagolás nem /xx/-ra, hanem /x/-ra vezet. Másrészt $A_1 = 0$ és $A_2 = 0$ igen kis környezetében a IV.1. pontbelivel analóg módon elvégzett átlagolás nem vezet sem /x/-ra, sem /xx/-ra. Végül ha A_1 és A_2 pontosan 0, akkor az átlagolás /xx/-ra vezet. Annál kisebb $|A_1|$ - és $|A_2|$ -től kezdve kell ilyenkor a /xx/ képlet helyett az /x/ képletet használni, minél nagyobb eltolódásokat engedünk meg.

A megengedett eltolódások mértékének a csökkenésével természetesen /xx/ egyre jobb közelitést jelent a /00ℓ/ interferenciák esetében. Ez eleve sejthető is: ha a megengedett eltolódások 0-ra csökkennek, akkor visszajutunk a pontos grafitrács esetéhez, amikoris /xx/ pontosan érvényes.

3. Eltolódások és elfordulások együttes hatása

Ha a grafitrácsban egy kiválasztott $\bar{a}_3$ tengely körül az egyes rácssikok különböző α_{n_3} szögekkel elfordulva lépnek fel, akkor /1/ helyébe nyilván ezt kell irnunk:

$$\bar{r}_c = \left(n_1 \cos\alpha_{n_3} - n_2 \frac{a_2}{a_1} \sin\alpha_{n_3}\right)\bar{a}_1 + \left(n_1 \frac{a_1}{a_2} \sin\alpha_{n_3} + n_2 \cos\alpha_{n_3}\right)\bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3 . \qquad /1'/$$

Ha pedig ezenkivül még az eltolódások is fellépnek, akkor

$$\bar{r}_c = \left(n_1 \cos\alpha_{n_3} - n_2 \frac{a_2}{a_1} \sin\alpha_{n_3} + \delta_{n_3}\right)\bar{a}_1 + \left(n_1 \frac{a_1}{a_2} \sin\alpha_{n_3} + n_2 \cos\alpha_{n_3} + \varepsilon_{n_3}\right)\bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3 . \qquad /1''/$$

Igy /2/ konkrét alakja most ez lesz:

$$\left| \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} \sum_{n_3=1}^{N_3} \exp\left\{2\pi i\left[\left(n_1 \cos\alpha_{n_3} - n_2 \frac{a_2}{a_1} \sin\alpha_{n_3} + \delta_{n_3}\right)A_1 + \left(n_1 \frac{a_1}{a_2} \sin\alpha_{n_3} + n_2 \cos\alpha_{n_3} + \varepsilon_{n_3}\right)A_2 + n_3 A_3\right]\right\} \right|^2_{\text{átlag}} \qquad /1'''/$$

Ha az α_{n_3} szögek egyenlő valószinüséggel vehetnek fel minden értéket 0 és 2π között, akkor /7/ igy irható:

$$\frac{1}{4k^2}\iint_0^{2\pi}\sum_{n_1=1}^{N_1}\sum_{n_2=1}^{N_2}\exp\Big\{2\pi i\Big[\Big(n_1\cos\alpha_{n_3}-n_1'\cos\alpha_{n_3'}-n_2\frac{a_2}{a_1}\sin\alpha_{n_3}+$$

$$+n_2'\frac{a_2}{a_1}\sin\alpha_{n_3'}\Big)A_1+\Big(n_1\frac{a_1}{a_2}\sin\alpha_{n_3}-n_1'\frac{a_1}{a_2}\sin\alpha_{n_3'}+ \qquad /8/$$

$$+n_2\cos\alpha_{n_3}-n_2'\cos\alpha_{n_3'}\Big)A_2\Big]\Big\}d\alpha_{n_3}\,d\alpha_{n_3'}\cdot$$

$$\cdot\Big|\sum_{n_3=1}^{N_3}\exp\{2\pi i\,(n_3A_3+\delta_{n_3}A_1+\varepsilon_{n_3}A_2)\}\Big|^2\cdot$$

/8/ második tényezője megegyezik a /3/-beli $\overline{f/A_3}$/-al. /8/ első tényezője azonban szemmelláthatólag nem vezet a /3/ első két tényezőjét képező /x/ kifejezésre. Tehát /8/ különbözik /3/-tól, és igy a rendezetlen elfordulások hatása tényleg nem egyezik meg a rendezetlen eltolódások hatásával, ellentétben Warren állitásával.

4. Kristályszerkezeti faktor

Mindeddig csupán az elemi cellákat kijelölő cella-csucspontoktól származó intenzitást tárgyaltuk. A cellák belsejében a kijelölő csucspontokhoz képest meghatározott módon elhelyezkedő atomok hatása az intenzitásra az $|F|^2$ szerkezeti faktorral vehető figyelembe. Ennek a szórási szöggel való viszonylag lassu változása a krisztallitnagyság számitását ugyan gyakorlatilag nem, de a különböző reflexiók abszolut intenzitását nyilván lényegesen befolyásolja.

Warren számitásaiban a grafit-térrácsra vonatkozó $|F|^2$-et használja. /Lásd Warren, id.mü (4o) egyenlet./ A számitásaiban feltételezett eltolódások miatt azonban /akár kicsik azok, akár nagyok/ már nem teljesül az a feltétel, hogy a grafit elemi celláiban lévő összes atomok a cellát kijelölő csucsponthoz képest meghatározott módon helyezkedjenek el. Ugyanis a grafit szerkezete olyan, hogy két-két, egymástól a_3 távolságban fekvő rácssik között is, tőlük $\frac{1}{2}a_3$ távolságban található egy ugyanolyan, csak az előbbiekhez képest meghatározott módon eltolt rácssik.

Semmi sem indokolná azt a feltevést, hogy minden ilyen "köztes" rácssik az emlitett rendezetlen eltolódásoknál, ill. elfordulásoknál pontosan együtt tolódik, ill. fordul el - mondjuk - az alatta fekvő rácssikkal, amikoris nem egyes rácssikok, hanem rácssik-párok eltolódásáról kellene beszélnünk. /Ebben az esetben a rendezetlenség ellenére is az eredeti térrácshoz tartozóval azonos $|F|^2$-et kellene használnunk./

A szomszédos rácssikok egyenértéküsége miatt csak az a feltételezés látszik jogosultnak, hogy az emlitett rendezetlen elcsuszási és elfordulási lehetőség az összes, egymástól $\frac{1}{2}\bar{a}_3$ távolságban lévő, $\bar{a}_3$-ra merőleges rácssikokra nézve fennáll.

Ennek megfelelően a fenti képletekben a következő módositásokat kell végrehajtanunk. 1. $\bar{a}_3$ helyébe $\frac{1}{2}\bar{a}_3$-at kell tennünk, és N_3-on az egy krisztallitban található ilyen rácssikok számát kell értenünk. Ez az igen nagy eltolódások és $A_1 \neq 0$, $A_2 \neq 0$ esetében érvényes /x/ integrálját ugyan nem, de /6/ integrálját /ill. a vele analóg, az eltolódási lehetőség egyéb értékeire vonatkozó képletek integrálját/ befolyásolja. 2. A grafit kristályszerkezeti faktora helyett most az $\bar{a}_1$, $\bar{a}_2$ élvektoru kétméretü elemi cella atomjaira képezett sikrács-szerkezeti faktort kell használnunk. Ez még az igen nagy eltolódások, tehát a /x/ képlet alkalmazása esetére is igaz, és lényegesen megváltoztatja az egyes reflexiókra számitott abszolut intenzitást, amint az a kétféle $|F|^2$ képzésével azonnal kiderül.

V. Következtetések

A fentiekben a következő megállapitásokat tettük:

a/ A Warren által használt /x/ képlet csak az igen nagy eltolódási lehetőség esetében, a /xx/ képlet pedig csak a 0 eltolódási lehetőség esetében érvényes exaktul. A kettőnek szokásos egyidejü használata tehát semmiképpen sem lehet exakt.

b/ Egy speciális, kisebb eltolódási lehetőség esetén a /x/ és /xx/ képletek helyett a /6/ képletet kell alkalmazni. A levezetés alapján könnyen megadható a megfelelő képlet bármilyen más nagyságu eltolódások esetére is.

c/ Ha az eltolódási lehetőségen kivül az elfordulási lehetőséget is figyelembevesszük, az - Warren állitásával ellentétben - módositja az intenzitásképletet.

d/ A tárgyalt rendezetlenség esetén /akár igen nagy eltolódások és elfordulások léphetnek fel, akár csak kisebbek/ az intenzitás számitására nem a grafit-térrács szerkezeti faktorát kell használnunk, hanem az $\bar{a}_3$-ra merőleges síkrácsét, ellentétben Warren állitásával. Ez egy-egy reflexión belül ugyan csak gyakorlatilag konstans tényezővel változtatja meg az intenzitást, az egész koherens intenzitás-eloszlásban azonban lényeges különbséget okoz.

1. A krisztallit-méretek számitása az eltolódások mértékének figyelembevételével

Felmerül a kérdés, hogy a krisztallitméreteknek a Debye-Scherrer vonalak szélességéből számitott értékeiben milyen különbséget okoz az, ha ehhez a /x/ és /xx/ képletet, ill. az eltolódások mértékét helyesen figyelembevevő /6/ ill. valamelyik azzal analóg képletet használjuk. Erre vonatkozólag a következő becslést adhatjuk.

A /xx/ integrálást Laue végezte el közelitő módon [5], /x/-ot pedig Warren integrálta /id.mü/ - lényegében Laue-ra visszanyuló közelitésben. A krisztallit-nagyság és a vonalszélesség ezen számitásokból meghatározott összefüggése nem hasonlitható össze egymással közvetlenül, mert ezt Laue az un. integrális, Warren pedig a félérték-szélességre adta meg. Az összehasonlitás azonban megtehető, ha a Laue-féle összefüggést átalakitjuk ugy, hogy az is a félértékszélességre vonatkozzék. Ilyen módon könnyen kimutatható, hogy ha adott vonalszélességből a /x/ képlet alapján számitjuk a krisztallit-nagyságot, akkor ez kb. 2-szer nagyobbnak adódik, mint ha a /xx/ képlet alapján végezzük a számitást.

A IV.1. és IV.2. pontokban láttuk, hogy a /6/ és az azzal analóg képletek az igen kis ill. igen nagy eltolódásoknál határesetként a /xx/ ill. az /x/ képletbe mennek át. Az ezekből a képletekből a krisztallit-méretekre vezető számitás jellegét figyelembevéve, ebből azt a következtetést vonhatjuk le, hogy ha a /x/ és /xx/ képletek alapján számolunk, a tényleges rendezetlenségnek megfelelő /6/, ill. valamelyik ezzel analóg képlet helyett, akkor a számitott krisztallit-méretek csak egy 2-es faktoron belül helyesek.

Félreértések elkerülésére megjegyezzük még, hogy a tárgyalt

rendezetlenségek esetében a Warren-féle módszer alapján számitott krisztallit-nagyság az eltolódások semmilyen mértéke mellett sem lehet exakt. Ui. ezen módszer szerint - amint már emlitettük - a /x/ és a /xx/ képleteket egyidejüleg használják: a /hk/ tipusu reflexiókra /x/-ot, a /00ℓ/ tipusu reflexiókra /xx/-ot. Továbbá N_1-et és N_2-t a /hk/ tipusu reflexiókból, tehát /x/ alapján, N_3-at a /00ℓ/ reflexiókból, tehát /xx/ alapján számitják ki. Igy minél jobb értékeket nyerünk N_1- és N_2-re /nagy eltolódások esetében/, annál rosszabb értéket nyerünk N_3-ra, ill. /a kis eltolódások esetében/ megforditva.

2. Az eltolódások mértékének meghatározása

A tárgyalt eltolódások mértékét röntgen-diffrakcióval aligha lehetne számbajövő pontossággal megállapitani. Igy a különféle, általunk diszkutált képletek közül az adott esetben helyeset röntgendiffrakciós mérések alapján nem is lehetne kiválasztani. A röntgendiffrakció által adott lehetőségek körében maradva, az $|F|^2$ tényezőre vonatkozó megjegyzésünktől eltekintve, meg kellene elégednünk a szokásos számitási módszer elvi kritikájával, de helyette jobbat ajánlani nem tudnánk.

Neutron-diffrakció alkalmazása azonban módot nyujt arra, hogy a különböző tárgyalt képletek közül adott esetben a leginkább megfelelőt kiválasszuk, vagyis hogy a rendezetlenség fajtáját és mértékét megállapitsuk. /Ennek ismeretében a krisztallitméretek meghatározásában uralkodó emlitett bizonytalanság is megszüntethető./

A neutron-diffrakciót a következő sajátságok teszik alkalmassá ilyen vizsgálatokra. A röntgen- sugárzáshoz képest a neutron-sugárzás abszorpciója a szénben igen kicsi. A szén neutronszórása gyakorlatilag teljesen koherens szórás, mig a röntgenszórásnál a koherens részt csak az inkoherens szórásnak számitással történő levonásával kaphatjuk meg a mért szórásból, ami természetesen ujabb bizonytalanságot okoz. Végül a röntgen-diffrakciónál az intenzitás a nagyobb szórási szögek felé erősen csökken az atomalakfaktor miatt, a neutron-diffrakciónál viszont ez a hatás hiányzik, ami a finomkristályos szenek amugyis gyenge reflexiói esetében nagy előnyt jelent. Mindezen sajátságok követ-

keztében a neutron-diffrakciónál sokkal könnyebben és pontosabban lehet a mért intenzitások megfelelő korrigálásával belőlük a zavaró hatásoktól /abszorpció, inkoherens szórás/ mentes koherens intenzitás-eloszlást megkapni, mint röntgen-diffrakciónál.

A reflexiók szélességének a /x/ és a /xx/, ill. a /6/ stb. képlet alkalmazása esetében várható különbözőségén tulmenően a teljes intenzitás-eloszlásban, különösen annak diffuz részében szemmelláthatóan lényeges különbségek várhatók.

Igy a különböző mértékü rendezetlenségekre vonatkozó képletek között a számitott és a mért teljes intenzitás-görbék összehasonlitásával várhatóan dönteni lehet. Itt persze fontos, hogy a helyes /tehát a sikrács-/ szerkezeti faktort használjuk a számitásokhoz, másképpen biztosan mindegyik fajta tárgyalt képlet alkalmazása esetén a kisérleti görbétől eltérő intenzitás-eloszlási görbék adódnak.

De esetleg nem is szükséges a teljes intenzitás-görbét kimérni és kiszámitani ahhoz, hogy a rendezetlenség mértékéről tudomást szerezhessünk. Ui. neutron-diffrakcióval - annak emlitett sajátságai miatt - nemcsak jóval pontosabban lehet a koherens intenzitás-menetet megállapitani, mint röntgen-diffrakcióval, hanem igazi abszolut intenzitás-méréseket is lehet végezni krisztallit-halmazokon. Az egyes reflexiók abszolut módon meghatározott intenzitásmaximumánál a diffuz intenzitásnak és a reflexió szélességének a viszonya a különböző tárgyalt képletekből nyilván lényegesen különbözőnek adódik. Igy ebből a viszonyból is lehet következtetni a rendezetlenség mértékére. Elvben a maximumnál a diffuz és a reflexiós intenzitás viszonyából is következtetni lehetne a rendezetlenségre. De a reflexió-szélesség pontosabban mérhető, mint a reflexiós intenzitás-maximum, és a pontosságbeli különbség különösen nagy lesz a bennünket most elsősorban érdeklő kisméretü, többé-kevésbé rendezetlen szénkrisztallitok esetében várható nagyon gyenge reflexióknál.

Megfontolásaink tehát olyan módszer alapjait vetik meg, amelynek alkalmazása alapos reménnyel kecsegtet a finomkristályos szemek szerkezetének jobb megismerésére.

I r o d a l o m

[1] U.Hofmann, D.Wilm, Z. für phys. Chemie B 18, 4o1, 1932; Koll. Z. 7o, 21, 1935; Z. für Elektrochemie 42, 5o4, 1936; G.Clark, H.Rhodes, Ind.Eng.Chem.Anal.Ed. 12, 66, 194o; K.Biastoch, U.Hofmann, Angew. Chemie 53, 327, 194o; stb.

[2] H.Arnfelt, Arkiv f. Mat., Astron., Fys. 23, B 1, 1932.

[3] B.E.Warren, Phys. Rev. 59, 693, 1941.

[4] J.Biscoe, B.E.Warren, J.Appl. Phys. 13, 364, 1942; R.E.Franklin, Proc. Roy. Soc. A 2o9, 196, 1951; stb.

[5] M.v.Laue, Z.für Krist. 64, 115, 1926.

Érkezett 1958.jul.1.

KFKI Közlemények 6.évf. 3.sz. 1958.

NEUTRON-DIFFRAKTOMÉTER KOLLIMÁTORÁNAK MÉRETEZÉSE ÉS ELHELYEZÉSE

Irta: Szabó Pál

Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

Megmutatjuk, hogyan lehet kiszámitani egy neutron-diffraktométerre beeső neutron-nyaláb előirt kollimálását biztositó kollimátor optimális méreteit. Az optimális méreteket kiszámitottuk kétféle: "közeli" és "távoli" elrendezésre. /A "távoli" elrendezés lehetővé teszi a szomszédos reaktor-csatornák egyidejü zavartalan használatát./ Kiszámitottuk a kollimátoron a "távoli" és "közeli" elrendezés esetében átbocsátott intenzitások viszonyát. Az átbocsátott intenzitásnak bizonyos kiindulási feltevések alapján való számitására megadtuk az exakt számitási módszert. Az exakt /zárt alakban megadható/ formulák numerikus kiértékelése rendkivül fáradságosnak bizonyult. Ezért megadtunk egy közelitő számitási eljárást is. Numerikus számitással kimutattuk, hogy esetünkben gyakorlatilag teljesen elegendő a közelitő számitás alkalmazása.

A neutron-diffraktométer kollimált beeső neutron-nyalábot igényel. A nyaláb kollimálásának mértékétől függ a felbontóképesség. Berendezésünk a vizszintes sikban szórt intenzitás vizsgálatára lesz alkalmas. Kimutatható, hogy ebben az esetben adott felbontóképesség elérése érdekében a beeső neutron-nyaláb függőleges sikbeli divergenciája sokkal nagyobbra választható, mint a vizszintes sikbeli divergencia. /Divergencián célszerüen a különböző irányu sugarak által bezárt legnagyobb hegyesszög felét értjük./ Igy a kollimátor-üreg téglalap-keresztmetszetü hasáb lehet, melynek méretei olyanok, hogy a kétféle szögdivergencia az előirt legyen. Hogy az időegységenként átbocsátott neutronok száma elég nagy legyen, a valóságban olyan nagyobb keresztmetszetü kollimátort kell alkalmaznunk, amely több ilyen egymásmellé helyezett hasábból /szekcióból/ áll, és az egyes szekciókat megfelelően nagy

abszorpcióképességü lemezek választják el egymástól. [1].

Számitást kell végeznünk arra vonatkozólag, hogy adott kollimálás /divergencia/ esetén melyek a kollimátor optimális méretei, azaz hogy az adott kollimálást biztositó kollimátor milyen méretek /hosszuság és szekció-szám/ esetén bocsátja át a legnagyobb intenzitást.*

Az általunk tervezett diffraktométer nagy méretei miatt nagy előny származna abból, ha a berendezést nem közvetlenül a reaktor-csatorna nyilása elé, hanem kb. 2,5-m-rel messzebbre helyezhetnénk, amennyiben ekkor a berendezés nem zavarná a szomszédos csatornáknál elhelyezett berendezések használatát. Ilyen elhelyezés megvalósithatóságának eldöntéséhez tudnunk kell azt, hogy ezzel a "távoli" elrendezéssel milyen mértékben csökkentjük az intenzitást a kedvezőbb /"közeli"/ elrendezéshez képest. Ehhez ki kell számitanunk a kétféle elrendezésnek megfelelő optimális kollimátor-méreteket és az általuk átbocsátott intenzitást.

1. Kiindulási adatok

A kollimátor által meghatározott vizszintes szögdivergencia: $\alpha = 20'$ legyen. A függőleges szögdivergenciát a reaktorcsatorna alább ismertetendő méretei eleve kisebbre szabják meg a maximálisan megengedhetőnél, igy ezt külön korlátoznunk nem kell.

A kollimátor összkeresztmetszete 4 cm magasságu, 5 cm szélességü téglalap. /Ezeket a méreteket itt tárgyalni nem kivánt szempontok szabják meg./

A kollimátort 0,5 mm vastagságu acéllemezekkel n db egyenlő szekcióra osztjuk; adott n mellett a kollimátor hossza olyan, hogy a vizszintes szögdivergencia a fent megadott legyen.

---

* Könnyen belátható, hogy ha a szekciókat elválasztó lemezek vastagságát elhanyagolhatnánk, akkor az átbocsátott intenzitás - adott összkeresztmetszet és adott divergencia esetén - monoton nőne a szekciók számának növelésével /azaz a kollimátor hosszuságának csökkentésével/; az elválasztó lemezek véges vastagsága miatt azonban az átbocsátott intenzitásnak mint a szekció-szám függvényének maximuma, a méretezésnek tehát optimuma alakul ki.

A sugárzást 10 cm átmérőjü vizszintes csatornából kapjuk. A közeli elrendezésnél a kollimátor a csatornában helyezkedik el szimmetrikusan ugy, hogy a kollimátornak a reaktor aktiv zónájától távolabbi vége a csatorna nyilásánál van. A távoli, egyébként hasonló elrendezésnél a kollimátornak ez a vége 245 cm-re van a csatorna nyilásától.

A csatorna 250 cm hosszu külső szakasza nehézbetonba van ágyazva, belső, 80 cm hosszu szakaszát pedig aluminium és viz veszi körül.

Jelölések:

l a kollimátor-hosszuság

L a csatorna bemeneti keresztmetszetének a távolsága a kollimátor kimeneti keresztmetszetétől

é a csatorna keresztmetszetéhez definiált élhosszuság /esetünkben 8,85 cm/

d egy-egy szekció belső szélessége /$= l \cdot \mathrm{tg}\,\alpha$/

s a kollimátor össz-szélessége /esetünkben 5 cm/

h a szekciók magassága /esetünkben 4 cm/

q = hd egy-egy szekció keresztmetszetének területe

v a kollimátor szekciókat elválasztó lemezek vastagsága /esetünkben 0,05 cm/

α = 20' a vizszintes szögdivergencia

β = $\mathrm{arctg}\,\frac{h}{l}$ a függőleges szögdivergencia

n a kollimátor-szekciók száma

2. A számitás elve

Ki kell számitanunk a kétféle elrendezésre azt, hogy a fent megadott szögdivergenciának megfelelő különböző n szekciószámu /tehát különböző l hosszuságu/ kollimátorokon hány neutron megy át időegységenként (I_1 a közeli, I_2 a távoli elrendezésnél); meg kell keresnünk I_1 és I_2 maximumát; $\frac{I_{2,max}}{I_{1,max}} \cdot 100$ adja meg azt, hogy a távoli elrendezés esetében az optimális kollimátor által átbocsátott neutron-szám hány százaléka a közeli elrendezésnél az optimális kollimátor által átbocsátott neutron-számnak.

A számitás egyszerüsitésére a csatorna tényleges alakja helyett vele egyenlő területü, é /esetünkben 8,85 cm/ élhosszuságu négyzetkeresztmetszetü csatornával számolunk. Kimutatható, hogy $\frac{I_{2,max}}{I_{1,max}}$ számitott értékét ez kissé csökkenti, vagyis a távoli elrendezés által okozott intenzitás-romlást a valóságosnál kissé nagyobbnak mutatja.

Feltesszük továbbá, hogy a csatorna betonba ágyazott részének belső végén /tehát a nyilástól 250 cm-re/ a csatorna tengelyére merőleges keresztmetszet /"bemeneti keresztmetszet"/ minden helyén át cm^2-enként és sec-onként minden számitásbajövő irányban térszögegységenként azonos számu neutron halad át. /Ezt a számot mint konstans tényezőt I_1 és I_2 kifejezéseiből a következőkben el fogjuk hagyni./ Ezen keresztmetszet és az aktiv zóna közötti 80 cm-es csatorna-szakasz fentemlitett megvalósitása folytán ez a feltevés csak közelitőleg igaz. Könnyen belátható, hogy $\frac{I_{2,max}}{I_{1,max}}$ -nak számitott értéke emiatt a közelités miatt kissé nagyobb lesz a valóságosnál. Ez a hiba és az előző hiba tehát többé-kevésbé kompenzálja egymást.

Végül alkalmazzuk azt a számitásunk szempontjából nyilván igen jó közelitést, hogy a kollimátor-lemezek és a falak abszorpcióképességét végtelennek vesszük.

3. Exakt számitás

Egy kollimátor-szekción sec-onként átmenő neutronok száma /az emlitett tényező elhagyásával/:

$$I = \iint F(\varphi, \vartheta) \cdot \sin \vartheta \, d\varphi \, d\vartheta \qquad /1/$$

ahol $F(\varphi, \vartheta)$ a csatorna bemeneti keresztmetszetéből az a felület, amelyről φ , ϑ térbeli polárkoordináta-szögekkel jellemzett irányba haladó neutronok valóban átjutnak a kollimátoron. Az integrálást a kollimátor és a csatorna falai által megszabott szögtartományon kell végezni. /Ezen a tartományon kivül F = 0./

Célszerüen a $\varphi = 0$ sik legyen a csatorna-tengellyel párhuzamos, függőleges, a kollimátor-szekció tengelyén átmenő sik; a

ϑ = konst. kupok tengelye pedig legyen egy ebben fekvő függőleges egyenes; a koordinátarendszer kezdőpontja legyen a csatorna említett keresztmetszetének és a szekció-tengelynek a metszéspontja.

A $\psi = \vartheta - 90^{\circ}$ helyettesitéssel.

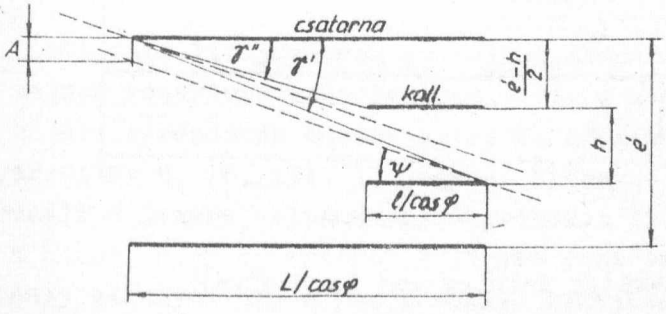
$$I = \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{-\beta}^{\beta} F(\varphi, \psi) . \cos \psi \; d\varphi \; d\psi \qquad /2/$$

lesz, ahol $\pm \alpha$ a φ szerinti, $\pm \beta$ a ψ szerinti integrálás határai, a kollimátor méretei által megszabott vizszintes ill. függőleges szögdivergencia.

Könnyen belátható, hogy esetünkben az $F(\varphi, \psi)$ területü felület alakja téglalap. Ennek függőleges, ill. vizszintes élhosszuságát A-val ill. B-vel jelölve,

$$F(\varphi, \psi) = A.B \qquad /3/$$

A kifejezése az 1.ábra alapján könnyen megadható. Ez a csatorna és a kollimátor egy függőleges, egy φ = konstans ($|\varphi| \leq 20'$) sikmetszetét mutatja /szándékosan torzitva/.



1.ábra

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\gamma' = \operatorname{arctg}\left(\frac{é + h}{2L} \cos \varphi\right)$$
$$\gamma'' = \operatorname{arctg}\left(\frac{é - h}{2(L-l)} \cos \varphi\right) \qquad /4/$$

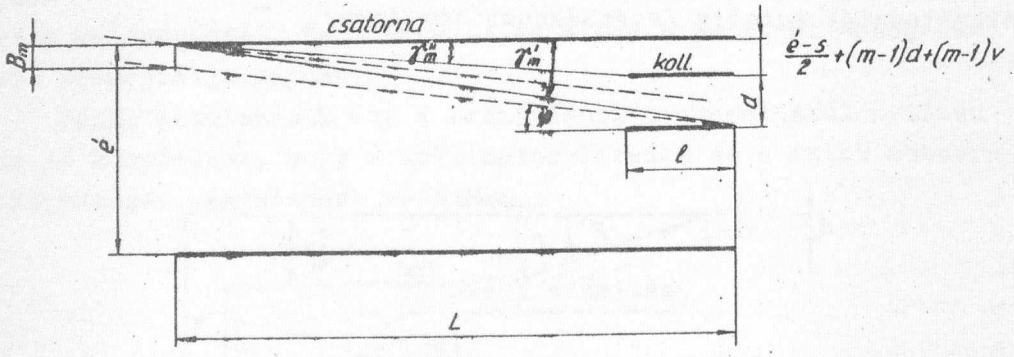
Igy A-t a következőképpen fejezhetjük ki:

$$A(\varphi,\psi) = \left[h - \frac{l}{\cos\varphi}\cdot tg|\psi|\right]\cdot f(\varphi,\psi)\,, \qquad /5/$$

ahol

$$f(\varphi,\psi) = \begin{cases} 1 \\ \dfrac{\acute{e}+h}{2} - \dfrac{L}{\cos\varphi}\cdot tg|\psi| \\ h - \dfrac{l}{\cos\varphi}\cdot tg|\psi| \\ 0 \end{cases}, \text{ ha } \begin{cases} |\psi| \le \gamma'' \\ \gamma'' \le |\psi| \le \gamma' \\ \gamma' \le |\psi| \end{cases} \qquad /6/$$

B kifejezése a különböző szekciókra általában különböző, egyébként nyilvánvalóan csak φ-től függ. Képzéséhez a 2.ábra ad segitséget. Ez a csatornának és az egyik /a kollimátor egyik szélétől számitva m-edik/ kollimátor-szekciónak a csatorna tengelyén átmenő vizszintes sikkal való metszetét mutatja - ugyanosak szándékosan torzitva.



2.ábra

/4/-el analóg jelöléseket bevezetve:

$$\gamma'_m = \text{arctg}\ \frac{\frac{\acute{e}-s}{2} + md + (m-1)\cdot v}{L}$$

$$\gamma''_m = \text{arctg}\ \frac{\frac{\acute{e}-s}{2} + (m-1)d + (m-1).v}{L-l} \qquad /7/$$

B-nek az m-edik szekcióra vonatkozó kifejezése:

$$B_m(\varphi) = (d - l.\operatorname{tg}|\varphi|).f_m(\varphi) = d\left(1 - \frac{\operatorname{tg}|\varphi|}{\operatorname{tg}\alpha}\right).f_m(\varphi) \qquad /8/$$

ahol

$$f_m(\varphi) = \begin{cases} \dfrac{d - L.\operatorname{tg}|\varphi| + \frac{e-s}{2} + (m-1)d + (m-1)v}{d\left(1 - \frac{\operatorname{tg}|\varphi|}{\operatorname{tg}\alpha}\right)} \\ 0 \end{cases} \text{, ha } \begin{cases} |\varphi| \le \gamma_m'' \\ \gamma_m'' \le |\varphi| \le \gamma_m' \\ \gamma_m' \le |\varphi| \end{cases} \qquad /9/$$

Az n db kollimátor-szekcióból álló kollimátor által sec-onként átbocsátott neutronok számát tehát /az emlitett tényező elhagyásával/ a következő kifejezés adja:

$$I = 4q \sum_{m=1}^{n} \int_0^{\alpha}\int_0^{\beta} \left(1 - \frac{\operatorname{tg}\varphi}{\operatorname{tg}\alpha}\right) \cdot f_m(\varphi) \cdot \left(1 - \frac{\operatorname{tg}\psi}{\operatorname{tg}\beta.\cos\varphi}\right) \cdot f(\varphi, \psi).\cos\psi \, d\varphi \, d\psi \qquad /10/$$

A /10/-beli integrál elemi függvények zárt kifejezésével megadható.

4. Közelitő számitás

Az emlitett zárt kifejezésnek numerikus számitásokra való alkalmazása sajnos rendkivül kényelmetlen. /Pl. n = 8 és L = 250 cm, tehát a közeli elrendezés esetén egyes szögfüggvény-értékeket, valamint inverzeiket 9, 10, ill. 12 jegyre, bizonyos 10-jegyü számok logaritmusait 8 jegyre, egyes négyzetgyököket 12 jegyre kell kiszámitanunk ahhoz, hogy I_1 értékét 3 jegyre pontosan megadhassuk./ Ezért nagy előnnyel jár olyan közelitő kifejezés alkalmazása, amelynek értéke a kollimátor-hosszuság, valamint L számbajövő tartományában elég kevéssé tér el a pontos kifejezés értékétől, és ugyanakkor numerikus kezelése kényelmesebb.

Ilyen közelitő kifejezésre a következő meggondolással jutunk. /10/ integrálási tartományában φ -nek ill. ψ -nek csak igen kis /még a közeli elrendezésnél is legfeljebb 20'-es, ill. 1,5°-os/ értékei fordulnak elő. Ezért itt az előforduló koszinuszokat

1-nek, a szinuszokat és tangenseket pedig argumentumukkal egyenlőknek vehetjük. Igy /1o/-ből ezt kapjuk:

$$I \approx 4q \sum_{m=1}^{n} \int_0^{\alpha} \int_0^{\beta} \left(1 - \frac{\varphi}{\alpha}\right) . f_m(\varphi) . \left(1 - \frac{\psi}{\beta}\right) . f(\psi)\, d\varphi\, d\psi \qquad /11/$$

ahol

$$f_m(\varphi) = \left\{ \begin{matrix} 1 \\ \dfrac{d - L|\varphi| + \frac{e'-s}{2} + (m-1)d + (m-1)v}{d\left(1 - \frac{|\varphi|}{\alpha}\right)} \\ 0 \end{matrix} \right\}, \qquad /12/$$

ha

$$\left\{ \begin{matrix} |\varphi| \leq \gamma''_m \\ \gamma''_m \leq |\varphi| \leq \gamma'_m \\ \gamma'_m \leq |\varphi| \end{matrix} \right\}$$

és

$$\gamma'_m = \frac{\frac{e'-s}{2} + md + (m-1).v}{L}$$
$$\gamma''_m = \frac{\frac{e'-s}{2} + (m-1)d + (m-1).v}{L-l} \qquad /13/$$

továbbá

$$f(\psi) = \left\{ \begin{matrix} 1 \\ \dfrac{\frac{e'+h}{2} - L|\psi|}{h - l|\psi|} \\ 0 \end{matrix} \right\}, \text{ ha } \left\{ \begin{matrix} |\psi| \leq \gamma'' \\ \gamma'' \leq |\psi| \leq \gamma' \\ \gamma' \leq |\psi| \end{matrix} \right\} \qquad /14/$$

és

$$\gamma' = \frac{e'+h}{2L}$$
$$\gamma'' = \frac{e'-h}{2(L-l)} \qquad /15/$$
$$\beta = \frac{h}{l}$$

A /11/-beli kettős integrál két integrál szorzatának összegére bontható:

$$I = 4q . \left[\sum_{m=1}^{n} I'_m(\varphi) \right] . I''(\psi) \qquad /16/$$

ahol

$$I'_m(\varphi)=\int_0^{\alpha}\left(1-\frac{\varphi}{\alpha}\right)\cdot f_m(\varphi)\,d\varphi\,, \qquad /17/$$

$$I''(\psi)=\int_0^{\beta}\left(1-\frac{\psi}{\beta}\right)\cdot f(\psi)\,d\psi\,. \qquad /18/$$

Az integrálás elvégzésével I'_m-re ill. I"-re a fent jelzett 3-3 tartományban a következő kifejezéseket kapjuk:

$$I'_m(\varphi)=\left\{\frac{\alpha}{d}\left[d+\frac{e-s}{2}+(m-1)(d+v)-\frac{L}{2}\alpha\right]\right\}_0^{\frac{\alpha}{2}} \qquad /19/$$

$$I''(\psi)=\left\{\frac{\beta}{2h}\left(e+h-L\beta\right)\right\}_0^{\frac{\beta}{2}} \qquad /20/$$

A /11/-ből ill. /16/-ból nyerhető adatok pontosságának megbecslését elegendő a közeli elrendezés (L=250 cm) esetében elvégezni. Ui. a távoli elrendezésnél az integrálás még kisebb szögtartományon történik, mint a közeli elrendezés esetében, és világos, hogy közelitésünk annál jobb, minél kisebb a szögtartomány.

Numerikus számitással megállapitható, hogy a közeli elrendezés esetében a kollimátor-hosszuság optimumának környezetében /11/-nek /10/ helyett való alkalmazása kb. 1 % hibát okoz I_1 értékében. Feltett kérdésünkre a választ tehát elegendő /11/ alkalmazásának alapján megadnunk.

5. Eredmények

A számitásokat elvégezve, megállapithatjuk, hogy az intenzitás maximuma a közeli elrendezés esetében n = 9-nél (l = 88 cm-nél), a távoli elrendezés esetében n = 7-nél (l = 115 cm-nél) van, továbbá, hogy a sec-onként átbocsátott maximális neutronszám /a csatorna bemeneti keresztmetszetének minden cm^2-én sec-onként és térszögegységenként áthaladó neutronok számát mint közös tényezőt elhagyva/ a két esetben:

$$I_{1,max} = 3{,}47.10^{-3}, \qquad I_{2,max} = 1{,}86.10^{-3}.$$

Látjuk tehát, hogy $\frac{I_{2,max}}{I_{1,max}} 100 = 53{,}5\ \%$, vagyis a távoli elrendezés esetében kb. fele akkora intenzitást kapunk, mint a közeli elrendezésnél.

Irodalom

[1] W. Soller, Phys. Rev. 24, 158 /1924/

Érkezett 1959. január 7.

KFKI Közlemények 6. évf. 6. szám, 1958.

HOMOGÉN MÁGNESES TEREK ELŐÁLLITÁSA KOMPENZÁLT SZOLENOIDDAL

Irta: Zsigmond György és Tarnóczy Tivadar

Neutronfizikai Osztály

Összefoglaló:

A cikk keretében a nagy homogenitásu mágneses terek előállitására szolgáló kompenzált szolenoidok tervezési és kivitelezési problémáival foglalkozunk.

Ismertetünk egy laboratóriumi célokra alkalmas petróleum hütésü, 7500 Oe mágneses teret előállitó szolenoidot, melynek kb. 50 mm átmérőjü vizsgáló üregében 110 mm tengelymenti hosszon a térerősség változása 0,1 %-nál kisebb.

Bevezetés

Korábbi dolgozatainkban [1] és [2] foglalkoztunk a közepes térerősségü szolenoidok általános problémáival, egyben részletes konstrukciós megoldásokat ismertettünk különböző célokra tervezett és kivitelezett laboratóriumi szolenoid tipusokról.

Ezek részletes felvilágositást nyujtottak az általános konstrukciós, a hütési és áramszabályozási problémákkal kapcsolatban is.

A cél természetszerüleg az, hogy a lehető legkisebb energiaveszteséggel állitsunk elő nagyhomogenitásu, erős mágneses teret. Ezt az ellentmondást tartalmazó követelményt azonban csak bizonyos kompromisszumokkal lehet kielégitően megoldani és igy érthetővé válik, hogy jó hatásfok mellett un. "univerzális" szolenoid nem képzelhető el.

Különböző szerzők [3], [4], [5] által javasolt megoldások is mindig csak egy adott problémakör szempontjából látszanak a legmegfelelőbbnek. A szerzők azonban elsősorban elméleti proble-

mákat helyezve előtérbe, nem fordítanak figyelmet a technikai megoldások kidolgozására. Könnyen belátható, hogy egy szolenoid l/d aránya, valamint a tekercsprofil formája bár némileg önkényesen választható meg, döntő befolyással van azonos térerősség és téreloszlás feltételezése mellett a tekercsben fellépő veszteségekre. Éppen ezért, nem kizárólagos elméleti problémát jelent azon törekvés, amely szerint egyes szerzők [6],[7] tanulmányaikban a legideálisabb tekercsforma meghatározását kísérlik meg.

A szolenoid végei felé rohamosan csökkenő térerősség kiegyenlítésére, azaz a szolenoid tengelye mentén széles tartományban homogén mágneses tér létesítésére, valóban az előbbi szerzők által ajánlott, un. "szférikus" tekercsprofil látszik az ideálist jól megközelítőnek. Ezt mind az elméleti megfontolások, mind pedig a végzett számítások alátámasztják,- kivitelezése azonban egyszerüen technikai akadályok miatt csak ugy képzelhető el, ha a tekercset szekcionált tekercsrészletekből állítjuk elő, - a szférikus profilt pedig, az egyes tekercsek különböző átmérőre való tekercselésével közelitjük meg. Ez a tekercsforma nem egyéb, mint számos egymás mellé helyezett egyedi Halmholz tekercs összessége, - amely a központtól jobbra-balra szimmetrikusan, a szférikus formát jól megközelitő, egyre növekvő átmérőjü sorositott tekercsekből áll és a tekercs végei felé egyébként rohamosan csökkenő térerősséget, a szükséges többlet menetszámaival megfelelő módon kompenzálja.

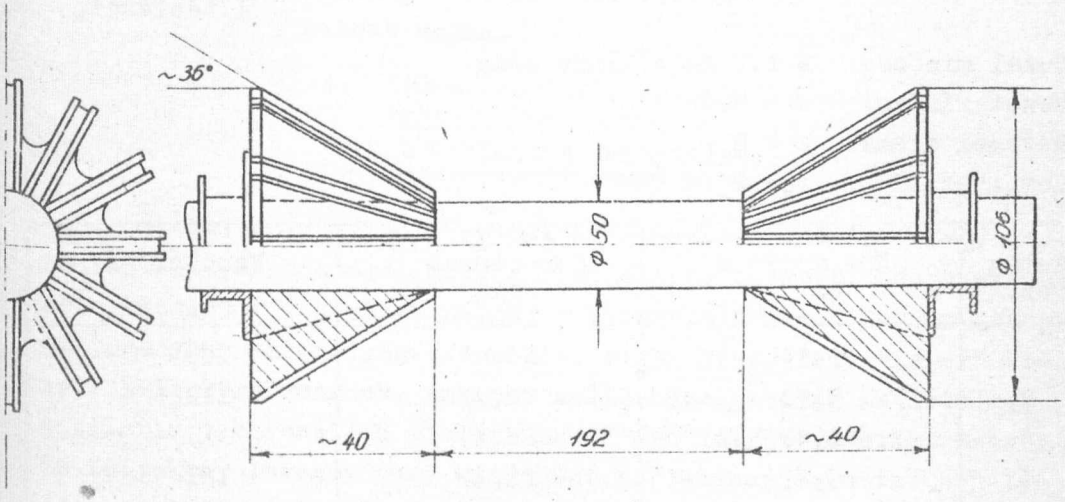
Az ily módon való felépitás azonban nem teszi lehetővé a kompenzált tekercs egyes sorainak hütését, igy csak kis áramsürüség alkalmazható, és még viszonylag kis /500-1000 Oe/ térerősségek létrehozása is a tekercs jelentős felmelegedésével /egyuttal térerősség változással/ jár.

A továbbiakban ismertetünk egy általunk kidolgozott megoldást, mely lehetővé tette a kompenzált szolenoid kedvező tekercsprofilja mellett, olyan hatásos folyadékhütés alkalmazását, amely az áramsürüség 2,5 A/mm^2-ről 60-100 A/mm^2-re való emelésével, igen nagy homogenitás mellett, nagystabilitásu erős mágneses terek előállitására alkalmas.

1. A kompenzált szolenoid tekercsprofiljának közelitő meghatározása

Az ideális tekercsprofilt meghatározó görbe analitikus alakját matematikailag meghatározhatjuk.

Az egyes tekercssorok közötti hütőtornyok kiképzése szempontjából azonban a részleges tekercstérkitöltés - és egyéb figyelembe veendő paraméterek az amugy is igen hosszadalmas számitásokat még tovább komplikálnák.



1.ábra

Ezek figyelembevételével, az általunk tervezett, és az 1. ábrán látható profilu szolenoidra a számitásokat ugy végeztük el, hogy megállapitottuk a minimálisan szükséges belső vizsgáló üreg átmérőjét - és feltételként kikötöttük azt, hogy a tengely mentén mért tér erőssége 100 mm tengelymenti távolságon 0,1 %-nál nagyobb eltérést ne mutasson. Ezen kikötések figyelembevételével grafikus szerkesztési eljárással [1] meghatároztuk azt a tekercsprofilt, amely az alaptekercs minden egyes rétegére vonatkozóan kb. 100 mm tengelymenti hosszon 4 % max. megengedett térerősségcsökkenést hoz létre. A grafikus szerkesztés alapján kaptuk meg az 1.ábrán látható tekercsprofilt, amelynek parabola végeit a felépités során az egyszerüség kedvéért egyenes szárakkal helyettesitettük.

A grafikus profilszerkesztési eljárás után számitásokkal is ellenőriztük a tekercs által keltett mágneses tér eloszlását, majd meghatároztuk az egyes sorok menetszámait, az alkalmazandó huzalméretet és a rétegek közötti hütőtornyok méretét.

A nagy térerősség elérhetőségének egyik előfeltétele az volt, hogy a vezetőben nagy áramsürüséget alkalmazzunk.

A tekercsben fellépő veszteségek szempontjából a mágnesező áram és a menetszám variációinak eredményeként a legkedvezőbbnek az I.táblázatban foglalt adatok mutatkoztak.

I.táblázat.

Huzal minőség: ϕ 1,7 mm silicon szig.
Menetszám/cm: $w = 5,7$
Rétegek száma: $z = 8$
Komp." " $z_k = 2$

Réteg sz.	Köz.menet ϕ cm	Sor hossza cm	Menetszáma
1.	5,44	19,oo	1o8
2.	5,93	19,72	112,5
3.	6,42	2o,45	117
4.	6,91	21,17	121
5.	7,4o	21,9o	125
6.	7,89	22,63	129
7.	8,38	23,35	133
8.	8,87	24,o8	137
			982,5
Komp.			
1.	9,36	24,81	36+36
2.	9,85	25,55	25+25

Az alaptekercs adatainak meghatározása után megvizsgáltuk a kompenzálás feltételeit, közelitő számitásokkal meghatároztuk a tekercs végeire elhelyezendő kompenzáló menetek számát, amelyek ugy ellensulyozzák a végek felé fellépő térerősség csökkenést, hogy az 100 mm tengelymenti hosszon 0,1 %-nál.ne legyen nagyobb. Ugy találtuk, hogy a 2 réteges kompenzáló tekercs a feltételeket teljesiteni tudja.

Mind az alaptekercs ellenőrzőszámitását, mind a kompenzáló tekercsek számitását, az alábbi - a szabályos n-szög keresztmetszetü egyrétegü szolenoidra érvényes, ismert képlet felhasználásával végeztük:

$$\mathcal{H}(x) = 2\frac{n \cdot J}{10} \cdot N\left\{ arc.tg\left(\frac{L-x}{\sqrt{R^2+(L-x)^2}}\, tg\frac{\pi}{n}\right) + arc\,tg\left(\frac{L+x}{\sqrt{R^2+(L+x)^2}}\, tg\frac{\pi}{n}\right)\right\}$$

ahol is x a középponttól mért távolság
L a tekercs hosszának fele
R a sokszög köré irt kör rádiusza
n a szögek száma.

2. A szolenoid felépitése

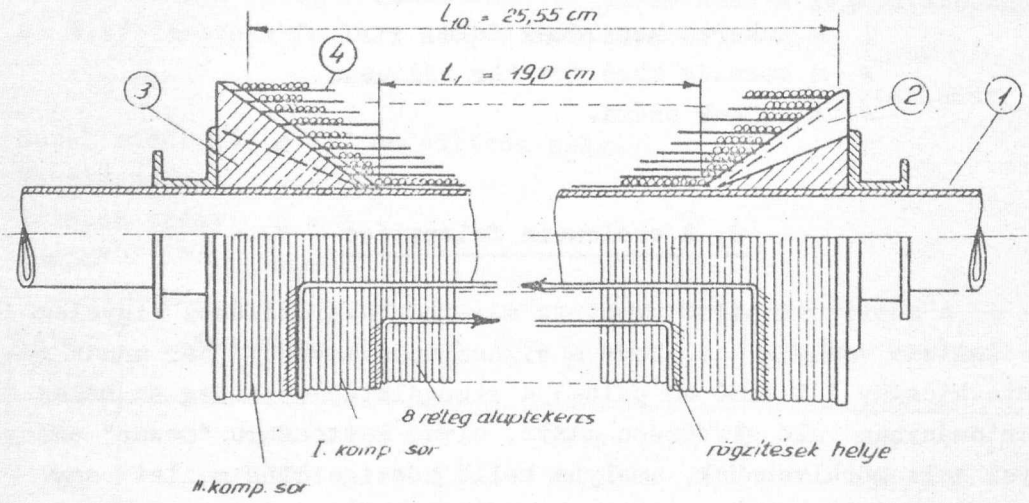
A szolenoid belső üregének méretmeghatározásához figyelembe kellett vennünk azt, hogy a vizsgálandó anyagot, bár annak mérete kicsiny (Ø 4x80 mm pálca) a vizsgálatoknak hideg és meleg tartományban való elvégzése miatt, olyan kettősfalu "Dewar" edénynyel kell körülvennünk, amelybe kellő hőszigetelés mellett egy bifiláris tekercselésü elektromos fütésü kályha, esetleg helyette folyékony levegőt vagy nitrogént tartalmazó kriostat behelyezése mellett, még helyet kell biztositani különböző szerelvények elhelyezésére is. Ezeket természetesen egy további hatásos hőszigeteléssel kell a kályhától, illetve a kriosztáttól elválasztani, az egész belső szerelvényt pedig egy vizhütött köppennyel a szolenoid belső falától szigetelni.

Ezek figyelembevételével 48 mm-ben határoztuk meg a szolenoid belső üregének átmérőjét. A központi tartószerkezet felépitéséről a(2.)ábra nyujt felvilágositást.

A szolenoid tartórészét egy 50 mm külső átmérőjü 1 mm falvastagságu sárgarézcső képezi ①, melyre egymással szembefordítva, a számitások szerint szükséges végprofiloknak megfelelő olajvezetőhornyokkal ellátott ② textilbakelitből készitett kuptámaszt szereltünk ③.

A kupos oldalfalakba mart 12 db 4 mm széles horonyba fektettük le az egyes menetsorok közötti hütőtornyokat kiképző tá tartólemezeket ④, amelyek 0,8 mm vastag 4 mm széles bakelitlemezből készültek.

Az első menetsor feltekercselése után, az alája helyezett távtartók kialakitották a tekercs 12 szögletü alakját, a további sorok közé hasonló távtartók behelyezésével biztositottuk, hogy a növekvő átmérő mellett, a tekercs megtartsa a 12 szögletü alakját, és az egyes menetsorok között kialakuljanak a hütőhornyok.

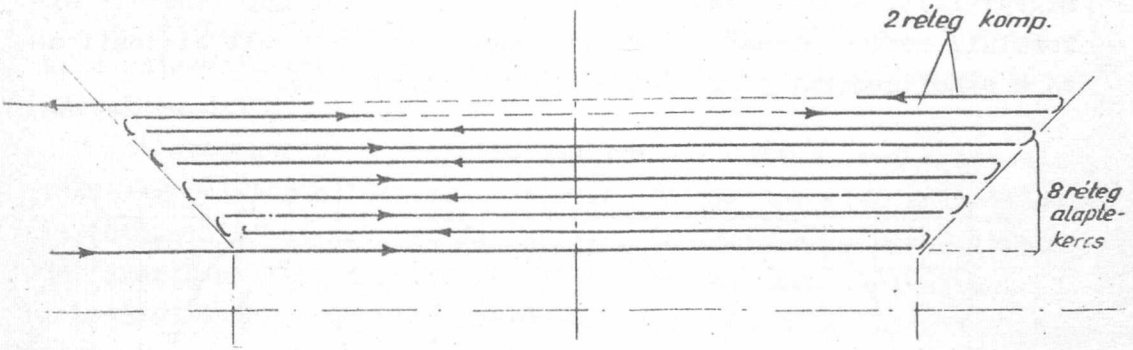


2.ábra

A sorok hosszát maga a két oldaltámasz határozza meg. A 8 soros alaptekercs feltekercselése után, a huzalvéget későbbi mérés céljára kivezettük és azonos anyagból tekercseltük a két rétegü kompenzáló tekercset. A viszonylag vastag (1,7 mm Ø) zománchuzal alkalmazása miatt nem volt mód a kompenzáló tekercsek megszakitására, mert helyszükében a tekercssorok között toldást nem alkalmazhattunk. Emiatt a 3.ábrán látható módon folyamatosan tekercseltünk, bár az egyes kompenzáló sorok féltekercseinek rögzitése nehézségekbe ütközött.

A kompenzáló tekercs szekciók mechanikai rögzitését ugy oldottuk meg, hogy az első kompenzáló réteg tekercselését a szolenoid végétől a közepe felé haladva kezdtük meg, és a szükséges menetszám feltekercselése után 2 menetet, felületén a zománcszigeteléstől megtisztitva, összeforrasztottunk, majd a menetirányra derékszögbe megtörve, az alkotó mentén vezettük át a szolenoid

másik végén lévő kompenzáló tekercsekhez, ahol az első két menetet hasonlóképpen rögzitettük és feltekercseltük az ellenkező oldal kompenzáló sorait is. A második (felső) réteg feltekercselésénél hasonlóan jártunk el, igy nem kellett toldást, illetve forrasztást alkalmaznunk a tekercsen belül.



3.ábra

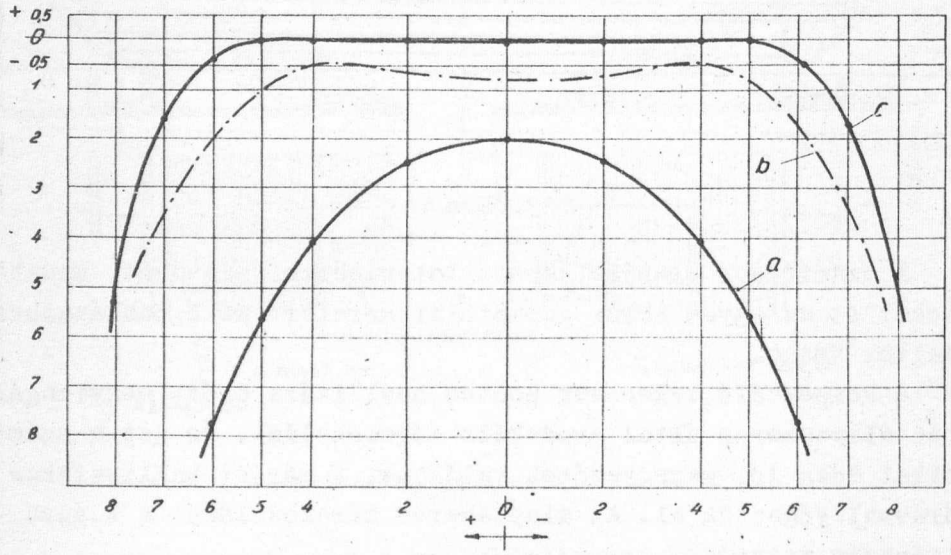
A számitások alapján kapott tekercselési adatokat, menetszámokat és az egyes sorok geometriai méreteit az I.táblázatban foglaltuk össze.

A kompenzáló tekercsek pontos beállitása előtt megvizsgáltuk az alaptekercs által produkált téreloszlást, és azt a számitásokkal igen jól megegyezőnek találtuk. A mérést ballisztikus eljárással végeztük el. Az alaptekercs téreloszlását a 4.ábra (a) görbéje mutatja.

Mint már előzőekben utaltunk rá, a kompenzáló tekercsek szükséges menetszámát a későbbi korrekciós lehetőségek biztositása miatt kb. 15 %-al növeltük. Ennek hatása már az első kompenzáló tekercssor beiktatásával jelentkezett, mert a 4.ábra (b) görbéje szerinti kismértékü tulkompenzáltságot mutatta. Látható azonban az is, hogy a görbe oldalai nem meredekek és tulkompenzáltság nélkül, csak további sor, vagy sorok tudnák a homogén zónát a szükséges mértékre kinyujtani, és a végek felé mindenképpen jelentkező tércsökkenés jellegét meredekebbé tenni.

Közelitő számitások és kisérleti vizsgálatok alapján megállapitottuk ezek után az első kompenzáló sor ténylegesen szükséges pontos menetszámát. A fölösleges meneteket felületi leforrasztással (rövidrezárással) iktattuk ki.

A második kompenzáló réteg bekapcsolásával már csak igen kismértékü tulkompenzáltság jelei mutatkoztak. Ezt a tulkompenzáltságot a fölösleges 1-2 menet kizárásával megszüntetve, kaptuk a 4.ábra (c) görbéjének megfelelő téreloszlást, amely célkitüzésünknek mindenben megfelelt, és a számitásokkal is igen jól megegyezett. A kismértékü eltérést természetesen nem lehetett elkerülni, mert a mechanikai kivitelezés során nem volt biztositható a számitásokkal ezrelékekre egyező mérettartás.



4.ábra

A kompenzáló tekercsek beiktatásával végzett vizsgálatokat a nagy pontossági követelmény miatt, differenciál-ballisztikus eljárással végeztük. A szolenoid tekercsállandóját ballisztikus eljárással mérve k = 56,05 Oe/A-nak találtuk. Ez a kompenzáló tekercsek nélkül számitott tekercsállandónál kb.2%-kal nagyobbnak bizonyult, amint az a 4.ábrán is látható.

A kompenzálómenetek viszonylag kis száma is arra mutat, hogy nem törekedtünk a több rétegszámmal elérhető esetleg kedvezőbb, hosszabb kiterjedésü homogén tér létesitésére. Ez fölösleges nagymértékü energiafogyasztással járt volna. A középértékben 218 mm hosszu szolenoid tengelye mentén igy is 110 mm hosszon tudtuk biztositani a 0,1 %-nál kisebb térerősségváltozást.

3. A szolenoid felépitése, hütése és áramszabályozása

A 2.ábra szerinti megtekercselt szolenoid testet egy zárt köpeny veszi körül. Erre épitettük rá a hütőfolyadék bevezetésére, illetve elvezetésére szolgáló csatlakozó csonkokat, a szolenoid szigetelt áramcsatlakozását, és magát a szolenoidot tartó háromlábu állványzatot.

A szolenoidot a rendelkezésünkre álló 280 V. 600 Å kapacitásu akkumulátor hálózatról táplálva, teljes terhelés mellett olajhütéssel próbáltuk ki. Maximális feszültség esetén a 2,1 Ohmos tekercsen meleg állapotban 130 Amp áramot keresztülhajtva, k = 56,05 tekercsténye zö mellett kb. 7.300 Oe térerősséget állitottunk tartósan elő. A hütés kielégitőnek mutatkozott, és a viszonylag rövid idő alatt (kb. 60 perc) beálló termikus egyensuly után, a szolenoid tekercsének átlagos tulmelegedése kb. 40 C^{o} volt.

Ez esetben is bebizonyosodott, hogy a menetsorok között lévő vékony (kb. 0,8 mm) olajvezetőhornyok áramlástani számitásait nem lehet még megközelitő pontossággal sem elvégezni, és modellkisérlet nélkül, teljesen hamis, nagyságrendi eltérés mutatkozik (pl.: viszkózus surlódások következtében fellépő nyomásesésben). Emlitésre méltó, hogy pl. a szolenoidban felszabaduló hőenergia átvételére és elvezetésére szükséges olajmennyiség átnyomásához számitások szerint kb. 5 atü nyomás látszott szükségesnek, ezzel szemben - a számitottnál nagyobb mennyiségü és sebességü olajáramlás mellett is csupán 0,35 atü nyomás volt valójában szükséges. A Kaiser Wilhelm Institutban végzett hasonló kisérletek is meglepő eredményeket mutattak. Modellkisérleteket végeztek vékony csövekben áramoltatott olaj áramlástani tulajdonságainak vizsgálatára, melynek eredményeként kiderült, hogy különösen szélsőséges esetekben, igen kis átmérőjü csővezetékek alkalmazásakor, a különben bevált számitási módszerek teljesen hamis képet adtak a csőben keringetett olaj áramlástani körülményeiről.

Bár ilyenirányu behatóbb vizsgálatokat nem folytattunk, feltételezhető, hogy a számitásokkal szemben sokkal kedvezőbben ala-

kuló surlódási veszteségek oka az, hogy a menetsorok között menetenként megismétlődő konfuzor-diffuzor jellegü hornyok bemélyedéseit az olaj kitölti és ez bár a viszkózus tapadás folytán továbbvándorol ("lekenődik"), a falak mégis mint sima felületü vezetőhornyok foghatók fel.

A lefolytatott tartós üzemeltetés után, a közvetett vizhütésü olajhütőberendezés felhasználásával áttérünk a petróleumhütésre, mely kisebb viszkozitása, nagyobb fajhője figyelembevételével, feltétlenül annyira kedvezően fogja a hütési tulajdonságokat javitani, hogy a szükséges áramerősség növelésével -10.000 Oe térerősség előállitása biztositottnak látszik tartós üzemeltetés mellett is.

A szolenoid áramának szabályozására egy "Helipot"-hoz hasonló forgódobos, olajhütésü potenciométert terveztünk és készitettünk el, mely szervomotor-távmüködtetéssel, max. 45 kW átmenő teljesitmény mellett, 10^{-2} - 2.10^{2} Amp intervallumban teljesen folyamatos, lépcsőmentes áramszabályozást biztosit. A feltételezhetően érdeklődésre számottartó nagyteljesitményü, egyenáramu szabályozóról egy később megjelenő cikk keretében részletes ismertetést nyujtunk.

A szolenoid kivitelezéséért köszönettel tartozunk Szakács Béla mérnöki munkát végző technikus munkatársunknak, aki nagy precizitást igénylő munkájával biztositotta az elért eredményeket.

Irodalom

[1] Pál L.-Zsigmond Gy.: KFKI Közl. 3, 3oo, (1955)
[2] Zsigmond Gy.: KFKI Közl. 3, 69o, (1955)
[3] I.M.Puzej Fizicseszkije Metodi Iszledovanyija 176 (1949)
[4] Bitter Rev. Sci. Instr. 1o, (1939)
[5] I.R.Barker Brit.J.Appl.Phys. 1, 238, (195o)
[6] T.A.Heddle Brit.J.Appl.Phys. 3, 95 (1952)
[7] B.Lewis Brit.J.Appl. Phys. 1, 238 (195o)

Érkezett 1958.november 26.

UJ POTENCIÁLFÜGGVÉNY KÉTATOMOS MOLEKULÁK SZÁMÁRA

Irta: Fogarassy Bálint és Németh Géza
Szilárdtestfizikai Laboratórium

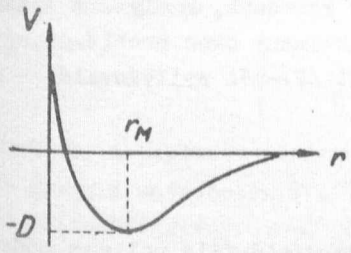
Összefoglalás. - Kétatomos molekulák potenciálfüggvényét célszerü empirikus uton meghatározni. Röviden összefoglaljuk azokat a fizikai meggondolásokból eredő feltételeket, amelyeket egy ilyen empirikus potenciálfüggvénynek ki kell elégiteni, majd ezek alapján diszkutáljuk az eddig használt potenciálfüggvényeket. Rámutatunk, hogy a sokat alkalmazott Morse-függvénnyel kapcsolatban a Schrödinger-egyenlet irodalomban elterjedt megoldása matematikailag nem korrekt. Javasolunk egy uj potenciálfüggvényt, amely a kirótt feltételeket kielégiti és segitségével a Schrödinger-egyenlet exakt módon megoldható. Tárgyalásunkat a vibrációs spektrumra korlátozzuk.

Bevezetés

Kétatomos molekulák potenciálfüggvényének exakt meghatározása komoly matematikai nehézségekbe ütközik. Ezért célszerü fizikai meggondolások alapján néhány feltételt kikötni és empirikus uton olyan potenciálfüggvényt keresni, amely ezeket kielégiti. Röviden feljegyezzük ezeket a feltételeket és az 1. ábrán ábrázoljuk a potenciálfüggvény menetét.

1. $V(r) \longrightarrow 0$, ha $r \longrightarrow \infty$;
2. $V(r) \longrightarrow \infty$, ha $r \longrightarrow 0$;
3. $V'(r_M) = 0$, és $V''(r_M) > 0$, r_M az egyensulyi magtávolság;
4. $V(r_M) = -D$, D a disszociációs energia;
5. $V(r) - t$ a Schrödinger-egyenletbe helyettesitve, az a tapasztalattal megegyező energia sajátértékeket szolgáltasson, azaz ilyen alakut:

$$W_n = -D + \hbar\omega_0 \left[\left(n + \tfrac{1}{2}\right) - x\left(n + \tfrac{1}{2}\right)^2 + K_3 \left(n + \tfrac{1}{2}\right)^3 + \dots \right] \qquad /1/$$



Fentiekben $V(r)$ a potenciálfüggvényt, r az atommagok távolságát jelenti. A következőkben a feljegyzett feltételek alapján vázlatosan diszkutáljuk az eddig alkalmazott potenciálfüggvényeket.

A hatványfüggvények

$$V(r) = -D + \alpha(r - r_M)^2 - \beta(r - r_M)^3 \pm \dots \qquad /2/$$

nyilván sem 1. sem 2. feltételnek nem tesznek eleget, így csak r_M kis környezetében alkalmazhatók.

Kratzer a következő függvényt adta meg [1] :

$$V(r) = -D + (2\pi\omega_0)^2 \mu r_M^2 \left[\frac{(r-r_M)^2}{2r^2} + \frac{c_3(r-r_M)^3}{r_M^3} + \frac{c_4(r-r_M)^4}{r_M^4} + \dots \right], \qquad /3/$$

amely az 1. feltételt nem elégiti ki.

Rydberg függvényénél [2] :

$$V(r) = -D\left[1 + b(r - r_M)\right] e^{-b(r-r_M)} \qquad /4/$$

forditott a helyzet, mert a 2. feltétellel nincs összhangban.

Nem célunk a kétatomos molekulák esetére javasolt összes potenciálfüggvényt felsorolni, csupán a legismertebbeket említettük. Igen részletes felsorolást és analizist ad ilyen potenciálfüggvényekkel kapcsolatban V.P. Varshni [3]. Végezetül részletesebben diszkutáljuk a Morse-potenciált, amely a következő alaku [4] :

$$V(r) = D\left[e^{-2a(r-r_M)} - 2e^{-a(r-r_M)}\right]. \qquad /5/$$

A függvény nem elégiti ki a 2. feltételt, de ennek ellenére gyakran alkalmazzák a spektroszkópiában, mert kényelmesesn kezelhető és a belőlevont következtetések jól egyeznek a kisérleti eredményekkel. Igy például a Schrödinger-egyenlet megoldása alapján kapott sajátértékek az /1/ formula első három tagját adják. Szeretnénk rámutatni, hogy a Morse-potenciált tartalmazó Schrödinger-egyenlet megoldása mind az eredeti közleményben [4] mind máshol az irodalomban matematikailag nem korrekt. A [4] közlemény /1/ egyenletét idézzük:

$$z\frac{d^2F(z)}{dz^2} + (\alpha - z)\frac{dF(z)}{dz} + \beta F(z) = 0, \qquad /6/$$

ahol α és β állandók, $F(z)$ a hullámfüggvény radiális tényezőjétől egy szorzó faktorral különbözik, a z változó

$$z = 2de^{-a(r-r_M)}. \qquad /7/$$

ahol d ismét egy állandó $F(z)$ olyan megoldását keressük, amely z kérdéses tartományában korlátos. Éppen a kérdéses tartomány okoz problémát, ugyanis Morse a $0 \leq z \leq \infty$ tartományt tekinti, holott /7/-ből nyilvánvaló, - mivel $0 \leq r \leq \infty$ - hogy csak

$$0 \leq z \leq 2de^{ar_M} \qquad /8/$$

lehetséges. Ekkor azonban nem alkalmazható a Sommerfeld-féle polinom módszer,

mert nem indokolt a végtelen sort megszakitani. /6/korlátos megoldása ugyanis közvetlenül felirható [5]:

$$F(z) = C \, {}_1F_1(\alpha, \beta, z), \qquad /9/$$

ahol ${}_1F_1(\alpha, \beta, z)$ a konfluens hipergeometriai függvény, amely minden véges z esetén korlátos és igy nem szükséges az első paraméter helyére negativ egész számot irni ($\alpha = -n$), ami a végtelen sor megszakitását jelentené. Morse tehát a $0 \leqq z \leqq \infty$ intervallumban állitja elő a megoldást és ugyanebben az intervallumban alkotnak ezek a függvények ortonomált rendszert. Ha el is fogadjuk, hogy a sajátfüggvények és az indokolatlanul fellépő sajátértékek a valódi tartományban jó közelitések, - ezt a tapasztalat igazolja és D. Ter Haar matematikailag is kimutatta [6] - a függvényrendszer ortogonalitása csak egy kiterjesztett intervallumban lesz biztositva.

A fenti problémák elkerülése céljából a következő potenciálfüggvényt javasoljuk:

$$V(r) = D\left\{\left[1 - \frac{e^{-\beta(\varrho-1)}}{1-e^{-\beta\varrho}}\right]^2 - 1\right\}, \qquad /10/$$

ahol

$$\varrho = \frac{r}{r_0} \qquad /11/$$

és D a disszociációs energia, β egy állandó és r_0 kifejezhető az egyensulyi magtávolság és β segitségével a $V'(r_M) = 0$ feltétel alapján:

$$r_0 = \frac{\beta r_M}{\ln(1 + e^{\beta})}. \qquad /12/$$

Látható, hogy /1o/ az első négy feltételnek eleget tesz és - mint megmutatjuk - a Schrődinger-egyenlet exakt megoldásából a tapasztalattal megegyező energia sajátértékek adódnak, igy potenciálfüggvényünk az összes megkivánt feltételt kielégiti.

A Schrődinger-egyenlet megoldása

Az atommagokra vonatkozó Schrődinger-egyenlet kétatomos rendszer esetén a következő:

$$\left\{\Delta - \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[W - V(r)\right]\right\} \cdot \psi(r, \vartheta, \varphi) = 0 \qquad /13/$$

ahol Δ a Laplace-operátor, μ a redukált tömeg, $\hbar$ a Plank-állandó, W az energia sajátérték, $V(r)$ a /1o/ alatt feljegyzett potenciálfüggvény, ψ az állapotfüggvény, r, ϑ és φ gömbi változók. Szeparálva az állapotfüggvényt a

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{R(r)}{r}\,\theta(\vartheta)\,\phi(\varphi) \qquad /14/$$

alakban és a szögfüggéstől eltekintve, azaz csak vibrációs spektrumra szoritkozva, az $R(r)$ sajátfüggvényekre a következő differenciálegyenletet nyerjük:

$$\frac{d^2R(\rho)}{d\rho^2} + \alpha^2\left\{W + D - D\left[1 - \frac{e^{-\beta(\rho-1)}}{1-e^{-\beta\rho}}\right]^2\right\}R(\rho) = 0, \qquad /15/$$

ahol

$$\alpha^2 = \frac{2\mu r_o^2}{\hbar^2} \qquad /16/$$

A /15/ egyenlet megoldását keressük a $0 \leq \rho \leq \infty$ tartományban és megköveteljük, hogy itt $R(\rho)$ korlátos és négyzetesen integrálható legyen. Transzformáljuk /16/ -t az

$$y = e^{-\beta\rho} \qquad /17/$$

uj változó segitségével:

$$y^2(1-y)^2\frac{d^2R(y)}{dy^2} + y(1-y)^2\frac{dR(y)}{dy} + (a_1 + a_2 y + a_3 y^2)R(y) = 0 \qquad /18/$$

ahol

$$a_1 = \frac{\alpha^2}{\beta^2}W, \qquad /19/$$

$$a_2 = -2\frac{\alpha^2}{\beta^2}(W - De^{\beta}), \qquad /20/$$

$$a_3 = \frac{\alpha}{\beta^2}\left[W - De^{\beta}(2 + e^{\beta})\right], \qquad /21/$$

Az uj értelmezési tartomány: $0 \leq y \leq 1$. Vezessünk be uj ismeretlen függvényt:

$$R(y) = (1-y)^s\,u(y). \qquad /22/$$

Ha az s kitevőt célszerüen a következőképen választjuk:

$$s(s-1) + a_1 + a_2 + a_3 = 0, \text{ azaz}$$

$$s = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - (a_1 + a_2 + a_3)} = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + D\frac{\alpha^2}{\beta^2}e^{2\beta}}, \qquad /23/$$

akkor /18/ egyenlet a transzformáció után $(1-y)$-al osztható és a következő egyenletet kapjuk:

$$y^2(1-y)\frac{d^2u}{dy^2} + y\left[1-(1+2s)y\right]\frac{du}{dy} + \left[a_1 - (a_3 + s^2)y\right]u = 0 . \qquad /24/$$

Vegyük észre, hogy s nem függ a meghatározandó W sajátértéktől. További egyszerüsités céljából végezzük el a következő transzformációt:

$$u(y) = y^{\lambda} v(y) , \qquad /25/$$

ahol λ -t válasszuk ugy, hogy

$$\lambda^2 + a_1 = 0, \qquad \text{azaz} \qquad \lambda = +\sqrt{-a_1} \qquad /26/$$

legyen. A /24/ egyenletet a transzformáció után y -al osztva a következő alakban irható:

$$y(y-1)\frac{d^2v}{dy^2} + \left[(\xi + \eta - 1)y - \zeta\right]\frac{dv}{dy} + \xi\eta v = 0 , \qquad /27/$$

ahol

$$\xi = s + \sqrt{-a_1} + \sqrt{-a_3} , \qquad /28/$$

$$\eta = s + \sqrt{-a_1} - \sqrt{-a_3} , \qquad /29/$$

$$\zeta = 1 + 2\sqrt{-a_1} . \qquad /30/$$

A /27/ differenciálegyenlet általános megoldása ismert [7] , éspedig:

$$v(y) = C_1\, {}_2F_1(\xi, \eta, \zeta; y) + C_2\, y^{1-\zeta}\, {}_2F_1(\xi - \zeta + 1, \eta - \zeta + 1, 2 - \zeta; y) , \qquad /31/$$

ahol C_1, C_2 tetszőleges állandók és ${}_2F_1(\ldots)$ a Gauss-féle hipergeometriai függvény. $R(y)$ csak akkor lesz korlátos az $y = 0$ helyen, ha $C_2 = 0$. Az $y = 1$ hely már gondosabb megfontolásokat igényel, [8] alapján ugyanis:

$${}_2F_1(\xi, \eta, \zeta; 1) = \begin{cases} \text{divergens} & \text{ha } (\xi + \eta - \zeta) \geq 1 \\ \dfrac{\Gamma(\zeta)\Gamma(\zeta - \xi - \eta)}{\Gamma(\zeta - \xi)\Gamma(\zeta - \eta)} & \text{ha } (\xi + \eta - \zeta) < 0. \end{cases} \qquad /32/$$

Esetünkben $\xi + \eta - \zeta = 2s - 1 \gg 1$, mert $s \gg 1$. A divergencia erősségét is meghatározhatjuk, ha alkalmazzuk a következő összefüggést [9] :

$${}_2F_1(\xi, \eta, \zeta; y) = (1-y)^{\zeta - \xi - \eta}\, {}_2F_1(\zeta - \xi, \zeta - \eta, \zeta; y) , \qquad /33/$$

ahol a jobboldalon álló hipergeometriai függvény /32/ szerint már konvergens az $y = 1$ helyen, hiszen

$$(\zeta - \xi) + (\zeta - \eta) - \zeta = \zeta - \xi - \eta = 1 - 2s \ll 0. \qquad /34/$$

Látható, hogy $R(y)$ az $y \to 1$ esetben $(1-y)^{1-s}$ szerint tart a végtelenhez. Ezen ugy lehet segiteni, hogy a végtelen sort véges polinommá alakitjuk, amit elérhetünk azáltal, hogy a hipergeometriai függvény első, vagy második paraméterét negativ egész számmal tesszük egyenlővé. Erre lehetőségünk van, mert a W paraméter még határozatlan, tehát az eljárás éppen a sajátértékeket szolgáltatja. Mindkét esetben azonos eredményt kapunk, válasszuk az első lehetőséget:

$$\xi = s + \sqrt{-a_1} + \sqrt{-a_3} = -n. \qquad /35/$$

Rendezve ezt az összefüggést és négyzetre emelve, valamint /19/ és /21/ figyelembe vételével bevezetve a következő jelölést:

$$l = a_1 - a_3 = \frac{\alpha^2}{\beta^2} De^{\beta}(2 + e^{\beta}), \qquad /36/$$

$\sqrt{-a_1}$ igy irható:

$$l_n = \sqrt{-a_1} = \frac{l - (n+s)^2}{2(n+s)} \qquad /37/$$

Ebből négyzetreemeléssel /19/ alapján a sajátértékek:

$$W_n = -\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\left(n + s - \frac{l}{n+s}\right)^2. \qquad /38/$$

Később megmutatjuk, hogy /38/ az /1/ alatt feljegyzett empirikus energia sajátértékeket szolgáltatja. Vegyük észre, hogy n nem vehet fel tetszés szerinti nagy értéket, hiszen /26/ alatt feltételeztük, hogy $\sqrt{-a_1}$ pozitiv, igy /37/ alapján $l_n \geq 0$ -ból következik, hogy n maximális értéke

$$N = \left[\sqrt{l} - s\right] \qquad /39/$$

ahol $[A]$ most A egész részét jelenti. Feljegyezzük végül a sajátfüggvényeket a legutóbb bevezetett jelöléseket használva és C_1 helyett $1/\sqrt{N_n}$ -t irva:

$$R_n(\varrho) = \frac{1}{\sqrt{N_n}}\left(1 - e^{-\beta\varrho}\right)^s e^{-l_n\beta\varrho}\, {}_2F_1\left(-n, 2l_n + 2s + n, 2l_n + 1; e^{-\beta\varrho}\right) \qquad /40/$$

Könnyen belátható, hogy /40/ kielégiti az állapotfüggvénytől megkövetett ortonormáltságból adódó

$$\int_0^{\infty} R_n(r) R_{n'}(r)\, dr = r_0 \int_0^{\infty} R_n(\varrho) R_{n'}(\varrho)\, d\varrho = \delta_{nn'} \qquad /41/$$

feltételt és $n=n'$ esetén /41/ alapján az N_n norma meghatározható. A számítást a függelékben végeztük el és a következő eredményt kaptuk:

$$N_n = \frac{r_0}{\beta} \frac{n+s}{l_n+n+s} \frac{n!\,\Gamma(2l_n)\,\Gamma(2l_n+1)\,\Gamma(2s+n)}{\Gamma(2l_n+2s+n)\,\Gamma(2l_n+n+1)} \qquad /42/$$

Meg kell még mutatnunk, hogy a sajátértékek az /1/ alatt feljegyzett formában irhatók fel. Alakitsuk át /38/-t a következők alapján:

$$s = \frac{1}{2} + s', \text{ ahol } \quad s' = \sqrt{\frac{1}{4} + D\frac{\alpha^2}{\beta^2} e^{2\beta}} \approx \sqrt{D}\frac{\alpha}{\beta} e^{\beta}; \qquad /43/$$

$$W_n = -\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\left\{\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)+s'\right]^2 - 2l + \frac{l^2}{\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)+s'\right]^2}\right\}. \qquad /44/$$

Felhasználtuk /23/-t és azt, hogy $s \sim s' > 100$ a valóságban előforduló esetekben. Továbbá /39/ és /36/ alapján:

$$\frac{n-\frac{1}{2}}{s'} \leq \frac{N+\frac{1}{2}}{s'} \leq \frac{\sqrt{l}-s'}{s'} = \sqrt{1+2e^{-\beta}} - 1 < 1, \qquad /45/$$

tehát /44/ harmadik tagját e hányados szerint sorbafejtve és rendezve

$$W_n = -\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\left\{(s'-\frac{l}{s'})^2 + 2\frac{s'^4-l^2}{s'^3}\left[(n+\frac{1}{2}) - \frac{1}{2}\frac{3l^2+s'^4}{s'(l^2-s'^4)}(n+\frac{1}{2})^2 + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{2l^2}{s'^2(l^2-s'^4)}(n+\frac{1}{2})^3 + \ldots\right]\right\} \qquad /46/$$

Végül figyelembe véve, hogy /36/ és /43/ szerint

$$\frac{l}{s'^2} = 1 + 2e^{-\beta} \qquad /47/$$

és bevezetve a következő jelöléseket:

$$\hbar\omega_0 = \frac{2\beta}{\alpha}\sqrt{D}\frac{e^{\beta}+1}{e^{\beta}}, \qquad /48/$$

$$x = \hbar\omega_0 \frac{1}{4D}\frac{e^{2\beta}+3e^{\beta}+3}{(e^{\beta}+1)^2}, \qquad /49/$$

$$K_3 = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar\omega_0}{2D}\right)^2 \frac{(e^{\beta}+2)^2}{(e^{\beta}+1)^3}, \qquad /50/$$

az energia sajátértékek a következő formában irhatók:

$$W_n = -D + \hbar\omega_0\left[\left(n+\frac{1}{2}\right) - x\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 + K_3\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \mp \ldots\right], \qquad /51/$$

amely pontosan megegyezik az empirikus formulával.

Következtetések

A /40/ alatt felirt sajátfüggvények és az /51/ alatt megadott sajátértékek lényegében a probléma megoldását szolgáltatják. Az általunk javasolt potenciálfüggvény az összes kirótt fizikai feltételeket kielégiti, azonban

azt, hogy a kétatomos molekulák potenciálját valóban helyesen írja-e le, csak a kisérlettel történő összehasonlitás döntheti el. Az összehasonlitáshoz szükséges nagyszámu numerikus munka elvégzését nem tekintjük feladatunknak, csupán az ellenőrzés két lehetőségére mutatunk rá:

1. D és ω_o helyébe spektroszkópiai mérések eredményét helyettesitsük és határozzuk meg /48/ alapján e^{β} t. Figyelembe véve /16/ és /12/ egyenlőségeket, a következőt kapjuk:

$$f(e^{\beta}) = \frac{(e^{\beta}+1)\ln(e^{\beta}+1)}{e^{\beta}} = \sqrt{\frac{J\omega_o^2}{2D}} \qquad /52/$$

ahol $J = \mu r_M^2$ a kétatomos molekula tehetetlenségi nyomatéka a sulyponton keresztül haladó és az atomokat összekötő egyenesre merőleges tengelyre vonatkozólag. J értéke méréssel szintén meghatározható, igy /52/ jobboldala ismert, tehát az $f(z)$ függvényt tabellázva, vagy grafikusan ábrázolva e^{β} kiszámitható. Az igy meghatározott e^{β}, valamint a mért D és ω_o segitségével /49/ és /50/ alapján számolhatjuk x és K_3 értékét, amelyeket összehasonlithatunk a kisérleti eredményekkel. Előre látjuk, hogy lesz eltérés, mert például K_3 esetünkben határozottan pozitiv, mig a tapasztalat pozitiv és negativ értékeket egyaránt szolgáltat. Ezen esetleg egy megfelelő perturbáló tag figyelembe vételével lehetne segiteni.

2. Más lehetőség az ellenőrzésre, ha a mérési eredményekből meghatározott β és r_M értékek segitségével a /10/ alatt adott potenciálfüggvényt grafikusan ábrázoljuk és összehasonlitjuk a Klein-Rydberg módszerrel nyerhető potenciálfüggvénnyel. Klein [10] és Rydberg [11] ugyanis olyan eljárást adott, amelynek segitségével pusztán a spektroszkópiai mérések alapján a "valódi" potenciálfüggvényt pontról - pontra meg lehet szerkeszteni.

Befejezésül rámutatunk arra, hogy a sajátérték kifejezésében szereplő paraméterek elég nagy β esetén a Morse által adott [4] paraméterekbe mennek át, ugyanis /48/, /49/ és /50/ összefüggésekből leolvashatjuk, hogy

$$\hbar\omega_o \longrightarrow \frac{2\beta\sqrt{D}}{\alpha}, \quad x \longrightarrow \frac{\hbar\omega_o}{4D} \qquad \text{és} \qquad K_3 \longrightarrow 0$$

ha $\beta \longrightarrow \infty$.

Szeretnénk köszönetet mondani Dr.Hoffmann Tibornak és Dr.Nagy Elemérnek, akik a problémára felhivták figyelmünket és munkánk során velünk értékes megbeszéléseket folytattak; továbbá Dr.Mátrai Tibornak, aki tanácsaival támogatott.

I r o d a l o m

[1] Kratzer A., Zs.f.Phys. 3, 289 /1920/

[2] Rydberg R., Zs.f.Phys. 73, 376 /1931/

[3] Varshni Y.P. Rev.Mod.Phys. 29, 664 /1957/

[4] Morse P.M., Phys. Rev. 34, 57 /1929/

[5] Kamke E.: Differentialgleichungen, Lösungsmethoden und Lösungen. 427. old. Chelsea Publishing Co., New York, 1948.

[6] Ter Haar D. Phys.Rev. 70,222 /1946/

[7] Kamke E.: Idézett mü, 465 old.

[8] Magnus W., Oberhettinger F.: Formeln und Sätze für die Speziellen Funktionen der Mathematischen Physik. J.Pringer, Berlin, 1948.

[9] Magnus W., Oberhettinger F.: Idézett mü, 13 old.

[10] Klein O., Zs.f.Phys. 76, 226 /1932/

[11] Rydberg R., Zs.f.Phys. 80, 514/1933/

[12] Magnus W., Oberhettinger F.: Idézett mü, 15. old.

[13] Magnus W., Oberhettinger F.: Idézett mü, 14. old.

Függelék

Meghatározzuk az N_n norma értékét /41/ egyenlet alapján:

$$r_o \int_o^\infty R_n^2(\varrho)\, d\varrho = 1 \qquad /1,1/$$

ahol $R_n(\varrho)$ a /40/ alatt feljegyzett sajátfüggvény. Ezt behelyettesítve és bevezetve az $y = e^{-\beta\varrho}$ változót:

$$N_n = \frac{r_o}{\beta} \int_o^1 (1-y)^{2s}\, y^{2l_n-1}\, {}_2F_1^2(-n, 2l_n+2s+n, 2l_n+1; y)\, dy \,. \qquad /1,2/$$

Alkalmazzuk a következő átalakítást [12] :

$$(c-a)_n\, y^{c-a-1}(1-y)^{a+b-c-n}\, {}_2F_1(a,b,c;y) = \qquad /1,3/$$

$$= \frac{d^n}{dy^n}\left[y^{c-a+n-1}(1-y)^{a+b-c}\, {}_2F_1(a,b,c;y)\right]$$

Legyen $a = 0$, $b = 2l_n + 2s + n$, $c = 2l_n + 1$ és nyilván ${}_2F_1(0,b,c,y) = 1$ ekkor /1,2/ így írható:

$$N_n = \frac{r_o}{\beta(2l_n+1)_n} \int_o^1 \left(\frac{1}{y} - 1\right) {}_2F_1(-n, 2l_n+2s+n, 2l_n+1; y) \cdot$$

$$\cdot \frac{d^n}{dy^n}\left[y^{2l_n+n}(1-y)^{2s+n-1}\right] dy \,. \qquad /1,4/$$

Ezután n-szer parciálisan integrálva és felhasználva az ${}_2F_1(\ldots.)$ sorfejtése alapján [13] könnyen belátható

$$\frac{d^n}{dy^n}\left[\frac{1}{y}\, {}_2F_1(-n, 2l_n+2s+n, 2l_n+1; y)\right] = \frac{(-1)^n n!}{y^{n+1}} \qquad \text{és} \qquad /1,5/$$

$$\frac{d^n}{dy^n}\, {}_2F_1(-n, 2l_n+2s+n, 2l_n+1; y) = (-1)^n n!\, \frac{(2l_n+2s+n)_n}{(2l_n+1)_n} \qquad /1,6/$$

összefüggéseket, a norma értéke így írható:

$$N_n = \frac{r_o\, n!}{\beta(2l_n+1)_n}\left[\int_o^1 y^{2l_n-1}(1-y)^{2s+n-1}\, dy - \right.$$

$$\left. - \frac{(2l_n+2s+n)_n}{(2l_n+1)_n} \int_o^1 y^{2l_n+n}(1-y)^{2s+n-1}\, dy \right]. \qquad /1,7/$$

Az integrálok értékét és a szorzó tényezőket Γ függvényekkel kifejezve és rendezve:

$$N_n = \frac{r_o}{\beta}\, \frac{n+s}{l_n+n+s}\, \frac{n!\,\Gamma(2l_n)\,\Gamma(2l_n+1)\,\Gamma(2s+n)}{\Gamma(2l_n+2s+n)\,\Gamma(2l_n+n+1)} \,. \qquad /1,8/$$

Érkezett 1959. okt.14.

KFKI Közlemények 7.évf.5.szám, 1959.

SZILÁRD TESTEK FAJHŐJÉRŐL ÉS HŐTÁGULÁSÁRÓL*

Irta: Fogarassy Bálint és Németh Géza
Szilárdtestfizikai Laboratórium

Összefoglalás

Szilárd testek fajhőjét és hőtágulási együtthatóját határozzuk meg a kvantumelmélet alapján. Feltételezzük, hogy a szilárd test atomjai anharmonikus erőkkel vannak kötve, amelyek potenciálját adott fizikai követelmények kielégitő függvénnyel irjuk le. Az általunk javasolt potenciálfüggvény segitségével a Schrödinger-egyenlet exaktul megoldható és a potenciálfüggvény paraméterei közvetlenül mérhető fizikai mennyiségekkel állnak kapcsolatban. A fajhőre kapott kifejezés alacsony hőmérsékleten az Einstein által adott formulába megy át, magas hőmérsékleten a Dulong - Petit törvénynél nagyobb értéket szolgáltat. Ezzel kapcsolatban diszkutáljuk Born - Bródy hasonló jellegü számitásait. A hőtágulási együtthatót ki tudjuk fejezni a szublimációs energia, kompresszibilitás és minimális rácstávolság függvényeként, igy módunkban áll a Grüneisen - állandót e mennyiségekkel kapcsolatba hozni. Az elmélet által szolgáltatott hőtágulási együtthatók csak egy meghatározott faktorral történő szorzás esetén egyeznek a kisérleti eredményekkel.

Bevezetés

Szilárd testek termikus tulajdonságait vizsgáljuk, figyelembe véve a rácsrezgések anharmonikus jellegét. A ráspontokban elhelyezkedő atomokra ható anharmonikus erők potenciálját a kétatomos molekulák empirikus potenciálfüggvényével tesszük egyenlővé. Más helyen foglalkoztunk [1] azokkal a fizikai feltételekkel, amelyeket a kétatomos molekulák potenciálfüggvényének ki kell elégiteni és ugyanott a következő formulát javasoltuk:

$$V(r) = D\left\{\left[1 - \frac{e^{-\beta(\varrho-1)}}{1-e^{-\beta\varrho}}\right]^2 - 1\right\}; \quad \varrho = \frac{r}{r_o} \qquad /1/$$

Itt r az atommagok egymástól mért távolsága és szilárd testek esetében D a szublimációs energia, β és r_o a K_o adiabatikus kompresszibilitással és r_M minimális rácstávolsággal kifejezhetők. [1] -ben megmutattuk, hogy a Schrödinger-egyenlet a fenti potenciálfüggvénnyel exak módon megoldható.

---

* 1959. szeptember hóban, a szilárdtestfizikai kollokviumon elhangzott előadás.

Az 1. fejezetben megadjuk a potenciálfüggvény paraméterei és a fizikai mennyiségek közötti összefüggéseket, valamint idézzük az [1] közlemény számunkra érdekes eredményeit. Meghatározzuk az r_n átlagtávolságokat, amelyeket a következőképen definiálunk:

$$r_n = \int \psi_n^x \; r \; \psi_n \, d^3 x \,, \qquad /2/$$

ahol ψ_n a Schrödinger-egyenlet n-ik sajátfüggvénye és az integrálás az egész térre kiterjesztendő. Az E_n sajátenergia és r_n átlagtávolságok értékéből a Boltzmann-faktor segitségével előállitjuk az $E(T)$ energia és $r(T)$ magtávolság hőmérsékletfüggését. Ezek ismeretében a fajhő és hőtágulási együttható a T hőmérséklet szerinti differenciálással nyerhető.

A 2. fejezetben

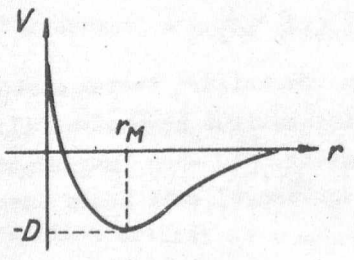
$$Z = \sum e^{-\frac{E_n}{kT}} \qquad /3/$$

állapotösszeg alacsony és magas hőmérsékleten érvényes közelitésével foglalkozunk. Rámutatunk, hogy a Born-Bródy fajhőelméletben szereplő hasonló kifejezésben a szerzők olyan közelitést alkalmaznak, amely nem szükségképen megengedett.

A 3. fejezetben az állapotösszeg felhasználásával a fajhőre és hőtágulási együtthatóra vonatkozó konkrét kifejezéseket adunk meg, majd meghatározzuk a Grüneisen-állandót.

A 4. fejezetben a hőtágulás klasszikus elméletével foglalkozunk és a kvantumelméleti számitás alapján kapott, közepes hőmérsékleten érvényes formulát klasszikus meggondolások segitségével is levezetjük.

Az 5. fejezetben alkalmazzuk az elméletet néhány ionkristályra és fémre, majd összehasonlitjuk az elméleti és kisérleti eredményeket.



1. ábra

1. Sajátértékek meghatározása

Mindenekelőtt az /1/ potenciálfüggvényben szereplő paraméterek és fizikailag mérhető mennyiségek között állapitunk meg összefüggéseket. A potenciálfüggvény menete az 1. ábrán látható. A $V'(r_M) = 0$ feltételből

$$r_M = r_o \, \frac{\ln(e^{\beta} + 1)}{\beta} \,, \qquad /4/$$

ahol r_M a minimális rácstávolság, másszóval az egyensulyi helyzethez ($T = 0\,K^\circ$) tartozó legközelebbi rácspontok távolsága. /1/-ből nyilvánvaló, hogy $V(r_M) = -D$, tehát D a szublimációs energia, másszóval az az energia, amely egy rácspontnak a szomszédai közül történő kiszakitásához szükséges. A második derivált:

$$V''(r_M) = \frac{2\beta^2 D}{r_o^2}\left(\frac{e^\beta+1}{e^\beta}\right)^2 \qquad /5/$$

ugyanakkor az adiabatikus, vagy a $T = 0K^\circ$ hőmérsékleten vett kompresszibilitás [2]:

$$\frac{1}{K_o} = v_o\left(\frac{\partial^2 V}{\partial v^2}\right)_{v=v_o} = \frac{1}{9\delta r_M} V''(r_M), \qquad /6/$$

ahol v_o az egy molekulára eső térfogat, amelyet a következőképen fejezünk ki:

$$v_o = \delta r_M^3 \qquad /7/$$

ahol δ a kristálystrukturából egyszerű geometriai meggondolások alapján meghatározható. Néhány köbös szerkezetű kristályra vonatkozólag az 1. táblázatban megadjuk δ értékét:

	Ionkristály		Fémkristály	
	NaCl tipusu	CsCl tipusu	Lapcentrált	Tércentrált
δ	2	$\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^3$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^3$

1. Táblázat

A /4/, /5/ és /6/ egyenletek alapján e^β -ra implicit összefüggést nyerhetünk, éspedig

$$f(e^\beta) = \sqrt{\frac{9\delta r_M^3}{2DK_o}}, \qquad /8/$$

ahol

$$f(e^\beta) = \frac{(e^\beta+1)\ln(e^\beta+1)}{e^\beta} \qquad /9/$$

A /8/ összefüggés alapján e^β pl. grafikusan és β visszakeresés után meghatározható. Ekkor természetesen r_o értéke is /4/-ből kiszámítható.

Rátérünk a kvantummechanikai probléma megoldására. A probléma Schrödinger-egyenlet a következő alaku:

$$\left\{\Delta + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[W - V(r)\right]\right\}\psi(r,\vartheta,\varphi) = 0, \qquad /10/$$

ahol Δ a Laplace-operátor, μ a redukált tömeg, W az energia sajátérték $V(r)$ az /1/ alatt feljegyzett potenciálfüggvény, r, ϑ és φ gömbi koordináták. Szeparálva az állapotfüggvény:

$$\psi(r,\vartheta,\varphi) = \frac{R(r)}{r}\,\theta(\vartheta)\,\phi(\varphi) \qquad /11/$$

és a továbbiakban a szögfüggéstől eltekintve, valamint bevezetve a $\varrho = r/r_o$ változót az $R_n(\varrho)$ sajátfüggvényekre vonatkozó sajátértékegyenlet a következő:

$$\frac{d^2 R_n(\varrho)}{d\varrho^2} + \alpha^2 \left[W_n - V(\varrho) \right] R_n(\varrho) = 0, \qquad /12/$$

ahol

$$\alpha^2 = \frac{2\mu r_o^2}{\hbar^2} \qquad /13/$$

Megköveteljük, hogy a sajátfüggvények ortonormáltak legyenek:

$$\int_0^\infty R_n^x R_n \, dr = \delta_{nn'} . \qquad /14/$$

/14/ természetesen a ψ állapotfüggvényekre kirótt ortonormálási feltételből következik.

Az [1] közleményben meghatároztuk /12/-nek /14/ feltételt kielégítő megoldását, éspedig

$$R_n(r) = \frac{1}{\sqrt{N_n}} (1-y)^s y^{l_n} \, {}_2F_1(-n, 2l_n + 2s + n, 2l_n + 1, y), \qquad /15/$$

ahol ${}_2F_1$ a Gauss-féle hipergeometriai függvény és N_n a norma, amely függvényekkel a következőképen fejezhető ki:

$$N_n = \frac{r_o}{\beta} \frac{n+s}{l_n+n+s} \frac{n!\,\Gamma(2l_n)\,\Gamma(2l_n+1)\,\Gamma(2s+n)}{\Gamma(2l_n+2s+n)\,\Gamma(2l_n+n+1)} \qquad /16/$$

A további jelölések:

$$y = e^{-\beta\varrho} \qquad /17/$$

$$S = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + D\frac{\alpha^2}{\beta^2} e^{2\beta}} \cong \sqrt{D}\,\frac{\alpha}{\beta} e^{\beta} ; \qquad /18/$$

$$l_n = \frac{l - (n+s)^2}{2(n+s)} , \qquad \text{ahol} \qquad /19/$$

$$l = D\frac{\alpha^2}{\beta^2} e^{\beta}(2 + e^{\beta}). \qquad /20/$$

Megjegyezzük, hogy a továbbiakban "S" értékére a /18/ alatt adott második formulát használjuk, mivel reális esetben $S > 100$. n értékei a következők lehetnek:

$$n = 0, 1, 2, \ldots N, \qquad /21/$$

ahol N, n maximális értéke, $l_N \cong 0$ feltételből határozható meg, tehát

$$N = \left[\sqrt{l} - s \right] \cong \sqrt{D}\,\frac{\alpha}{\beta} \left[1 - \frac{1}{2}\frac{1}{e^{\beta}+1} - \frac{1}{8}\frac{1}{(e^{\beta}+1)^3} - \cdots \right] \qquad /22/$$

A megfelelő energia sajátértékek:

$$W_n = -\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\left(n+s-\frac{l}{n+s}\right)^2 \qquad /23/$$

A továbbiakban W_n sorfejtésének csak első három tagját használjuk megjegyezve, hogy az igy elkövetett hiba $n = N$ esetén sem haladja meg az 5%-ot. W_n tehát igy irható:

$$W_n = -D + \hbar\omega_0\left[\left(n+\tfrac{1}{2}\right) - x\left(n+\tfrac{1}{2}\right)^2\right], \quad \text{ahol} \qquad /24/$$

$$\hbar\omega_0 = \frac{2\beta\sqrt{D}}{\alpha}\cdot\frac{e^{\beta}+1}{e^{\beta}} \quad \text{és} \qquad /25/$$

$$x = \frac{\hbar\omega_0}{4D}\cdot\frac{e^{2\beta}+3e^{\beta}+3}{(e^{\beta}+1)^2} \qquad /26/$$

Feljegyezzük még az előbbiekből következő két nagyságrendi becslést, amelyekre szükségünk lesz:

$$x \sim \frac{\hbar\omega_0}{4D}, \quad N \sim \frac{2D}{\hbar\omega_0}. \qquad /27/$$

Foglakozzunk az átlagtávolságok kiszámitásával. Átlagtávolság alatt értjük az W_n sajátenergiához tartozó legvalószinübb magtávolságot. Ennek meghatározása céljából a /2/ alatt felirt integrált kell kiszámitani, azaz jelen esetben

$$r_n = \int_0^{\infty} r\, R_n^2(r)\, dr. \qquad /28/$$

Az integrálást az 1. függelékben végeztük el és az $1/s^2$ -t tartalmazó tagokat elhagyva az átlagtávolságokra a következő kifejezést kaptuk:

$$r_n = r_M + \frac{3r_0 e^{\beta}}{2s\beta}\cdot\frac{e^{\beta}+2}{e^{\beta}+1}\left(n+\frac{1}{6}\right) = \qquad /29/$$

$$= r_M\left[1+\frac{3}{2s}\cdot\frac{e^{\beta}+2}{f(e^{\beta})}\left(n+\frac{1}{6}\right)\right],$$

ahol az utóbbi formához felhasználtuk a /4/ és /9/ összefüggéseket. Az r_M mellett fellépő n -t nem tartalmazó tag a kvantummechanikai zéruspont energia következménye. A zérusponti fluktuáció anharmónikus esetben nem engedi, hogy az atommagok távolságának legvalószinübb értéke 0 K^0-on r_M legyen.

Vezessünk be néhány egyszerüsitő jelölést a /24/ és /29/ formulákban, pontosabban válasszuk külön az n -t tartalmazó és nem tartalmazó tagokat:

$$W_n = E_0 + E_n; \quad E_n = \omega_1 n - \omega_2 n^2; \quad \omega_1 = \hbar\omega_0; \quad \omega_2 = \hbar\omega_0 x, \qquad /30/$$

itt x -t elhanyagoltuk az egység mellett. Természetesen $W_n \geq 0$ és monoton növekvő a szóbajövő n értékek esetén.

$$r_n = r_M^o + r' n \; ; \quad r' = \frac{3 r_M (e^{\beta} + 2)}{2 s f(e^{\beta})} . \qquad /31/$$

E_o és r_M^o értékét a /24/ és /29/ egyenlet határozza meg.

Most már megadhatjuk az energia és a magtávolság hőmérsékletfüggését. Nem kell mást tennünk, mint kiszámitani W_n és r_n átlagértékét a Boltzmann-faktorral meghatározott sürüségfüggvény esetén

$$E(T) = \frac{\sum_{n=0}^{N} W_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{Z} , \qquad /32/$$

$$r(T) = \frac{\sum_{n=0}^{N} r_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{Z} , \qquad /33/$$

ahol Z az állapotösszeg jelenti, azaz

$$Z = \sum_{n=0}^{N} e^{-\frac{E_n}{kT}} . \qquad /34/$$

Hangsulyozzuk, hogy a felirt összefüggéseknek csak $T \leq T_k$ hőmérséklet értékek esetén van értelme, mert az első közelitésben oszcillátornak tekinthető atommagok átlagos kinetikus energiája nem lépheti tul a szublimációs energia értékét, tehát

$$\frac{3}{2} k T_k = D . \qquad /35/$$

A valóságban természetesen az olvadáspont szab határt a formuláknak, amely lényegesen alacsonyabb, mint T_k . Megjegyezzük még, hogy a tárgyalás csak $P = 0$ külső nyomásnál érvényes teljes pontossággal, amikor is a hőtágulás nem ad járulékot az energiához.

Amint látni fogjuk $E(T)$ és $r(T)$ meghatározásához elegendő az állapotösszeg ismerete, mert abból megfelelő paraméterek szerinti parciális deriválással /32/ és /33/ előállitható.

2. Az állapotösszeg kiszámitása

A /34/ alatt definiált állapotösszeg alacsony és magas hőmérsékletek tartományában érvényes közelitését akarjuk meghatározni. Pontosan megadjuk, mit értünk a két tartomány alatt.

1/ $0 < T << T_o$, /36/

2/ $T_o << T \leq T_k$, ahol /37/

$$T_o = \frac{\hbar \omega_o}{k} = \frac{\omega_1}{k} \qquad /38/$$

és T_k -t /35/ alatt határoztuk meg.

Alacsony hőmérsékleten már $n = 1$ esetén is

$$\frac{E_n}{kT} >> 1 , \qquad /39/$$

így az összegnek csak az első néhány tagja ad jelentősebb járulékot, de kis n esetén $E_n \sim \omega_1 n$ /harmónikus közelítés/ és ezután, kényelmi szempontból, az összegezést végtelenig terjeszthetjük ki. Tehát az állapotösszeg alacsony hőmérséklet esetén:

$$Z_a = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\omega_1}{kT}}} \qquad /40/$$

Mielőtt az állapotösszeg magas hőmérsékleten érvényes alakját meghatároznánk, néhány megjegyzést fűzünk Born és Bródy fajhő elmélettel kapcsolatban irt közleményéhez [3]. Ők, a jelölésektől eltekintve, szintén a

$$Z = \sum_n e^{-\frac{\omega_1 n}{kT} - \frac{\omega_2 n^2}{kT}} \qquad /41/$$

állapotösszeget számitják ki. Közleményük /10/ képletében a kitevő második tagja is negativ előjellel van feljegyezve, de esetükben ω_2 is negativ: továbbá az összegezést végtelenig kell kiterjeszteni, amely nyilván divergenciára vezet. Ezen a nehézségen ugy segitenek, hogy sorfejtést alkalmaznak és az első két tagot megtartva konvergens összeget nyernek, azaz

$$Z \sim \sum_n e^{-\frac{\omega_1 n}{kT}} \left(1 + \frac{\omega_2 n^2}{kT}\right) \qquad /42/$$

Nyilván a sorfejtés korlátlan n esetén csak végtelen nagy hőmérsékleten érvényes, de véges számu n mellett is ellentmondásra vezet. Ha például az általunk adott paraméterekkel számolunk, felhasználva /27/ és /30/-t

$$\frac{\omega_2 N^2}{kT} \sim \frac{D}{kT} , \qquad /43/$$

amelynek egynél kisebbnek kellene lenni, de ehhez az kell, hogy /35/-t figyelembe véve

$$T > \frac{3}{2} T_K \qquad /44/$$

legyen. Ilyen nagy hőmérsékletet viszont nem engedhetünk meg. Ugy gondoljuk, hogy ezen sorfejtés helyett matematikailag korrektebb közelitést kell alkalmaznunk.

A 2. függelékben az Euler összegezési formulát alkalmazva kiszámitjuk az állapotösszeget magas hőmérsékleten és a következő összefüggést nyerjük:

$$Z_m = \frac{kT}{\omega_1}\left(1 + \frac{2\omega_2 kT}{\omega_1^2}\right) . \qquad /45/$$

3. Fajhő és hőtágulási együttható

Az állapotösszeg /34/ alatt felirt általános alakjából /3o/ és /31/-t felhasználva /32/ és /33/ a következőképen számolható:

$$E(T) = E_o + \frac{kT^2}{Z}\frac{\partial Z}{\partial T} \qquad /46/$$

$$r(T) = r_M^o - \frac{r'kT}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \omega_1} \qquad /47/$$

A felirt összefüggések egyszerüen verifikálhatók. Irjuk most be /46/ és /47/-be az állapotösszeg /40/ és /45/ alatt adott alakját, elvégezve a kijelölt differenciálásokat, élve az eddig is alkalmazott közelitésekkel és ω_1, ω_2 alakját /30/-ból helyettesitve:

$$E(T) = E_o + \begin{cases} \hbar\omega_o \dfrac{e^{-\frac{\hbar\omega_o}{kT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega_o}{kT}}} & \text{ha } 0 < T << T_o \\ kT\left(1+\dfrac{2\times k}{\hbar\omega_o}T\right) & \text{ha } T_o << T \leq T_k \end{cases} \qquad /48/$$

$$r(T) = r_M^o + \begin{cases} r' \dfrac{e^{-\frac{\hbar\omega_o}{kT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega_o}{kT}}} & \text{ha } 0 < T << T_o \\ \dfrac{r'kT}{\hbar\omega_o}\left(1+\dfrac{4\times k}{\hbar\omega_o}T\right) & \text{ha } T_o << T \leq T_k \end{cases} \qquad /49/$$

Mólnyi mennyiségben $3pA$ lineáris oszcillátor van, igy az állandó térfogaton vett fajhő:

$$C_V = 3pA\frac{\partial E}{\partial T}, \qquad /50/$$

ahol A az Avogadro-szám és p az egy molekulában lévő atomok száma. /48/-t differenciálva és x -re a /27/ közelitést alkalmazva, amely 10%-nál pontosabb / $\beta > 2$ a reális esetekben/, bevezetve az $Ak = R$ univerzális gázállandót, valamint a T_o jelölést /38/ alapján, C_V igy irható:

$$C_V = \begin{cases} 3pR\left(\dfrac{\frac{T_o}{2T}}{Sh\frac{T_o}{2T}}\right)^2 & \text{ha } 0 < T << T_o \\ 3pR & \text{ha } T \sim T_o \\ 3pR\left(1+\dfrac{k}{D}T\right) & \text{ha } T_o << T \leq T \end{cases} \qquad /51/$$

Alacsony hőmérsékleten az Einstein által, magas hőmérsékleten a Born - Bródy által előállitott formulákhoz jutottunk. Utóbbitól annyi az eltérés, hogy esetünkben a hőmérsékleti együttható értéke könnyen összehasonlitható a ta-

passtalattal. A közepes hőmérsékletre érvényes összefüggést az előbbiekből határátmenettel nyerjük $T \to \infty$ illetve $T \to 0$ formalizmussal, ez természetesen a Doulong - Petit törvényt szolgáltatja.

A lineáris hőtágulási együttható definiciója:

$$\alpha_l = \frac{1}{r_M} \frac{\partial r}{\partial T} \quad . \qquad /52/$$

/49/-t differenciálva, felhasználva a fajhőnél tett közelitéseket és a /31/, /18/, /25/ összefüggéseket, α_l igy irható:

$$\alpha_l = \begin{cases} \frac{3k}{4D} \frac{e^{\beta}+2}{(e^{\beta}+1) f(e^{\beta})} \left(\frac{\frac{T_o}{2T}}{\mathrm{Sh}\, \frac{T_o}{2T}} \right)^2 & \text{ha} \quad 0 < T \ll T_o \\ \frac{3k}{4D} \frac{e^{\beta}+2}{(e^{\beta}+1) f(e^{\beta})} & \text{ha} \quad T \sim T_o \\ \frac{3k}{4D} \frac{e^{\beta}+2}{(e^{\beta}+1) f(e^{\beta})} \left(1 + \frac{2k}{D} T\right) & \text{ha} \quad T_o \ll T \leq T \end{cases} \qquad /53/$$

Megjegyezzük, hogy a közepes hőmérsékleten érvényes, határátmenettel nyert formula, hasonlóan a fajhőhöz, klasszikus meggondolások alapján is előállitható. A hőtágulás kvantumelmélete, tehát - a várakozásnak megfelelően - alacsony és magas hőmérsékleten nyujt ujat. Feltételezhető, hogy alacsony hőmérsékleten komplikáltabb modellt kellene alkalmazni, amely az exponenciális függés helyett a Debye-függvényt eredményezné. Érdekes megfigyelni, hogy a magas hőmérsékleten érvényes közelitésben C_V és α_l hőmérsékleti együtthatója különböző.

Felirjuk a Grüneisen-állandó értékét [4] :

$$\gamma = \frac{3 \alpha_l V}{K_o C_V} , \qquad /54/$$

ahol V a mólnyi mennyiség térfogata. Behelyettesitve /51/ és /53/-t, az Avogadro-számmal osztva, majd felhasználva /7/, /8/ és /9/ összefüggéseket és közepes hőmérsékletre szoritkozva:

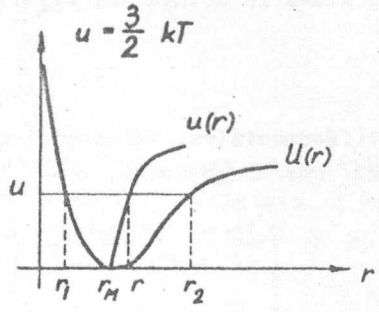
$$\gamma = \frac{(e^{\beta}+2) f(e^{\beta})}{6 (e^{\beta}+1) p} \quad \text{ha} \quad T \sim T_o \qquad /55/$$

Mégegyszer hangsulyozzuk, hogy az alkalmazott modell lehetővé tette a hőtágulási együttható és a Grüneisen-állandó, valamint magas hőmérsékleten a fajhő és hőtágulási együtthatóra adott összefüggésben szereplő hőmérsékleti együttható kifejezését makroszkópikusan mérhető fizikai mennyiségekkel, mint a szublimációs energia, adiabatikus kompresszibilitás és rácsállandó. A modell alkalmazhatóságát a kisérleti eredményekkel történő összehasonlitás dönti el.

4. A hőtágulás klasszikus elmélete

Tekintsük az 1. ábrán látható potenciálgörbét. Ha hőt közlünk a szilárd testtel, az atomok nagyobb kinetikus energiára tesznek szert és átlagos távolságukat egymástól a potenciálgörbe középvonala szolgáltatja. Ha a középvonal egyenletét meghatározzuk, ez az $r(T)$ összefüggést szolgáltatja és a hőtágulási együttható az /52/ definiáló képlet alapján számítható.

A 2. ábrán ismét felrajzoltuk a potenciálgörbét és a meghatározandó középvonalat egy célszerűen választott koordinátarendszerben. Az ordinátára most az $u = \frac{3}{2} kT$ átlagos kinetikus energiát mértük fel. A potenciálfüggvény ebben a koordinátarendszerben:



2. ábra

$$U(\varrho) = D\left[1 - \frac{e^{-\beta(\varrho-1)}}{1-e^{-\beta\varrho}}\right]^2 ; \quad \varrho = \frac{r}{r_o} \qquad /56/$$

Szemeljünk most ki egy u értéket és határozzuk meg az $u(r)$ kapcsolat által kijelölt r értékeket. Ez nyilván nem más, mint az u és $U(r)$ metszéspontjaihoz tartozó r_1 és r_2 számtani közepe.

$$u = D\left[1 - \frac{e^{-\beta(\varrho_{1,2}-1)}}{1-e^{-\beta\varrho_{1,2}}}\right]^2 , \qquad /57/$$

amelyből $\varrho_{1,2}$ meghatározható. Közvetlenül azok számtani közepét írjuk fel:

$$\varrho = \frac{\varrho_1 + \varrho_2}{2} = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{(1+e^{\beta})^2 - \frac{u}{D}}{1 - \frac{u}{D}} . \qquad /58/$$

ϱ és u -t r és T -vel kifejezve:

$$r(T) = \frac{r_o}{2\beta} \ln \frac{(1+e^{\beta})^2 - \frac{3k}{2D}T}{1 - \frac{3k}{2D}T} . \qquad /59/$$

A hőtágulási együtthatót /52/ alapján T-szerinti differenciálással nyerjük. Figyelembe véve /4/-t:

$$\alpha_l = \frac{3k e^{\beta}(e^{\beta}+2)}{4D \ln(e^{\beta}+1)} \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{3k}{2D}T\right)\left[(1+e^{\beta})^2 - \frac{3k}{2D}T\right]} . \qquad /60/$$

$T = 0\ K^{\circ}$ -on, vagy ha $\frac{3}{2} kT \ll D$, azaz nem tul magas hőmérsékleten, tekintettel /9/ -re α_l így írható:

$$\alpha_l = \frac{3k}{4D} \cdot \frac{e^{\beta}+2}{(e^{\beta}+1) f(e^{\beta})} , \qquad /61/$$

amely azonos a közepes hőmérsékleten érvényes kvantumelméleti formulával.

Látjuk, hogy a szilárd testek fajhő és hőtágulásának elmélete között szoros analógia van. Mindkét esetben a hőmérsékletfüggést alacsony és magas hőmérsékleten csak a kvantumelmélet tudja helyesen magyarázni, közepes hőmérsékleten a kvantummechanika és klasszikus elmélet azonos eredményre vezet.

5. Elméleti és kisérleti eredmények összehasonlitása

A hőtágulásra vonatkozó elméleti eredményeinket néhány ionkristályra és fémre alkalmazzuk. Felhasználva a /7/, /8/, /53/ és /55/ összefüggéseket, valamint bevezetve a mólnyi mennyiség szublimációs energiáját $D' = pAD$ és térfogatát $V = A\nu_o$, közepes hőmérsékleten a lineáris hőtágulási együttható és a Grüneisen-állandó a következőképen irható:

$$\alpha_l = \frac{R}{\sqrt{8}} \sqrt{\frac{pK_o}{D'V}} = 145 \sqrt{\frac{pK_o}{D'V}} \qquad \text{és} \qquad /62/$$

$$\gamma = \frac{1}{p\sqrt{8}} \sqrt{\frac{pV}{D'K_o}} = 1{,}724.10^{-6} \sqrt{\frac{V}{pD'K_o}} , \qquad /63/$$

ahol D' kal/mól-, K_o cm^2/dyn-, V cm^3-ben helyettesitendő és

$$p = \begin{cases} 2 \text{ ionkristályok esetén} \\ 1 \text{ fémek esetén} \end{cases} \qquad /64/$$

továbbá feltételeztük, hogy $(e^{\beta}+2)/(e^{\beta}+1) \sim 1$. A /62/ és /63/ alapján számitott elméleti értékeket a 2. táblázatban hasonlitjuk össze a kisérleti eredményekkel.

A táblázat alapján igen nagy az eltérés a kisérleti és elméleti eredmények között, azonban vegyük észre a következő érdekes összefüggést: ha a hőtágulási együtthatóra kapott elméleti kifejezést $3p$ -vel szorozzuk, néhány kivételtől eltekintve /CsCl, CsBr, CsJ, Ca, Ba/ igen jó egyezést kapunk a tapasztalattal mind a lineáris hőtágulási együtthatókra, mind a Grüneisen-állandókra vonatkozólag. A $3p$ -vel történő szorzást, bár analóg módon jelentkezik, mint a fajhő számitás esetében, nem tudjuk elméletileg indokolni. Mindenesetre megállapithatjuk, hogy /62/ és /63/ helyett a következő fél empirikus formulák adják helyesen a lineáris hőtágulási együttható és Grüneisen-állandó értékét:

$$\alpha_l = 435 \quad p \sqrt{\frac{pK_o}{D'V}} \qquad \text{és} \qquad /65/$$

$$\gamma = 5{,}18.10^{-6} \sqrt{\frac{pV}{D'K_o}} \qquad /66/$$

ahol D', K_o és V a /63/ után ismertetett egységekben helyettesitendő.

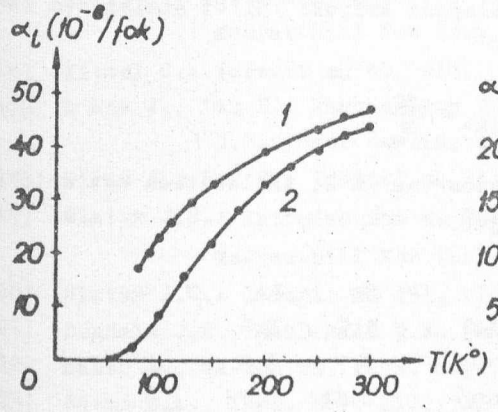
Kristály	D' mól/Kal	K_0 10^{12} dyn/cm^2	V cm^{-3}	$\alpha_2 . 10^6$ fok		γ	
				számított	mért	számított	mért
LiF	240,1 [5]	1,43 [7][8]	9,78 (*)	5,06	30,6 [17]	0,206	1,34 [19]
LiCl	198,1 "	3,17 "	20,4 "	5,74	40,4 "	0,220	1,52 "
LiBR	189,3 "	3,90 "	24,9 "	5,89	46,6 "	0,224	1,70 "
NaCl	182,8 "	3,97 "	26,6 "	5,85	36,7 "	0,234	1,63 "
NaBr	173,3 "	4,75 "	31,8 "	6,01	39,6 "	0,240	1,56 "
KF	189,7 "	3,14 "	22,8 "	5,52	33,3 "	0,238	1,45 "
KCl	164,4 "	5,50 " [9]	37,2 "	6,14	33,6 "	0,248	1,60 "
KBr	156,2 "	6,45 "	42,7 "	6,36	36,6 "	0,251	1,68 "
KJ	151,5 "	8,07 " [9]	53 "	6,49	41,6 "	0,254	1,63 "
RbCl	160,5 "	6,16 "	42 "	6,19	33,0 "	0,251	
RbBr	153,3 "	7,25 "	48,5 "	6,40	34,6 "	0,255	1,37 "
RbJ	149,0 "	9,00 "	58,8 "	6,57	39,6 "	0,256	1,41 "
CsCl	155,1 "	5,8 [10]	41,7 "	5,92	49,6 "	0,272	
CsBr	148,6 "	6,9 "	47,3 "	6,18	59,6 "	0,272	
CsJ	145,3 "	8,4 "	57 "	6,32	55,0 "	0,272	
Li	36 [6]	7,8 [11]	13 [16]	18,7	56 [18]	0,370	1,17 [20]
Na	26,2 "	13,9 "	24 "	21,58	71 "	0,442	1,25 "
K	21,9 "	28,8 "	45 "	24,78	84 "	0,461	1,34 "
Rb	20,6 "	34,8 "	55,9 "	25,20	90 "	0,482	1,48 "
Cs	18,7 "	44,1 "	70 "	26,58	97 "	0,503	1,29 "
Mg	36,6 "	2,71 [12]	14. "	10,52	26 "	0,648	
Ca	42,9 "	5,92 [13]	25,9 "	10,57	22 "	0,552	
Ba	40,9 "	7,37 "	39 "	9,84	19 "	0,621	
Cu	81,7 "	0,705 [14]	7,09 "	5,06	16,5 "	0,605	1,96 "
Ag	69,4 "	0,92 "	10,28 "	5,21	18,7 "	0,692	2,40 "
Au	90,7 "	0,555 "	10,2 "	3,55	14,2 "	0,776	3.03 "

2. Táblázat

(*) $V = A\delta r_M^3$ összefüggés alapján számoltuk: r_M értékeit a [15] irodalomból, δ -t az 1. táblázatból vettük.

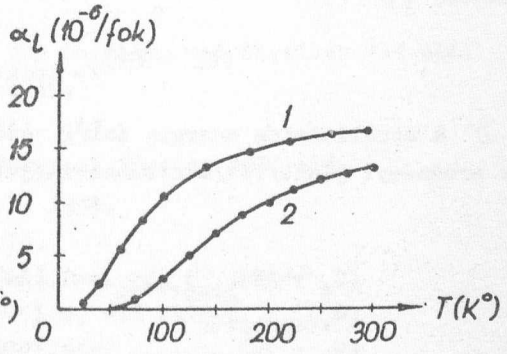
Itt jegyezzük meg, hogy Dugdale és MacDonald [21] lineáris lánc modellt alkalmazva klasszikus meggondolások alapján számolják a hőtágulási együtthatót feltételezve, hogy az atomok közötti erőhatást a Morse-potenciál írja le. Eredményük hasonló a miénkhez és a néhány fémre történt kiértékelés során megállapitják, hogy α_l (kisérleti)/ α_l (elméleti) ~ 3, $p = 1$ .Dugdale és MacDonald számitásait Bauer és Ta-You Wu ismételte meg [22] a kvantummechanika alapján, de csak alacsony hőmérsékleten érvényes közelitésben. Eredményünket nem hasonlitották össze a tapasztalattal és további problémát jelent, hogy - mint más helyen rámutattunk [1] - a Schrödinger-egyenlet megoldása a Morse-potenciállal bizonyos nehézségekre vezet. Megemlitjük még, hogy Stern igen általános feltételek mellett foglalkozik a szilárd testek anharmonikus tulajdonságaival [23], de eredményeit csak a Na magas hőmérsékleten mért fajhő-anomália magyarázatára alkalmazza.

Alacsony hőmérsékleten a hőtágulási együttható elméleti és kisérleti hőmérsékletfüggését Li és Cu esetén hasonlitjuk össze. A 3. ábrán a Li-ra, a 4. ábrán a Cu-re vonatkozó grafikonok vannak feltüntetve. Az elméleti görbéket az



3. ábra

Li lineáris hőtágulási együtthatója a hőmérséklet függvényében. 1. a kisérleti [24], 2. az elméleti görbe.



4. ábra

Cu lineáris hőtágulási együtthatója a hőmérséklet függvényében. 1. a kisérleti [25],[26] 2. az elméleti görbe

$$\alpha_l(T) = \alpha_{l\infty} \left(\frac{\frac{T_0}{2T}}{sh \frac{T_0}{2T}} \right)^2 \qquad /67/$$

összefüggés alapján számoltuk, ahol $\alpha_{l\infty}$ a 2.táblázatból vett kisérleti érték és /38/, /25/, /13/, /4/, /8/ és /9/ összefüggés alapján

$$T_0 = \frac{3\hbar}{K} \sqrt{\frac{\delta r_M}{\mu K_0}} . \qquad /68/$$

T_0 értéke Li esetén 518 K°, Cu esetén 506 K°. A kisérleti eredmények arra engednek következtetni, hogy a hőtágulási együttható nem exponenciálisan, ha-

nem gyengébben tart zérushoz $T \longrightarrow 0$ esetén. Egyes szerzők szerint [27],[28] a hőtágulási együttható erősebben tart zérushoz, mint a fajhő, aminek következtében a Grüneisen-állandó értéke alacsony hőmérsékleten csökken. A kérdés még nem tekinthető lezártnak.

Magas hőmérsékleten a hőtágulási együtthatóra vonatkozólag nem állt megfelelő kisérleti anyag a rendelkezésünkre, amellyel az elméletet össze tudtuk volna hasonlitani. Eastbrook [29] a termodinamika alapján és Born-Bródy eredményeit felhasználva a miénkhez hasonló kifejezést vezetett le.

A fajhőre vonatkozó /51/ összefüggésünk alacsony hőmérsékletek esetén Einstein eredményével egyezik, ami természetes, mert az általunk alkalmazott egyszerü modellben is csak egy frekvencia szerepel. Ismeretes, hogy ebben a hőmérséklet tartományban a kisérleti eredményeket csak komplikáltabb modellel lehet leirni, amely a Debye-összefüggésre vezet. Közepes hőmérsékleten természetesen a klasszikus Dulong-Petit törvényt kaptuk vissza. Magas hőmérsékleten Cu és Ag esetén hasonlitjuk össze eredményeinket a tapasztalattal. A 3. táblázaton feltüntetjük a $T = 1000\ K^{o}$-on mért fajhő értékét és az elektron-fajhő járulékot Wilson nyomán [30], valamint az általunk számitott értéket. Utóbbit a következő összefüggés alapján kapjuk: /51/-t átalakitva fémek esetén ($p = 1$):

$$(C_v - 3R)_{T=1000K^{o}} = \frac{50}{D'} \qquad /69/$$

ahol D' a szublimációs energia Kal/g. atom-ban /a 2. táblázatból nyerhető/. és az eredményt joule/fok/b.atomban kapjuk.

		Cu	Ag
$(C_v - 3R)_{kisérleti}$	[30]	1,5	0,8
$(C_v)_{elektron}$	[30]	0,7	0,6
$(C_v - 3R)_{elméleti}$	/69/	0,61	0,72

3. Táblázat

Ha az elektron-fajhőt a kisérleti értékből levonjuk Cu esetén elég jó egyezést kapunk, de Ag esetén az elméleti érték nagyobb. Pontosabb diszkussziora nincs mód, mert még nem tekinthetjük tisztázottnak, hogy az elektron-fajhő járulékát ilyen hőmérsékleten milyen mértékben kell figyelembe venni.

Szeretnénk köszönetet mondani Dr.Hoffmann Tibornak és Dr.Nagy Elemérnek, akik a témára felhivták figyelmünket, munkánk során velünk értékes megbeszéléseket folytattak és tanácsaikkal támogattak.

I r o d a l o m

[1] Fogarassy B., Németh G. Megjelenés alatt

[2] Kittel C.: Introduction to Solid State Physics 78. old. J.Wiley Inc. New York, 1957.

[3] Born M., Bródy E., U.f.Phys. 6, 132 /1921/

[4] Grüneisen E., Handbuch der Physik 10, 1. J. Springer Berlin, 1926.

[5] Kittel C.: Idézett mü 80. old.

[6] Mac Donald D.K., Roy S.K., Phys. Rev. 97, 673 /1955/

[7] Spangenberger K., Naturwissenschaften 43, 394 /1956/

[8] Briscoe C.V., Squire C.F., Phys. Rev. 106, 1175 /1957/

[9] Norwood M.H., Briscoe C.V., Phys. Rev. 112, 45 /1958/

[10] Gombás P.: Az atom statisztikus elmélete 285. old. Akadémia Kiadó Budapest, 1954.

[11] Swenson C.A., Phys. Rev. 99, 423 /1955/

[12] Slutsky L.J., Garland C.W., Phys. Rev. 107, 972 /1957/

[13] Gombás P.: Idézett mü 308. old.

[14] Neighbours J.R., Alers G.A., Phys. Rev. 111, 707 /1958/

[15] Seitz F.; The Modern Theory of Solids 52. old. McGraw-Hill New York, 1940.

[16] Kittel C.: Idézett mü 40. old.

[17] D'Ans J., Lax E.: Taschenbuch für Chemiker und Physiker 739.old. J.Springer Berlin, 1949.

[18] D'Ans J., Lax E.: Idézett mü 211. old.

[19] Slater J.C.: Introduction to Chemical Physics 393. old. McGraw-Hill New York, 1939.

[20] Slater J.C.: Idézett mü 451. old.

[21] Dugdale J.S., MacDonald D.K. Phys.Rev. 96, 57 /1954/

[22] Bauer E., Ta-You Wu, Phys. Rev. 104, 914 /1956/

[23] Stern E.A., Phys. Rev. 111, 786 /1958/

[24] Pearson W.B., Canadian J.Phys. 32, 708 /1954/

[25] Rubin T., Altman H.W., Johston H.L. J.American Chem.Soc. 76, 5289/1954

[26] Simons R.O., Balluffi R.W., Phys. Rev. 108, 278 /1957/

[27] Bijl D., Pullan H., Phil. Mag. 45, 290 /1954/

[28] Barron T.H., Phil.Mag. 46, 720 /1955/

[29] Eastbrook J;N., Phil.Mag. 2, 1421 /1956/

[30] Wilson A.H.: The Tehory of Metals 150. old. University Press Cambridge, 1954.

[31] Magnus W., Oberhettinger F.: Formeln und Sätze für die Speziellen Funktion der Matematischen Physik. 15. old. J.Springer Berlin, 1948

[32] Rényi A.: Valószinüségszámitás. 148. old. Tankönyvkiadó, Bp. 1954.

[33] Karpov K.A.: Tablicü Funkcii $\omega(z) = e^{-z^2} \int_0^z e^{x^2} dx$ 5 old. Izd.Akadimii Moszkva, 1954.

1. Függelék

Meghatározzuk az átlagtávolságokat. Ezek /28/, /15/ és /17/ szerint:

$$r_n = r_o^2 \int_o^\infty \varrho\, R_n^2\,(\varrho)\, d\varrho = \qquad /1,1/$$

$$= -\frac{r_o^2}{\beta^2 N_n} \cdot \int_o^1 \ln y\,(1-y)^{2s}\; y^{2l_n-1}\; {}_2F_1^2(-n, 2l_n+2s+n, 2l_n+1; y)\, dy$$

Használjuk fel a következő összefüggést [31] :

$$(c-a)_n\, y^{c-a-1}(1-y)^{a+b-c-n}\; {}_2F_1(a-n, b, c; y) = \qquad /1,2/$$

$$= \frac{d^n}{dy^n}\left[y^{c-a+n-1}(1-y)^{a+b-c}\; {}_2F_1(a, b, c; y)\right],$$

ahol a $(d)_n$ jelölés a következőt jelenti:

$$(d)_n = \frac{\Gamma(d+n)}{\Gamma(d)} \qquad /1,3/$$

Legyen most

$$\left.\begin{aligned} a &= 0 \\ b &= 2l_n + 2s + n \\ c &= 2l_n + 1 \end{aligned}\right\} \qquad /1,4/$$

/1,2/ és /1,4/ -t felhasználva /1,6/ így írható:

$$r_n = -\frac{r_o^2}{\beta^2 N_n (c)_n} \int_o^1 \ln y \left(\frac{1}{y}-1\right) {}_2F_1(\ldots)\, \frac{d^n}{dy^n}\left[y^{2l_n+n}(1-y)^{2s+n-1}\right] dy \qquad /1,5/$$

A hipergeometriai függvény argumentumát nem írjuk ki a következőkben, mert nem változik. /1,5/-t n-szer parciálisan integrálva:

$$r_n = \frac{(-1)^{n-1} r_o^2}{\beta^2 N_n (c)_n} \int_o^1 y^{2l_n+n}(1-y)^{2s+n-1}\, \frac{d^n}{dy^n}\left[\ln y \left(\frac{1}{y}-1\right) {}_2F_1(\ldots)\right] dy\,. \qquad /1,6/$$

A Leibnitz-féle differenciálási szabályt alkalmazva és néhány jelölést bevezetve

$$r_n = \frac{r_o^2}{\beta^2 N_n}\,(A + B + C), \qquad \text{ahol} \qquad /1,7/$$

$$A = \frac{(-1)^{n-1}}{(c)_n} \int_o^1 y^{2l_n+n}(1-y)^{2s+n-1} \ln y\, \frac{d^n}{dy^n}\left[\left(\frac{1}{y}-1\right) {}_2F_1(\ldots)\right] dy\,, \qquad /1,8/$$

$$B = \frac{(-1)^{n-1}}{(c)_n} \int_0^1 y^{2l_n+n} (1-y)^{2s+n-1} \sum_{j=1}^{n} \binom{n}{j} (-1)^{j-1} \frac{(j-1)!}{y^j} \frac{d^{n-j}}{dy^{n-j}} \left[\frac{1}{y} \, {}_2F_1(\cdots) \right] dy \qquad /1,9/$$

$$C = \frac{(-1)^{n-1}}{(c)_n} \int_0^1 y^{2l_n+n} (1-y)^{2s+n-1} \sum_{j=1}^{n} \binom{n}{j} (-1)^{j} \frac{(j-1)!}{y^j} \frac{d^{n-j}}{dy^{n-j}} \left[{}_2F_1(\cdots) \right] dy. \qquad /1,10/$$

A hipergeometriai függvény sorfejtését felhasználva az integrálok kiszámithatók és a következőket kapjuk:

$$A = \frac{n!\,\Gamma(2l_n)\,\Gamma(2l_n+1)\,\Gamma(2s+n)}{\Gamma(2l_n+n+1)\,\Gamma(2l_n+2s+n)} \left\{ \psi(2l_n+2s+n) - \psi(2l_n) - \right.$$
$$\left. - \frac{l_n}{l_n+s+n} \left[\psi(2l_n+2s+2n+1) - \psi(2l_n+n+1) \right] \right\}, \qquad /1,11/$$

$$B = \frac{n!\,\Gamma(2l_n)\,\Gamma(2l_n+1)\,\Gamma(2s+n)}{\Gamma(2l_n+n+1)\,\Gamma(2l_n+2s+n)} \left[\psi(2l_n+n+1) - \psi(2l_n+1) \right], \qquad /1,12/$$

$$C = \frac{n!\,\Gamma(2l_n)\,\Gamma(2l_n+1)\,\Gamma(2s+n)}{\Gamma(2l_n+n+1)\,\Gamma(2l_n+2s+n)} \cdot \frac{l_n}{l_n+n+s} \left[\psi(2l_n+2s+n) - \right.$$
$$\left. - \psi(2l_n+2s+2n) \right] \qquad /1,13/$$

ahol a ψ függvény a Γ függvénnyel az ismert kapcsolatban áll:

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \left[\ln \Gamma(x) \right]. \qquad /1,14/$$

A norma értékét /16/-ból behelyettesitve az átlagtávolságra a következő kifejezést kapjuk:

$$r_n = \frac{r_0}{\beta} \left\{ \frac{l_n+s+n}{s+n} \left[\psi(2l_n+2s+n) - \psi(2l_n) + \psi(2l_n+n+1) - \right. \right.$$
$$\left. - \psi(2l_n+1) \right] - \frac{l_n}{s+n} \left[\psi(2l_n+2s+2n+1) - \psi(2l_n+n+1) + \right. \qquad /1,15/$$
$$\left. \left. + \psi(2l_n+2s+2n) - \psi(2l_n+2s+n) \right] \right\}.$$

Az átlagtávolság exakt kifejezése nem használható fel a további számitásoknál, igy közelitést fogunk alkalmazni. Feltételezzük, hogy r_n sorbafejthető n hatványai szerint és megelégszünk a sorfejtés első két tagjával.

$$r_n = \sum_{j=0}^{\infty} q_j n^j, \qquad \text{ahol} \qquad q_j = \frac{1}{j!} \left(\frac{\partial^j r_n}{\partial n^j} \right)_{n=0} \qquad /1,16/$$

Könnyen belátható, hogy $n \ll N$ esetén a sorfejtés konvergens és q_j $1/s^j$ és magasabbrendü kifejezésekkel arányos, igy az általunk alkalmazott közelités

az $1/s^2$ és magasabbrendü tagok elhanyagolását jelenti. Az /1,15/ kifejezésből /1,16/ alapján q_0 és q_1 közvetlenül meghatározható felhasználva a ψ függvény sorfejtését és a /18/, /19/, /20/ összefüggéseket. Az $1/s^2$ és magasabbrendü tagokat következetesen elhagyva:

$$q_0 = \frac{r_0}{\beta}\left[\ln(1+e^{\beta}) + \frac{e^{\beta}}{2}\,\frac{1+2e^{-\beta}}{2s(1+e^{-\beta})}\right], \qquad /1,17/$$

$$q_1 = \frac{3r_0 e^{\beta}}{2\beta s}\,\frac{1+2e^{-\beta}}{1+e^{-\beta}}. \qquad /1,18/$$

/1,17/ és /1,16/ -t /1,16/ -ba helyettesitve és felhasználva a /4/ összefüggést:

$$r_n = r_M + \frac{3r_0 e^{\beta}}{2\beta s}\cdot\frac{e^{\beta}+2}{e^{\beta}+1}\left(n+\frac{1}{6}\right). \qquad /1,19/$$

2. Függelék

Kiszámitjuk az állapotösszeget magas hőmérséklet esetén az Euler-féle összegképlet segitségével [32] :

$$\sum_{n=0}^{N}\varphi(n) = \int_0^N \varphi(y)\,dy - \left[\varrho(N)\varphi(N) - \varrho(0)\varphi(0)\right] + \int_0^N \varrho(y)\varphi'(y)\,dy, \qquad /2,1/$$

ahol

$$\varrho(y) = y - [y] - \frac{1}{2}, \qquad /2,2/$$

amelyben a szögletes zárójel y egész részét jelenti. Esetünkben

$$\varphi(y) = e^{-\frac{\omega_1}{kT}y + \frac{\omega_2}{kT}y^2}, \qquad /2,3/$$

tehát az állapotösszeg:

$$Z = \int_0^N e^{-\frac{\omega_1}{kT}y + \frac{\omega_2}{kT}y^2}\,dy + M, \qquad \text{ahol} \qquad /2,4/$$

$$|M| \leq 1 - e^{-\frac{\omega_1}{kT}N + \frac{\omega_2}{kT}} < 1, \qquad /2,5/$$

mert a kitevő minden szóbajövő n, tehát N értékére is negativ. A főtagról látni fogjuk, hogy $\frac{kT}{\omega_1}$ nagyságrendü, de akkor magas hőmérsékleten /37/ és /38/ alapján:

$$\frac{kT}{\omega_1} = \frac{T}{T_0} >> 1, \qquad /2,6/$$

tehát a maradéktag elhanyagolható.

A /2,4/ alatt felirt integrál kiszámitása céljából vezessük be a következő helyettesitést:

$$\sqrt{\frac{\omega_2}{kT}}\left(y - \frac{\omega_1}{2\omega_2}\right) = u . \qquad /2,7/$$

Ekkor az állapotösszeg:

$$Z = e^{-\frac{\omega_1^2}{4\omega_2 kT}} \sqrt{\frac{kT}{\omega_2}} \int_{-\sqrt{\frac{\omega_1^2}{4\omega_2 kT}}}^{\sqrt{\frac{\omega_2}{kT}}\left(N - \frac{\omega_1}{2\omega_2}\right)} e^{u^2}\, du , \qquad /2,8/$$

de /30/ és /27/ alapján $\left(N - \frac{\omega_1}{2\omega_2}\right) \sim 0$, igy

$$Z = e^{-\frac{\omega_1^2}{4\omega_2 kT}} \sqrt{\frac{kT}{\omega_2}} \int_0^{\sqrt{\frac{\omega_1^2}{4\omega_2 kT}}} e^{u^2}\, du . \qquad /2,9/$$

Megjegyezzük itt, hogy két nagy szám N és $\frac{\omega_1}{2\omega_2}$ különbségének közelitése sokszor hibára vezethet, ezért gondosabb becslést is végeztünk, de a felirt eredmény változatlan. Használjuk fel a következő aszimptotikus sorfejtést [33] :

$$\int_0^z e^{u^2}\, du = \frac{e^{z^2}}{2z}\left[1 + \frac{1}{2z^2} + O\left(\frac{1}{z^4}\right)\right] \qquad /2,10/$$

Esetünkben /30, /27/ és /35/ összefüggések alapján:

$$z^2 = \frac{\omega_1^2}{4\omega_2 kT} = \frac{3}{2}\,\frac{T_k}{T} > 1, \quad \text{ha} \quad T \leq T_k \qquad /2,11/$$

A továbbiakban az állapotösszeget csak a hőmérséklet négyzetes tagjáig bezárólag kivánjuk meghatározni, ami a gyakorlati esetekben ($T_{olvadáspont} < 0{,}1 T_k$) kielégitő közelités. A /2,10/ aszimptotikus sorfejtést /2,9/-re alkalmazva:

$$Z_m = \frac{kT}{\omega_1}\left(1 + \frac{2\omega_2 kT}{\omega_1^2}\right). \qquad /2,12/$$

KFKI Közlemények 7.évf.5.szám, 1959.

A RENDEZETT FÁZIS KIALAKULÁSÁNAK KINETIKÁJA Cu_3Au ÖTVÖZETBEN*

Irta: Nagy Elemér, Nagy Imre, és Tóth József
Szilárdtestfizikai Laboratórium

Összefoglalás

Cu_3Au ötvözet rendeződését elektromos ellenállás, valamint differenciális thermofeszültség mérésével követtük. A méréseket a rendeződési hőmérsékleten végeztük, közbenső lehütés nélkül. Megállapitottuk, hogy a differenciális thermofeszültség a rendeződésre vezető atomi helycserékről ad felvilágositást, mig az ellenállás változására a fentin kivül az ellenfázisu tartományok folyamatos kiküszöbölődése is hatással van.

Bevezetés

Kondenzált fázisok közti átalakulások kinetikájának vizsgálata általában rendkivül nehéz kisérleti és elméleti feladatot jelent. Bizonyosnak tekinthetjük, hogy kisérleti szempontból egyik legegyszerübben vizsgálható, elméletileg is közelitőleg tárgyalható a rendezetlen-rendezett átalakulás. A könnyebbség abban nyilvánul meg, hogy az átalakulás folyamata alatt a kristályszerkezet egyáltalán nem, az elemi cella mérete is csak elhanyagolhatóan változik. A rendeződés folyamata egyedül abból áll, hogy a rendezetlen állapotban statisztikusan elosztott különböző fajtáju atomok a rendezett állapotban az elemi cella egyes jól meghatározott rácspontjaira vándorolnak. Világos tehát, hogy egy ilyen folyamat kinetikája egyben felvilagositást ad az atomok helycseréjének folyamatáról is.

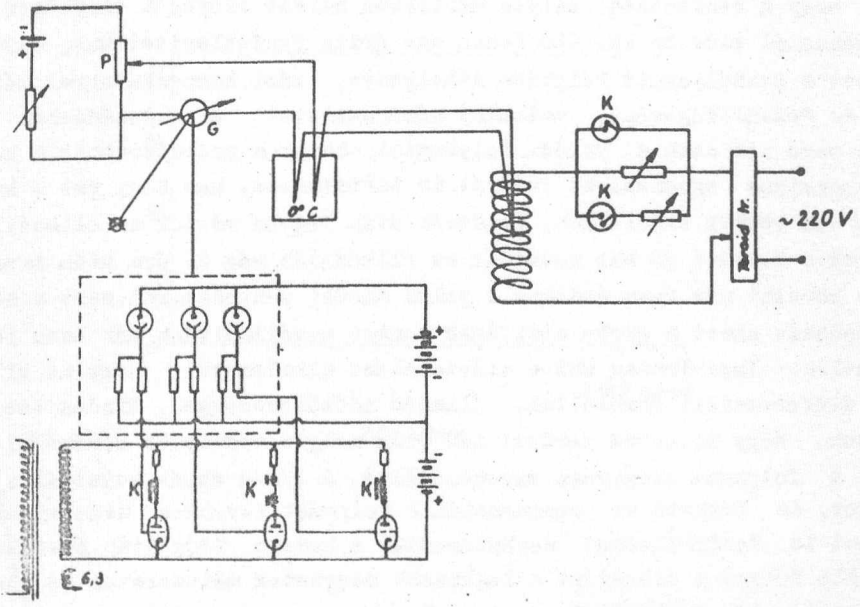
Kisérleti módszer

A vizsgálatokat Cu_3Au ötvözettel végeztük, tekintettel arra, hogy ennek nagyon bő irodalma van, a folyamat viszonylag egyszerü is, ugy, hogy reméltük, hogy továbbfejlesztett mérési módszerek és nagyobb mérési pontosságrévén egyes feltételezett folyamatok valóban végbemeneteléről egyértelmüen fogunk tudni dönteni. A méréseket állandó hőmérsékleten végeztük, a Curie-pont alatt, közbenső lehülés nélkül. Ezzel kivántuk az állandó lehütés-felmelegedés közben esetlegesen fellépő bizonytalanságokat /idő és belső feszültség tekintetében/ kiküszöbölni. Ez természetesen azt igényelte, hogy a hőmérsékletet a rendezés folyama alatt /kb. 30 óráig/ pontosabban kellett tartani, mint a szokásos vizsgálatoknál, mert a hőmérséklet változása nemcsak a rendeződés kinetikáját változtatja meg, hanem a rendeződés indikálására használt transzport-tulajdonság értékét is.

---

* 1959. szeptember hóban a szilárdtestfizikai kollokviumon elhangzott előadás.

A drótalaku próbatestet csillámállványra szereltük /kb. 1 m hosszut, olyan elrendezéssel, mint egy szénszálas izzólámpa fonala/, ivhegesztéssel két platina és két Pt-Rh kivezetéssel láttuk el. Üvegburába forrasztottuk, amit kimelegitès után 300 mm Ar-nal töltöttünk meg. Ezen a próbatesten tehát áramot, potenciálkülönbséget, valamint hőmérsékletet tudtunk mérni. A hőkezelésre a próbatestet csőkályhába helyeztük, melynek hőmérsékletét az 1. ábra elrendezésében szabályoztuk. Egy nagy kapacitásu akkumulátor feszültségét



1. ábra

ugy osztottuk le, hogy kb. azonos legyen a kályhában lévő thermoelem feszültségével.Ezt a két feszültséget szembekaposoltuk.0-indikátorként M 25/3 galvanométert használtunk /érzékenység 10 mm/mikrovolt/.A galvanométer fénymutatója előtt három fotocellát helyeztünk el, melyek egy-egy thyratront működtettek, a thyratron árama két kétállásu kapcsoló tekercsein átfolyva, három különböző áram beállitását tette lehetővé, egy minimális, közepes és egy maximális áramot.A szabályozó optimálisan akkor működik, amikor a kályha már elég sokáig volt előmelegitve, és a középáram kb. a kályha tényleges hőmérsékletének megfelelő egyensulyi fütőárammal egyenlő. Ilyen esetekben kb. 30 óráig $\pm$ 0,1 C^{o}-nál pontosabban tudtuk a hőmérsékletet tartani.

Számos különböző konstrukciójú próbatesten végeztünk méréseket,melyek egymással egyező eredményt adtak. Az itt bemutatásra kerülő eredményeket egyetlen próbatesten nyertük, abból a célból, hogy összetétel-változások hatásától megszabaduljunk. Az ötvözet elkészitésénél a stoichiometriai arányban bemért összetevőket megolvasztottuk, többször átolvasztottuk, majd hidegen lehúztuk 0,2 mm átmérőre. Ezután 700 fokon kb. 10 óráig hidrogénben tempe-

ráltuk. Az igy előállitott huzalt szereltük be a próbatestbe. A próbatest analitikailag megállapitott összetétele: Cu: 74,06, Au: 25.94. Ugy látszik, hogy a homogenizálás még nem volt tökéletes, és valószinüleg ez az eltérés okozta, hogy a Curie-pont az irodalmi értéknél alacsonyabb.

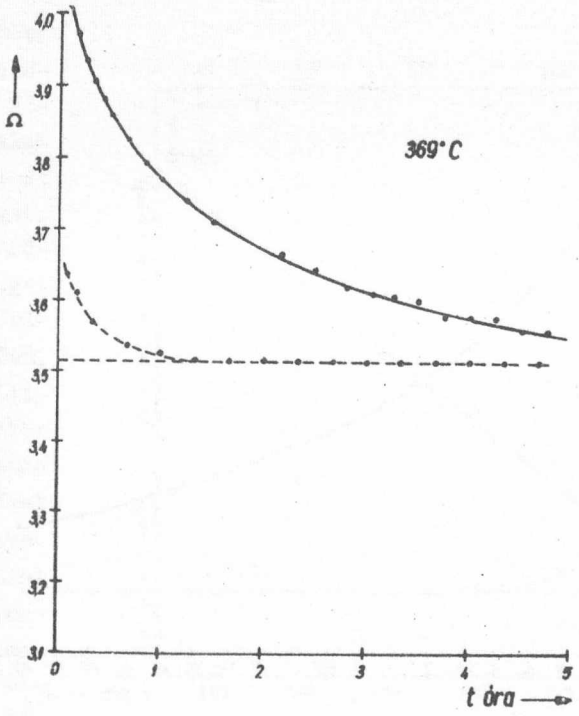
Kisérleti eredmények

Mértük a próbatest ellenállását rendezett és rendezetlen állapotban egyaránt, mindegyik esetben olvadó jég hőmérsékletén. Ezzel győződtünk meg arról, hogy a rendeződés milyen mértékben haladt előre. A tényleges kinetikai mérésnél először kb. 420 fokon egy óráig rendetlenitettünk, majd a próbatestet a szabályozott kályhába áthelyezve, kézi kompenzátorral mértünk áramot és feszültségesést, valamint hőmérsékletet. A rendeződésben az első kb. 5 perc nem csak a valódi folyamatot, hanem a próbadarabnak a kályhával való thermikus egyensulyba jutását is tartalmazza, ugy hogy ezt a kiértékelésben nem vettük számitásba. Rendezés után jégben mértük az ellenállást. Amint azt a felvett görbék mutatják az ellenállás még 25 óra után is változik. Tovább követni nem igen érdemes a jelen mérési pontossággal, mert a hőmérsékletingadozás miatt a görbe alakjának pontos megállapitása már ezen időn túl lehetetlen. Empirikusan azt a kiértékelést alkalmaztuk, hogy az ellenállás első differenciáit ábrázoltuk, állandó időkülönbséggel. Minden esetben azt találtuk, hogy bizonyos kezdeti idő után mely alacsonyabb hőmérsékleten nagyobb, a folyamat szigoruan exponenciális. A 2/a-d ábrák mutatják a felvett görbéket, és látható az exponenciális folyamat levonása után visszamaradt folyamat is. Kontrollképen meghatároztuk a hosszu idők után érvényes exponenciális folyamat állandóit a legkisebb négyzetek módszerével is. Azt, hogy milyen idő után próbáljunk meg egyetlen exponenciálist alkalmazni, azt egyrészt ezen tájékozódás, másrészt a thermofeszültségmérés adataiból vettük.

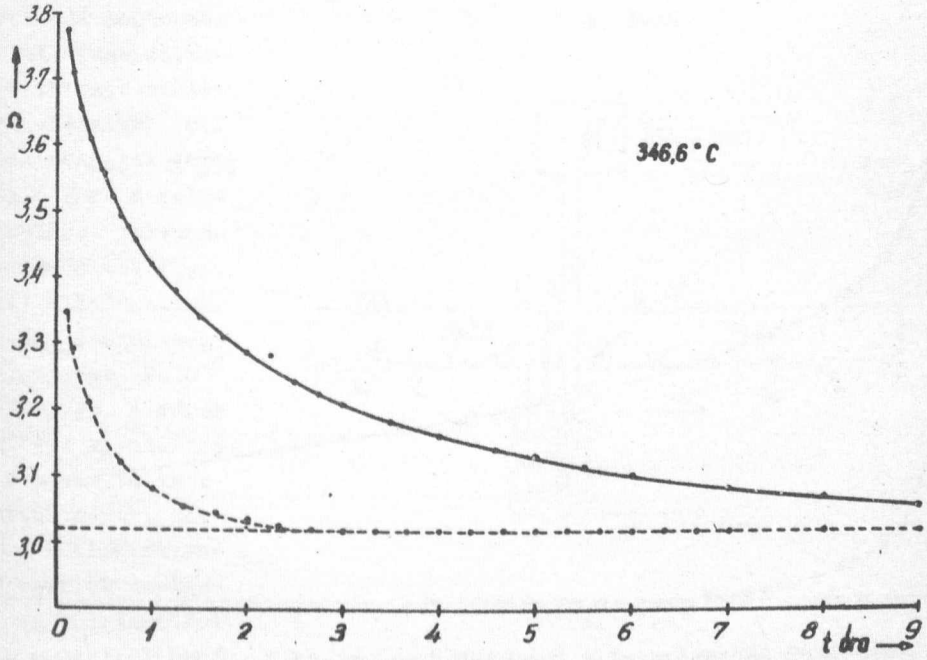
A 3. ábra mutatja az igy meghatározott időállandót, mint a hőmérséklet függvényét. Egészen jól látható, hogy az időállandó a hőmérséklettől exponenciálisan függ. A talált aktiválási energia 0,81 eV.

Nézetünk szerint azonban egyedül az ellenállás időfüggése még nem adhat olyan képet a rendeződés kinetikájáról, amit fizikailag értelmezni lehetne. Tekintve, hogy Komar és munkatársai [1] vizsgálatai azt mutatták, hogy rendezett és rendezetlen minta Hall-együtthatójának előjele különböző, világos, hogy egysávmodell alapján az ellenállást értelmezni helytelen eljárás lenne. Éppen ezért bonyolultabban mérhető, de az elektronsávszerkezetre jobban felvilágositást nyujtó effektusok mérését is elhatároztuk, melyek közül ezidáig a differenciális thermofeszültség mérése járt sikerrel.

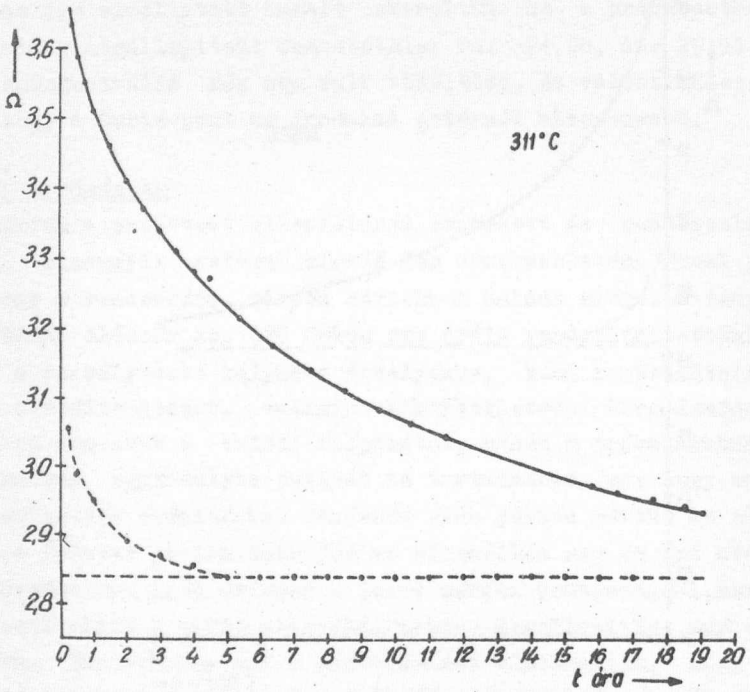
Ugyanabban a kályhában egy csillámlemezre az ötvözetből egy szálat és egy Pt-Rh szálat helyeztünk el. Pt, ill. Pt-Rh kivezetésekkel láttuk el és ugyanugy, mint az ellenállásmérő próbatestet, üvegburába forrasztottuk. Mér-



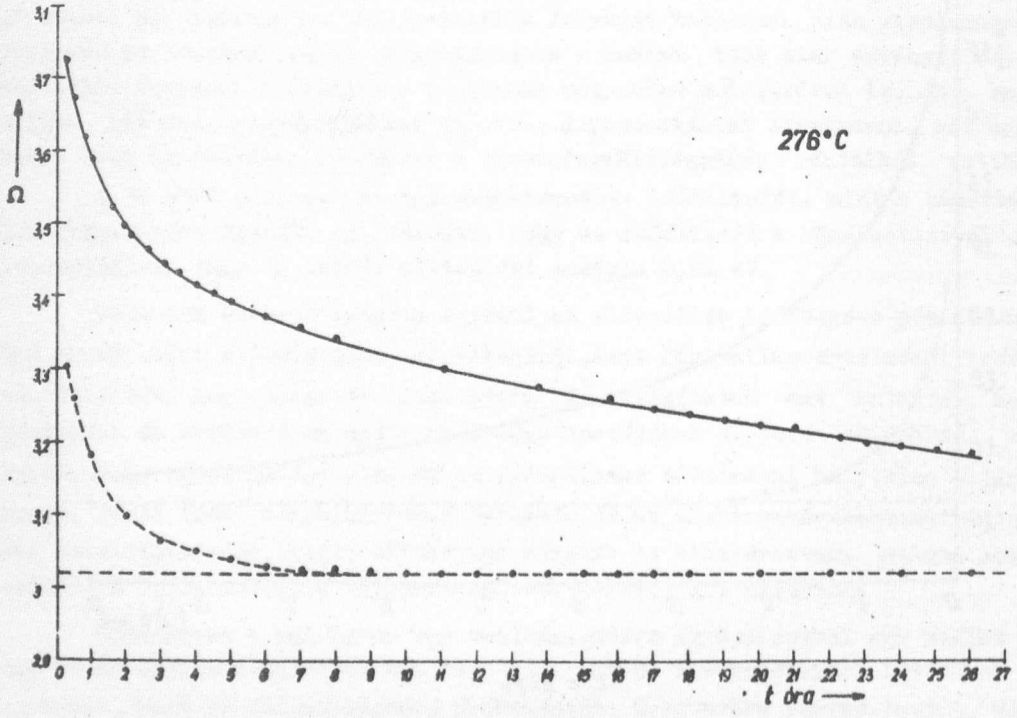
2/a ábra



2/b ábra

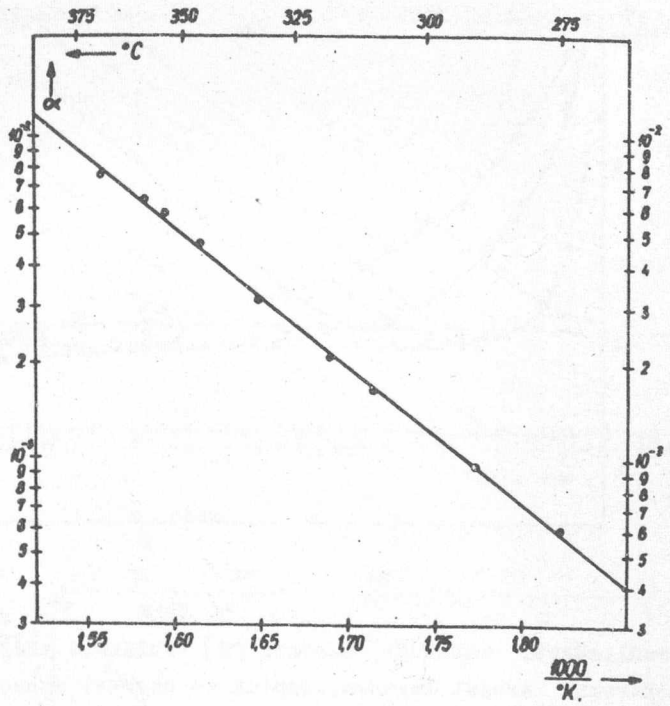


2/c ábra

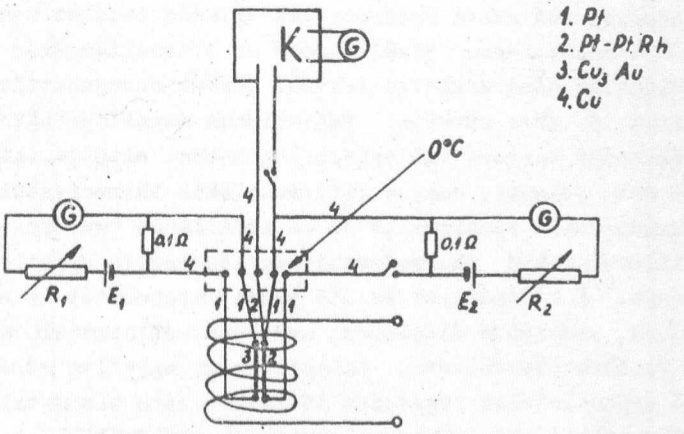


2/d ábra

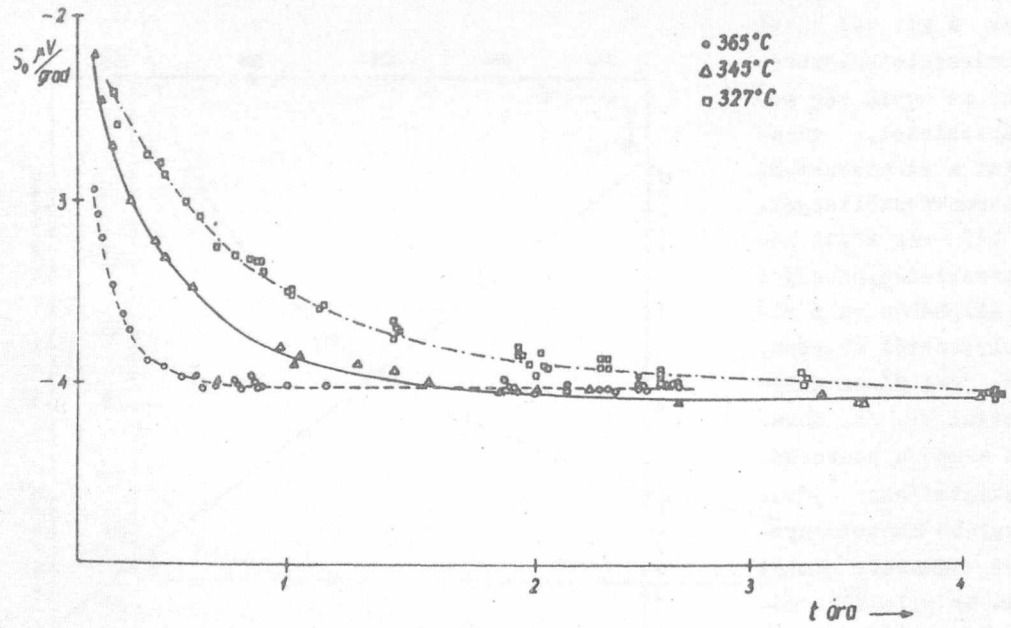
tük a két vég közti hőmérsékletkülönbséget,az egyik vég hőmérsékletét, valamint a Pt-ötvözet-Pt thermo-feszültségét. A két vég közti hőmérsékletkülönbséget a kályhában való elhelyezéstől függően, kb. 2-4 C^{o}-ra állitottuk be. /4. ábra/ Ez a mérés pontosság tekintetében jóval nagyobb követelményeket támaszt, mint pl. az ellenállásmérés. Ha kb. 1% pontosságot akarunk elérni, ahhoz a hőmérsékletkülönbséget 0,02C^{o}-nál pontosabban kell ismerni,azaz a thermofeszültséget legalább 0,1 μV pontossággal kell mérni. Erre a célra fotocellás galvanométer erősitőt /Typ. Φ 16/ alkalmaztunk, melynek feszültségérzékenysége 2.10^{-8} Volt/osztás. A mérés tényleges kivitelezése, a parazita thermofeszültségek,valamint rádiófrekvenciás zavarok esetleges egyenirányitása miatt rendkivül nehéz. A thermofeszültségmérő elvezetésekhez Cu-drótot forrasztottunk, a forrasztási helyeket közös thermosztátba helyeztük, a galvanométer rézbevezetéseit a rézdrótokhoz megfelelően illesztettük. A mérést magát kompenzálással végeztük az előbb emlitett galvanométert használva nullindikátornak. Igy meghatároztuk az ötvözet-Pt közti egy fokra eső thermo-



3. ábra



4. ábra



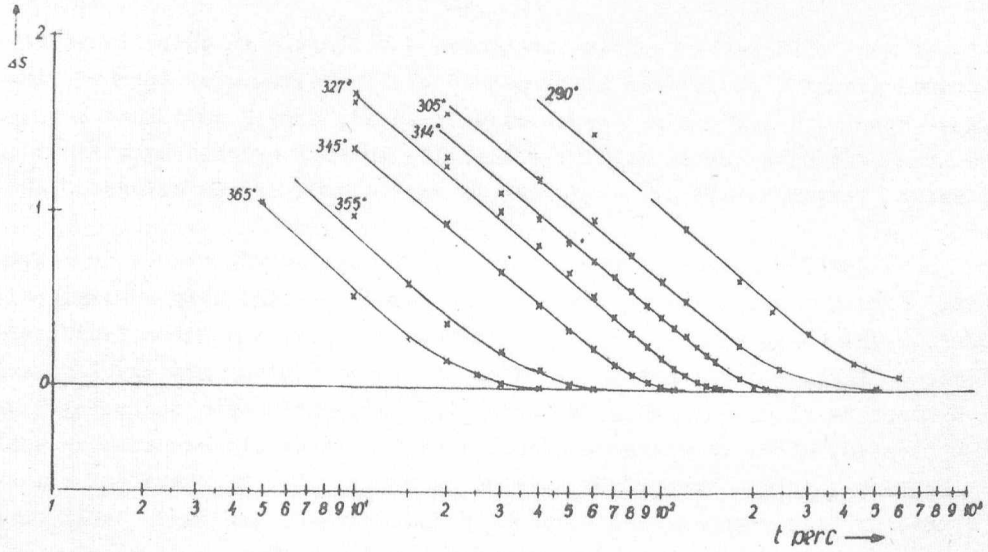
5. ábra

feszültséget, amelyből Cussack [2] táblázata alapján a Pt abszolut thermoelektromos erejét levonva, kaptuk az ötvözet abszolut thermoelektromos erejét.

Jellegzetes mérési eredményeket mutat az 5. ábra. Látható, hogy az ötvözet differenciális thermofeszültsége kezdetben gyorsan változik, majd bizonyos idő mulva határozottan állandó értéket vesz fel. A mérési pontosság itt természetesen jóval kisebb az ellenállásmérés pontosságánál, kb. 1%. A különböző hőmérsékleten felvett görbék szerkezetileg nagyon hasonlók, amint azt a 6. ábra mutatja. Empirikusan megállapitható, hogy a különböző hőmérséklethez tartozó változások log t-ben eltolva, azonos menetü görbét adnak. Ez azt jelenti, hogy a differenciális thermofeszültség hőmérséklet és időfüggésében a hőmérséklet és az időállandó összefüggésben vannak, ugy, hogy a differenciális thermofeszültség lényegében egyetlen független változó függvénye. A hőmérséklet és idő közti kapcsolatot az egyes görbék fedésbe hozásához szükséges eltolásból meg lehet állapitani, az igy kapott összefüggést a 7. ábra szemlélteti. Látható, hogy egyetlen mérési ponttól eltekintve, ez jó exponenciális függésnek látszik; ezen bizonytalanság végleges tisztázása folyamatban van, azonban a kisérleti körülmények nem engednek meg túl nagy pontosságot. Provizórikusan fogadjuk el tehát az exponenciális függést, melynek 1,26 eV aktiválási energia felel meg.

Diszkusszió

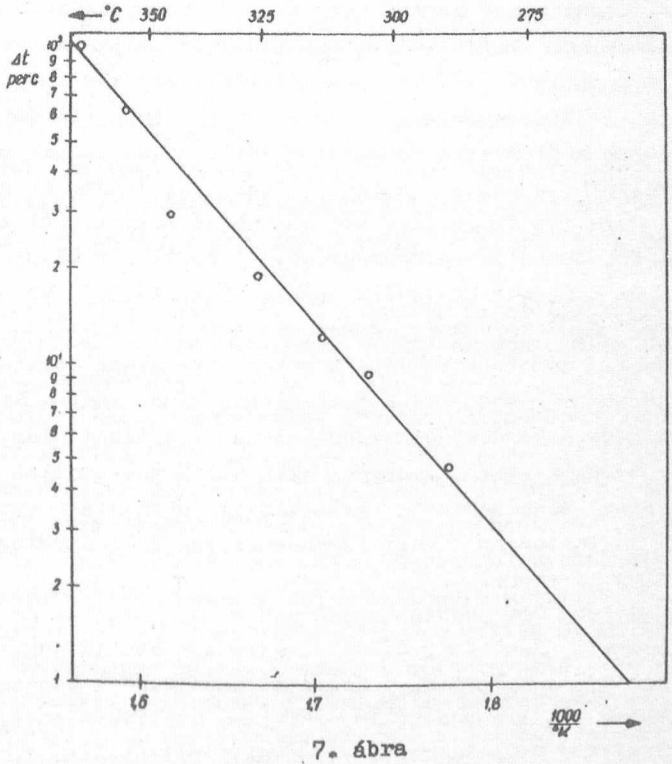
Az itt bemutatott mérési eredményekből több következtetést vonhatunk le. A leglényegesebb megállapitás nyilvánvalóan az, hogy a differenciális



6. ábra

thermofeszültség, valamint a fajlagos ellenállás időfüggése azonos hőmérsékleten is lényegesen különböző. Előbbi bizonyos véges idő alatt / fél órától 15 óráig/ eléri egyensulyi értékét, utóbbi viszont 25 - 30 óra után is változik. Ezen tény értelmezése eléggé kézenfekvő. A differenciális thermofeszültség általános kifejezése akár többsávvezetés esetére is a következő:

$$P = const. \left(\frac{\partial \log \sigma}{\partial E} \right)_{E=\zeta}$$



7. ábra

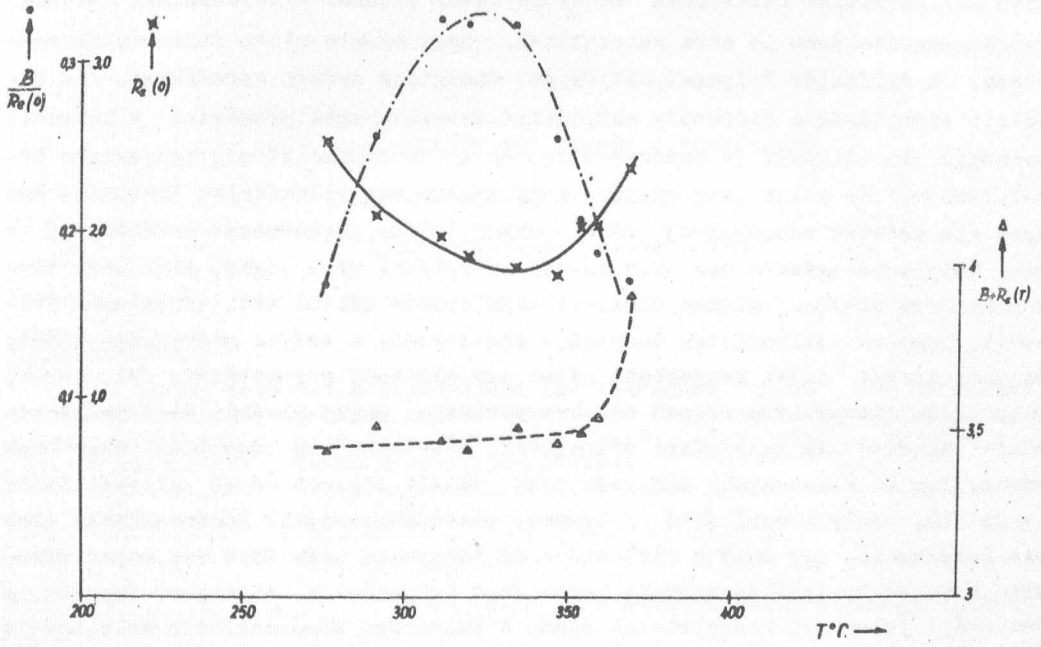
Látható, hogy ha egyedül a relaxációs idő változik, de úgy, hogy a relaxációs idő energiafüggése emellett változatlan,akkor ez a thermofeszültségben nem jelentkezik. Ezzel azt kivánjuk mondani, hogy az a változás, ami ellenállásban még észlelhető, de thermofeszültségben már nem, a szórócentrumok száma csökkenésé-

nek felel meg változatlan szórási mechanizmus mellett. A thermofeszültség változása viszont a rendeződés alatt változó elektronstrukturát tükrözi vissza.Ezek szerint a legtermészetesebb magyarázat az, hogy P változása a tényleges rendeződésnek felel meg, az ellenállás további csökkenése viszont az antifázisu tartományhatárok mozgásának és ezek okozta szórás kiküszöbölődésének.

A rendeződés hatása természetesen az ellenállás változáson is észrevehető. Látjuk, hogy az exponenciális folyamat levonása után visszamaradt kezdő folyamat elég pontosan ugyanakkora ideig tart,mint a thermofeszültség változása. Elvileg meg lehetne próbálni az azonositásban még egy lépéssel tovább menni és pl.az ellenállásváltozás első folyamatát és a thermofeszültség változását közös törvényszerüséggel leirni. Ez az eljárás azonban több oknál fogva nem nagyon meggyőző. Az első ok mérési ill. kiértékelési jellegü: a levonás után visszamaradt folyamat pontossága már nem nagy. Különösen az érzékeny részeknél /vége felé/rendkivüli mértékben függ az egyensulyi ellenállás és az exponenciális folyamat felvett értékeitől. Másodsorban semmi biztositékunk nincs arra, hogy ez az exponenciális folyamat t=o-ig extrapolálható volna. Valószinüleg ez diffuziós folyamat, az észlelt exponenciális csak a legkisebb időállandó-sajátértékének felel meg, tehát elméletileg is eltérést kellene a folyamat kezdetére várnunk. Pontosabbat nem tudunk mondani, hiszen a diffuziós folyamat sajátérték-spektruma pl. a tartomány alakjától, valamint a felvett határfeltételektől erősen függ.

Hogy itt fizikailag két különböző folyamatról van szó, azt mutatja az aktiválási energiák különbsége is, 1,26 ill. 0,81 eV. Nagyon nehéz lenne ezekhez biztos interpretációt füzni, tekintettel az előbbi adat bizonytalan voltára. Tény az, hogy nagyon sok spekulativ jellegü megállapitást lehetne itt tenni. Nézetünk szerint azonban erre nincs szükség, mivel további thermofeszültségmérések, és a folyamatban lévő Hall-állandó mérések rendeződés közben ezt a kérdést bizonyosan hamar tisztázni fogják. A 0,81 eV-os aktiválási energia vakanciamozgási aktiválási energiákkal jó egyezésben van.Természetesen ezen vakancia keletkezési aktiválási energiája nagyon kicsiny, hiszen a tartomány- vagy szemcsehatáron valószinüleg a szükséges vakanciák már jelen is vannak.

Nagyon sok problémát vet fel a 8. ábra. Ha az ellenállás változásban visszamaradt első folyamatot megnézzük, azt látjuk, hogy a legmagasabb hőmérséklettől eltekintve, a folyamat amplitudója azonos. Ha ezt az amplitudót hozzáadjuk az exponenciális folyamat amplitudójához, valamint a rendezési hőmérsékleten meghatározott egyensulyi ellenálláshoz, nagyon jól visszakapjuk a rendezetlen anyag ellenállásának hőmérsékletfüggését. Az első folyamat hőmérsékletfüggésére akkor az látszik egyszerü magyarázatnak, hogy magas hőmérsékleten - tehát viszonylag kevéssé rendezett anyagnál - a teljesen rendezetlen és egyensulyi rendállapot egy elektron szabad uthosszon belül nem lényegesen különbözik, ugy hogy nagymértékü, szóráscsökkenés nem várható.



8. ábra

Alacsonyabb hőmérséklethez tartozó egyensulyi rendnél viszont már a rend oly nagy, hogy az attól való eltérések viszonylag jelentéktelen szóráscsökkenést tudnak csak okozni,úgy hogy a mérés pontosságán belül már alig vehetők észre.

A 8. ábra másik két görbéje veti fel a nehezebb problémát. Tisztán látható, hogy az egyensulyi ellenállás minimuma, és az exponenciális folyamat amplitudójának maximuma egybeesik.

A magas hőmérsékleti oldal a könnyebben érthető. Alacsonyabb hőmérséklethez nagyobb egyensulyi rend tartozik, tehát az exponenciális folyamattal elért ellenálláscsökkenésnek nagyobbnak kell lennie, valamint az egyensulyi rendállapotban levő anyag végső ellenállásának kisebbnek kell lennie. Mi van azonban az extrémum másik oldalán? Az eddigi meggondolásokból ezt magyarázni reménytelen. Kézenfekvőnek látszik ezt a nukleáció megnyilvánulásának tekinteni, azzal, hogy az eddigiekben semmimódon nem vettük számitásba a keletkezett antifázisu tartományok számát, azaz a tartományban levő anyag mennyiségét. /A Cu_3Au ötvözetben rendeződés közben az Au atomok négy ekvivalens alrácsra gyülhetnek össze. A tapasztalat szerint a kristályszemcse különböző pontjaiban meginduló rendeződés valóban ilyen. Ezen, már rendezett részt nevezzük tartománynak /domain/. A rendeződés közben ezen tartományok növekednek, végre egymással érintkeznek. Ha két különböző alrácsra rendezett tartomány növekedés közben összeér,akkor egy ellenfázisu tartományhatár alakul ki./ Azt tételeztük fel, hogy az ellenfázisu tartománynak diffuzióval történő megszünése végig ugyanazon aktiválási energiával megy végbe, és a

tartományok kivétel nélkül ugyanazon alakuak és nagyságuak. Világos, hogy ezen hallgatólagos feltevések mennyire távol állanak a valóságtól. Modellszerü meggondolások is arra vezethetnek, hogy azonos alaku tartományok esetében, a diffuziós folyamat aktiválási energiája erősen méretfüggő. /Az elméleti számitások a diffuziós aktiválási energia meghatározására a harmadik szomszéd elmozditását is számbaveszik, és ez az eredményt még lényegesen befolyásolja./ Ez alatt azt értjük, hogy amikor egy ellenfázisu tartomány már igen kis méretre zsugorodott össze, akkor teljes megszünését eredményező atomi helycsere egészen más aktiválási energiával megy végbe, mint nagy tartományméret esetén. Minden elméleti megalapozás nélkül azt szeretnénk felvetni, hogy az ellenfázisu tartomány közvetlenül a teljes megszünése előtt, kezdeti alakja által megszabott módon egy alacsony szimmetriáju /pl. lemez, vagy pálca alaku/ kis méretü darabra csökken. Ennek további megszünése viszont egészen más aktiválási energiával, feltehetőleg nagyobbal megy csak végbe. Igy az alacsonyabb hőmérsékleten talált nagyobb végső ellenállásnak az az oka, hogy a nukleáció folyamata alatt alacsonyabb hőmérsékleten több mag keletkezik, úgy hogy a diffuzió első folyamata után több váz marad visszsza, a végső ellenállás nagyobb lesz. Ez a meggondolás számszerü formába is önthető, jelenlegi kisérleteink éppen a különböző hőmérsékletén keletkezett magok számának meghatározására irányulnak: Ugyanazon végső hőmérsékleten mért ellenállás az először keletkezett magok számától függ, úgy hogy kétlépéses hőkezeléssel erről a folyamatról kvantitativ képet lehet majd adni. Ez a meggondolás Burns és Quimby meggondolásaival teljes összhangban van.[3]

Végső konkluziónkat ebben szeretnénk összefoglalni: Nem szükséges a lehető legdurvább feltevések alapján felépiteni az elméletet, hanem - jóllehet jóval nehezebben mérhető - specifikusabb transzportegyütthatók mérésével az egyes atomi folyamatokat szét lehet választani és remélhető az is, hogy a nukleációs folyamatokra is felvilágositásokat tudunk kapni.

Irodalom

[1] Komar A., Szidorov S., J. Tech.Phys.USSR, 11, 711 /1941/

[2] Cussak N., Kendall P., Proc.Phys.Soc.72, 898 /1958

[3] Burns F.P., Quinaly S.L., Phys.Rev. 97, 1567 /1955/

KFKI Közlemények 7. évf. 5.szám, 1959.

NEUTRONOK LELASSULÁSI IDEJÉNEK SZÓRÁSÁRÓL

Irta: Pál Lénárd és Németh Géza

Szilárdtestfizikai Laboratórium

Összefoglalás

Jelen dolgozat a lelassulási idő átlagának $t_1(u)$ és szórásának $D(u)$ valószinüségszámitási módszerekkel való meghatározásával foglalkozik. A lelassulási idő relativ szórására a következő, nagy letargia-értékek mellett jó közelitést jelentő összefüggés adódott

$$\frac{D(u)}{t_1(u)} = \frac{\sqrt{t_2(u) - t_1^2(u)}}{t_1(u)} = \sqrt{\frac{\xi/2}{1 - \frac{2}{3}\,\frac{1-\alpha^{3/2}}{1-\alpha}} - 1}\left\{1 + \xi/2\,\frac{1+\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}}\,e^{-u/2} + \ldots\right\}$$

ahol $\xi = 1 + \frac{\alpha}{1-\alpha}\ln\alpha$ $\qquad \alpha = \left(\frac{M-1}{M+1}\right)^2$ /M a lassitő közeg atommagjainak tömege/.

I. Bevezetés

Neutronok lelassulási idejének azt az időt nevezik, amely a neutronok adott E_0 energiáról az E energiaszint alá történő lelassulásáig eltelik. Jelöljük ezt az időtartamot $\tau(E_0, E)$-vel. Mivel a lelassulási folyamat kifejezetten valószinüségi jellegü, a tulajdonképpeni feladat a $P\{\tau(E_0, E) < t\} = G(t, E_0, E)$ valószinüségi eloszlásfüggvény meghatározása. A $g(t, E_0, E) = \frac{\partial}{\partial t} G(t, E_0, E)$ valószinüségi sürüségfüggvényt meghatározó egyenletet Takács [1] megadta és igy könnyen megvizsgálhatjuk, milyen formulák adódnak a lelassulási idő átlagára és szórására különböző moderátorokban.

Tegyük fel az egyszerüség kedvéért, hogy a neutron végtelen kiterjedésü közegben mozog, amely azonos M tömegszámu atommagokból áll. Feltételezzük továbbá, hogy az abszorbeáló atommagok nincsenek jelen és, hogy szórási hatáskeresztmetszet nem függ a neutron energiájától. Vezessük be uj változóként az $u = \ln E_0/E$ mennyiséget. Legyen $P(t < \tau(u) < t + dt) = g(t, u)dt$ annak valószinüsége, hogy az u -nál nagyobb letargia eléréséhez szükséges lelassulási idő a $(t, t + dt)$ intervallumba esik.

A $g(t, u)$ meghatározására szolgáló egyenletet Takács [1] dolgozatában közölt (19) alatti egyenletből kisebb átalakitásokkal az alábbi formában irhatjuk fel:

$$\frac{\partial g(t,u)}{\partial t} = -\frac{v_0}{\lambda_s}\int_0^u e^{-u'/2}\left[1 - \int_0^{u-u'} w_s(u'')\,du''\right]\frac{\partial g(t,u')}{\partial u'}\,du' \qquad (1.1)$$

ahol λ_s a szórási szabaduthozz, v_o az $u = o$ letargiáju neutron sebessége és

$$w_s(u) = \begin{cases} \frac{1}{1-\alpha} e^{-u} & , \text{ ha } 0 \leq u \leq \ln 1/\alpha \\ 0 & , \text{ ha } u > \ln 1/\alpha \end{cases} \quad (1.2)$$

mig $$\alpha = \frac{(M-1)^2}{(M+1)^2} .$$

A továbbiakban meggondolásainkat az (1.1) alatti egyenletre alapozzuk.

II. A lelassulási idő átlagértékének meghatározása

Jelöljük a lelassulási idő átlagértékét $t_1(u)$ -val, azaz legyen

$$t_1(u) = \int_o^\infty t\, g(t, u)\, dt . \quad (2.1)$$

Ha $f(u)\,du$ az $(u, u+du)$ letargia-intervallumban bekövetkező ütközések átlagos száma, akkor

$$f(u)\,du = \frac{v_o}{\lambda_s} e^{-u/2}\, dt_1(u) , \quad (2.2)$$

mivel $dt_1(u)$ annak az időnek az átlagát jelenti, amit a neutron az $(u, u+du)$ letargia-intervallumban tölt. A (2.2)-ből a

$$t_1(u) = t_1(o) + \frac{\lambda_s}{v_o} \int_o^u f(u') e^{u'/2}\, du' \quad (2.3)$$

egyenlethez jutunk, ahol $t_1(o)$ annak az időnek az átlaga, ami alatt letargia növekedés nem következik be. Könnyen belátható, hogy

$$t_1(o) = \frac{\lambda_s}{v_o} . \quad (2.3)$$

A (2.3)-ban szereplő $f(u)$ függvény pontos alakjának meghatározásával a szerzők egyike egy korábbi dolgozatában [2] már foglalkozott. Azt találtuk, hogy

$$f(u) = \frac{\alpha}{1-\alpha} e^{\frac{\alpha}{1-\alpha}u} \left\{ \varphi_\beta\left(\frac{u}{\ln 1/\alpha}\right) - \alpha^{-\frac{1}{1-\alpha}} \varphi_\beta\left(\frac{u}{\ln 1/\alpha} - 1\right) \right\} . \quad (2.4)$$

ahol $\beta = \frac{\alpha}{1-\alpha}^{-\frac{1}{1-\alpha}} \ln 1/\alpha$, mig $\varphi_\beta(x)$ a

$$\frac{d\varphi_\beta(x)}{dx} = -\beta\, \varphi_\beta(x-1) \quad (2,4')$$

retardált differenciál-egyenlet megoldása.

Az elemi meggondolásokkal megalkotott (2.3) alatti kifejezés az (1.1) alatti egyenletből is egyszerüen származtatható.

Jelöljük $\vartheta_1(z)$ -vel a

$$\vartheta_1(z) = \int_o^\infty t_1(u)\, e^{-uz}\, du$$

Laplace-transzformáltat. Könnyen megmutathatjuk, hogy az (1.1)-ből $\vartheta_1(z)$ -re a következő kifejezés adódik

$$\vartheta_1(z) = \frac{\lambda_s}{v_o z} \frac{1}{1 - \omega(z - 1/2)} , \quad (2.5)$$

ahol

$$\omega(z) = \int_0^\infty e^{-uz}\, w_s(u)\, du . \qquad (2.5')$$

A (2.5) megforditásából a (2.3) alatti kifejezés adódik. Mivel $t_1(u)$ argumentumának monoton függvénye, a

$$\lim_{u\to+\infty} e^{-u/2}\, t_1(u) = \lim_{z\to 0} z\, \vartheta_1(z+1/2) \qquad (2.6)$$

tétel alapján $t_1(u)$-ra nagy letargia értékek mellett a

$$t_1(u) \sim \frac{2\lambda_s}{v_0 \xi}\, e^{u/2} - \frac{1+\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}}\,\frac{\lambda_s}{v_0} + O\left(e^{-\gamma_1 u}\right) \qquad (2.7)$$

$u \to +\infty \quad 0 < \gamma_1 \le 1/2$

aszimptotikus kifejezést származtatjuk, ahol

$$\xi = 1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} \ln \alpha , \qquad (2.7')$$

A (2.3) helyett az irodalomban [3] az u nagy értékei mellett jó közelitést jelentő, de főtagja kivételeivel a korrekt aszimptotikus formulával nem egyező

$$t_1(u) \sim \frac{2\lambda_s}{v_0 \xi}\left(e^{u/2} - 1\right) \qquad (2.7'')$$

$u \gg \ln 1/\alpha$

kifejezést idézik és érvényességét sajnálatos módon összekapcsolják a lassitás elméletének Fermi-féle tárgyalásához szükséges feltételekkel. A (2.7") alatti kifejezést tisztán protonokból álló lassitóra pontosnak tekinthetjük. Nagyobb atomsulyu magokból álló lassitóra csak nagy letargia-értékek esetében tekinthetjük főtagjában korrekt közelitésnek.

III. A lelassulási idő szórásának meghatározása

Mig a lelassulási idő átlagértékét az (1.1) alatti egyenlet nélkül is könnyen meghatározhatjuk, addig a

$$D^2(u) = t_2(u) - t_1^2(u) \qquad (3.1)$$

szórásnégyzetéhez szükséges $t_2(u) = \int_0^\infty t^2\, g(t,u)\, dt$ második momentumot közvetlen módszerekkel nehéz volna kiszámitani.

A

$$\vartheta_2(z) = \int_0^\infty t_2(u)\, e^{-uz}\, du$$

Laplace transzformáltra az (1.1) -ből a

$$\vartheta_2(z) = \frac{2}{z}\left(\frac{\lambda_s}{v_0}\right)^2 \frac{1}{[1-\omega(z-1/2)][1-\omega(z-1)]}$$

összefüggés adódik. Ismét felhasználva azt a körülményt, hogy $t_2(u)$ argumentumának monoton függvénye, a (2.6) -hoz hasonló tétel alapján $t_2(u)$ asszimptotikus sorának első tagjaira a következő kifejezést kapjuk:

$$t_2(u) \sim 2\left(\frac{\lambda_s}{v_0}\right)^2 \frac{1}{\xi}\,\frac{e^u}{1 - \frac{2}{3}\,\frac{1-\alpha^{3/2}}{1-\alpha}} - 4\left(\frac{\lambda_s}{v_0}\right)^2 \frac{1}{\xi}\,\frac{1+\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}}\, e^{u/2} -$$

$$-2\left(\frac{\lambda_s}{v_0}\right)^2 \frac{1+\sqrt{\alpha}}{(1-\sqrt{\alpha})(1+\frac{\ln\alpha}{1-\alpha})} + O\left(e^{-\gamma_2 u}\right) \qquad (3.4)$$

$$u \to \infty \qquad \gamma_2 > 0 \,.$$

A minket különösen érdeklő relativ szórásra pedig azt kapjuk, hogy

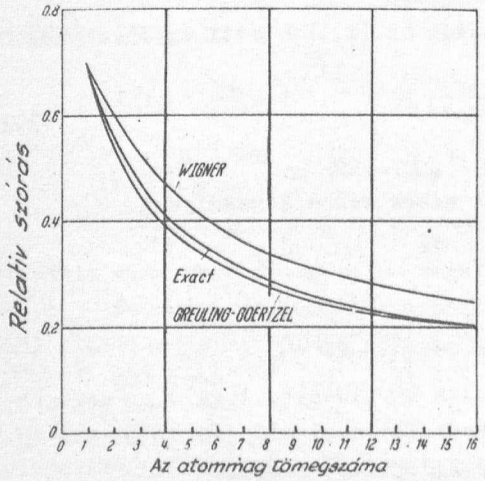
$$\frac{D(u)}{t_1(u)} \cong \sqrt{\frac{\xi/2}{1-\frac{2}{3}\frac{1-\alpha^{3/2}}{1-\alpha}} - 1} \left\{1 + \frac{\xi}{2}\,\frac{1+\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}}\, e^{-u/2} + \ldots\right\}. \qquad (3.5)$$

Az I.sz. táblázatban összeállitottuk a relativ szórás főtagjának értékeit különböző moderátorokra.

I. Táblázat

E l e m	Tömegszám M	Relativ szórás %-ban $D(\infty)/t_1(\infty)$
Hidrogén	1	70,7
Deutérium	2	55,3
Helium	4	40,0
Lithium	7	30,7
Beryllium	9	27,0
Szén	12	23,5
Oxigén	16	20,3
Uránium	238	7,0

Látható, hogy pl. hidrogén atomokból álló lassitó közegben a relativ szórás 70,7%, ami arra utal, hogy a lelassulási idő átlaga nem jellemzi megbizhatóan a folyamatot.



A lelassulási idő asszimptotikus relativ szórásának az atommagok tömegszámától való függése

A $w_s(u)$ függvényt közelitő függvényekkel helyettesithetjük. Célszerünek láttuk meghatározni a lelassulási diő relativ szórását a Wigner- és a Greuling-Goertzel-féle közelitő függvények segitségével. A II.sz. táblázatban összeállitottuk a relativ szórásra levezetett különböző kifejezéseket.

Az 1 sz. ábrán láthatjuk a lelassulási idő relativ-szórásának asszimptotikus kifejezésére különböző, közelitő $w_s(u)$ függvényekkel számolt értékek függését a lassitó közeg atommagjainak

II. Táblázat

$w_s(u)$		$t_1(u)$	$D(u)/t_1(u)$	$D(\infty)/t_1(\infty)$
Wigner	$\frac{e^{-u/\xi}}{\xi}$	$\frac{\lambda_s}{v_0} + \frac{2\lambda_s}{v_0\xi}(e^{u/2}-1)$	$\frac{\sqrt{2\xi - \xi(2-\xi)e^{-u}}}{2-(2-\xi)e^{-u/2}}$	$\sqrt{\xi/2}$
Greuling-Goertzel	$\frac{1}{\varepsilon^2\xi} e^{-\frac{u}{\varepsilon\xi}} + (1-\frac{1}{\varepsilon})\delta(u)$, $\varepsilon = \frac{1}{\xi} - \frac{\alpha \ln^2 \alpha}{2\xi(1-\alpha)}$	$\varepsilon\frac{\lambda_s}{v_0} + \frac{2\lambda_s}{v_0\xi}(e^{u/2}-1)$	$\frac{\sqrt{2\xi\varepsilon - \xi\varepsilon(2-\xi\varepsilon)e^{-u}}}{2-(2-\xi\varepsilon)e^{-u/2}}$	$\sqrt{\xi\varepsilon/2}$
Exakt	$\frac{1}{1-\alpha}e^{-u}$, ha $0 \le u \le \ln 1/\alpha$; 0, ha $u > \ln 1/\alpha$	$\frac{2\lambda_s}{v_0\xi}e^{u/2} - \frac{1+\sqrt{\alpha}}{1-\sqrt{\alpha}}\frac{\lambda_s}{v_0}$, $u \gg \ln 1/\alpha$	———	$\sqrt{\frac{\xi/2}{1-2/3\,\frac{1-\alpha}{1-\alpha}^{3/2}} - 1}$

gését a lassító közeg atommagjainak tömegétől. Látható, hogy a Greuling-Goertzel-féle közelitő függvénnyel számolt görbe jobban megegyezik az exakt görbével, mint a Wigner-maghoz tartozó görbe.

I r o d a l o m

[1] Takács L., MTA Mat. Kut.Int.Közl. 1, 55 /1956/

[2] Pál L., MTA Mat.Kut.Int.Közl. 1, 41 /1956/
Uzsoki M., KFKI Közl. 6, 559 /1956/

[3] Glasstone S., Edlund M.C., The Elements of Nuclear Reactor Theory., D.Van Nostrand Comp.Inc. Princeton, New Jersey /1952/ 184 old.

Érkezett 1959. aug.6.

KFKI Közlemények, 7. évf., 6.szám, 1959.

A TOTÁLREFLEXIÓ BEFOLYÁSA NEUTRON-KOLLIMÁTOROK MÉRETEZÉSÉRE

Irta: Szabó Pál

Neutronfizikai Osztály

Összefoglalás

Szerző egy előbbi munkájának [4] kibővitéseképpen vizsgáljuk a neutron-diffraktométerek és kristályspektrométerek primér kollimátorainak falain létrejövő totálreflexió hatását a kollimátorok optimális méreteire. Megadjuk a formulákat az egyszeres totálreflexió révén átjutó intenzitás számitására. Ezek azt mutatják, hogy a kollimátor-méreteknek az igy átjutó intenzitás szempontjából is (a közvetlen módon átbocsátott, [4]-ben tárgyalt intenzitáshoz hasonlóan) optimuma van, és hogy ez az optimum a gyakorlatilag érdekes esetekben ugyanott van, mint a közvetlen módon átbocsátott intenzitás esetében.

1. Bevezetés

Neutron-diffraktométerekben és neutron- kristály-spektrométerekben általában Soller-tipusu [1] kollimátorokat használnak. Az irodalomban tárgyalták az elérhető felbontóképességet [2], valamint azt a kérdést, hogy olyan diffraktométerekben, amelyek három ilyen kollimátort tartalmaznak, ezek szögdivergenciáit milyen módon célszerü megválasztani [3].

Hogy a szögdivergencia egy adott felbontóképességnek megfelelő megválasztása után hogyan kell méretezni a primér kollimátort maximális intenzitás elérése érdekében, azt szerző tárgyalta [4].

Tudott dolog az,hogy a kollimátor-lemezeken létrejövő totálreflexióval - megfelelő tulajdonságu kollimátor-lemezek alkalmazása esetén - jelentős mértékben növelni lehet a kollimátorokon átbocsátott intenzitást. A következőkben - az utoljára idézett cikken tulmenően - az optimális kollimátor-méretek számitását tárgyaljuk abban az esetben, amikor ez a hatás számbajövő.

2. Kiindulási feltevések

Világos, hogy ideális kollimátor-lemez olyan volna, a/ amelynek δ totálreflexiós határszöge megegyezne a megvalósitani kivánt vizszintes szögdivergenciával és b/ amely a δ-nál kisebb szög alatt beérkező neutronokat valóban totálisan reflektálná.

A b/ feltételt technikailag igen nehéz volna megvalósitani. Az a/ feltétel pedig kristályspektrométereknél, ahol az elérni kivánt vizszintes

szögdivergencia esetleg csak 1' vagy 2', nem teljesül, mert a gyakorlatilag számbajövő kollimátor-anyagokra (elsősorban az acélokra) a totálreflexió δ határszöge kb. 10' nagyságu. Emiatt ezeknél a b/ feltétel megvalósulását nem is szabad megengedni. Ui. ebben az esetben a többszörös reflexiók is nagy szerepet játszanának a neutron-átbocsátásban, és igy az átbocsátott nyaláb szögdivergenciáját nem lehetne δ alá csökkenteni.

Ezért a következőkben arra a gyakorlatilag legfontosabb esetre szoritkozunk, amikor a többszörös reflexiók szerepe elhanyagolható, és csak az egyszeres totálreflexió hatásával foglalkozunk. Mutatis mutandis számitásunk könnyen alkalmazható többszörös reflexiók figyelembevételére is.

Egyéb kiindulási feltevéseink és jelöléseink megegyeznek azokkal, amelyekkel [4]-ben éltünk. Ezek ismertetését ezért itt mellőzzük, csupán egy csekély megjegyzéssel egészitjük ki.

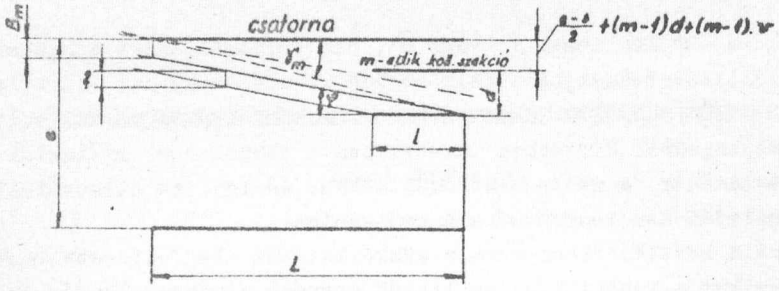
Az ottani 2.pontban emlitettük,hogy előirt felbontóképességhez általában elegendő az α vizszintes szögdivergenciát rögziteni, az ugyanakkor jóval nagyobbra vehető függőleges szögdivergenciát a csatorna méretei általában eleve kisebbre szabják meg a megengedhetőnél. Igy a kollimátor $\beta \equiv \operatorname{arctg}\frac{h}{l}$ függőleges szögdivergenciáját általában nem szükséges külön korlátoznunk. Ehhez hozzátehetjük, hogy az ottani, valamint az itteni meggondolásaink akkor is érvényesek maradnak, ha a csatorna ezt a korlátozást nem végzi el, csak ilyenkor az optimum számitásánál változónak tekintett l kollimátor-hosszuságra egy alsó (az l -lel egyértelmüen összefüggő n szekciószámra tehát egy felső) korlátot kell előirnunk. Ez eredményeinken semmit sem változtat.

3. A totálreflexiótól származó intenzitás számitása

Totálreflexió felléphet a (függőleges) kollimátorlemezeken és a köztük elhelyezett (vizszintes) "távolságtartókon". Először a függőleges lemezeken fellépő totálreflexiótól származó $I_{refl.}$ intenzitást, majd a vizszintes falakon fellépő totálreflexiótól származó $I'_{refl.}$ intenzitást tárgyaljuk. (Intenzitáson itt ugyanazt a viszonyt értjük, mint [4]-ben.) Azt, hogy a reflexió a valóságban nem teljes, majd utólag vesszük figyelembe egy ε csökkentő tényezővel.

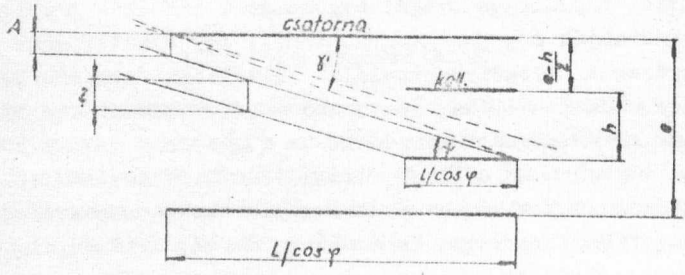
Az 1.ábra mutatja a csatorna és az egyik (m-edik) kollimátor-szekció vizszintes metszetét, a 2.ábra pedig a csatorna és a kollimátor egy függőleges, a kollimátortengellyel φ szöget bezáró metszetét.

Az 1.ábrában a tengellyel φ szöget bezáró párhuzamos egyenespár közt haladó és velük párhuzamos egyenesek sokasága mutatja az egyik kollimátorlemezre φ azimuttal és ϑ polárszöggel, ill. az utóbbinak megfelelő $\psi \equiv \vartheta - \frac{\pi}{2}$ szöggel jelzett irányban beeső és totálreflexió révén a kollimátoron átjutó sugarak vizszintes sikra való projekcióját. Ez a neutron-forrás felszinén $l.\operatorname{tg}\varphi$ nagyságu, az ábrában kérdőjellel jelölt egyenesdarabot metsz ki. Az



1.ábra

ezen φ , ψ irány körüli "egységnyi" térszögben beeső és totálreflexióval a mondott módon továbbjutó ([4]-ben pontosan definiált) intenzitás arányos ennek a nyaláb-szélességnek és a második ábrában A-val jelölt (és [4]-ben ugyancsak pontosan definiált) nyaláb-magasságnak a szorzatával.



2.ábra

Egyszeres reflexióval olyan sugarak is átjuthatnak a kollimátoron, amelyek az α vízszintes szögdivergenciánál nagyobb, de arctg(2.tg α)-nál kisebb szöggel esnek a kollimátor-lemezre. Könnyen belátható, hogy ezeknél az 1.ábrabeli, kérdőjellel jelölt szélesség (azaz l .tg φ) helyébe irányuktól függetlenül l .tg α kerül.

Az ilyen módon átjutó intenzitást tehát a következő (az összes n darab kollimátor-szekcióra képezett) összeg adja:

$$I_{refl.} = \sum_{m=1}^{n} 4l \left\{ \int_{0}^{\varphi_1} \int_{0}^{\beta} tg\varphi \cdot A(\varphi,\psi) \cdot \cos\psi \, d\varphi \, d\psi + \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \int_{0}^{\beta} tg\alpha \cdot A(\varphi,\psi) \cdot \cos\psi \, d\varphi \, d\psi \right\} \qquad (1)$$

Itt és később a kettős integrálokban az első integrál-jelhez a φ , a második integrál-jelhez pedig a ψ szerinti integrálások határait irtuk.

A φ szerinti integrálások határainak jelentése:

$$\left\{ \begin{matrix} \phi_1 \\ \\ \phi_2 \end{matrix} \right\}$$ helyébe a γ'_m, δ és $$\left\{ \begin{matrix} \alpha \\ \\ arctg\,(2.tg\,\alpha) \end{matrix} \right\}$$

mennyiségek közül a legkisebbet kell behelyettesiteni.

Az (1)-beli integrálok visszavezethetők a [4]-ben jelzett integráltipusokra, és igy elemi függvények zárt kifejezésével előállithatók. Ehelyett azonban az integrálási tartományban előforduló φ és ψ értékek kicsisége folytán (ugyanugy, mint [4]-ben) azt a numerikus szempontból jelentős egyszerüsitést vezethetjük be, hogy az előforduló koszinuszokat 1-el, a szinuszokat és tangenseket pedig argumentumukkal helyettesitjük.

Ha ezenfelül még arra a gyakorlatilag legfontosabb esetre szoritkozunk, amikor $\phi_2 = 2\alpha$ (és igy $\phi_1 = \alpha$), akkor (a megfelelő [4]-beli összefüggéseket felhasználva) (1) helyett a következő kifejezésre jutunk:

$$I_{refl.} = 4\,n\,l\,h \left\{ \int_0^{\alpha} \int_0^{\beta} \varphi \cdot \left(1 - \frac{\psi}{\beta}\right) \cdot f(\psi)\, d\varphi\, d\psi + \right.$$

$$\left. + \alpha \int_{\alpha}^{2\alpha} \int_0^{\beta} \left(1 - \frac{\psi}{\beta}\right) \cdot f(\psi)\, d\varphi\, d\psi \right\}. \qquad (1')$$

$\beta > \gamma' > \gamma''$ esetén ebből

$$I_{refl.} = 6\,h\,\alpha \left[s - (n-1)\,v \right] \cdot \left\{ \frac{\frac{e^2 - h^2}{2} - \frac{e^2 - h^2}{4h} + \frac{(e-h)^2}{8h}}{L - \frac{s - (n-1)\,v}{\alpha\, n}} + \frac{(e+h)^2}{8hL} \right\}, \qquad (1'a)$$

$\beta \approx \frac{h}{l} < \gamma' < \gamma''$ esetén pedig

$$I_{refl.} = 3\,h^2\,\alpha^2\,n. \qquad (1'b)$$

A vizszintes falakon fellépő totálreflexiótól származó intenzitás számitásának szemléltetésére a 2.ábrában egy a vizszintessel ψ szöget bezáró egyenespár között haladó és velük párhuzamos egyenesek sokasága mutatja az egyik távolságtartó-lemezre φ, ψ irányban beeső és totálreflexió révén a kollimátoron átjutó sugarak egy φ azimutu polárkoordináta-sikra való projekcióját. Ez a neutron-forrás sikjából $\frac{l}{\cos\varphi} \cdot tg\,\psi$ (a 2. ábrában kérdőjellel jelölt) nagyságu egyenesdarabot metsz ki. Az ezen φ, ψ irány körüli "egységnyi" térszögben beeső és a tárgyalt módon továbbjutó intenzitás arányos ennek a nyaláb-magasságnak és az 1.ábrában B_m-mel jelzett (és [4]-ben pontosan definiált) nyaláb-szélességnek a szorzatával.

A vizszintes falakon fellépő totálreflexiótól származó intenzitást tehát a következő kifejezés szolgáltatja:

$$I'_{refl.} = \sum_{m=1}^{n} 4\,l \int_0^{\alpha} \int_0^{\bar{\psi}} \frac{tg\,\psi}{\cos\varphi} \cdot B_m(\varphi) \cdot \cos\psi\, d\varphi\, d\psi \qquad (2)$$

Itt $\bar{\psi}$ a δ, γ'' és β mennyiségek közül a legkisebbet jelöli. $I'_{refl.}$ is visszavezethető a [4]-ben szereplő integráltipusokra, tehát elemi függvények zárt kifejezésével ugyancsak előállitható.

Ha itt is alkalmazzuk az integrálási tartományok kicsiségét kihasználó fentebbi közelitést, akkor

$$I'_{refl.} = \sum_{m=1}^{n} 4 l d \int_0^{\alpha} \int_0^{\Psi} \psi \cdot \left(1 - \frac{\varphi}{\alpha}\right) \cdot f_m(\varphi)\, d\varphi\, d\psi \qquad (2')$$

Abban a gyakorlatilag legérdekesebb esetben, amikor $\alpha < \gamma'_m < \gamma''_m$ és amikor $\Psi = \delta$, (2')-ből ezt kapjuk:

$$I'_{refl.} = 4 n l d \int_0^{\alpha} \int_0^{\delta} \psi \cdot \left(1 - \frac{\varphi}{\alpha}\right) d\varphi\, d\psi = \frac{\left[\delta - (n-1)v\right]^2}{n} \cdot \delta^2 \qquad (2'')$$

4. Következtetések

Képleteink közelebbi vizsgálatával kiderül, hogy minden gyakorlatilag érdekes esetben $I'_{refl.} \ll I_{refl.}$ ($I'_{refl.}/I_{refl.} < 0{,}01$.) Az átbocsátott intenzitásban tehát $I'_{refl.}$ gyakorlatilag nem játszik szerepet.

A teljes átbocsátott intenzitást a [4]-ben tárgyalt, közvetlen módon átbocsátott I intenzitás és a totálreflexióval átbocsátott intenzitás összege adja. A 2.pontbeli feltételek mellett és $I'_{refl.}$ kicsisége folytán utóbbi egyenlő $\varepsilon . I_{refl.}$-val. A teljes intenzitás tehát: $I + \varepsilon . I_{refl.}$. Adott szögdivergenciáju és összkeresztmetszetü kollimátor l hosszát, ill. az ezzel összefüggő n szekció-számát ugy kell megválasztani, hogy ez az összeg maximális legyen.

Könnyü kimutatni, hogy a [4]-ben tárgyalt I intenzitáshoz hasonlóan $I_{refl.}$-nek mint n ill. l függvényének is maximuma van. Most még kimutatjuk, hogy abban a gyakorlatilag szinte kizárólag érdekes esetben, amikor $I_{refl.}$-t az (1') képlet irja le, $I_{refl.} = 3I$, tehát az összintenzitás: $I + \varepsilon . I_{refl.} = (1 + 3\varepsilon) . I$. Ez azt jelenti, hogy ilyenkor az összintenzitás maximuma ugyanott van, mint I maximuma, a kollimátor optimális méretei ugyanazok, mint amelyek csupán a közvetlen módon átbocsátott intenzitás [4] szerinti figyelembevételével adódnak.

Bizonyitás. Ebben az esetben [4] (11) egyenletében $f_m(\gamma) = 1$ és igy ez az egyenlet igy irható:

$$I = 4 q n \int_0^{\alpha} \int_0^{\beta} \left(1 - \frac{\varphi}{\alpha}\right) \cdot \left(1 - \frac{\psi}{\beta}\right) \cdot f(\psi)\, d\varphi\, d\psi =$$
$$= 2 h \left[\delta - (n-1) v\right] \alpha \cdot \int_0^{\beta} \left(1 - \frac{\psi}{\beta}\right) \cdot f(\psi)\, d\psi . \qquad (3)$$

$I_{refl.}$ (1')-beli kifejezését pedig igy alakithatjuk át:

$$I_{refl.} = 6 h \left[\delta - (n-1) v\right] \alpha \int_0^{\beta} \left(1 - \frac{\psi}{\beta}\right) \cdot f(\psi)\, d\psi \qquad (1'')$$

Tehát valóban $I_{refl.} = 3I$.

Jelölések

Itt csak azokat a szimbólumokat soroljuk fel, amelyek [4]-ben nem szerepelnek. A [4]-ben is szereplő szimbólumok jelentése változatlan.

$I_{refl.}$ a függőleges falakon fellépő egyszeres totálreflexió intenzitása

$I'_{refl.}$ a vizszintes falakon fellépő egyszeres totálreflexió intenzitása

δ a totálreflexió határszöge

ε a totálreflexió hatásfoka

ϕ_1 a γ'_m , δ és α mennyiségek közül a legkisebb

ϕ_2 a γ'_m , δ és arctg(2.tg α) mennyiségek közül a legkisebb

Ψ a δ , γ' és β mennyiségek közül a legkisebb.

I r o d a l o m

[1] Soller W., Phys.Rev. 24, 158 /1924/

[2] Sailor V.L., Foote H.L., Jr., Landon H.H., Wood R.E., Rev.Sci.Instr.27, 26 /1956/

[3] Caglioti G., Paoletti A., Ricci F.P., Nucl.Instr.3, 223 /1958/

[4] Szabó P., Nucl.Instr.and Methods 5, 184 /1959/

Érkezett 1959. augusztus 24.

KFKI Közlemények 7.évf. 4.szám, 1959.

NEUTRON-MONOKROMATIZÁLÁS CÉLJÁRA KÉSZITETT NAGY EGYKRISTÁLYOK ORIENTÁLÁSA

Irta: Szabó Pál és Krén Emil
Szilárdtestfizikai Laboratórium

Összefoglalás

Neutron-diffraktométerekben és kristályspektrométerekben használt nagy monokromátor - kristályok egykristály-jellegének megállapitására és a kristályoknak az előirt krisztallográfiai sik kiképezéséhez és a felhasználáshoz szükséges orientálására kidolgoztunk egy egyszerü /hátsóreflexiós Laue -felvételek segitségével való kristály-orientálás ismert módszerén[1] alapuló/ röntgen-diffrakciós eljárást. Az eljáráshoz készitettünk egy megfelelő kristály-befogófejekkel felszerelt speciális goniométert. Mivel az irodalomban található standard sztereografikus projekciók [2, 3] pontossága az általunk elérni kivánt pontossághoz nem elegendő, készitettünk és megadunk egy megfelelő pontosságu köbös (lll) sztereografikus projekciót. Tárgyaljuk és kisérletileg ellenőriztük az orientálási pontosságot.

1. Bevezetés

Neutron-diffrakciós és neutron-kristályspektrometriai vizsgálatokhoz kellő intenzitás-viszonyok elérésére általában széles sugárnyalábokat használnak.Ennek következtében e berendezések neutron-monokromátoraiban nagy egykristályokat kell alkalmazni./Előfordul pl.,hogy 5 cm széles,20 cm hosszu kristálylapra van szükség./ Ezek előállitása legtöbbször kuposvégü hengerek, ritkábban lemezek alakjában történik.

Készitésük után mindenekelőtt egykristály-jellegüket kell ellenőrizni. Azután ki kell vágni belőlük egy előirt krisztallográfiai orientációju siklapot. Az ilyen lapot tartalmazó kristályt kell előirt orientációban a fenti berendezésekben elhelyezni.

A kristályok egykristály-jellegének megállapitására és a kivánt krisztallográfiai siknak a kivágáshoz és a felhasználáshoz szükséges definiálására kidolgoztunk egy egyszerü /hátsóreflexiós Laue-felvételek segitségével való kristály-orientálás ismert módszerén [1] alapuló/röntgen-diffrakciós eljárást. Ezt a II. pontban irjuk le. Az eljárás leirásánál a használt berendezésre csak olyan mértékben utalunk, amennyire ez az eljárás megértéséhez szükséges.

Az eljáráshoz készitettünk egy megfelelő kristály - befogófejekkel felszerelt speciális goniométert. Ennek leirását a III. pontban adjuk. A röntgen-felvételeket szokványos,köralaku sikfilmet tartalmazó hátsóreflexiós kamrával készitettük.

Feladatunkhoz, mint látni fogjuk, standard sztereografikus projekcióra is szükségünk van. Mivel az irodalomban található standard projekciók [2, 3] pontossága az általunk elérni kivánt orientálási pontossághoz nem elegendő, készitettünk és a IV. pontban megadunk egy megfelelő pontosságu köbös (111) sztereografikus projekciót. Neutron-monokromatizálás céljára legtöbbször köbös lapcentrált szerkezetü kristályok (111) reflexióját használjuk, tehát legtöbbször erre a standard projekcióra van szükségünk.

A berendezésünkkel elérhető orientálási pontosságot az V. pontban tárgyaljuk. A becsült pontosságot nagy Al- és Pb-egykristályokon /a leggyakrabban használt monokromátorokon/ végzett mérésekkel ellenőriztük.

II. Az eljárás

1/ A kristályt egy pontosan hengeres részt is tartalmazó befogófejbe fogjuk. Ha a kristály nagyjából hengeres, akkor ugy, hogy a /nem jól definiált/ tengelye kb. egybeessen a befogófej hengeres részének tengelyével. /A következőkben "forgástengely", egyéb megjelölés hiján, mindig ezt a tengelyt fogja jelenteni./ Ha pedig a kristály lemezalaku, akkor ugy, hogy a szabad olvadékfelszinből képződött siklapja párhuzamos legyen a forgástengellyel.

2/ A kristályba több, a forgástengellyel párhuzamos siklapot /mérőlapot/ gyalulunk.

3/ A kristályt a befogófejjel behelyezzük a goniométerbe ugy, hogy a forgástengely párhuzamos legyen a goniométer forgástengelyével.

4/ A goniométer és megfelelő idomszer segitségével a kristály egy mérőlapját egy hátsóreflexiós röntgen-kamra filmjének sikjával párhuzamosra és tőle előirt távolságura állitjuk, és a mérőlap több helyéről hátsóreflexiós Laue-felvételt készitünk. A mérőlap különböző helyeinek besugárzásánál a kristályt csupán a forgástengellyel párhuzamosan toljuk el, a forgástengelyen átmenő egyenes tehát megtartja térbeli irányát. Gondoskodunk arról, hogy a röntgen-filmeken jel mutassa a film középpontján átmenő és a forgástengellyel párhuzamos, vagy arra merőleges irányt. Ez a felvételsorozat alkalmas annak a megállapitására, hogy a mérőlap besugárzott helyei ugyanahhoz az egykristályhoz tartoznak-e: ha igen, akkor a felvételeknek teljesen egyformáknak kell lenniök.

5/ Ugyanilyen méréssorozatokat készitünk a többi mérőlapról is. Az egyik mérőlapról a másikra való áttérésnél a kristályt egyrészt önmagával párhuzamosan eltoljuk, másrészt a forgástengely körül a goniométeren leolvasható szöggel elforgatjuk.

6/ Greninger-háló és Wulff-háló segitségével [1] elkészitjük a kristály sztereogrammját a kristálynak a különböző mérőlapokon végzett mérésekhez tartozó helyzeteiben. A sztereogrammok projekciós sikja ennél az eljárásnál a filmmel párhuzamos sik.

7/ Az egyik mérőlap sztereogrammját indexeljük. Ez egyenértékü a krisztallográfiai tengelyek irányának, tehát az orientációnak a meghatározásával. Ezután Wulff-háló segitségével a sztereogrammot standard helyzetbe hozzuk, azaz olyan sztereogrammot készitünk, amelynek projekciós sikja valamely előirt krisztallográfiai sik. A továbbiakban - kizárólag a beszédmód egyszerüsitésére - a Bevezetésben emlitett esetről, tehát a köbös (lll)standard helyzetről fogunk beszélni. Ezzel az általánosságot nem csorbitjuk,mert mindaz, amit elmondunk, egyszerüen átirható bármely más esetre.

8/ A többi mérőlap helyzetét ehhez a mérőlaphoz képest 5/ szerint ismerjük. Ezt az ismeretet felhasználva, a hozzájuk tartozó sztereogrammokat könnyen transzformálhatjuk a 7/-ben mondott standard helyzetbe. Ha a különböző mérőlapok ugyanahhoz az egykristályhoz tartoznak, akkor az igy kapott projekciók fedik az előre elkészitett teljes standard (lll) projekciónak azt a film-kristálylap távolságból és a film méreteiből meghatározható részét,amely az egyes hátsóreflexiós felvételekkel megismerhető. Igy tehát megállapithatjuk, hogy a különböző mérőlapokon besugárzott összes helyek ugyanahhoz az egykristályhoz tartoznak-e.

Ha az eljárást eddig követve,megállapitottuk, hogy a vizsgált test egykristály, akkor 7/ szerint már a kristály orientációja is meg van határozva.

9/ Ezután egy (lll) indexü lapot kell a kristályon kiképeznünk. Ezt gyalugéppel végezhetjük el. Ehhez a lap irányát jellemző két olyan szöget kell megadnunk, amelyek a gyalugépen közvetlenül beállithatók. Ezt a nem egyértelmü követelményt, mint látni fogjuk, a következő két szög megadásával célszerü kielégitenünk: a/ Megadjuk azt az /előjeles/ α szöget, amellyel a kristályt a vizszintesre beállitott forgástengely körül el kell forgatnunk ahhoz a helyzethez képest, amikor a 7/-ben emlitett indexelt sztereogrammhoz tartozó mérőlap sikja függőleges./ α előjelének kérdését alább tárgyaljuk./ b/ Meg kell adnunk azt a β szöget, amelyet a gyalulással kiképezendő siklap a kristálynak az α szögü elforgatás utáni helyzetében a vizszintes sikkal és ugyanakkor a forgástengellyel is bezár.

Ennek a két szögnek a megadása az eddig elvégzett müveletek után igen könnyü, mert ezek egyszerü összefüggésben vannak a 7/ szerint indexelt röntgen-felvétel (lll)indexü foltjához a sztereogramm készitésénél a Greninger-hálón leolvasott két, [1] -ben /és [1] nyomán a közhasználatu Greninger-hálókon/ γ -val és δ -val jelölt szöggel.

A beszédmód egyszerüsitése kedvéért a röntgen-film sikját függőlegesnek,a goniométer forgástengelyének irányát pedig az előbbivel párhuzamosnak és vizszintesnek tekintjük. /Az általunk használt elrendezés közelitőleg ilyen volt./ Más elrendezésre tárgyalásunk egyszerü átirással érvényes lesz. Hogy a keresett összefüggéseket egyértelmüen megadhassuk, állapodjunk meg a következőkben. γ és δ leolvasásához a Greninger-hálót ugy helyezzük rá a filmre, hogy a háló $\gamma = 0$ vonala /amelynek a film és a direkt sugár met-

széspontján kell átmennie/ párhuzamos legyen a goniométer forgástengelyével. A filmet a direkt röntgensugár irányában nézve, δ értékét a $\delta = 0$ vonaltól jobbra pozitivnak, balra negativnak, γ értékét a $\gamma = 0$ vonaltól felfelé pozitivnak, lefelé negativnak vegyük. α előjele feleljen meg a szokásos előjelválasztásnak /tehát az óramutatóval ellentétes irányu elfordulás legyen pozitiv/ akkor, ha a forgástengely körüli forgatást előjel szempontjából egy olyan x-koordinátatengely pozitiv irányába való nézéshez definiáljuk, amely egybeesik a forgástengellyel és amely a függőlegesen felfelé mutató iránnyal /y-tengely/ és a direkt sugár irányával /z-tengely/ ebben a sorrendben jobbrendszert képez. (3. ábra.) β előjele feleljen meg a szokásos előjelválasztásnak akkor, ha a neki megfelelő /z-tengely körüli/ szögelfordulást a z-tengely negativ irányába való nézéshez definiáljuk.

Az α szögü elforgatás célja az,hogy a kiképezendő (lll) lap normálisát beforgassuk a függőleges /x-y/ sikba. Az α szög jelentését figyelembevéve, könnyen igazolható, hogy ehhez $\alpha = \gamma - 90^{\circ}$ elforgatás szükséges az x-tengely körül.

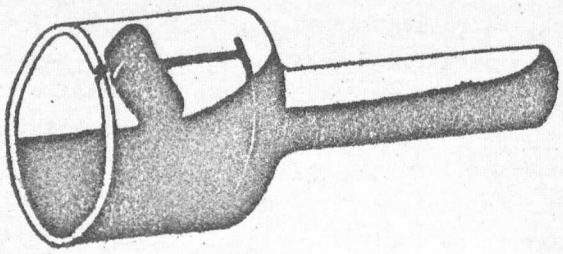
A β szög tulajdonképpen a kristálynak az előbbi elforgatás utáni helyzetében az (lll) irányra /és egyben az x - y sikra/ merőleges sik és az x-tengely által bezárt szöget jelenti. A δ szög jelentését figyelembevéve, könnyen látható, hogy $\beta = \delta$

10/ A teljes standard projekciót olyan helyzetbe hozzuk, hogy fedje azt a 9/ szerint kiképzett (lll) laphoz tartozó sztereogrammot, amely ugy készült,hogy a forgástengely vizszintes és ugyanekkor az (lll) lap, valamint a projekciós sik a röntgen-filmmel párhuzamos volt. A kiképezett (lll) lapnak ezt a sztereogrammját könnyen megkaphatjuk a 7/-beli indexelt sztereogrammról a 9/-beli α és β szögeknek megfelelő projekció-forgatások révén. Az ilyen helyzetbe hozott standard projekció a kiképezett (lll) lapot krisztallográfiai szempontból tökéletesen és közvetlen módon jellemzi./Nemcsak a lap-normális, hanem pl. a bennefekvő krisztallográfiai irányok indexei is leolvashatók belőle./

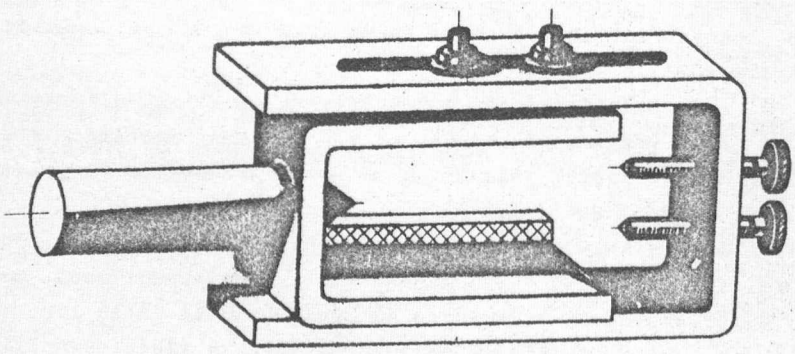
11/Az ilyen helyzetbe hozott standard projekció segitségével továbbá kényelmesen ellenőrizhetjük azt, hogy a kiképzett lap valóban a kivánt helyzetü, (lll) indexü lap-e. Ehhez hátsóreflexiós Laue-felvételt készitünk erről a lapról az előbb definiált helyzetében. A felvételből 6/ szerint készitett sztereogrammnak fednie kell a mondott helyzetbe hozott standard projekciót.

III. A goniométer

Az 1. ábra mutatja a hengeres, a 2. ábra a lemezalaku kristályokhoz készitett befogófejet. Az előbbiben látható a csavar, melynek segitségével a kristályt a befogófejhez rögzitjük. A lemezalaku kristályok behelyezése ugy történik, hogy a kristály megfelelő lapját a 2. ábrában vonalkázással jelölt, a forgástengellyel párhuzamosra megmunkált felülethez szoritva, pár-



1. ábra
Befogófej hengeres kristályokhoz



2. ábra
Befogófej lemezalaku kristályokhoz.

huzamosra állitjuk a forgástengellyel,majd a kristályt az ábrán látható csavarok segitségével rögzitjük.

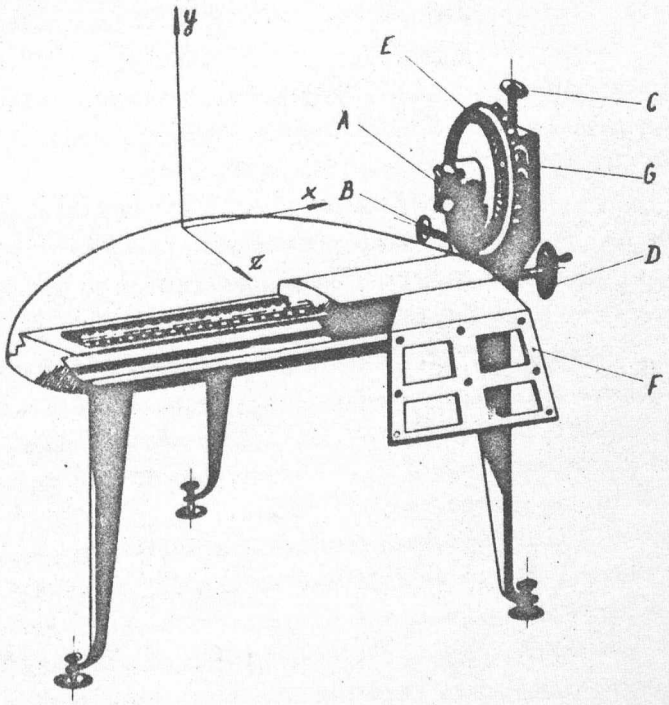
A 3. ábrában látható goniométerünk tartalmaz egy az ábrán A-val jelölt eszterga-tokmányt. Ebbe a befogófejek hengeres részét befogva, teljesül az a 3/-beli követelmény, hogy a forgástengely párhuzamos legyen a goniométer forgástengelyével.

A kristály mérőlapjainak 4/ szerinti beállitását egy idomszerrel végeztük. A távolság, amelyre ennek segitségével a mérőlapokat a filmhez beállitottuk, 3 cm volt, mert ez teljesen megfelelőnek bizonyult, és mert a szokványos Greninger-hálók is erre a távolságra készültek. Az idomszer kiképzése olyan, hogy a hátsóreflexiós röntgen-kamrából a film elé kiálló kollimátor-tartórész nem zavarja az idomszernek a filmre való fektetését.

Ahhoz, hogy a 4/-beli müveleteket elvégezhessük, a kristályt a goniométeren három megfelelő,egymásra merőleges irányban kell tudnunk eltolni. Goniométerünk ezt a 3. ábra B, C és D forgatógombjainak elforgatásával teszi lehetővé.Az elmozdulási távolságok a goniométeren leolvashatók. A forgásten-

gely irányának definiálását célszerüen a forgástengely vizszintezésével végezzük. A vizszintezés könnyen elvégezhető a goniométer talpcsavarainak megfelelő beállitásával.

A filmeken a középponton átmenő és a forgástengelyre merőleges irányt a 4/-beli követelménynek megfelelően ugy jelöljük meg, hogy a röntgen - kamrára egy reprodukálhatóan beállitható, csucsban végződő fémtestet szereltünk. Felvétel közben ez nekifekszik a röntgenfilmnek, és a filmen olyan árnyéknyomot hagy, amely lehetővé teszi ennek az iránynak a kijelölését. A film középpontját pedig egy köralaku árnyéknyom középpontjaként jelölhetjük ki. Ezt az árnyéknyomot egy olyan fémgyürüvel létesitjük, amelyet a röntgen-kamra kollimátor-tartójára szereltünk.



3. ábra
A goniométer

Az 5/-beli müvelet érdekében goniométerünkön az esztergatokmány saját tengelye körül elforgatható, és szöghelyzete a 3. ábra E jelü szögskáláján leolvasható. A szögskála $1/3^{o}$-os beosztásu. A konstrukció ennél nagyobb leolvasási pontosságot is megengedne /amit pl. nóniusz használatával könnyü lenne megvalósitani/, jelenlegi célkitüzésünket tekintve azonban ez a pontosság elegendő.

Amint tudjuk, az indexelést sokszor nagyon megkönnyiti, ha a kristályt felvétel közben egy kisebb szögtartományban lengetjük a forgástengely körül. A lengetést ugy hajtjuk végre, hogy egy előre beállitható számu fordulat után forgási irányát megváltoztató motorral forgatjuk goniométerünk megfelelő áttétellel ellátott, a 3. ábrában G-vel jelölt csigakerék-tengelyét, amely az esztergatokmányt forgatja. A motor a F tartólapra szerelhető fel. Egy ilyen lengőkristály-felvétel természetesen nem teszi nélkülözhetővé

azt az állókristály-felvételt, amelyből II. pontbeli leirásunk szerint a 7/-ben mondott indexelt sztereogrammnak készülnie kell. Ui.,amint láttuk, szükséges hogy a kristálynak a sztereogrammhoz tartozó helyzete jól definiált legyen.

IV. Az (lll) standard projekció

Feladatunkhoz,amint mondtuk,le gyakrabban köbös lapcentrált kristályok (lll) sztereografikus projekciójára van szükség. Amint az V. pontban látni fogjuk, berendezésünkkel az orientálást $1/2^{o}$-os pontossággal végezhetjük el. Szükséges tehát, hogy az eljárásunkban szereplő szerkesztések pontatlansága $1/2^{o}$-nál kisebb legyen. Ehhez viszont $1/4^{o}$-mál pontosabb Wulff-hálóra és standard projekcióra van szükség.

Ilyen pontosságu Wulff-háló 30 cm átmérővel a kereskedelemben kapható. Az irodalomban közölt standard (lll) projekció [2] pontatlansága 2^{o} [5], és ezt még a Wulff-hálónak megfelelően 30 cm átmérőjüre kellene nagyitanunk, ami pontosságát tovább rontaná.

Az (lll) projekciót nem szerkeszthettük meg az irodalomban rendelkezésünkre álló (100) projekció [3] felhasználásával sem, mert az 10 cm átmérőjü Wulff-hálóval, tehát kb. $1/2^{o}$ pontatlansággal készült, és pontossága nyomdatechnikai okokból még tovább romlott. Az ugyancsak szükséges nagyitás itt is tovább rontaná a pontosságot.

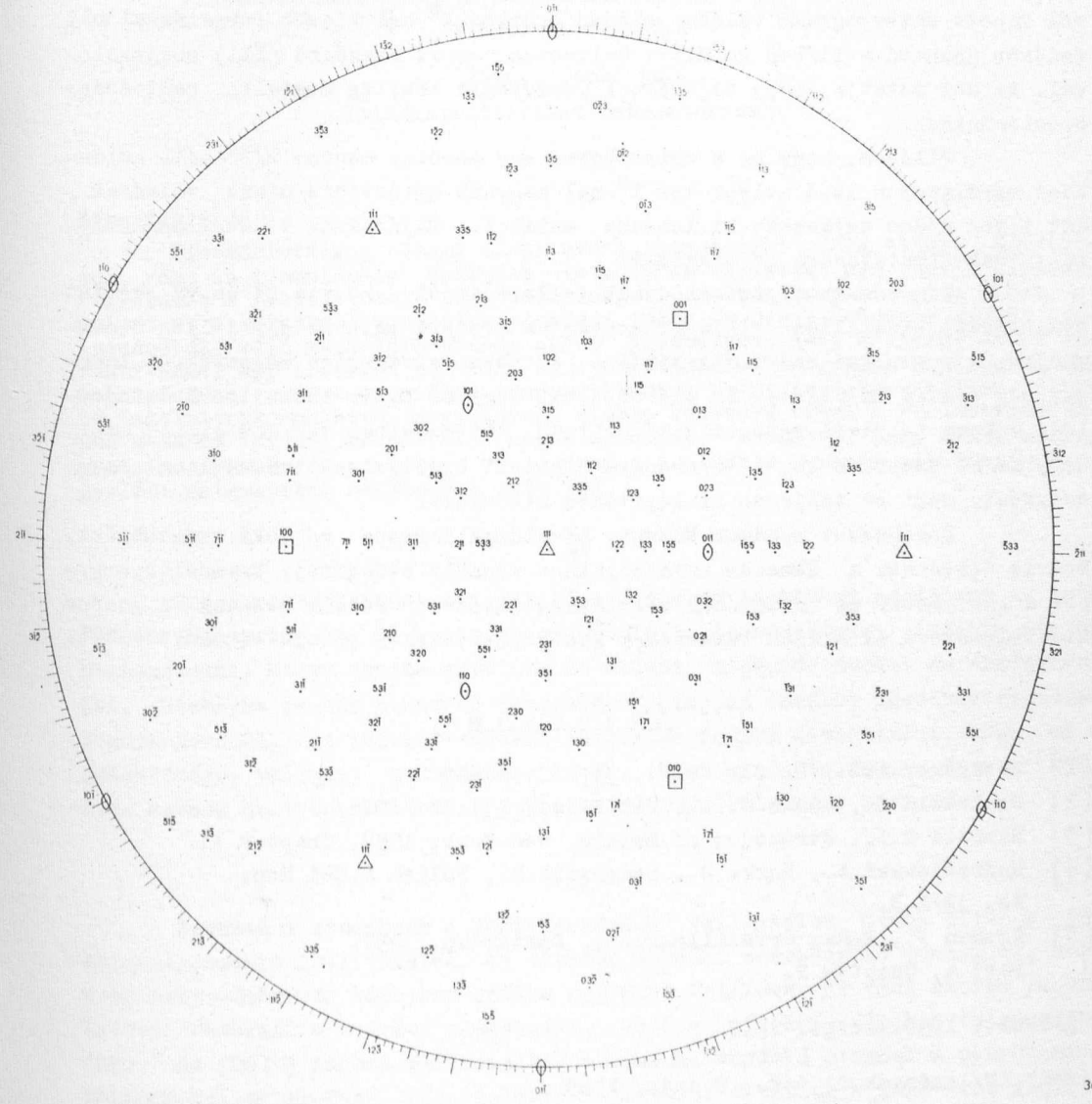
(lll) projekciónkat tehát a szükséges geometriai számitások elvégzése alapján,egy 30 cm átmérőjü Wulff-háló segitségével készitettük. A szerkesztések megkönnyitésére a projekciót szögbeosztással is elláttuk. Projekciónk pontjainak szerkesztési pontosságát a használt Wulff-hálóval elérhető pontosság szabja meg. A pontosság tehát kb. $1/4^{o}$. A projekciót 4.ábraként közöljük.

Ebben olyan siknormális irányokat jelöltünk csak meg, melyekre a Miller-indexek négyzetösszege nem nagyobb 56-nál, ami a gyakorlatban teljesen elegendő.Mivel esetünkben legtöbbször lapcentrált szerkezetü köbös kristályokról van szó, az olyan siknormálisokat is kihagytuk az ábrából, amelyek Miller-indexei vegyesen páros és páratlan számok és négyzetösszegük 4-szerese nagyobb 56-nál. Ui. az ilyen Miller-indexü hálózati sikoktól származó reflexiók legalább másodrendüek, és ezekre a Miller-indexek négyzetösszegének szerepét e négyzetösszeg 4-szerese veszi át.

V. A pontosság ellenőrzése

Eljárásunk fő hibaforrásai: a mérőlap és a film párhuzamositásában, a film középpontja és a filmeken bejelölt irány kijelölésében, valamint a sztereografikus projekciók szerkesztésében elkövetett hibák. Ezekből jelenlegi berendezésünkkel az orientálásban becslésünk szerint legfeljebb $1/2^{o}$-os hiba adódhat.

Ezt a becsült pontosságot ugy ellenőriztük, hogy az eljárást egy



Al- és egy Pb-egykristállyal* végigcsináltuk és mindkét esetben elvégeztük a II.pontban 11/ alatt említett ellenőrzést is. Az egy mérőlap mentén végzett mérések sztereogrammjaiban észlelt eltérések valóban mindig $1/2^{o}$-on belül voltak. Mivel a 11/ szerinti ellenőrzés esetében tulajdonképpen két, egyenként $1/2^{o}$ pontossággal elvégzett orientálás összevetéséről van szó, a 11/ szerint észlelt eltérésnek 1^{o}-on belül kell lennie. A kiképzett kristálylapról kapott sztereogramm valóban minden esetben 1^{o}-nál kisebb forgatással volt fedésbe hozható a 11/ben körülírt helyzetbe hozott standard (111) projekcióval. Ez azt mutatja, hogy eljárásunk pontossága tényleg megfelel pontosságbecslésünknek.

Világos, hogy ha a kristályban egy mérőlap mentén $1/2^{o}$-nál, különböző mérőlapokon levő helyek közt 1^{o}-nál nagyobb orientáció-hibák volnának, azt ilyen módon ugyancsak ki lehetne mutatni. Eljárásunk tehát ilyen kristályhibák kimutatására is alkalmas.

A mérésekhez gondoskodnunk kellett arról, hogy a 2/ és 9/ szerint gyalulással előállított síklapok mentén az eredeti egykristály-jelleg megmaradjon. A gyalulást ezért nagyjából a [4] -ben leírt módon végeztük. A lapokat még kémiai maratásnak is alávetettük, hogy az elkerülhetetlenül deformálódó vékony felületi réteget eltávolítsuk. Itt annyiban tértünk el [4] -től, hogy az Al esetében kb. 3-szorosára higított királyvizet használtunk marószerként, mert ez teljesen kielégítőnek bizonyult.

Köszönetet mondunk Muzsnay Lászlónak hasznos mérnöki tanácsaiért, Petrik Olivérnek a lemezes kristályokhoz készült befogófej, Szamosi Györgynek a goniométer és tartozékai megszerkesztéséért, Póczik Bélának a gondos kivitelezésért és Bördén Péternek a röntgenfelvételek precíz elkészítéséért.

Irodalom

[1] Greninger A.B., Z. für Krist. 91, 424 /1935/
[2] Schiebold E., Sachs G., Z. für Krist. 63, 34 /1926/
[3] Barrett C.S., Structure of Metals, New-York, 1952. Chapter II.
[4] Modrzejewski A., Buras B., Czarnecki R., Polish A.Sci.Rep. No. 32/I-B.
[5] Bouman J., X-Ray Crystallography, Amsterdam, 1951. Part A, Chapter V.

Érkezett 1959. szept. 25.

KFKI Közlemények 7. évf., 6.szám, 1959.

* Az Al-egykristály a Lengyel Tudományos Akadémia Magkutató Intézetében, a [4]-ben leírt módon készült, és azt az Intézet bocsátotta rendelkezésünkre. Fogadják érte hálás köszönetünket. Az Pb-egykristályt magunk állítottuk elő.

FINOMKRISTÁLYOS SZENEK KRISTÁLYSZERKEZETI RENDEZETLENSÉGÉNEK KIMUTATHATÓSÁGÁRÓL*

Irta: Szabó Pál

Szilárdtestfizikai Laboratórium

Összefoglalás

Finomkristályos szenek által szórt intenzitást tárgyaljuk. Kimutatjuk, hogy az irodalomban használt intenzitás-képletek nem veszik helyesen figyelembe a feltételezett rendezetlenséget, és tárgyaljuk azt a hibát, amelyet ez a krisztallit-méretek szokásos módon /a Debye-Scherrer gyürük szélességéből/ való meghatározásában okoz. Kimutatjuk, hogy a diffuz szórt intenzitásnak egy irodalmi esetben [7] a Warren-féle tárgyaláson alapuló értelmezése az ottani speciális rendezetlenségi feltevés felhasználása nélkül is indokoltnak mondható. Tárgyalásunk elvben lehetővé teszi a rendezetlenségnek a szórt intenzitásból való meghatározását. Vázoljuk, hogy ehhez milyen neutron-diffrakciós mérésekre van szükség. A módszer konkrét alkalmazását egyelőre matematikai nehézségek gátolják.

I.

Ennek az előadásnak alapját képező munkám időközben megjelent az Acta Physics Hungarica-ban [1]. Az ebben foglalt levezetéseket itt nem fogjuk megismételni, hanem csupán vázoljuk az ottani meggondolásokat és eredményeket. Bizonyos pontok behatóbb tárgyalása alapján további következtetéseket fogunk levonni. Az idézett munkán tulmenően fogjuk diszkutálni, hogy mi a jelentősége, valamint a nehézsége annak, hogy megfontolásaink finomkristályos szenek neutron-szórásának kiértékelésére alkalmazást nyerjenek.

II.

Ezeknek a szeneknek a röntgenszórása jellegzetes módon eltér a jól kristályosodott grafitokétól. Az eltérés azonnal szembeszökő vonása az, hogy ezek Debye-Scherrer képeiben széles gyürüket találunk, de csak azokon a helyeken /azoknál a szórási szögeknél/, ahol a jól kristályosodott grafitok $(hk0)^+$ és $(00l)$ indexü reflexióit várhatnánk, továbbá ezeknek a gyürüknek a maximum-helyei kevéssé /de biztosan mérhetően/ eltérnek a megfelelő grafit-reflexiós szögektől. /Az indexelés ortohexagonális elemi cellára vonatkozik./

+ A továbbiakból érthetően ezeket a reflexiókat a (hk) index-párral szokták jellemezni.

* 1959. szeptember hóban a szilárdtestfizikai kollokviumon elhangzott előadás

Arnfelt nyomán [2] a szórási képnek ezeket a sajátságait röviden a következőképpen magyarázzák. A grafit-krisztallitok nagyságának csökkenésével egyre növekvő rendezetlenség lép fel bennük. Ez abban áll, hogy a konvencionális c-tengelyre merőleges rácssikok síkjuk irányitottságát megtartva egyre nagyobb mértékben eltolódnak és elfordulnak a grafit-rácsban meghatározott helyzetükhöz képest. Az atomok konfigurációját a szóbanforgó síkokban ez a rendezetlenség nem befolyásolja, azt tehát az ismert /és neutron-diffrakcióval meglehetősen jól igazolt [3] /Bernal-konfigurációnak tekinthetjük. A rendezetlenséggel együtt rácsállandó-változás is fellép.

Már az ilyen szenekre vonatkozó 1941 előtt megjelent munkákban is [4] gyakran találkozunk a Debye-Scherrer gyürük szélességéből való krisztallitméret meghatározásokkal. Ezeket a meghatározásokat a rendezetlenség-mentes krisztallitokra vonatkozó számitások szerint végezték. Ez az eljárás természetesen igazolásra szorult.

1941-ben Warren közölt számitásokat [5], melyek alapján ugy tünt, hogy az eljárás bizonyos módositással helyes. Azóta finomkristályos szenek krisztallit-méreteit Warren számitásai alapján határozzák meg [6].

Warren számitásai abból indulnak ki, hogy a (hk) tipusu reflexiók esetében a

$$\frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{\sin^2 \pi A_1} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{\sin^2 \pi A_2} \qquad (*)$$

interferenciafüggvényből, a (00 l) tipusu reflexiók esetében pedig a

$$\frac{\sin^2 \pi N_1 A_1}{\sin^2 \pi A_1} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_2 A_2}{\sin^2 \pi A_2} \cdot \frac{\sin^2 \pi N_3 A_3}{\sin^2 \pi A_3} \qquad (**)$$

interferenciafüggvényből kell számitani a Debye-Scherrer intenzitást /a krisztallitok összes lehetséges térbeli orientációinak megfelelő integrálással/. Itt N_1, N_2, N_3 a krisztallitok átlagos lineáris mérete a három krisztallográfiai tengely irányában, az elemi cella megfelelő élének hosszuságához viszonyitva; A_1, A_2, A_3 pedig az Ewald-féle reciprok rács terében a megfelelő koordináták.

III.

Idézett munkánkban [1] foglalt megfontolások és számitások /amelyekre tehát most nem térünk ki/ azt mutatják, hogy ezek az interferencia-függvények nem felelnek meg az ismertetett fajtáju és Warren által is feltételezett szerkezeti rendezetlenségnek. Az (*) interferenciafüggvény csak akkor érvényes, ha a rácsállandóhoz képest igen nagy rendezetlen eltolódások fordulnak elő, a (**) interferenciafüggvény pedig csak akkor, ha nincs rendezetlenség. Ha nincs rendezetlenség, akkor az összes reflexiókra (**) érvényes. Igen nagymértékü rendezetlen eltolódások esetén pedig (*) érvényes a reciprok rács terének összes olyan pontjaira, amelyek kivül esnek egy bizonyos, a reciprok térbeli A_3 koordináta-tengelyt körülvevő hengeren. Egy

utóbbival koaxiális,de kisebb sugaru hengeres tartományon belül ebben az esetben is a (* *) interferenciafüggvény érvényes. A két hengerfelület közötti átmeneti zónában az interferenciafüggvénynek mind (*)-től, mind (* *)-től különböznie kell. E két henger sugarának nagysága a rendezetlen eltolódások nagyságától függ. Minél nagyobbak az eltolódások, annál kisebbek a hengerek sugarai. Az átmeneti zónában az interferenciafüggvény alakja ugyancsak a rendezetlenségtől függ. Láthatjuk tehát, hogy az (*) és a (* *) interferenciafüggvény egyidejü használata /az egyiknek a reflexiók egyik tipusára, a másiknak a reflexiók másik tipusára/ a rendezetlenség semmilyen esetében sem lehet teljesen helyes.

Az elmondottakból az is következik, hogy igen nagy rendezetlen eltolódások esetén a szórt intenzitás számitására egyedül az (*) interferenciafüggvényt kell használnunk. Másszóval ilyenkor a szórt intenzitáseloszlásnak gyakorlatilag meg kell egyeznie a megfelelő sikrács-halmazról várható szórt intenzitás-eloszlással, tehát a (00 l) tipusu reflexiók sem léphetnek fel. Ezzel összefüggésben a (00 l) reflexiók egyes esetekben tapasztalt erős kiszélesedésének olyan értelmezését ([4],[6],[7]), amely a (* *) interferenciafüggvényt veszi alapul, és a kiszélesedést kizárólag a krisztallitok c-tengely menti méretének kicsiségére vezeti vissza, nem tekinthetjük kötelezőnek. A c-tengely menti N_3 méret szokásos, a Warren-féle tárgyaláson alapuló meghatározását ([4],[6],[7]) tehát kvantitativ szempontból kétes értékünek kell mondanunk.

Idézett munkánkban megmutattuk azt is, milyen módon kell a rendezetlenség fajtájára és nagyságára vonatkozó feltevéseket az interferenciafüggvényben figyelembevenni. Módszerünkre példaként megadtuk az interferenciafüggvényt egy bizonyos rendezetlenségi feltevés esetére.

Kimutattuk,hogy -Warren állitásával ellentétben- a rendezetlen elfordulási lehetőség figyelembevétele más interferenciafüggvényre vezet, mint csupán a rendezetlen eltolódások.

Kimutattuk, hogy -a Warren-féle tárgyalástól eltérően- a mondott rendezetlenségek miatt nem a grafit kristályszerkezeti faktorát, hanem a c-tengelyre merőleges ráossikok szerkezeti faktorát kell alkalmaznunk.

IV.

Megvizsgáltuk, milyen hibákat okoznak a Warren-féle tárgyalás mondott hiányosságai a (hk) tipusu reflexiók szélességében és igy az ezekből számitott (N_1,N_2) krisztallitméretekben. Az előbb mondottak alapján érthető, hogy ehhez a rendezetlenség két ellentétes határesetére vonatkozó (*), ill. (**) interferenciafüggvényekből számitható reflexió-szélességeket kellett összehasonlitanunk. Utóbbit Laue [8] , előbbit Warren [5] adta meg bizonyos Laue-re visszavezethető közelitésben. A Laue-féle formula az un. integrális, a Warren-féle formula pedig az un. félérték-szélességre vonatkozik. Hogy a kettőt összehasonlithassuk, a Laue-féle formulát átalakitottuk ugy, hogy az is a

félérték-szélességre vonatkozzék. Az igy elvégzett összehasonlitás azt mutatta, hogy az (*) interferenciafüggvény kb. 2-szer nagyobb szélességre vezet, mint a (* *) interferenciafüggvény. Ez azt jelenti, hogy az eltolódási rendezetlenség esetében a Warren-féle számitás alkalmazása a c-tengelyre merőleges méret (N_1,N_2) meghatározásában egy kb. 1/2 és 1 közötti faktorral korrigálható hibát okoz. Igaz ugyan, hogy -amint mondtuk- az elfordulási rendezetlenség figyelembevétele módositja az interferenciafüggvényt, de valószinünek látszik, hogy a vonalszélességre vonatkozólag most megállapitott hiba-tartományt nem befolyásolja lényegesen.

A vonalszélességnek ezek a hibái általában nagyobbak, mint amelyeket az intenzitásmérési pontatlanság okoz. Még igen széles, minden irányban csak néhány rácsállandónyira kiterjedő krisztallitoktól származó reflexiók esetében is általában 10%-nál pontosabban lehet megadni a vonalszélességet [7]. Mégis mondhatjuk, hogy ezek a hibák nem tul nagyok. A Warren-féle számitást tehát jogosultnak jelenthetjük ki a (hk) tipusu reflexiók szélességének tárgyalása, illetve a velük összefüggő N_1, N_2 krisztallitméretek meghatározása szempontjából. Igaz ugyan, hogy ezzel ezekben a krisztallit-méretekben a mérési hibákon általában tulmenő módszeres hibát kapunk, de megvan az a nagy előnyünk, hogy nem kell foglalkoznunk a rendezetlenség pontosabb figyelembevételéből adódó nagy matematikai nehézségek leküzdésével.

V.

A Warren-féle számitás bizonyos diffuz szórást is mutat. Ez az (*) interferenciafüggvény sajátságainak a következménye. Ismeretes dolog az, hogy kristályszerkezeti rendezetlenségek általában koherens diffuz szórásra vezetnek. A Warren-féle számitás alapján azonban mégsem lehet a diffuz szórásból a rendezetlenség fajtájára és nagyságára következtetést levonni. Egyrészt azért nem, mert - amint mondtuk, - a Warren-féle számitásban felvett (*) és (* *) interferenciafüggvények nem veszik helyesen figyelembe ezeket, nem tartalmaznak a rendezetlenség fajtáját és nagyságát kifejező paramétereket. Másrészt azért sem, mert Warren a Debye-Scherrer intenzitáseloszlás számitására olyan közelitést használt, amelynek jellemző sajátsága az, hogy diffuz szórás esetében általában nem engedhető meg. Ez a közelités általában csak akkor használható, ha a koherens szórás diffuz részének intenzitása/legalábbis gyakorlatilag/ 0, ahogy az a rendezetlenségmentes krisztallitok esetében fennáll. Igy a diffuz szórás számitására a Warren-féle tárgyalás általában nem alkalmas.

A III. pontban emlitettük, hogy nagymértékü rendezetlen eltolódások esetében a szórt intenzitás számitására gyakorlatilag egyedül az (*) interferenciafüggvényt kell használnunk. Ebben a speciális esetben tehát az ebből kiinduló Warren-féle számitás mégis alkalmas a diffuz szórás intenzitásának a tárgyalására. Ezzel igazoltuk a diffuz szórás [7]-ben található ilyen tárgyalásának közelitő jogosságát annak a [7] -ben alkalmazott további rendezetlenségi feltevésnek a felhasználása nélkül, amely szerint a c-jen-

gelyre merőleges rácssikok párhuzamossága az ott vizsgált szénféleségnél csak nagyon kis mértékben valósult meg.

Az elmondottakból adódik meggondolásaink lehetséges szerepe a tárgyalt szénféleségek koherens diffuz szórásának értelmezésében. Az általunk megadott módszerrel számított, tehát a rendezetlenségi feltevésnek valóban megfelelő interferenciafüggvényt és a helyes /tehát a síkrács-/ szerkezeti faktort kellene használnunk a Debye-Scherrer intenzitáseloszlás számítására, és a számítást olyan exaktabb módon kellene elvégeznünk, hogy az a szórás diffuz részére is eléggé jó legyen. Az igy számitott és a kisérleti intenzitás-görbék összehasonlitásával következtetni lehetne a rendezetlenségek fajtájára és nagyságára. Amint idézett munkánkban [1] kimutattuk, a reflexió szélességnek és a reflexió helyén az abszolut módon meghatározott koherens diffuz intenzitásnak a viszonya nagyon célszerü jellemzője lehetne a rendezetlenségnek.

Ilyen vizsgálatokra elsősorban neutrondiffrakciós mérések volnának alkalmasak. Ez a következő sajátságok következménye.-A lassu neutronok abszorpciója sokkal kisebb, mint a röntgensugárzásé.- A neutronok szénen való szóródása gyakorlatilag teljesen koherens, ezzel szemben a röntgenszórás esetében a koherens részt csak a jelentős inkoherens szórás számitás utján való levonásával kaphatjuk meg, ami csak meglehetős bizonytalansággal történhet.- Ezekből a tulajdonságokból az is következik, hogy a neutronszórás esetében viszonylag könnyen lehet abszolut intenzitás-méréseket végezni.- A röntgendiffrakció esetében az intenzitás erősen csökken a szórási szög növekedésével, az atomalakfaktor csökkenése következtében. A neutrondiffrakciónál ez a mérési szempontból kellemetlen hatás hiányzik, mert az atomalakfaktor itt nem játszik szerepet. Ez még azért is előnyös, mert a szén atomalakfaktora nem ismeretes eléggé megbizhatóan [3]. Számitási szempontból pedig kellemes, hogy a kristályszerkezeti faktor igy egyszerübb függvény.

Rá kell végül mutatnunk arra, hogy módszerünk konkrét esetekre való alkalmazását sajnos nagy matematikai nehézségek gátolják, amelyek a fellépő integrálok kiszámitásával kapcsolatosak. Az elmondottak alapján ugy tünik, hogy nem érdektelen feladat ezeknek a nehézségeknek a megoldása.

VI.

Befejezésül röviden összefoglaljuk megállapitásainkat.

Rámutattunk a Warren-féle tárgyalás hiányosságaira. Kimutattuk, hogy ezeknek ellenére a Warren-féle összefüggések alkalmazása a (hk) tipusu reflexiók szélességének, ill. az ezekből adódó /tehát a konvencionális c-tengelyre merőleges/ krisztallitméreteknek a számitására legtöbbször megengedhető, bár általában a mérési pontatlanság által okozott hibáknál nagyobb hibákra vezet. A c-tengellyel párhuzamos méretnek a Warren-féle tárgyalás alapján való szokásos meghatározását azonban teljesen kétes-értékünek kell tekintenünk.

Nem engedhető meg a Warren-féle számitás alkalmazása a szórás diffuz részére /és Warren nem is használta erre!/, mégpedig két okból: 1. A számitás a rendezetlenségek fajtáját és nagyságát megfelelően figyelembe nem vevő, ezekre jellemző paramétert nem tartalmazó interferenciafüggvényből indul ki, 2. olyan közelitést tartalmaz, amely diffuz szórás esetében általában nem engedhető meg.

Kimutattuk, hogy egy irodalmi esetben [7] a diffuz intenzitásnak a Warren-féle tárgyalásra támaszkodó számitását az ott alkalmazott további rendezetlenségi feltevés felhasználása nélkül is közelitőleg helyesnek mondhatjuk.

Megadtuk a módszert a rendezetlenségeket helyesen figyelembe vevő interferenciafüggvény kiszámitására, és kijelöltük a rendezetlenségek fajtájának és nagyságának meghatározására követendő eljárást. Ennek keresztülvitelét egyelőre matematikai nehézségek gátolják.

Irodalom

[1] Szabó P., Acta Phys. Hung. 9, 285 /1959/

[2] Arnfelt H., Arkiv f. Mat.,Astron.,Fys. 23, B 1, /1932/

[3] Bacon G.E., Acta Cryst. 5, 492 /1952/

[4] Hofmann U., Wilm D., Z.für phys.Chemie B 18, 401 /1932/; Z.für Elektrochemie 42, 504 /1936/; Clark G., Rhodes H., Ind.Eng.Chem.Anal.Ed. 12, 66 /1940/; Biastoch K., Hofmann U., Angew. Chemie 53, 327 /1940/ stb.

[5] Warren B.E., Phys. Rev 59, 693 /1941/

[6] Biscoe J., Warren B.E., J.Appl.Phys. 13, 364/1942/ stb.

[7] Franklin R.E., Acta Cryst. 3, 107 /1950/

[8] v.Laue M., Z.für Krist. 64, 115 /1926/

KFKI Közlemények 7.évf.5.szám, 1959.

RELAXÁCIÓS IDŐK MEGHATÁROZÁSA FÉMEKBEN ELEKTRON-MAG KETTŐS REZONANCIA ALAPJÁN

Irta: Tompa Kálmán

Elektromágneses Hullámok Osztálya

Összefoglalás

A mag-rezonancia telitésnek az Overhauser effektus eredményeként kapott stacionárius magpolarizációra való hatását vizsgáljuk meg. Megmutatjuk, hogy az Overhauser effektus kisérleti igazolásával kapcsolatban elvégzett magrezonancia abszorpciós mérések olyan természetüek, hogy a stacionárius mag-polarizációt csökkentik. A kapott eredmények alapján rámutatunk a T_n, T_n' és T_0 magrelaxációs idők egy uj módszerrel történő meghatározásának a lehetőségére.

Bevezetés

Fématommagok polarizálására, az Overhauser [1] által javasolt eljárás a vezetési sáv elektronjainak elektron-rezonancia telitésén alapszik. A polarizációért az elektron saját mágneses momentuma, β_e és a mag mágneses momentum, β_n közötti kölcsönhatás a felelős. A kölcsönhatási Hamilton operátor [2]:

$$H = -\frac{8\pi}{3} \cdot \beta_e \cdot \beta_n \cdot \sigma_e : \sigma_n \cdot S(r) \qquad (1)$$

ahol σ_e , σ_n az elektron, illetve a mag Pauli-féle spin operátora, és $S(r)$ a tekintett mag és elektron közötti távolság delta-függvénye.

Az elektronspin-rezonancia telités akkor lép fel, ha a fém mintát H_0 állandó és H_0 -ra merőleges, $2 . H_e \cdot \cos \omega_e t$ váltakozó mágneses térbe helyezzük, ahol az ω_e körfrekvenciára az elektron-rezonancia feltétel, $\hbar \omega_e = 2\beta_e (H_0 + \Delta H)$ teljesül,/ ΔH belső mágneses tér/. A váltakozó mágneses térből történő energia felvétel hatására a magasabb energiaállapotban lévő (elektronspin és H_0 párhuzamos) elektronok száma megnő. A rendszer ekkor nincs egyensúlyban és azok a folyamatok, amelyek igyekeznek azt egyensulyi állapotába visszavinni, az (1) kölcsönhatásnak megfelelően magátmeneteket hoznak létre. A ráccsal történő egyéb kölcsönhatások csak azt eredményezik, hogy az elektron-rezonanciát nehezebb teliteni. Minden egyes elektronspin átbillenésnek, a magasabb energia állapotból az alacsonyabba, amely az (1) kölcsönhatásnak felel meg, egy olyan magátmenet fog megfelelni, amelynél a mag impulzusmomentumának a H_0 irányra eső vetülete $\hbar$ értékkel megnő. Feles spinü, pozitiv mágneses momentumu magoknál (a továbbiakban ezekről lesz szó) a kölcsönhatás eredményeképpen tehát az alacsonyabb energiáju spinbeállásnak (magspin és H_0 párhuzamos) megfelelő magok száma megnő, ami a rács hőmérsékleténél alacsonyabb

magspin-hőmérsékletnek felel meg ($\Theta_{n_s} < \Theta$). A magok ráccsal történő kölcsönhatása következtében többségben olyan magátmenetek jönnek létre, amelyek a magspin-rendszer hőmérsékletét emelik, azaz az alacsonyabb energiaállapotban lévő magok számát csökkentik. A két folyamat hatására beálló magspin-hőmérséklet alacsonyabb lesz a rácshőmérsékletnél, a kétféle magspin beállásnak megfelelő energiaállapotokban lévő magok számának a különbsége eltér a hőmérséklet egyensuly ($\Theta_{n_s} = \Theta$) esetén felvett, a Boltzmann eloszlásnak megfelelő értéktől. A betöltöttség különbségére ($\Delta = N_{alacsonyabb} - N_{magasabb}$) Overhauser a következő eredményt kapta [1]:

$$\Delta = \frac{N \cdot \hbar \cdot H_e}{2 \cdot k \cdot \Theta} \cdot \left[\gamma_n + s \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot |\gamma_e| \right], \qquad (2)$$

ahol N az 1 cm^3 térfogatban lévő magok száma, k a Boltzmann-állandó, γ_n és γ_e a mag illetve elektron giromágneses faktora, T_n a magspin-rács relaxációs idő, T_n' az (1) kölcsönhatásnak megfelelő mag realxációs idő, s az elektron rezonancia telitési faktor, amelynek értéke:

$$s = 1 - \frac{D}{D_0} = \frac{\gamma_e^2 \cdot H_e^2 \cdot T_{e1} \cdot T_{e2}}{1 + \gamma_e^2 \cdot H_e^2 \cdot T_{e1} \cdot T_{e2}}, \qquad (3)$$

ahol D ill. D_0 a H_0 állandó mágneses térben a kétféle elektron spin beállásnak megfelelő energia szintek betöltöttségének különbsége, illetve annak hőmérséklet egyensuly esetén felvett értéke, és T_{e1} az elektronspin-rács, T_{e2} az elektronok spin-spin relaxációs ideje. A telitési faktor értéke zéró $D = D_0$ és egy teljes telités, azaz a két energia szint egyenlő betöltődöttsége esetén ($D = 0$).

Δ értéke, ami a magpolarizációval arányos, függ az elektron-rezonancia telitéstől. Az eredmény ugy értelmezhető, hogy a magok γ_n giromágneses faktor helyett $\gamma_{eff} = \gamma_n + s\,(T_n / T_n')\,|\gamma_e|$ giromágneses faktorral rendelkeznek, ami $s \sim 1$ és $T_n / T_n' \sim 1$ esetén az energiaszintek betöltöttségének különbségében $\sim 10^3$ faktornak felel meg.

A betöltöttségek különbsége, Δ határozza meg a sztatikus szuszceptibilitás értékét, igy elektronrezonancia telités esetén a sztatikus szuszceptibilitás (2)-nek megfelelően megnő. Mivel a magrezonancia abszorpciós vizsgálatoknál az abszorpciós jel amplitudója függ a sztatikus szuszceptibilitásból, többen ([3],[4], illetve nem fémek esetén [5]) próbálkoztak az Overhauser-féle elméletet magrezonancia abszorpciós módszerrel igazolni.

Megvizsgáljuk, hogy az anyagmintában milyen folyamatok játszódnak le magrezonancia abszorpció esetén, ha az elektronrezonancia részben telitve van. A kapott eredmények alapján az Overhauser-effektus kisérleti igazolásával kapcsolatos néhány körülményre hivjuk fel a figyelmet és rámutatunk a mag, illetve az elektron relaxációs idők meghatározásának a lehetőségére.

Elektron-mag kettős-rezonancia abszorpció

Egyszerüség kedvéért tételezzük fel, hogy a vizsgált magok pozitiv mágneses momentummal rendelkeznek és az I magspin értéke: $I = 1/2$. A fém min-

tát helyezzük H_0 állandó, erre merőleges $2H_0 \cos \omega_e t$ mikrohullámu és mindkettőre merőleges $2H_n \cos \omega_n t$ rádiófrekvenciás mágneses térbe, ahol az ω_n körfrekvenciára a következő feltétel érvényes: $\omega_n = \gamma_n (H_0 + \Delta H)$. A H_0 térben történő kétféle mag, illetve elektronspin beállásnak megfelelő energiaszintek betöltöttségének különbségei Δ, ill. D, ezek hőmérsékleti egyensuly esetén felvett értékei Δ_0, ill. D_0. Ahol az utóbbi két mennyiségre a következő összefüggés áll fenn (pl. [1]):

$$\Delta_0 = \frac{N \cdot \hbar \cdot H_0 \cdot \gamma_n}{2 k \Theta} , \tag{4}$$

$$D_0 = \frac{3 \cdot N \cdot \hbar \cdot H_0 \cdot |\gamma_e|}{4 \cdot \varepsilon_f} , \tag{5}$$

ahol ε_f a Fermi eloszlás határenergiája.

Δ időbeli változását a következő differenciálegyenlettel irhatjuk le:

$$\frac{d\Delta}{dt} = \frac{\Delta_0 - \Delta}{T_n} + \frac{D_0 - D}{T_1'} - 2 \Delta P , \tag{6}$$

ahol T_1' a hiperfinom kölcsönhatásnak megfelelő elektron relaxációs idő, P a H_n mágneses tér hatására, az alacsonyabb energia állapotból a magasabba történő, időegység alatt bekövetkező átmenetek átmeneti valószinüsége, értéke [6]:

$$P = \frac{1}{4} \cdot \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot g(\nu) , \tag{7}$$

ahol $g(\nu)$ a magrezonancia abszorpciós görbe szélességére jellemző mennyiség.

(6) egyenlet első két tagja [1] megfelelő egyenletének felel meg $G = 1$ esetén, ami $J = 1/2$ esetén érvényes, ahol az első tag a magspin-rács kölcsönhatást, a második a hiperfinom kölcsönhatásnak megfelelő elektron relaxációt irja le. Az egyenlet harmadik tagja a H_n térből történő tiszta energia abszorpciónak felel meg.

T_1' kifejezhető T_n' segitségével [1]:

$$T_1' = \frac{3k \cdot \Theta \cdot T_n'}{2 \varepsilon_f} . \tag{8}$$

Keressünk a $\frac{d\Delta}{dt} = 0$ stacionárius állapotnak megfelelő Δ_s értéket (4), (5), (7) és (8) felhasználásával és az $s = 1 - D/D_0$ ismert összefüggés behelyettesitésével (6) egyenlet alapján kapjuk:

$$\Delta_s = \frac{\frac{N \cdot \hbar \cdot H_0}{2 k \Theta} \cdot \gamma_n}{1 + \frac{1}{2} \cdot \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot g(\nu)} \cdot \left[1 + s \, \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n} \right] . \tag{9}$$

Mivel a továbbiakban nem vagyunk kiváncsiak a magrezonancia abszorpciós görbe alakjára, csak amplitudójára, igy $g(\nu_n) = 2 \cdot T_2$ helyettesitéssel (T_2 mag spin-spin relaxációs idő) (9) a következőképpen irható:

$$\Delta_s = \frac{\frac{N \cdot \hbar \cdot H_0}{2 k \Theta}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \cdot \left[1 + s \, \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n} \right] . \tag{10}$$

(1o) egyenlet $H_n = 0$ esetén (2) formulát adja vissza. Az optimális magrezonancia mérés feltétele $H_n = \{\gamma_n \cdot \sqrt{T_n \cdot T_2}\}^{-1}$, amelynek teljesülése esetén a stacionárius állapotnak megfelelő Δ_s érték fele a "tiszta Overhauser-effektus" esetén várható, (2)-nek megfelelő Δ értéknek.

Határozzuk meg a z_n és s_n magrezonancia telitési faktorok értékét.

$$z_n = \frac{\Delta_s}{\Delta_o} = \frac{1 + s \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_2 \cdot T_n} \qquad (11)$$

és

$$s_n = 1 - z_n = \frac{\gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2 - s \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \qquad (12)$$

Az Overhauser-effektus hatására létrejövő negativ telitést a magrezonancia abszorpció csökkenti és $s_n = 0$ érték is elérhető $\Delta_s = \Delta_o$ esetén, amikor az Overhauser-effektus hatására létrejött polarizáció eltünik.

Végül nézzük meg, hogy ezen stacionárius telitési állapot, milyen magspin-hőmérsékletnek felel meg. A spinhőmérséklet definiciója értelmében (pl. [6]) $\Theta_{ns} = \Theta \cdot \frac{\Delta_o}{\Delta_s} = \Theta / z_n$ -nek egyenlő. (11) felhasználásával:

$$\Theta_{ns} = \Theta \frac{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_2 \cdot T_n}{1 + s \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}} \qquad (13)$$

Tehát Θ_{ns} általában eltér a rács hőmérsékletétől. $H_n = 0$ esetén alacsonyabb a rács hőmérsékleténél és a H_n térből történő energia abszorpció hatására emelkedik, azonban nem tul nagy H_n terek esetén még mindig a rácshőmérséklet alatt marad.

Mágneses szuszceptibilitások

A (13)-as formulának megfelelő magspin-hőmérséklet alapján könnyen meghatározhatjuk a stacionárius Δ_s értéknek megfelelő sztatikus szuszceptibilitás értékét. A Θ_{ns} magspin-hőmérséklethez tartozó sztatikus szuszceptibilitás [6]:

$$\chi_o(\Theta_{ns}) = \frac{N \cdot \beta_n^2}{k \cdot \Theta_{ns}} = \frac{N \beta_n^2}{k \cdot \Theta} \cdot z_n \,, \qquad (14)$$

amely a $\chi_o = N\beta_n^2 / k\Theta$ jelölés bevezetésével $\chi_o(\Theta_{ns}) = z_n \chi_o$ alakban irható. Ennek és (11)-nek a felhasználásával:

$$\chi_o(\Theta_{ns}) = \chi_o \cdot \frac{1 + s \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \,. \qquad (15)$$

Második lépésként határozzuk meg a komplex szuszceptibilitás imaginárius részének, χ''-nek az értékét. Erre azért van szükségünk, mert a magrezonancia abszorpciónál kapott abszorpciós görbe amplitudója χ'' -vel arányos. A χ'' szuszceptibilitás [6] alapján

$$\chi'' = \frac{1}{2} \cdot \pi \cdot \chi_o(\Theta_{ns}) \nu_n \cdot g(\nu)$$

illetve ennek maximuma a $\nu = \nu_n$ frekvenciánál:

$$\chi''_{max} = \pi \cdot \chi_o \cdot \mathcal{Z}_n \, \nu_n \cdot T_2 \quad (16)$$

Behelyettesitve $\mathcal{Z}_n$ (11) alatt felirt értékét és az $\omega_n = 2\pi\nu_n$ körfrekvenciát:

$$\chi''_{max} = \frac{1}{2} \cdot \omega_n \cdot \chi_o \cdot T_2 \cdot \left[\frac{1 - s \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \right].$$

Eredményünk két szempontból érdekes.

a/ Az Overhauser-effektus kisérleti igazolásával kapcsolatban többen vizsgálták a magrezonancia abszorpciónál kapott abszorpciós jel amplitudójának növekedését az elektronrezonancia telités függvényében, (17) alapján látható, hogy a χ''_{max} -al arányos amplitudó s -en és az állandókon kivül, függ még H_n -től a magrezonancia abszorpció vizsgálatánál alkalmazott mágneses tér amplitudójától is. Eredményeinkből láthatjuk, hogy egy effektus kimutatására olyan mérési módszert választottunk, amely magát az effektust csökkenti. Nem szerencsés esetben ($s << 1$ és... $T_n / T_n' << 1$) a csökkenés egészen nagy lehet, de még optimális magrezonancia mérés esetén is csak fele akkora χ''_{max} értéket kapunk, mint amekkora az Overhauser-effektusnak megfelelne. Tehát az elmélet kvantitativ igazolásánál feltétlenül figyelembe kell venni a magrezonancia telités jelenségét.

b/ Amint a továbbiakban meg fogjuk mutatni, a χ''_{max} szuszceptibilitás függése a H_n mágneses tértől és az s telitési faktortól lehetőséget ad számunkra a T_n, T_n' és T_2 relaxációs idők, valamint a $T_{e1} \cdot T_{e2}$ szorzat kisérleti meghatározására.

Relaxációs idők meghatározása

Az Overhauser-effektus igazolásával kapcsolatban, illetve a relaxációs idők meghatározása érdekében célszerü a következő mennyiségek kisérleti meghatározása:

1. A magnyomaték jel amplitudójának (de) mérése H_n függvényében, $s = s^*$ konstans elektronrezonancia telités esetén:

$$de' = de' \, (H_n \, , \; s = konst).$$

2. Az abszorpciós jel amplitudójának mérése s függvényében $H_n = H_n^*$ konstans mágneses tér esetén:

$$de = de \, (s, H_n = konst).$$

A kiértékelés egyszerübbé válik, ha meghatározzuk még a következő mennyiségeket:

3. A magrezonancia abszorpciós tekercsen lévő feszültséget H_n függvényében:

$$e' = e' \, (H_n).$$

4. Amennyiben lehetséges, az abszorpciós jel amplitudóját $s = 0$ és $H_n = H_n^*$ esetén:

$$de_o = de_o\,(s = 0,\ H_n = konst).$$

Először vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor de és de_o ismeretesek. Az abszorpciós jel amplitudója [7] szerint $de = A \cdot H_n\, \chi''_{max}$ ahol A a tekercs adataitól függő állandó. (17) felhasználásával de a következőképpen irható:

$$de = \frac{A}{2} \cdot H_n\, \omega_n\, \chi_o \cdot T_2 \cdot \left[\frac{1 + s \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \right] \tag{18}$$

és $s = 0$ esetén

$$de_o = \frac{A}{2} \cdot H_n\, \omega_n\, \chi_o \cdot T_2 \cdot \left[\frac{1}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \right] \tag{19}$$

Képezzük a két mennyiség hányadosát

$$\frac{de}{de_o} = 1 + s \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}. \tag{20}$$

A formulából a tekercsjellemzők és néhány állandó értéke kiesett, ami előnyös a kiértékelés és a kapott eredmények pontossága szempontjából. A (2o) kifejezés alapján az Overhauser-elmélet igazolása a legkényelmesebb, és az előbbi fejezet végén említett, a magrezonancia abszorpció telitésével kapcsolatos nehézségek sem játszanak szerepet. Igy Carver és Slichter [3] mérési eredményei az elmélet igazolását jelenthetik Na esetén, sajnos a szerzők nem értékelik ki mérésüket olyan részletesen, mint Li esetén. Az utóbbi, Lira vonatkozó eredmények, amelyekből a szerzők kvantitativ következtetéseket vonnak le, csak akkor érvényesek, ha az optimálisnál jóval alacsonyabb H_n mágneses térrel végezték a mérést, amiről azonban nem tesznek említést. Ha ez nem igy történt, a közvetve meghatározott de_o amplitudó kiszámolásánál, figyelembe kellett volna venni annak függését $\gamma_n^2 \cdot T_n \cdot T_2 \cdot H_n^2$ mennyiségektől is. [4] mérési eredményei sem használhatók fel az elmélet kvantitativ igazolására, ugyanis csak a de amplitudót mérték és igy fellépnek az előző fejezet végén említett, a magrezonancia telitéssel kapcsolatos problémák, azonkivül a mérési eredményeiket feltüntető grafikonon az ordináta értékek tetszőlegesek.

A továbbiakban megvizsgáljuk, hogy (2o) alapján milyen összefüggéseket adhatunk meg, amelyek alapján a relaxációs időket meghatározhatjuk.

Helyettesitsük be s (3) alatt felirt értékét (2o)-ba és átalakitva az egyenletet,

$$\frac{1}{\frac{de}{de_o} - 1} = \frac{T_n'}{T_n} \cdot \frac{\gamma_n}{|\gamma_e|} + \frac{1}{\gamma_e^2 \cdot T_{e1} \cdot T_{e2}} \cdot \frac{T_n'}{T_n} \cdot \frac{\gamma_n}{|\gamma_e|} \cdot \frac{1}{H_e^2}. \tag{21}$$

$1/H_e^2$ függvényében egy egyenes egyenletét kapjuk, amelynek

$$a = \frac{T_n'}{T_n} \cdot \frac{\gamma_n}{|\gamma_e|} \tag{22}$$

tengelymetszete és

$$tg\,\alpha = \frac{1}{\gamma_e^2 \cdot T_{e1} \cdot T_{e2}} \cdot \frac{T_n'}{T_n} \cdot \frac{\gamma_n}{|\gamma_e|} \tag{23}$$

iránytangense az abszorpciós jel relativ amplitudója és H_e mérése alapján meghatározható.

A T_{e1} és T_{e2} relaxációs idők szorzatát·mérhető mennyiségekkel kifejezve:

$$T_{e1} \cdot T_{e2} = \frac{1}{tg\,\alpha \cdot \gamma_e^2} \cdot a. \tag{24}$$

További összefüggéseket határozhatunk meg, amelyek a T_n', T_n relaxációs időkre vonatkoznak. A H_n függvényében felvett de' görbe vizsgálata helyett célszerűbb a de'/e' modulációs mélység diszkutálása. A modulációs mélység [8] alapján $de'/e = K x''_{max}$, ahol K tekercs jellemzőktől függő állandó, (17) alapján a következőképpen irható:

$$\frac{de'}{e'} = \frac{K}{2}\,\omega_n\, x_o \cdot T_2 \cdot \left[\frac{1 + s^* \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^2 \cdot T_n \cdot T_2} \right]. \tag{25}$$

Bevezetve a $B = \frac{K}{2}\omega_n x_o$ jelölést és átrendezve az egyenletet, a következő eredményt kapjuk:

$$B\,\frac{e'}{de'} = \frac{1}{T_2} \cdot \frac{1}{1 + s^* \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}} + \frac{1}{T_2} \cdot \frac{\gamma_n^2\, T_n \cdot T_2}{1 + s^* \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}} \cdot H_n^2 \tag{26}$$

H_n^2 függvényében egy egyenes egyenletét kaptuk, amelynek tengelymetszete:

$$c = \frac{1}{T_2 \left[1 + s^* \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n} \right]} \tag{27}$$

és iránytangense:

$$tg\,\gamma = \frac{\gamma_n^2 \cdot T_n}{\left[1 + s^* \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n} \right]} \tag{28}$$

(22), (27) és (28) alapján a három relasációs időt kifejezhetjük mérhető mennyiségekkel. Az egyenletrendszer megoldásának eredménye:

$$T_2 = \frac{a}{c \cdot [a + s^*]} \tag{29}$$

$$T_n = \frac{tg\,\gamma}{a \cdot \gamma_n^2} [a + s^*] \tag{30}$$

$$T_n' = \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n} \cdot \frac{tg\,\gamma}{\gamma_n^2} \cdot [a + s^*]. \tag{31}$$

Bonyolultabb a helyzet, ha a de_o amplitudó kisérletileg nem határozható meg. Fémek esetén ugyanis nem minden esetben mérhető a de_o amplitudó. Ebben az esetben a de/e kisérletileg meghatározott függvényből érdemes kiindulni [itt $e = e(H_n^*)$]

$$\frac{1}{B} \cdot \frac{de}{e} = \frac{T_2}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^{*2} \cdot T_n \cdot T_2} + \frac{T_2 \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^{*2} \cdot T_n \cdot T_2} \cdot s \cdot \tag{32}$$

Ismét egy egyenes egyenletét kaptuk s függvényében, amelynek iránytangense és tengelymetszete a kisérleti adatok alapján meghatározható, értékeik:

$$b = \frac{T_2}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^* \cdot T_n \cdot T_2} \tag{33}$$

$$tg\beta = \frac{T_2 \cdot \frac{T_n}{T_n'} \cdot \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n}}{1 + \gamma_n^2 \cdot H_n^{*2} \cdot T_n \cdot T_2} \tag{34}$$

(27), (28), (33) és (34) négy egyenlet a három relaxációs idő meghatározására. Az egyenletek nem függetlenek egymástól, a következő összefüggés áll fenn köztük $(s^* \cdot tg\beta + b)(H_n^{*2} \cdot tg\gamma + c) = 1$

Az egyenletrendszer megoldása:

$$T_2 = \frac{b}{c\,[b + s^* tg\beta]} \tag{35}$$

$$T_n = \frac{1}{\gamma_n^2} \cdot \frac{tg\gamma}{b} \cdot \left[b + s^* \cdot tg\beta\right] \tag{36}$$

$$T_n' \frac{|\gamma_e|}{\gamma_n^3} \cdot \frac{tg\gamma}{tg\beta} \cdot \left[b + s^* \cdot tg\beta\right]. \tag{37}$$

A relaxációs időkre vonatkozó formulák egyenlők, ami az $a = b/tg\beta$ mennyiség (29), (3o) és (31) formulákba való behelyettesitésével belátható. Az $a = b/tg\beta$ összefüggés érvényessége (33), (34) és (22) alapján belátható.

A megadott mérési eljárás különösen a T_n' relaxációs idő meghatározása szempontjából jelentős.

Befejezésül szeretnék köszönetet mondani Gécs Mária és Mertz János munkatársaimnak, akik a témára felhivták a figyelmemet és munkám során tanácsaikkal támogattak, és dr.Hoffmann Tibor osztályvezetőnek a kézirat átnézése során tett megjegyzéseiért.

I r o d a l o m

[1] Overhauser A.W., Phys.Rev. 92, 411 /1953/
[2] Overhauser A.W., Phys.Rev. 89, 689 /1953/
[3] Carver T.R., Slichter C.P., Phys.Rev. 1o2, 975-98o /1956/
[4] Бекетко, К.А. Конгорский, Е.И. Физика Металлов и металловедение 6. 609. /1958/
[5] Beljers H.G., Van der Kint L., Wierigen J.S., Phys.Rev. 95, 1683 /1954/
[6] Andrew E.R.: Nuclear magnetic resonance. Cambridge, 1956.
[7] Grivet P.: La resonance paramagnetique nucléaire. Paris, 1955.
[8] Faragó P.S., Gécs M., Mertz J., Acta Phys.Hung. 3, 329-334 /1954/

Érkezett 1959.május 18.

KFKI Közlemények 7.évf.3.szám, 1959.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT VIII/3. 1960.

NEUTRON-DIFFRAKTOMÉTEREKHEZ DETEKTORKÉNT ALKALMAS NAGY BF_3-OS SZÁMLÁLÓCSÖVEK*

GORDON JÁNOS és SZABÓ PÁL
Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest
Szilárdtestfizikai Laboratórium

Neutron-diffraktométerben való felhasználás céljára elkészítettünk egy az irodalomban leírt [1] számlálócső-típust, továbbá készítettünk olyan saját konstrukciójú csöveket, amelyektől nagyobb számlálási hatásfokot várhattunk. Méréseink azt mutatják, hogy a kétféle cső a hatásfoktól eltekintve egyenértékű, és hogy a saját csöveinkkel mintegy 1,6-szer nagyobb hatásfokot érhetünk el.

1. Bevezetés

Neutron-diffrakciós vizsgálatoknál nagy keresztmetszetű sugárnyalábok intenzitását kell mérni. A mérendő intenzitások igen kicsik, mert a berendezés jól kollimált primér sugárnyalábot használ, ebből egy monokromatikus komponenst (igen szűk hullámhossz-tartományt) választ ki, és ennek polikristályos anyagon való szórását méri valamely irányban, igen kis térszögben. Így az intenzitás-mérés hatásfokának jósága a mérések szempontjából döntő fontosságú.

Erre a célra megfelelően nagy keresztmetszetű, végablakos BF_3-os számlálócsöveket használnak. Ilyen számlálócsöveket saját diffraktométerünkhöz magunknak kellett előállítanunk. Ezeknek a csöveknek a konstrukcióját, készítésük technológiáját és legfőbb működési jellemzőiket közöljük itt.

A készített csövek kétfélék. Az egyik fajta a *Fowler* és *Tunnicliffe* [1] leírásában szereplő fém-végablakos konstrukció (a továbbiakban: F—T típus) reprodukálása. Ez az a csőtípus, amelyet neutron-diffraktométerekben és kristály-spektrométerekben használni szoktak [2]. Ennél a csőtípusnál a detektálandó neutron-nyaláb először egy elég nagy inaktív térfogatba jut, ahol abszorpció van, de detektálás nincs. Ezen kívántunk javítani a másik, saját csőkonstrukciónkkal (a továbbiakban: üvegvégablakos típus). Ennek inaktív térfogata kisebb, hatásfoka tehát nagyobb, mint az előbbié.

A csövek működésének vizsgálata és a kétféle csőtípus hatásfokának összehasonlítása legcélszerűbben a diffraktométeren, jól kollimált és nagy intenzitású monokromatikus primér neutron-nyalábbal történhetne. A diffrakto-

* Érkezett 1960. III. 17.

méter használatbavétele szempontjából azonban fontos volt ezeket a vizsgálatokat a diffraktométer megépülése előtt elvégeznünk. Ezért a méréseket egy Po—Be forrás neutronjaival végeztük.

A forrást egy tartóban helyeztük el, amely a neutronok lassítására, bizonyos mértékben kollimált nyaláb előállítására és sugárvédelemre szolgál. A kis intenzitás miatt természetesen nem alkalmazhattunk olyan jó kollimálást, mint amilyennel a diffraktométernél kívántunk dolgozni. Világos azonban, hogy csövek jellemzésére felvett adatok emiatt csak romlottak. A tényleges felhasználási körülmények közt tehát a csövek működése kedvezőbb lesz, mint amilyennek itt közölt méréseink mutatják.

2. A számlálócsövek

Az F—T típusú csöveink felépítése — lényegtelen különbségektől eltekintve — megegyezik az [1]-ben leírt csőével. A katódhenger OSNV/A minőségű hazai, hidrogénben redukált, nagytisztaságú vörösréz. Belső átmérője 60, falvastagsága 1,5 mm. Az anódszál 50μ vastagságú wolframdrót, melyet a cső összeállítása előtt formálógázban izzítottak. A csövek belső felületét leszívás előtt hígított ammóniákban többször átmostuk, majd többszöri desztillált vizes öblítés után gyorsan szárítottuk.

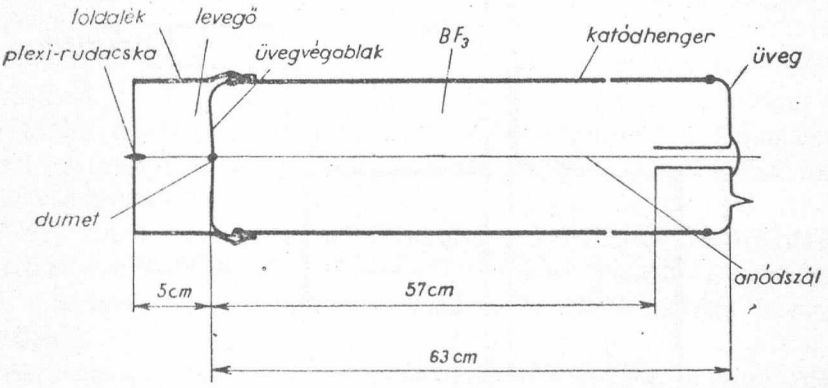
A csöveket töltés előtt 2-3 hónapig kisebb tisztaságú dúsítatlan BF_3-ban „áztattuk". Végleges töltésükre B^{10}-ben 82%-ra dúsított, nagytisztaságú BF_3 gázt alkalmaztunk. Közvetlenül a töltés előtt a csöveket 6-8 órán át 380 C°-on kb. 10^{-4} Hgmm vákuumra leszívtuk.

Ennek a csőtípusnak jellegzetessége a fém végablak és ezzel kapcsolatban a jelentős inaktív térfogat. Gondoskodni kell ugyanis arról, hogy a végablak környezetében, ahol az elektromos tér lényegesen torzult a cső belsejéhez képest, ne történjen számlálásra vezető ionizáció. Ezt ez a csőkonstrukció biztosítja. Így 7 cm hosszúságú inaktív térfogat adódik ezeknél a csöveknél. Ez az elérhető hatásfokot lényegesen csökkenti.

Üvegvégablakos típusú csöveink felépítését az 1. ábra mutatja.

A lényeges különbség az F—T típushoz képest az, hogy a katódhenger itt két, fémesen összekötött részből áll és ezek érintkezésénél van elhelyezve az üvegvégablak. A katódhenger fő része BF_3-dal van töltve, a „toldalék" rész a szabad levegővel közlekedik. Így a toldalék részben gyakorlatilag nem történik neutron-abszorpció. A toldalék hatása az, hogy az üvegvégablak környezetében már gyakorlatilag ugyanolyan az elektromos tér, mint a cső beljebb levő helyein. Az ionizáció tehát a fő rész elején olyan, mint beljebb, és így lényeges számlálási veszteség nincs.

Az üvegvégablakos típusnál is adódik bizonyos számlálási veszteség az anódszálnak az üvegen való átvezetésére szolgáló dumetgyűrű jelenléte folytán. Ui. ez azt okozza, hogy a végablak melletti kis szakaszon az anódszál közelében nem alakul ki elég nagy térerősség. A dumet-gyűrű méretei alapján ez az inaktív hossz 0,5 cm-nél kisebbnek várható. Látni fogjuk, hogy ezt méréseink igazolják.



1. ábra

Az üvegvégablak anyagának megválasztásánál az volt a szempont, hogy az üveg bórtartalma kicsi legyen és megfeleljen rézzel való kötés céljára. Ezeket a tulajdonságokat az ólomüveg elégíti ki leginkább. Ennek bórtartalma 0,1%-nál kisebb, ezért a használt 2 mm vastagság esetén abszorpciója kisebb, mint 1%.

Az üvegvégablakos típus egyéb adatai és készítési technológiája megegyeznek az F—T típusnál ismertetettekkel.

3. A csövek ellenőrzésére szolgáló berendezés

Méréseinkhez kb. 1 curie erősségű Po-Be forrást használtunk. Ehhez megfelelő tartót készítettünk.

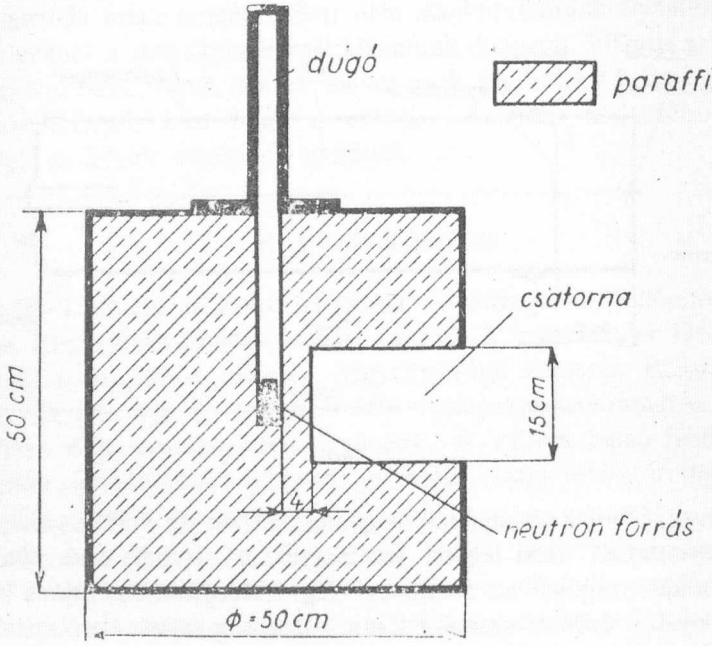
A forrástartó egy függőleges metszetének vázlatát a 2. ábra mutatja.

A vastagon húzott vonalak 1/2 mm vastagságú Cd-lemezborítást jelentenek. Kellő szilárdság biztosítására a Cd-lemezen kívül az ábrában nem jelölt Al-lemez borítja a tartót.

A csatornába különböző kollimátor-betétek helyezhetők. A betétek bórtartalmú anyaggal töltött köpenye jól illeszkedik a csatornába. A kollimáltság és az intenzitás kompromisszumaként vizsgálatainkhoz olyan betétet használtunk, amelyben 20 cm hosszú, 5 cm átmérőjű hengeres üreg volt. A 2,5 cm.

átmérőjű dugó plexivel töltött aluminiumhenger, melynek alsó végén egy 4 cm hosszú szakasz a neutronforrás befogadására van kiképezve. Használaton kívül a forrás a dugóval megfelelő magasságig felhúzható és ott rögzíthető.

A csövek mérésére a proporcionális számlálóknál szokásos kapcsolást használtuk.



2. ábra

4. A számlálócsövek vizsgálata

Mértük a csövek percenkénti beütésszámának anódfeszültség-függését, megfelelő erősítés, differenciálási időállandó és diszkrimináló feszültség mellett. A kapott görbékben mindkét típusú csőre 3%/100 V-nál kisebb meredekségű, 300 V-nál hosszabb plátót találtunk. Ez az irodalomban hasonló esetekre közölt értékekkel összhangban van [3].

Ezeket a görbéket a számlálócsövek időbeli leromlásának vizsgálatára ismételten kimértük. A mérések azt mutatták, hogy a görbék 3 hónapos időtartam után is reprodukálhatók. Mindez azt mutatja [1], hogy csöveink tisztasága kielégítő, továbbá, hogy az üvegvégablakos típus a plátógörbével jellemezhető tulajdonságok szempontjából az F—T típussal egyenértékű.

Mértük a csöveken az integrális impulzus-amplitudó eloszlást. Ez is gyakorlatilag megegyezett a kétféle csőnél, ami ugyancsak ezek egyenértékűségét mutatja.

Néhány μ curie erősségű Co^{60} preparátummal besugározva a csöveket, a γ-impulzusokat mindkét fajta csőnél a maximális neutron-amplitudó 5%-ának megfelelő diszkrimináló feszültséggel lehetett kiküszöbölni. A kétféle csőtípus tehát a γ-háttér diszkriminálása szempontjából is egyenértékű.

A hatásfoktól eltekintve tehát a kétféle csőtípust egyenértékűnek mondhatjuk. Azt kell még megvizsgálnunk, hogy az üvegvégablakos csőtípus hatásfoka mennyivel nagyobb, mint az F—T típusé.

Ebből a célból összehasonlítottuk az üvegvégablakos számlálócsövek beütésszámát az F-T típusú csövekével. Ehhez a csövek végablakait a forrástól azonos távolságban helyeztük el és a csőtengelyeket a kollimátor tengelyével egybeejtettük. A csövek működési paramétereit az előbbi mérések alapján választottuk meg.

Négy számlálócsövet hasonlítottunk össze: egy 550 Hgmm nyomású F-T, egy 700 Hgmm nyomású F-T és két 700 Hgmm nyomású üvegvégablakos típusú számlálót. Az utóbbiak egymástól kissé eltérő inaktív hosszukban különböztek.

Az üvegvégablakos csövekkel elérhető hatásfok-növekedés megállapítására természetesen optimális töltésű, azaz maximális hatásfokú F-T csővel kell az összehasonlítást megtennünk. Az F-T csövek hatásfoka [1] ugyanis

$$\eta = e^{-\Sigma \cdot M} \cdot (1 - e^{-\Sigma \cdot l}),$$

ahol

Σ a B^{10} makroszkópikus abszorpciós hatáskeresztmetszete,

M a cső inaktív hossza,

l a cső aktív hossza,

és η mint Σ, vagy (adott B^{10} tartalmú BF_3 gáz esetén) mint a gáznyomás függvénye maximummal rendelkezik. Az általunk használt gáz esetében az 550 Hgmm nyomású F-T cső hatásfoka gyakorlatilag maximális. Így az üvegvégablakos csövek beütésszámát ennek a csőnek a beütésszámához kell viszonyítanunk. A 700 Hgmm nyomású F-T típusú csövünk beütésszámát az előbbi hatásfok-képlet ellenőrzése céljából ugyancsak összehasonlítottuk az 550 Hgmm nyomású F-T cső beütésszámával. Így a következő beütésszám-hányadosokat kaptuk:

Csőfajta	Beütésszám-viszony
F—T 700 Hgmm	0,94
I. üvegvégablakos	1,64
II. üvegvégablakos	1,59

A fenti adatok a csövek helyzetének beállítási bizonytalansága miatt maximálisan 5%-ra bizonytalanok.

A két F-T cső beütésszámának viszonya a mérési pontosság határain belül megegyezik a fenti képlet alkalmazásával nyerhető hatásfok-viszonnyal.

A beütésszámok viszonyaiból a fenti képlet alapján visszaszámolva, a két üvegvégablakos cső inaktív hosszára 0,4 cm-t, ill. 0,1 cm-t, tehát plauzibilis értékeket nyertünk.

A detektálás javulását tehát, amelyet az F-T csövekkel szemben az üvegvégablakos típus alkalmazásával elértünk, utóbbiak és az 550 Hgmm nyomású F-T cső beütésszámának viszonyával, azaz 1,6 értékkel jellemezhetjük.

*

Köszönetet mondunk *Garai* László főmérnöknek és *Fülepi* Kálmán üvegtechnikusnak a számlálócsövek gondos elkészítésével nyújtott nagy segítségükért és *Madarász* Zoltánnak a számlálócsövek megtöltéséért és hasznos tanácsaiért.

IRODALOM

[1] *I. L. Fowler, P. R. Tunnicliffe,* Rev. Sci. Instr. *21,* 734, 1950.

[2] *D. G. Hurst, A. J. Pressesky, P. R. Tunnicliffe,* Rev. Sci. Instr. *21,* 705, 1950; *R. Pepinsky, B. C. Frazer, M. L. McKeown,* Rev. Sci. Instr. *25,* 699, 1954.

[3] *V. Cocconi Tongiorgi, S. Hayawaka, M. Widgotf,* Rev. Sci. Instr. *22,* 899, 1951.

NEUTRON-DIFFRAKCIÓS VIZSGÁLATOKRA VALÓ FELKÉSZÜLÉS KAPCSAN ELÉRT EREDMÉNYEINKRŐL+

Irta: Szabó Pál
Szilárdtestfizikai Laboratórium

Összefoglalás

Neutron-diffrakciós vizsgálatokra való felkészülésünkről számolunk be itt röviden. A felkészülés kapcsán eredményeket értünk el kollimátorokon átbocsátott intenzitás számításában, ill. kollimátorok méretezésében; monokromátor-kristályok előállitásában és orientálásában; egy uj számlálócső-konstrukció kidolgozásában;és finomkristályos szenek szórásának elméletében.

A budapesti Központi Fizikai Kutató Intézet Szilárdtestfizikai Laboratóriumában felkészültünk neutron-diffrakciós vizsgálatokra. Az ennek kapcsán elért eredményekről számolok be itt röviden.

1. Diffraktométer-tipus

Szilárdtestfizikai kutatásaink céljára megterveztünk és megépitettünk egy neutron-diffraktométert. Széleskörü felhasználásra,főképpen polikristályos anyagok vizsgálatára alkalmas berendezést kivántunk épiteni. Ennek ismeretes következményeként a lehetséges tipusok közül a nagyméretüek jöhettek számitásba. Az irodalomban ismertetett nagyméretü diffraktométerek közül a tervezéshez a Wollan és Shull ismert cikkében szereplő elrendezési vázlatot vettük alapul.Ugy tünik ugyanis, hogy ez az elrendezés meglehetősen tág teret enged a sugárvédő rétegek alkalmazásának, amit döntő szempontnak tekintettünk.

2. Kollimátor-méretezés

Meggondolásokat végeztünk a primér kollimátor méretezésével kapcsolatban. Az itt használt kollimátorok Soller tipusuak.

Kidolgoztuk az ilyen kollimátorokon közvetlenül átbocsátott intenzitás számitását [1] . Az átbocsátott intenzitást elemi függvények zárt kifejezése alakjában megadtuk. Mivel ennek numerikus kiértékelése igen fáradsá-

+ 1960 juniusban a drezdai Reaktor-Konferencián elhangzott előadás.

gos és hosszadalmas, azért közelitő formulákat is levezettünk, és kimutattuk, hogy minden gyakorlatilag érdekes esetben ez utóbbiak használata lényegesen egyszerübb és teljesen kielégitő.

A számitásokból kiderül, hogy adott csatorna-méretek és kollimátor-összkeresztmetszet, továbbá előirt vizszintes szögdivergencia esetén a kollimátoron közvetlenül átbocsátott intenzitásnak mint a kollimátor-hosszuság, vagy mint az ezzél egyértelmüen összefüggő osztásszám függvényének maximuma, a kollimátor-méretezésnek tehát optimuma van.

Foglalkoztunk továbbá az ilyen kollimátorok által a lemez-falakon fellépő totálreflexió következtében átbocsátott intenzitás számitásával[2]. Tekintettel arra, hogy a lemezeken a totálreflexió hatásfoka meglehetősen kicsiny, számitásunkban az egyszeres totálreflexióval átbocsátott intenzitásra szoritkoztunk. Számitásainkat azonban könnyen lehet alkalmazni a többszörös totálreflexió figyelembevételére is.

A számitás kapcsán kimutattuk, hogy /a közvetlen átbocsátás előbb tárgyalt esetéhez hasonlóan/ a kollimátor-méreteknek a totál-reflexióval átjutó intenzitás szempontjából is van optimuma, és ez minden gyakorlatilag érdekes esetben összeesik a közvetlenül átbocsátott intenzitás esetében kapott optimummal.

Ez azért fontos, mert igy az optimum helye, azaz a kollimátorok optimális méretezése nem függ a totálreflexiónak a lemezfelületek minőségétől erősen függő, tehát esetenként változó hatásfokától.

Ebben a munkában rámutattunk arra, hogy finomabb /1-2 szögperces vizszintes szögdivergenciáju/ kollimátorok esetében, amilyeneket kristályspektrometriai célokra kell használni, a totálreflexiónak kedvező, ti. intenzitást növelő hatása mellett káros hatása is van. Ugyanis a totálreflexió határszöge a rendelkezésre álló kollimátor-anyagokon /elsősorban acélon/ kb. 10'. Világos, hogy a geometriailag ennél kisebbre megszabott vizszintes szögdivergenciát a totálreflexió effelé az érték felé növeli, még pedig annál inkább, minél nagyobb a totálreflexió hatásfoka, tehát minél jobb a totálreflexió intenzitást növelő hatása. Tetszés szerinti kisebb határszöget lehetne elérni ugy, hogy egy negativ szórási amplitudéju elemet ötvöznénk megfelelő mennyiségben pl. az acélhoz, ugyanis a törésmutatót és igy a határszöget is az átlagos szórási amplitudó határozza meg. Szórási tulajdonságai miatt erre a célra Mn hozzáötvözése volna a legmegfelelőbb. Ez azonban igen nehéz metallurgiai problémákra vezetne. Ugy tünik, nem volna érdektelen ezekkel foglalkozni.

3. Egykristály-orientálás

Monokromátorként saját előállitásu Pb-egykristályokat használunk. A Pb alacsony olvadáspontjára való tekintettel az előállitásra egy a tégelymozgatásos eljárásoknál ugyan általában kevésbé kedvező, de ebben az esetben teljesen kielégitő és az előbbinél egyszerübben megvalósitható, mozgatás-mentes eljárást használtunk.

Neutron-diffraktométerekben és kristály-spektrométerekben használt nagy monokromátor kristályok egykristály-jellegének megállapitására, orientációjuk meghatározására és az előirt krisztallográfiai sik kivágására kidolgoztunk [3] egy egyszerü röntgen-diffrakciós eljárást, amely a hátsóreflexiós Laue-felvételek segitségével való orientálás ismert módszerén alapul. Erre a célra megfelelő kristály-befogófejekkel felszerelt, speciális goniométert készitettünk.

A kristályba a befogófej /pontosan definiált/ tengelyével párhuzamosan siklapokat gyalulunk. A goniométer által lehetővé tett párhuzamos eltolások és elforgatás, továbbá egy megfelelő idomszer segitségével ezek közül a siklapok közül bármelyiket párhuzamosra és előirt távolságura állithatjuk a hátsóreflexiós röntgenkamra filmjéhez képest, és a sikok különböző helyeiről készithetünk felvételeket.

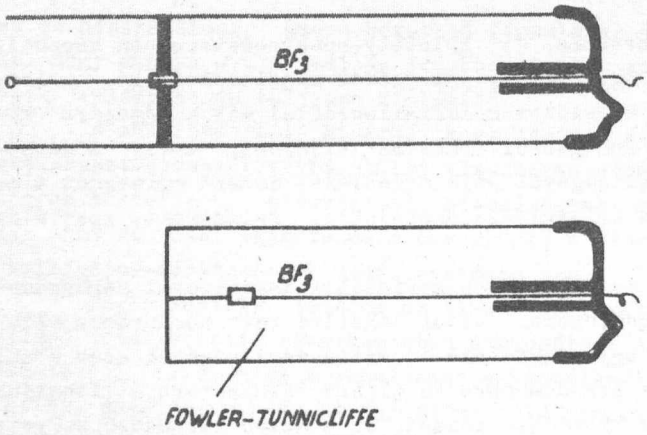
A közismert Greninger-háló és Wulff-háló felhasználásával viszonylag egyszerüen megállapitható, hogy a különböző besugárzott helyek ugyanahhoz az egykristályhoz tartoznak-e, meghatározható a kristály orientációja és elvégezhető a kivánt lap mentén való kivágás. Berendezésünk mindezt kb. $1/2^{\circ}$ pontossággal teszi lehetővé. Ez azt is jelenti, hogy eljárásunkban ennél nagyobb kristályhibák már kimutatásra kerülnek.

Az irodalomban található standard sztereografikus projekciók pontossága erre a célra nem elegendő, ezért magunk készitettünk egy megfelelő pontosságu köbös (111) sztereografikus projekciót.

4. Számlálócső-konstrukció

Diffraktométerünkhöz magunk készitettünk proporcionális, BF_3 töltésü számlálócsöveket [4] . A készitett csövek kétfélék. Az egyik fajta a Fowler és Tunnicliffe közismert leirásában szereplő fém-végablakos konstrukció reprodukálása. Ez az a csőtipus, amelyet neutron-diffraktométerekben és kristály-spektrométerekben használni szoktak. Ennél a csőtipusnál a detektálandó neutron-nyaláb először egy elég nagy inaktiv térfogatba jut, ahol abszorpció van, de detektálás nincs. Ezen kivántunk javitani a másik, saját csőkonstrukciónkkal. Ennek inaktiv térfogata kisebb, hatásfoka tehát nagyobb, mint az előbbinek. A kétféle csőtipus vázlatát az 1. ábra mutatja.

A mi csöveink lényeges eltérése a Fowler-Tunnicliffe tipustól az, hogy a katódhenger itt két, fémesen összekötött részből áll, és ezek érintkezésénél üvegvégablak foglal helyet. A katódhenger fő része BF_3-dal van töltve, a "toldalék" rész a szabad levegővel közlekedik. Igy a toldalékrészben neutron-abszorpció gyakorlatilag nem történik. A toldalék hatása az, hogy az üvegvégablak környezetében már gyakorlatilag ugyanolyan az elektromos tér, mint a cső beljebblevő helyein. Az ionizáció tehát a fő rész elején olyan, mint beljebb, és igy lényeges számlási veszteség nincs. Csöveinkben az inaktiv térfogatot az anódszál átvezetésére szolgáló /az ábrában is jelölt/ fémdarabka nagysága szabja meg.

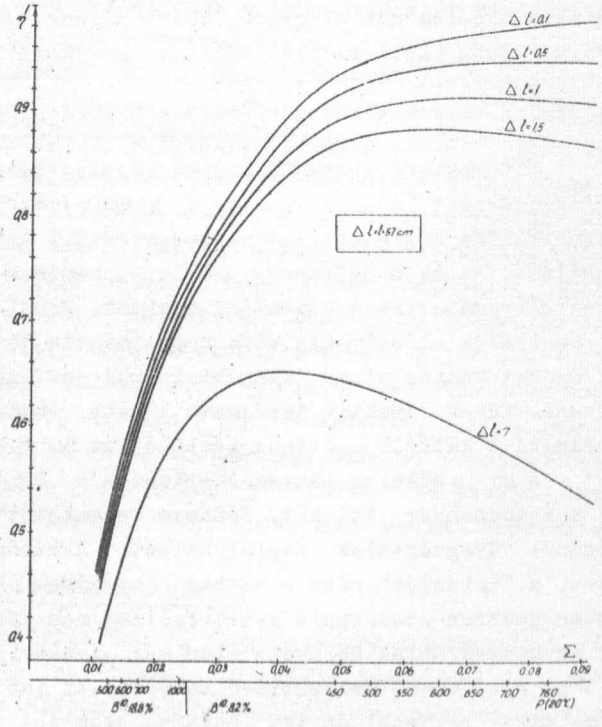


1. ábra
A kétféle csőtipus vázlata

Hogy az elérhető hatásfok mennyire függ az inaktiv rész hosszuságától, azt a 2.ábra mutatja. Az ábrán a hatásfok látható a gáztöltés makroszkópikus abszorpciós hatáskereszt-metszetének, ill. az általunk használt /B^{10}-ben 82 %-ra dusitott/ BF_3 gáz nyomásának függvényében adott csőhosszuság és különböző inaktiv hosszuságok mellett. $\Delta\ell$-nek minden értéke mellett a görbe maximumot tartalmaz, és a gáztöltést természetesen ugy kell megválasztanunk, hogy a hatásfok ez a maximális érték legyen. Másrészt minél kisebbre sikerült leszoritanunk $\Delta\ell$-t, a hatásfok annál nagyobb lesz.

A kétféle cső vizsgálata azt mutatta, hogy a hatásfoktól eltekintve jellemzőik megegyeznek, a mi csöveink hatásfoka azonban kb. 1,6-szor nagyobb.

Folyamatban vannak vizsgálataink, amelyekkel meg kivánjuk állapitani, hogy csöveinknél van-e olyan un. rádiusz-effektus, amilyent Milojevic és munkatársai közöltek 1959-ben a Genfi Konferencián hasonló csövek esetében. A még be nem fejezett méréseink azt mutatják, hogy ez a felhasználás szempontjából rendkivül hátrányos effektus a mi csöveinknél hiányzik.



2. ábra
A számlálócsövek hatásfoka

5. Finomkristályos szenek szórása

Foglalkoztunk a finomkristályos szenek ismert és sokat diszkutált szerkezeti rendezetlenségével kapcsolatos neutron - szórás problémájával [5, 6] . Kimutattuk,hogy az irodalomban használt intenzitás-formulák nem veszik megfelelően figyelembe a feltételezett rendezetlenséget.

Foglalkoztunk azzal a hibával, amelyet ez az utóbbi körülmény okoz a krisztallit-méretek szokásos /a Debye-Scherrer vonalak szélességéből való/ meghatározásában. Kimutattuk, hogy a (hk)-val jelölt tipusu reflexiók élességének, ill. az ezekből adódó (tehát a konvencionális c-tengellyel párhuzamos) méretnek a Warren-féle tárgyalás alapján való szokásos meghatározását teljesen kétes-értékünek kell tekintenünk.

Nem engedhető meg a Warren-féle számitás alkalmazása a szórás diffuz részére (és Warren nem is használta arra!), még pedig két okból: 1. a számitás a rendezetlenségek fajtáját és nagyságát megfelelően figyelembe nem vevő interferencia-függvényből indul ki, 2. olyan közelitést tartalmaz,amely diffuz szórás esetében általában nem engedhető meg. Megadtuk a módszert a rendezetlenségeket helyesen figyelembevevő interferenciafüggvény kiszámitására, és vázoltuk, hogy milyen fajta neutron-diffrakciós mérésekre van szükség a rendezetlenségek fajtájának és nagyságának a helyes számitási eljárás alapján való meghatározására. Ennek a módszernek az alkalmazását egyelőre matematikai nehézségek gátolják.

I r o d a l o m

[1] Szabó P., Nucl.Instr. and Methods 5, 184 /1959/
[2] Szabó P., Nucl.Instr. and Methods 6, 183 /1960/
[3] Szabó P., Krén E., KFKI Köz. 7, 366 /1960/
[4] Gordon J., Szabó P., Magyar Fizikai Folyóirat, 8, 211 /1960/
[5] Szabó P., Acta Physica Hung. 9, 205 /1959/
[6] Szabó P., a balatonfüredi Szilárdtestfizikai Konferencián 1959 szeptemberében tartott előadás
[7] Gordon J., Szabó P., előkészületben

A KÖBÖS MÓDOSULATU KOBALT MÁGNESES TELITÉSI TÖRVÉNYÉNEK KISÉRLETI VIZSGÁLATA

Irta: Tarnóczi Tivadar
Szilárdtestfizikai Laboratórium

összefoglalás

A mágneses telitettség közelében vizsgáltuk a polykristályos kobalt köbös módosulatának differenciális szuszceptibilitását a mágneses térerősség függvényében. A különböző hőmérsékleten kapott mérési adatokat összehasonlitottuk az irodalomból ismert anizotrópia állandók segitségével számitott értékekkel.

Köbös kristályokból álló ferromágneses anyagok telitési törvényéből könnyen meghatározhatjuk az első anizótrópia állandó értékét. Mint az irodalomból [1] ismeretes, a polikristályos vas és nikkel esetében ilyen módon meghatározott anizótropia állandók jól megegyeznek az egykristályon mértekkel. A kobalt köbös módosulatára, amely 450 C° felett stabilis, nincsenek ehhez hasonló mérések, jóllehet ismerjük mindkét anizótropia állandó hőmérséklet-függését egészen 1000 C°-ig Sucksmith és Thompson [2] kobalt -egykristályokra vonatkozó mérései alapján. Ennek következtében célszerünek látszik megvizsgálni, vajon a köbös módosulatu polikristályos kobalt mágnesezési görbéjének alakja a telités közelében hasonló összefüggésben van-e az anizótropia állandókkal, mint a vas és a nikkel esetében.

A telitettséghez közel a mágneses intenzitás a következő alaku:

$$J = J_s\left(1 - aH^{-1} - bH^{-2} - \dots\right) \qquad /1/$$

ahol J_s - a mágneses telitési intenzitás

H - a mágneses térerősség

a, b - konstansok.

Innen a differenciális szuszceptibilitásra a

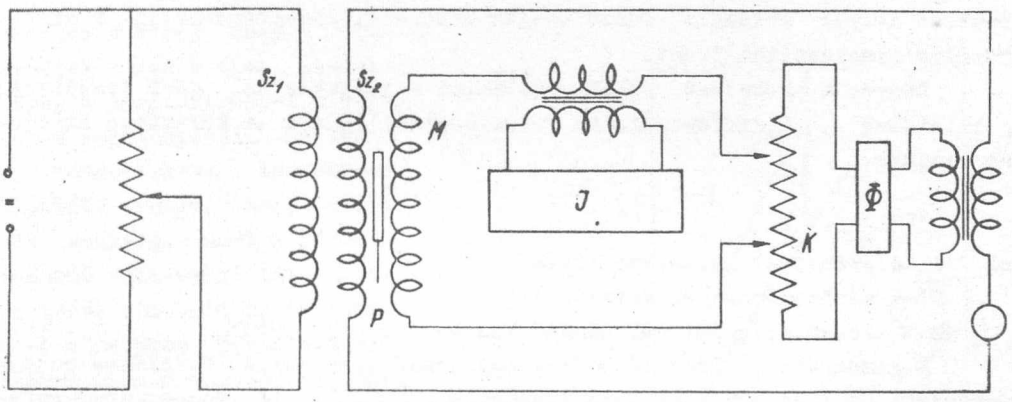
$$\chi = \frac{dJ}{dH} = \chi_p + AH^{-2} + BH^{-3} + \dots \qquad /2/$$

kifejezést kapjuk, ahol χ_p az un. parafolyamat szuszceptibilitása, $A = J_s a$ és $B = 2J_s b$

Mechanikai feszültségektől mentes anyag esetében a telitési törvényben szereplő A és B konstansokra a következőket mondhatjuk [3]:

1. $a = A = 0$ akkor /1/ a következő alakban irható fel:

$$J = J_s - \frac{B}{2H^2} \qquad /3/$$



1/a.ábra

2. B kifejezhető az anizotrópia állandókkal:

$$B = \frac{2}{J_S}\left(\frac{8}{105}k_1^2 + \frac{16}{1155}k_1 k_2 + \frac{8}{5005}k_2^2\right) \qquad /4/$$

ahol k_1 és k_2 az anizotropia állandók.

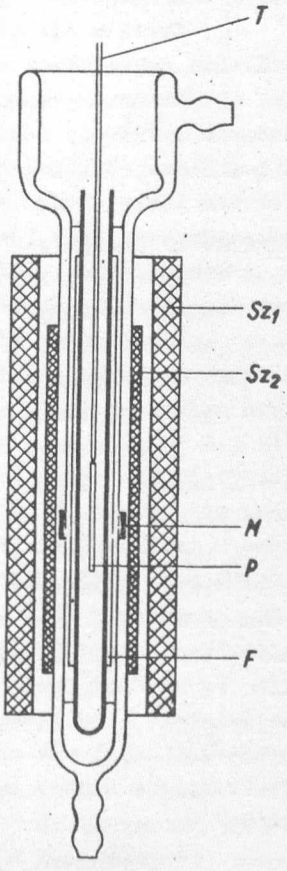
Mérési módszer

A telitési törvény vizsgálatához szükség van a differenciális szuszceptibilitás meghatározására erős mágneses térben.

Mivel 450 C^o feletti hőmérsékleten kellett a méréseket végezni, olyan berendezést készitettünk, amely alkalmas e feladat megoldására. Tulajdonképpen egy előző cikkben [4] ismertetett készüléket használtunk fel bizonyos módositással.

Az 1. ábrán a berendezés kapcsolási vázlatát /a/ valamint a tekercsek és a próbatest kölcsönös térbeli elhelyezését /b/ tüntettük fel.

A mérés lényege abban állt, hogy a vizsgálandó ferromágneses anyagot P az Sz_1 szolenoid erős[x], állandó mágneses terébe helyeztük, amelyre az Sz_2 szolenoid segitségével aránylag kis amplitudóju váltakozó mágneses teret szuperponáltunk. Ekkor az M mérőtekercsben a próbatest jelenlétében, illetőleg



1/b. ábra

[x] Az állandó mágneses teret itt abban az esetben nevezzük erősnek, ha az adott körülmények között /a próbatest anyagi minősége, alakja, hőmérséklete/ olyan közel kerültünk a mágneses telitettséghez, hogy a további mágnesezésben már csaknem egyedül az un. forgási folyamatok játszanak szerepet.

próbatest nélkül indukált feszültségek értékéből meghatározhatjuk a differenciális szuszceptibilitást.

Legyen a próbatest nélkül valamint a próbatesttel mért feszültség E_o illetőleg E_1. A differenciális szuszceptibilitásra a következő kifejezést kapjuk:

$$\chi = \frac{S}{4\pi\delta} \frac{E_1 - E_o}{E_o} \qquad /5/$$

ahol δ -a próbatest keresztmetszete

S -a mérőtekercs keresztmetszete

Az E_o és E_1 feszültségeket váltóáramu kompenzátorral mértük.

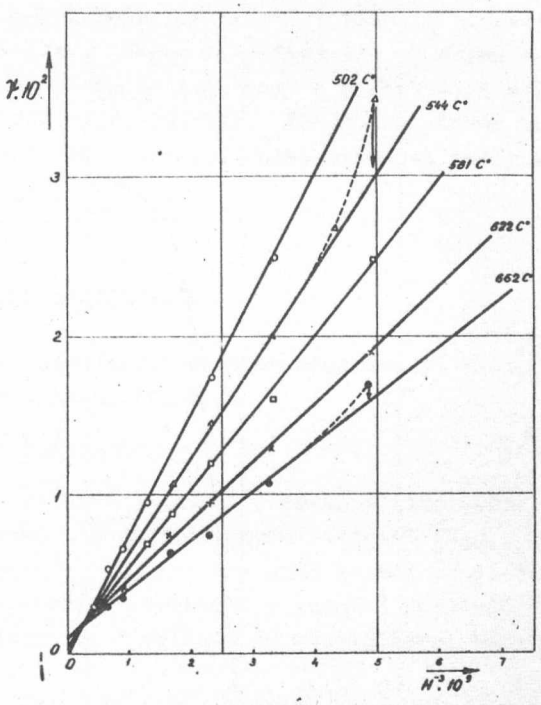
A kompenzátor lényegében egy amplitudó-kiegyenlitő ötdekádos potenciométerből (K) és egy fázistoló egységből (ϕ) állt. A kompenzátor referens feszültségét ugyanaz az áramforrás szolgáltatta, amellyel az Sz_2 szolenoidot tápláltuk. Ez az árramforrás EMG 1113/C tipusu RC-generátor volt. A kompenzátor null-indikátoraként szelektiv erősitő szerepelt (J). Az erősitő szelektiv frekvenciáját ugy választottuk meg, hogy a megfelelő frekvencia alkalmazásakor a skin-hatás miatt elkövetett hiba 4 mm átmérőjü próbatest esetén elhanyagolható legyen [5]. Az alkalmazott frekvencia 320 Hz volt.

Mivel a /4/ alatti kifejezésben szereplő feszültségek értékét tetszőleges egységekben mérhettük, nem kellett feszültség etalont használni, ami a váltóáramu kompenzátorok legnehezebben megoldható problémája. E szerencsés körülmény lehetővé tette, hogy öt jegy pontossággal határozzuk meg a feszültség-értékeket. Az állandó mágneses teret előállitó szolenoidot részletesen ismertettük már egy előző közleményünkben [6]. E helyen csupán arra szoritkozunk, hogy lényegesebb paramétereit felsoroljuk: Tápfeszültség: 280 V, a maximálisan előállitható térerősség 7300 Oe. A o,1%-ra homogén tér hossza a tengely mentén 11 cm. A belső üreg átmérője 48 mm.

Mivel magas hőmérsékleten kellett méréseket végezni, a próbatestet elektromos kályhával fütöttük (F). A kályha fütőszála nyilvánvalóan csak olyan anyag lehetett, amely nem ferromágneses. Erre a célra leginkább a Cr-Ni ötvözet felelt meg. Ugy épitettük meg a kályhát, hogy a fütőáram által keltett mágneses tér a lehető legtökéletesebben kikompenzálódjék, s igy a mérést ne zavarja. A kályha konstrukciója a következő volt: Egy 6 mm belső átmérőjü kvarc-csövet körülvettünk Phythagoras-csövekkel, ezeknek furataiba füztük be a fütőszálat ugy, hogy a fütőszál, eltekintve a kályha két végétől, párhuzamos volt a szolenoidok tengelyével. Mivel az egymás mellett futó szálakban az áram iránya ellentétes, elég jól kikompenzálódott a mágneses tér. Ez utóbbit ugy ellenőriztük, hogy összehasonlitottuk a nullindikátor zajszintjét a fütőáram bekapcsolásakor és fütőáram nélkül. A különbség lényegtelen volt. Ez annál is inkább várható volt, mert a szelektiv erősitő frekvenciája messze esik a fütőáram frekvenciájának /50 Hz/ fel harmonikusaitól.

A próbatest hőmérsékletét Pt-PtRh termoelemmel mértük (T), amely egyben a próbatest felfüggesztését is biztositotta. A fütőelem hosszát ugy

választottuk meg, hogy a próbatestet mérés közben kiemelhettük a mérőtekercsből a termoelem segitségével, anélkül, hogy hőmérséklete lényegesen változott volna. Erre azért volt szükség, mert a mérőberendezés null-stabilitása hosszu időre nem volt biztositható és a nagyobb pontosság érdekében minden alkalommal megmértük az E_o feszültséget is.



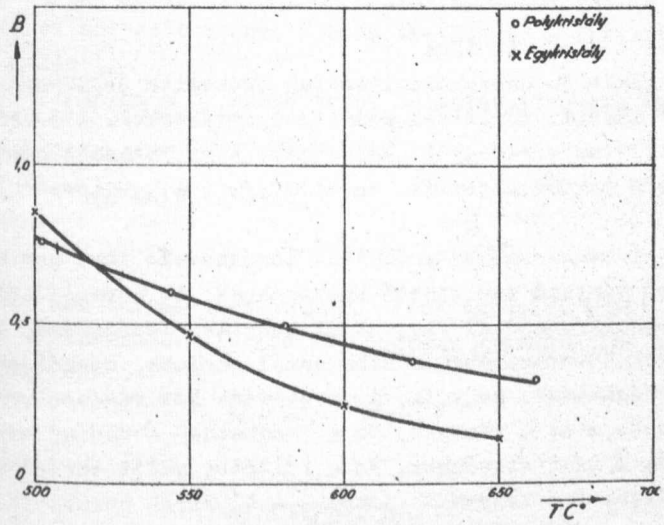
2. ábra

Mérési eredmények

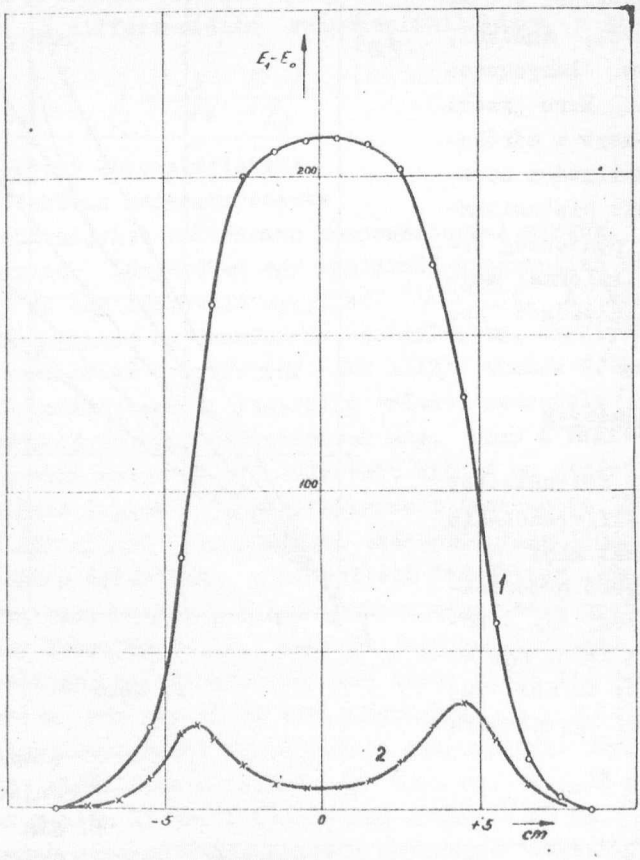
A 2.ábrán feltüntettük a köbös kobalt differenciális szuszceptibilitását mint H^{-3} függvényét különböző hőmérsékleten. Látható, hogy egy bizonyos térerősségen felül már egyeneseket kapunk; ez azt mutatja, hogy a /2/ egyenletben elegendő a sorbafejtést a H^{-3} tagig elvégezni és azonkivül az A=0 feltétel is teljesül. Ez azzal magyarázható, hogy magas hőmérsékleten a mechanikai feszültségek megszünnek. Ilyen módon /2/ a következő alakot veszi fel:

$$\chi = \chi_p + BH^{-3} \quad /6/$$

Az egyenesek irántangenseiből meghatároztuk a B ko-



3. ábra



4. ábra

efficiens hőmérsékleti függését és összehasonlitottuk Sucksmith és Thompson [2] mérési adataiból a /3/ alatti képlettel számitott értékekkel. A 3.ábrán tüntettük fel az összehasonlitás eredményét. Láthatjuk, hogy magasabb hőmérséklet felé az egyezés egyre inkább elromlik, ennek magyarázata valószinüleg a következő:

Az általunk használt henger-alaku próbatest lemágnesező tere nem homogén és igy a lemágnesező tényező nem vehető konstansnak. Az anyagon belül uralkodó mágneses tér meghatározásánál viszont mi konstans lemágnesező tényezővel számoltunk. Ennek következtében a hiba annál nagyobb, mennél erősebben érvényesül az un. "véghatás", hogy ti. a próbatest két végében uralkodó térerősség sokkal kisebb, mint a közepén. Ez a "véghatás" abban az esetben nagy, ha közel vagyunk a telitettséghez. Ez a feltétel adott térerősség mellett magasabb hőmérsékleten érvényesül jobban. A 4. ábrán bemutatjuk a "véghatást" szobahőmérsékleten /1/, illetve 622 C^{o}-on /2/.

Az abszcisszán a próbatest és a mérőtekercs relativ elhelyezését

vettük fel, mig az ordinátán a differenciális szuszceptibilitással arányos mennyiséget ábrázoltuk. Mivel a végek felé az effektiv ható térerősség kisebb, a szuszceptibilitás nagyobb lesz. Magas hőmérsékleten ez olyan erősen jelentkezik, hogy felülmulja azt a tendenciát, hogy a próbatest a mérőtekercsből kikerülve már kisebb feszültséget indukál. Ebből arra lehet következtetni, hogy magasabb hőmérsékleten a középre vonatkoztatott lemágnesező faktor is megnövekszik.

A lemágnesező tér

Ismeretes, hogy valamely főtengely irányában mágnesezett ellipszoid lemágnesező tere arányos a mágneses intenzitással:

$$H_o = -NJ \qquad /7/$$

E formula hengeralaku próbatestre is kiterjeszthető, azzal a kikötéssel, hogy az N lemágnesező tényező nem csupán a próbatest geometriájától függ. Azonban, ha olyan hengeralaku próbatestről van szó, amelynek hossza legalább egy nagyságrenddel nagyobb, mint az átmérője; azonkivül a végeken uralkodó térerősség nem érdekel bennünket, akkor az N értékét jó közelitéssel konstansnak vehetjük.

Jelöljük a külső teret H_e -vel, az anyagon belül ható belső teret H_i-vel, akkor:

$$H_i = H_e + H_o = H_e - NJ \qquad /8/$$

A H_i kiszámitásához az N értékét konstansnak véve a mindenkori J értékre van szükségünk. Mivel /1/-ben az J_S szerepel, melyet az irodalomból [7] ismert értékkel helyettesitünk, kiszámithatjuk az J értékét különböző T és H értékek mellett.

/3/-ba a H_i belső teret helyettesitve azt kapjuk, hogy

$$J = J_S - \frac{B}{2H_i^2} \qquad /9/$$

/9/-t /8/-ba helyettesitve

$$H_i = H_e - N\left(J_S - \frac{B}{2H_i^2}\right) \qquad /10/$$

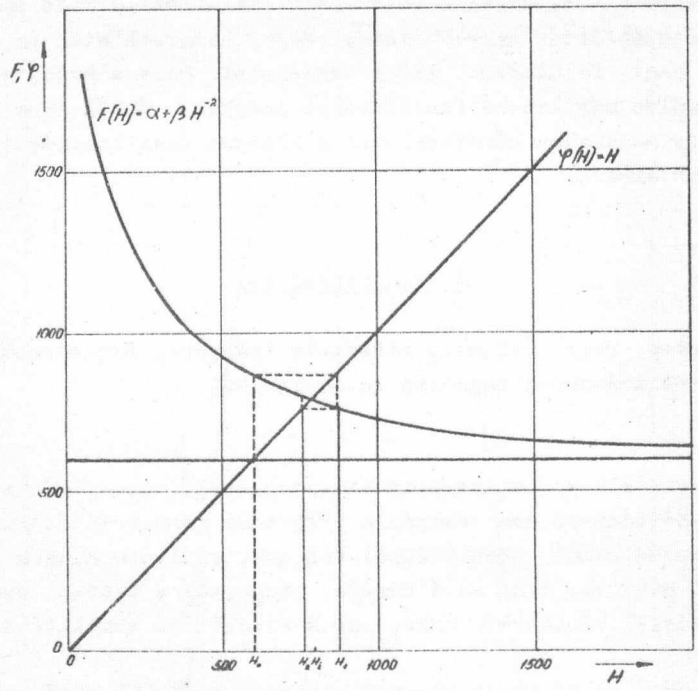
harmadfoku egyenlethez jutunk. /10/ egyenlet exakt megoldása helyett iterációt alkalmazunk. Iterációs függvény gyanánt /10/ alatti összefüggést használjuk fel:

$$H = \alpha + \beta H^{-2} \qquad /11/$$

ahol

$$\alpha = H_e - NJ_S$$

$$\beta = B/2$$



5.ábra

Az iteráció a következő sort adja:.

$$H_n = \alpha + \beta H_{n-1}^{-2} \qquad /12/$$

Az 5. ábra szemlélteti az alkalmazott iteráció konvergenciáját. Mivel az $f'(H)$ az egész értelmezési tartományban negativ a /12/ sorozatban egymást követő tagok közül az egyik kisebb,a másik nagyobb H_i -nél. Ebben az esetben a konvergencia feltétele, hogy $|f(H)|<1$ a $[H_0, H_1]$ intervallumban.

Megjegyezzük, hogy ez a feltétel elegendő, de nem szükséges; erről van szó jelen esetben is. Látható az 5. ábrán, hogy a nulladik közelitést bárhol is választjuk, a H_2 legrosszabb esetben α értékét veszi fel, annak ellenére, hogy az $|f'(H)|>1$ a H = 0 közelében. Mivel az $|f'(H)|$ mindenütt monoton csökken, elegendő megvizsgálnunk a $H=\alpha = H_e - NJ_S$ helyen a differenciál hányados értékét

$$f'(H) = -2\beta H^{-3} \qquad /13/$$

tehát

$$|f'(\alpha)| = \frac{2\beta}{\alpha^3} = \frac{B}{(H_e - NJ_S)^3} \qquad /14/$$

A 3.ábráról láthatjuk, hogy $B_{max} \approx 8.10^7$ a minimális H_e = 672 Oe, maximális J_S = 1296 G

A lemágnesező tényező az adott próbatest méretek mellett /4 mm Ø, 80 mm hossz/ N = o,o677 tehát $NJ_{s\,max} < 100$

A konvergencia feltétele tehát:

$$\frac{\sqrt[3]{B}}{H_e - NJ_s} \approx \frac{431}{572} < 1 \qquad /15/$$

teljesül.

A gyors konvergencia érdekében nulladik közelitésként a $H_0 = H_e - NJ_s$ értéket választottuk és igy elértük, hogy rendszerint a második és harmadik közelités közötti eltérés már a mérési pontosság határain belül esett.

- . - . - . -

Felhasználom az alkalmat, hogy köszönetet mondjak Pál Lénárd tudományos igazgatóhelyettes elvtársnak a témaválasztásban és munkám közben nyujtott segitségéért, valamint Zsigmond György tudományos munkatársnak a készülékek tervezéséért.

Irodalom

[1] Polley H., Ann.d.Phys. 36, 625 /1939/
Gans R., Czerlinski E., Ann.d.Phys. 16, 625 /1933/
[2] Sucksmith W., Thompson J.E., Proc.Roy.Soc. 225, 362 /1954/
[3] Vonszovszkij Sz.V., Sur J.Sz., Ferromagnetizm, Moszkva-Leningrád, 1948.
[4] Pál L., Tarnóczi T., Acta Phys.Hung. 6, 225 /1956/
[5] Pál L., Disszertációja, Moszkva, 1953.
[6] Zsigmond Gy., Tarnóczi T., KFKI Közlemények 6, 42o /1958/
[7] Myers H.P., Sucksmith W., Proc.Roy.Soc. A 2o7, 427 /1951/

Érkezett 1959. november 18.

KFKI Közlemények 8.évfolyam 1.szám, 1960.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT IX/5. 1961.

GRAFITBÓL KÉSZÜLT NEUTRON-KOLLIMÁTOROK VIZSGÁLATA*

KISDINÉ KOSZÓ É., KROÓ N., PRAVETZKY E. és ZSIGMOND GY.
Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

A cikk adott szögdivergenciájú termikus neutronnyalábot szolgáltató grafit kollimátorok méretezésével foglalkozik. Mérési eredményeket közöl grafit kollimátorral előállított neutronnyaláb szögeloszlásáról és kimutatja, hogy a nagyobb kollimálónyílások esetén fellépő egyenetlen intenzitáseloszlást a grafit felületén létrejövő totálreflexió okozza.

Általános irányelvek

Termikus neutronokkal végzett kísérletekhez olyan kollimátorokat kellett készítenünk, amelyek meghatározott szögdivergenciájú neutronnyalábot szolgáltatnak. Sugárvédelmi szempontból a kollimátorok a termikus oszlop vízszintes csatornájának belsejében kerültek elhelyezésre. Ezért olyan anyagot kellett a kollimátorok készítésére felhasználnunk, amely kis aktiválási hatáskeresztmetszete folytán a kollimátorok gyakori kiszerelésével és cseréjével járó műveleteket különleges sugárvédelmi követelmények nélkül is lehetővé teszi. A kollimátor anyagát célszerű úgy megválasztani, hogy lassítsa és szórja a gyors neutronokat. Kívánatos, hogy a termikus neutronokra vonatkozó szórási hatáskeresztmetszete ne legyen kicsiny. Gyakorlati szempontból az is fontos, hogy a kollimátor anyaga jól megmunkálható legyen.

A grafit kollimátor szerkezeti felépítése

Kollimátor anyagként az előbbi szempontok figyelembevételével az elektromos ívkemencékhez használatos ipari tisztaságú elektrografit-rudat használtunk, amelynek spektroszkópiai vizsgálata

Al_2O_3	0,05%	SiO_2	0,35%
Fe_2O_3	0,05%	B	0,08%
MgO	0,2 %	Ca	0,1 %

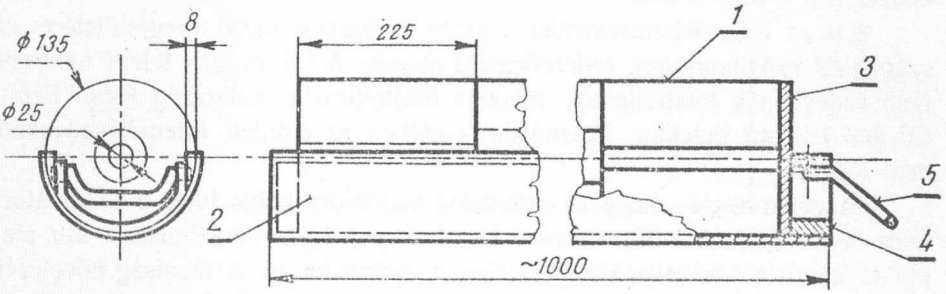
szennyeződést mutatott ki.

A kollimátorokat több tagból összerakhatónak terveztük. A tagok közül a szélsőket képeztük ki a tulajdonképpeni kollimáló rés-nyílással, a középsők

* Érkezett 1961. máj. 6.

ennél nagyobb belső üreggel rendelkeznek. Ez a megoldás a könnyű mechanikai kivitelezhetősége mellett igen jó lehetőségeket biztosított a legkülönbözőbb hosszméretek és résgeometriák gyors változtatására és viszonylag kevés elemmel is nagyszámú kombinációs lehetőségre adott alkalmat.

Konstrukciós szempontból azonban nehézséget jelentett a tagokból összerakható kollimátor mechanikai szilárdságának és főleg résnyílások pontos illesztésének biztosítása, mivel célszerűnek látszott a tartószerkezet céljára felhasznált anyagmennyiséget a minimálisra csökkenteni. Tartószerkezet anyagaként alumíniumot választottunk.



1. ábra. A kollimátor vázlatos rajza. *1* kollimátortagok *2* félhengerpalást alakú vályú *3* kadmium rés *4* alumínium ütköző *5* fogantyú

Az általunk alkalmazott kollimátor vázlatos rajza az 1. ábrán látható. Az *1.* kollimátortagok a *2.* alumíniumlemezből készített félhengerpalást alakú vályúban helyezkednek el. A vályú oldalai kb. 7 mm szélességben behajlanak és illeszkednek a grafit tagok kissé mélyebb, de hasonló méretű hornyaiba. Az 1,5 mm vastag félkeményre hengerelt vályú vezető bordái torziós igénybevétel esetén ellentétes irányú elcsavarodást szenvednének, ennek azonban ellenáll a grafittagok palástján szemközt elhelyezkedő, két párhuzamos vezető-horony vájataiba illesztett, behajlított két tartó borda.

A kollimátor végén *3* Cd lemez helyezkedik el a kollimátoréval azonos méretű nyílással.

Az egyes kollimátortagok tengelyirányú rögzítését a tartóvályú elején és végén elhelyezett alumíniumlemezből készített félköríves *4* ütközők biztosítják. Ezek közül az elsőt úgy képeztük ki, hogy egyúttal tartószerkezetét alkotja az *5* kihúzószerkezet fogantyújának.

Az 1. ábrán feltüntetett kollimátor méreteket részben a termikus oszlop csatornaméretei, részben pedig a megengedett (1,6°-os) szögdivergencia határozta meg. A kollimátor végén elhelyezkedő Cd sík 2 mm vastag Cd lemezből készült és a grafit által átengedett $\lambda = 6{,}7$ Å-nél nagyobb hullámhosszú neutronok elnyelésére szolgált.

Grafit kollimátorokkal végzett vizsgálatok

Körkeresztmetszetű rés esetén a 2. ábra szerinti neutron-eloszlás várható. Az „*a*" görbe a Cd levágás alatti, a „*b*" görbe pedig ezen energia feletti neutronok várható eloszlását mutatja.

Ezzel szemben az 1. ábra szerint felépített 4 azonos (∅25 mm) nyílással rendelkező tagból álló grafit kollimátorból kilépő neutronok a 3. ábrán látható eloszlást mutatták. Látható, hogy a kollimátortól 3 m távolságra a kollimált neutronnyalábon belül egy koncentrikusan elhelyezkedő gyűrű alakú intenzitásnövekedést tapasztaltunk.

Ezt az intenzitásnövekedést a grafit-kollimátor belső üregfelületére kisszög alatt eső neutronok totálreflexiója okozza. A Cd levágás feletti neutronok nem szenvednek totálreflexiót, mivel a totálreflexiós határszög kicsi. Ezért a Cd-mal letakart detektor használata esetében az említett intenzitásnövekedés nem lép fel.

Megállapítható, hogy az intenzitás-maximum helye függ a kollimátortól mért távolságtól. A kollimátorhoz közel az intenzitás-maximum a kör alakú nyílás kerülete közvetlen környezetében helyezkedik el. A távolság növelésével a maximum kissé elmosódik és helye a kollimátor tengelye felé tolódik el.

A totálreflexió által okozott egyenlőtlen intenzitás eloszlás sokszor nem kívánatos. Elég nagy L/d arányok esetében az egyenlőtlen intenzitáseloszlás nem jelentős. Kis L/d esetén a kollimátor-cső Cd-mal való kibélelése kizárja a totálreflexiót.

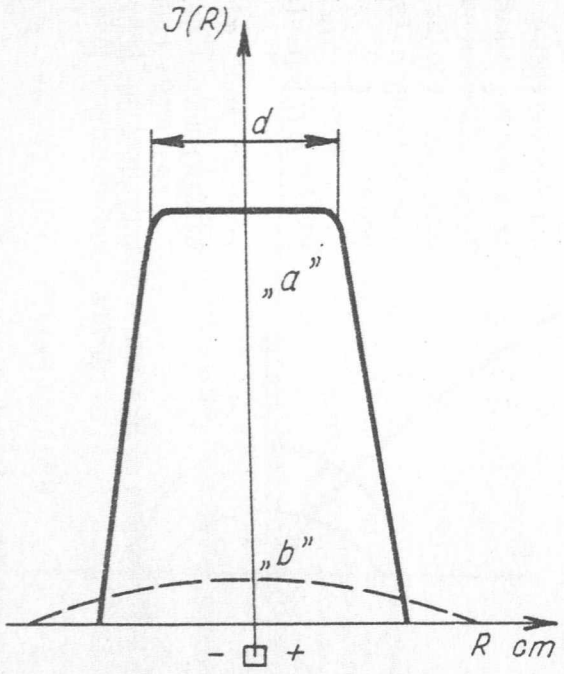
Megjegyezzük, hogy a $2{,}5 \cdot 10^8$ n/cm^2 sec termikus neutronfluxusba helyezett grafit kollimátor két heti állandó besugárzás után mindössze 0,02 mr/ó aktivitást mutatott.

A totálreflexió okozta nem centrális intenzitás-maximum közelítő számítása

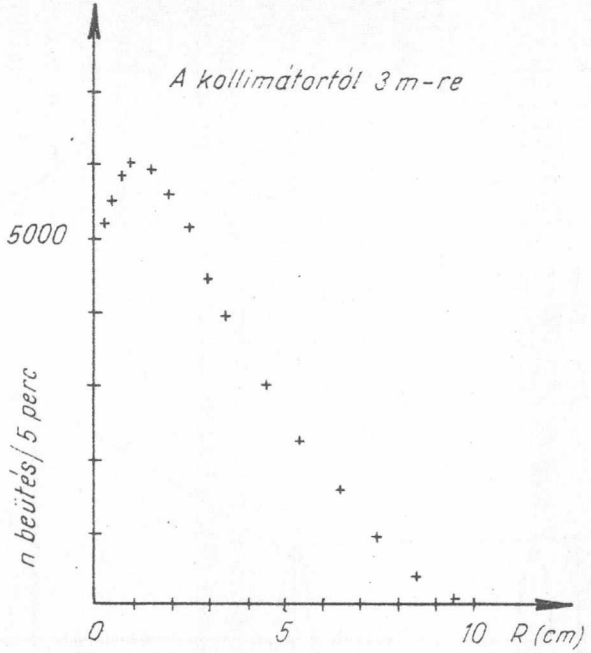
A számítás alapjául szolgáló geometriai elrendezést a 4. ábra mutatja. A direkt-nyaláb intenzitását az R pontban az

$$I_0(R) = \iint_{F_0} \frac{\sigma \, dx \, dy}{(L+l)^2 + (R+x)^2 + y^2}$$

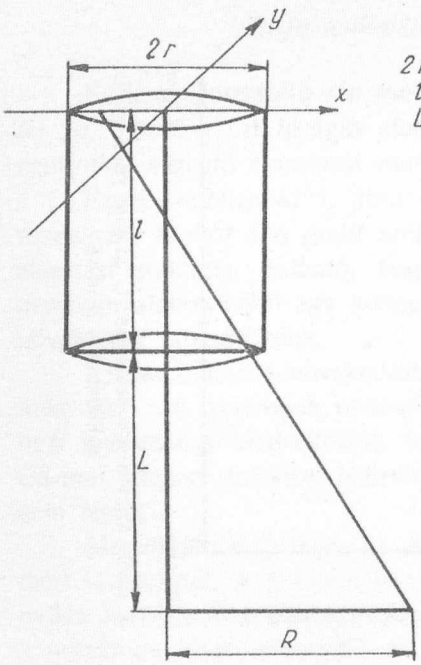
képlet alapján számíthatjuk, ahol σ a kollimátor belső nyílásának neutron forrássűrűsége, F_0 a kollimátor belső nyílásának az R pontból látható része (5. ábra). Az F_0 felületet határoló görbék közül az egyik egy körnek, a másik általában egy ellipszisnek megfelelő íve. Kimutatható, hogy az ellipszis nagy pontossággal körrel helyettesíthető.



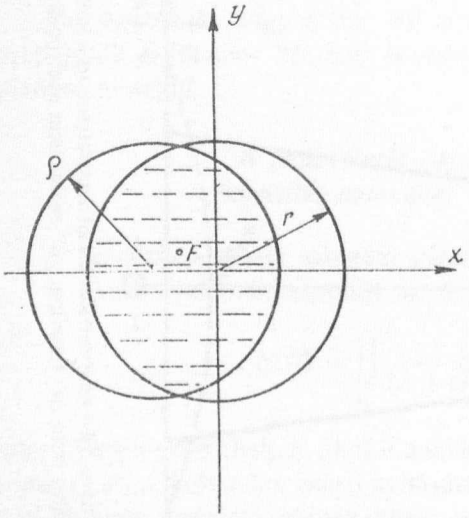
2. ábra. Várt neutroneloszlás körkeresztmetszetű kollimátor után „*a*" termikus „*b*" rezonancia neutrónokra



3. ábra. Mért neutroneloszlás ⌀ 25 mm résű grafit kollimátortól 3 m-re



4. *ábra.* Geometriai elrendezés



5. *ábra.* $F_0(R)$ integrációs tartomány a direkt-nyaláb intenzitáseloszlásának meghatározásához

A két kör egyenlete

$$x^2 + y^2 = r^2$$

és

$$(x+a)^2 + y^2 = \varrho^2,$$

ahol

$$a = \frac{l}{L} R,$$

$$\varrho = \frac{l+L}{L} r.$$

Az integrálás elvégzése után kapott $I_0(R)$ menetét a 6. ábra mutatja.

Az R pontban mért intenzitás másik részét a kollimátor belső falán totálreflexiót szenvedő neutronnyaláb okozza. A reflektált nyaláb intenzitását 0,025 eV energiájú neutronokra számítottuk ki. Ezekre a neutronokra a reflexiós határszög 10′. A reflektált neutronokat úgy vesszük figyelembe, hogy a kollimátor belső nyílásának az R pontból látható részét az F_0-nál célszerűen nagyobbnak választjuk. Jelöljük $F_1(R)$-rel a többletfelületet. Erről a felületről

$$I_1(R) = \iint_{F_1} \frac{\sigma \, dx \, dy}{(L+l)^2 + (R+x)^2 + y^2}$$

intenzitás-járulék adódik hozzá az $I_0(R)$ intenzitáshoz.

Az $F_1(R)$ felületet határoló görbeszakaszok az

$$x^2 + y^2 = r^2,$$

$$(x+a)^2 + y^2 = \varrho^2$$

és az

$$(x-R)^2 + A y^2 = B^2$$

görbékhez tartoznak, ahol

$$A = 1 - \left(\frac{R}{R_0}\right)^2, \quad B = (l + L)\ \mathrm{tg}\ \vartheta$$

és

$$R_0 = r \cos \vartheta.$$

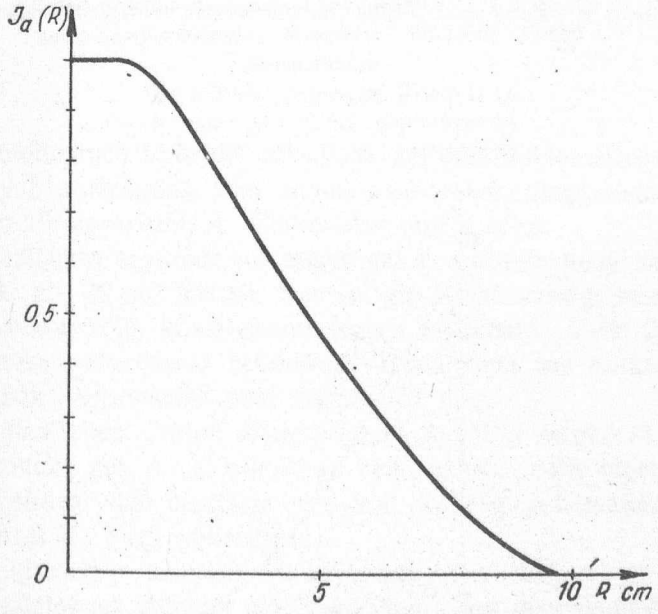
A harmadik görbe

a) ellipszis, ha $R < R_0$, mert $A > 0$,

b) egyenespár, ha $R = R_0$, mert $A = 0$,

c) hiperbola, ha $R > R_0$, mert $A < 0$.

Az $F_1(R)$ többlet-felület alakját szemlélteti a 7. ábra az *a)*, *b)* és *c)* eseteknek megfelelően. Elvégezve az integrálást megkapjuk a $I_1(R)$ mennyiséget. Az R



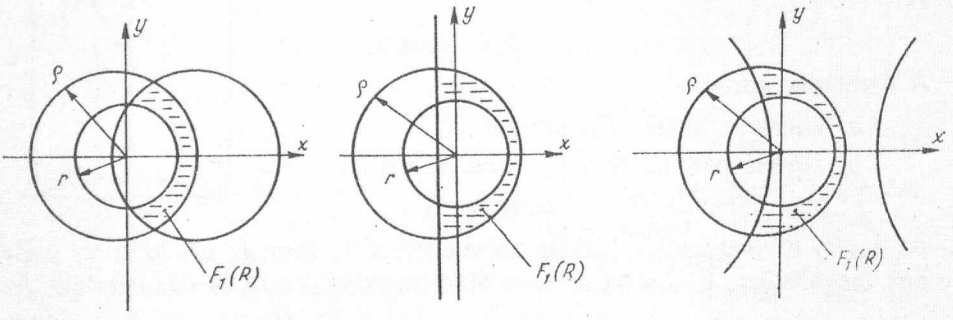
6. ábra. $I_0(R)$, a számított direkt-nyaláb intenzitásának eloszlása

pontban mérhető neutronintenzitás az előbbiekben meghatározott $I_0(R)$ és $I_1(R)$ mennyiségekből következőképpen adódik:

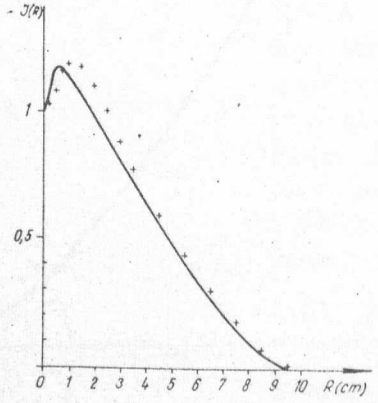
$$I(R) = C[I_0(R) + \eta I_1(R)],$$

ahol a szorzótényezőket úgy választottuk meg, hogy $I(R)$ a kísérleti adatokkal az $R = 0$ és R_{max} pontokban megegyezzen.

A számítás eredménye a 8. ábrán látható. Ugyanezen az ábrán feltüntettük a mért intenzitás értékeket is. A mérések statisztikus hibája kisebb, mint az ábrán feltüntetett keresztek.



7. ábra. $F_1(R)$ integrációs tartomány kollimátor belső faláról reflektált neutronok intenzitáseloszlásának számításához
a) ellipszis, ha $R < R_0$, mert $A > 0$
b) egyenespár, ha $R = R_0$, mert $A = 0$
c) hiperbola, ha $R > R_0$, mert $A < 0$



8. ábra. A direkt és reflektált neutronnyaláb eredő intenzitása, $I(R)$ és a mért intenzitásértékek

A számításnál nem vettük figyelembe a többszörös reflexiókat és csak egy neutron-energiához tartozó reflexiós szöggel számoltunk. Ennek ellenére kielégítőnek tekinthető az az egyezés, ami a kísérletileg és elméletileg meghatározott görbék menete között fennáll.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT IX. 1961.

EGYSZERŰ MÓDSZER NAGY EGYKRISTÁLYOK ELŐÁLLÍTÁSÁRA ALACSONY OLVADÁSPONTÚ FÉMEKBŐL*

KRÉN EMIL és SZABÓ PÁL
Központi Fizikai Kutató Intézet, Szilárdtestfizikai Laboratórium, Budapest

Építettünk egy kemencét alacsony olvadáspontú fémek nagy egykristályainak egyszerű módon: kályha- vagy tégelymozgatás és kristálycsírával való beoltás nélkül történő előállítására. A kemencét sikerrel alkalmaztuk neutronmonokromatizálás céljára alkalmas nagy Pb-egykristályok előállítására.

1. Bevezetés

Az Intézetünkben tervezett és épített neutrondiffraktométerhez nagy egykristályokra volt szükségünk mint monokromátorokra. Megfontolásaink szerint legcélszerűbb Pb-egykristályok alkalmazása erre a célra.

Az előállítandó egykristályok nagyságát az a követelmény határozta meg, hogy belőlük kb. 20 cm hosszú, 5 cm magas, 2 cm vastag, megfelelő krisztallográfiai orientációjú kristálylemez legyen kivágható. 5'-től 20'-ig változó szélességű mozaik-eloszlással rendelkező kristályokra van szükség. Nagyobb orientáció-hibák, deformációk nem engedhetők meg.

A következőkben leírjuk a berendezést, amellyel megfelelő Pb-egykristályokat állítottunk elő. Az előállításhoz sem kályha-, sem tégelymozgatásra, sem kristálycsírával való beoltásra nem volt szükség. A berendezés egyszerű, létrehozása nem jár nagy költséggel.

A berendezésben készített Pb-egykristályokat röntgen- és neutrondiffrakciós vizsgálatoknak vetettük alá. Vizsgálatainkkal megállapítottuk, hogy az előállított kristályok kivétel nélkül megfelelő minőségűek. E vizsgálatainkat a berendezés leírása után ismertetjük röviden.

2. Pb-egykristályok előállítása

Az egykristály-előállításhoz a következő követelmények teljesülése szükséges. A kristályosodás sebessége megfelelő legyen. A kristályosodás helyén elég nagy legyen a hőmérsékleti gradiens. A kristályosodás megindulását kis kristálycsíra behelyezésével, vagy az olvasztótégely megfelelő helyén csúcsalak kiképzésével kell elősegítenünk. A tégely fala egyébként nagyon síma

* Érkezett 1961. január 12.

legyen, hogy máshol ne keletkezzenek könnyen kristálygócok. A tégely anyaga az olvadékkal szemben inert legyen.

A kristályelőállításra általunk alkalmazott elv már régen ismert [1]. Hengeres alakú, alul finom csúcsban végződő tégelyben megolvasztjuk a fémet. Az olvasztókemence fűtése olyan, hogy az olvadékban alulról felfelé megfelelő gradiensü hőmérsékletemelkedés van. Az olvadékot lassan engedjük lehűlni, miközben a hőmérsékleti gradiens csak kevéssé változik. Így az olvadék először a tégely csúcsában dermed meg, és a kristályosodás onnan halad felfelé a lehűtésnek megfelelően.

Ilyen rendszerű kemencéknek a mozgatásos módszerekkel szemben az a hátrányuk, hogy a kellő hőmérsékleti gradiensnek a tégely egész hosszában fenn kell állnia, és így nagyobb egykristályok előállítása esetén a tégely és a kemence felső része az előállítandó kristály olvadáspontjánál jóval magasabb hőmérsékletre kerül. Mivel ez csak bizonyos határig engedhető meg, korlátozva van a hőmérsékleti gradiens értéke. Ennek ellenére ezt az elvet újabban ismét felhasználták vákuumkemencék készítésére [2].

Esetünkben, tekintettel a szükséges hőmérsékleti gradiens viszonylag kicsi voltára és a vákuumrendszer szükségességére, ez az elv szintén jól alkalmazható. Egy irodalmi adat szerint [3] ugyan az Pb-ból levegőben is előállíthatók egykristályok. Tapasztalataink azonban ennek ellenkezőjét mutatták: egykristály-előállítás levegő jelenlétében oxidálódás miatt lehetetlen volt.

Nagyméretű vákuumkályha helyett csak vákuumtégelyt készítettünk. A tégely anyaga nagy tisztaságú, finom szemcséjű Morganit grafit, amelyből esztergálással a már említett követelményeknek megfelelő síma belső felület nyerhető. (Az alacsony o. p. esetén szokásos üveg itt nem alkalmazható a tégely tetejénél fellépő magas hőmérséklet miatt.) A grafittégelyt egy fedéllel lezárható hengeres fémdobozba helyeztük. A fedél tömítése kilágyított rézgyűrűvel történt. A doboz egy csövön át leszívható, ill. védőgázzal tölthető.

A tégely falában furat van, amelybe felülről behelyezhető CrNi-konstantán termoelemmel történik a hőmérsékletmérés feszültség-kompenzációs módszerrel, 0,1 C° pontossággal. A tömítés olyan, hogy ezen a furaton keresztül sem juthat levegő a tégelybe.

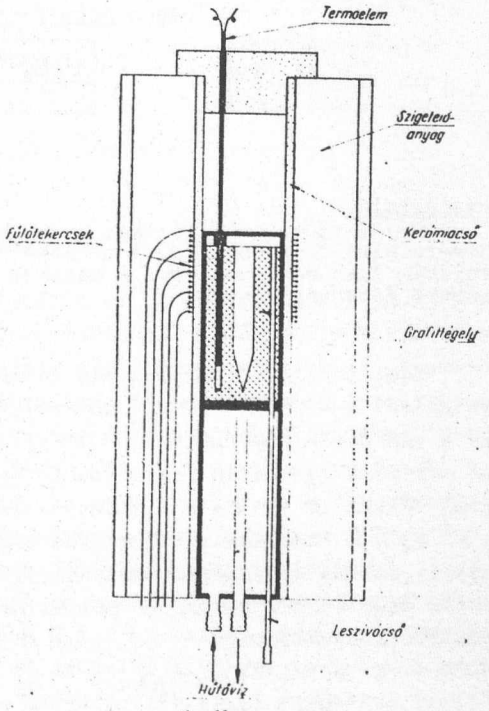
A megfelelő hőmérsékleti gradiens beállítását a következőképpen végeztük. A kemencében levő kerámiacsőbe alulról egy fémdoboz nyúlik be, amelyben hűtővíz kering. Erre a fémdobozra fekszik fel tégelyünk fémköpenye úgy, hogy a tégely alulról hűtést kap. A kerámia henger külső fala mentén négy különböző magasságban 4 fűtőtekercs helyezkedik el. A tégelyt tehát az előállítandó egykristály hosszától függő magasságban fűtjük. A fűtőtekercsekre stabilizált feszültséget adunk. Az alkalmazott fűtőteljesítmény kb. 600 W.

A kemence és a tégely vázlatát a mellékelt ábrán láthatjuk.

Kb. 20 cm hosszú és 5 cm átmérőjű Pb-egykristályok előállítása berendezésünkben minden esetben sikerült akkor, ha a tégely csúcsánál a tégely kúpszöge nem volt nagyobb 30°-nál, ha a lehűtési sebesség 10 C°/óránál kisebb volt és ha a hőmérsékleti gradiens legalább 4 C°/cm volt. A tégelyt 10^{-2} Hgmm nyomásig szívtuk le és utána tisztított Ar gázzal töltöttük meg.

A lehűtést automatizáltuk. A fűtőfeszültséget csúszókontaktussal egy toroid-transzformátorról vettük le. A csúszót egy motor forgatja igen kis sebességgel. A motort két időkapcsoló óra tartja előírt időkig be-, ill. kikapcsolva.

A termoelem feszültségének a változását, tehát a lehülést írószerkezettel regisztráljuk.



1. ábra

3. Az egykristályok vizsgálata

A nyert egykristályokat egy általunk kidolgozott és leírt [4] röntgendiffrakciós eljárással megvizsgálva 1°-nál kisebb bizonytalansággal kimutattuk, hogy bennük a kristallográfiai orientáció egész terjedelmükben állandó.

Az egykristályok közül néhányat neutron-diffraktométerrel is megvizsgáltunk és megállapítottuk, hogy mozaikeloszlásuk a bevezetésben leírt követelményeket kielégíti.

IRODALOM

[1] *J. Obreimov, L. Schubnikov*, Z. Physik, *25*, 31, 1924.
[2] *D. Lazarus, D. R. Chipman*, Rev. Sci. Inst., *22*, 211, 1951.
[3] *B. B. Betty*, Proc. Am. Soc. Testing Materials, *35*, 193, 1935.
[4] *Szabó P., Krén E.*, Priborü i Tehnika Ekszperimenta, megjelenés alatt.

A VAS TELJES HATÁSKERESZTMETSZETE HŐMÉRSÉKLETFÜGGÉSÉNEK MÉRÉSE

Irta: Kroó Norbert

Összefoglalás

BeO-szűrővel előállított hideg neutronok szóródását vizsgáltuk vason a hőmérséklet függvényében. A hatáskeresztmetszetnek a Curie-hőmérséklet környékén éles maximuma van. A maximum értéke az irodalomból eddig ismert méréssel összhangban van.

Squires [1] megmérte a vas totális hatáskeresztmetszetének hőmérsékletfüggését a - 183 - + 800 C^{o} hőmérséklet-intervallumban. Azt tapasztalta, hogy a vas Curie-hőmérsékleténél, vagyis 770 C^{o}-on a hatáskeresztmetszetnek éles maximuma van. Azon feltevéssel, hogy a hatáskeresztmetszet a mágneses szórás nélkül $\sigma = a + bT$ alaku és szobahőmérsékleten a mágneses szórás $\lambda > 4{,}04$ Å hullámhosszak esetén elhanyagolható, meghatározta külön a mágneses szórás hatáskeresztmetszetét. Ennek értéke 770 C^{o}-on 4,8 barnnak adódott. Squires méréseiben Pb polikristály által szürt neutronokat használt. A neutronok spektruma

$$dN = \begin{cases} A\lambda^{-5}\,d\lambda & \text{ha} \quad \lambda \geq 5{,}7\,\text{Å} \\ 0 & \text{ha} \quad \lambda < 5{,}7\,\text{Å} \end{cases}$$

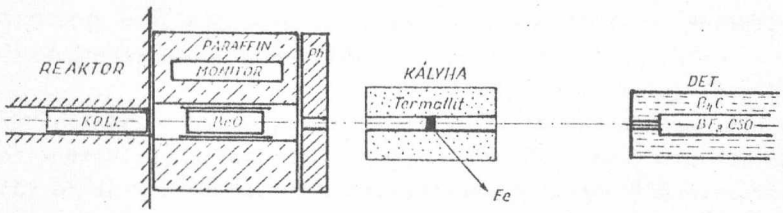
alaku volt. A mérésekkel meghatározott átlagos hullámhossz 7,00 $\pm$ 0,04 Å - nek adódott, mig a fenti spektrumból számolt átlagos hullámhossz 7,12 Å . A méréseket megismételtük BeO polikristály által szürt neutronnyalábbal. A BeO határhullámhossza $\lambda_c = 4{,}68$ Å . Igy feltehetjük, hogy

$$dN = \begin{cases} A'\lambda^{-5}d\lambda & \text{ha} \quad \lambda \geq 4{,}68\,\text{Å} \\ 0 & \text{ha} \quad \lambda < 4{,}68\,\text{Å} \end{cases}$$

alaku a spektrum, amit az a tény is igazolt, hogy az aranyfóliával mért átlagos hullámhossz $\bar{\lambda} = 5{,}81 \pm 0{,}03$ Å -nek adódott, mig a Maxwell-spektrumból számolt érték $\bar{\lambda} = 5{,}85$ Å . A gyors neutronok hányada a mérés során kisebb volt, mint 1 %.

A kisérlet leirása

Kisérleteinkben használt elrendezést mutatja az 1.ábra.



1.ábra

A 6 cm átmérőjü reaktorcsatornába helyezett 40 cm hosszu és Ø 1 cm köralaku nyilással rendelkező, ólomból és bóros paraffinból álló kollimátor után a neutronok 30 cm hosszu, szobahőmérsékletü BeO-szürőn haladtak át. A szürő után csak a 4,68 A^{o}-nél nagyobb hullámhosszu, hideg neutronok maradtak a direkt nyalábban. A kiszórt neutronokat egyrészt a szürőt körülfogó Cd-henger, másrészt a szürő köré helyezett bóros paraffin védelem nyelte el. A paraffin védőfal vastagsága 50 cm volt, és ez a rendszeren kivül mindenütt a megengedett szint alá szoritotta a neutronfluxust. A reaktorból kilépő γ -sugárzás elnyeletését 10 cm vastag ólomfallal biztositottuk.

A szürt hideg neutronokat egy 50 cm hosszu Ø 6 cm kerámiacső bélésü kályha közepébe helyezett 1,5 cm vastag Ø 5,9 cm Armco-mintán bocsátottuk át. A próbatest távolsága a szürőtől 60 cm volt. A kályha tengelye a neutronok haladási irányával párhuzamosan helyezkedett el. A próbatest izzitása levegőn történt, a mérés folyamán azonban csak elhanyagolható mértékü oxidáció lépett fel. A kályha hőmérsékletének változtatása és stabilizálása a csatorna-laboratóriumból történt. A stabilizálást fotocellás hőfokszabályzóval végeztük. Egy-egy mérési pont felvételénél a hőmérséklet állandóságát $\pm$ 0,2 C^{o}pontossággal tudtuk biztositani.

A neutronok detektálását 6 cm átmérőjü B^{10}-ben 82 %-ra dusitott BF_3 gázzal töltött proporcionális számlálócsővel végeztük [2] , amely 10 cm vastag B_4C védelemben helyezkedett el. A cső anódszála a neutronok repülési irányával párhuzamos volt.

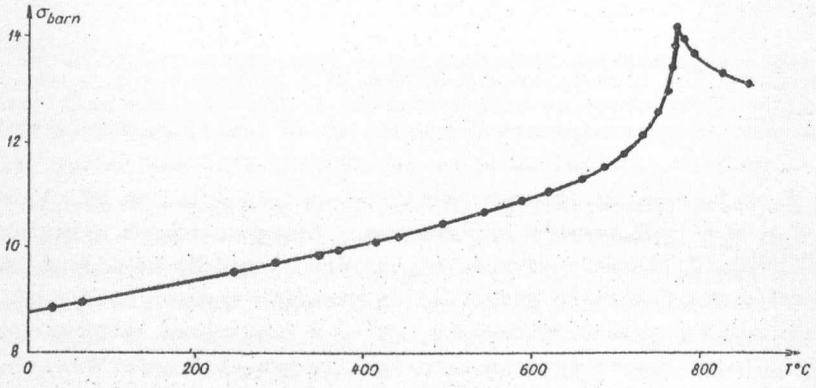
A próbatest hőmérsékletét Ni-CrNi termopárral és ПТТ B1 tipusu kompenzátorral mértük 0,2 C^{o} pontossággal.

A mérések monitorozását a szürő mellett, a védelemben /bórtartalmu paraffin/ elhelyezett CHM-5 tipusu számlálócsővel végeztük. A számlálócsö-

vek feszültségét BC-22 ill. BCB-1N nagyfeszültségü anódpótlók /szovjet/ szolgáltatták. A neutronimpulzusok detektálását A-11-R tipusu /KFKI/ erősitőkkel, D-11-R tipusu /KFKI/ diszkriminátorokkal, valamint S-11-R /KFKI/ ill. PW 4062 /PHILIPS/ scalerekkel végeztük. A Philips scaler kapuzta az előre beállitott monitor- impulzusszám beérkezése után a detektorscalert. A csatornalaboratóriumban elhelyezett elektronikus berendezéshez /erősitő + diszkriminátor + scaler/ a számlálócsövek impulzusai a csövekre szerelt előerősitőkről kábelen jutottak el.

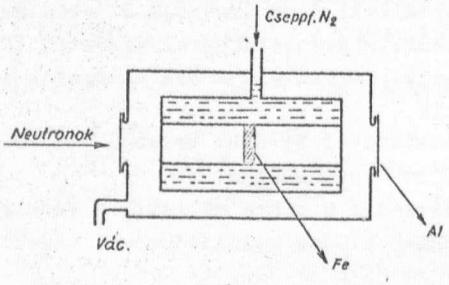
A szürt neutronnyaláb intenzitása a detektorcső helyén 10^4 n/sec volt. Az egyes mérési pontokban $4{,}5.10^5$ - $2{,}5.10^5$ impulzust gyüjtöttünk be.

A méréseinkből kapott hatáskeresztmetszet-görbe a 2.ábrán látható.



2.ábra

Squires számitásai szerint a kristályban a fononokon való szóródás a hőmérséklettel lineárisan változik az abszorpció pedig hőmérséklet-független. Ha feltesszük, hogy szobahőmérsékleten, és még alacsonyabb hőmérsékleten a szórás mágneses része hideg neutronokra elhanyagolható, az abszorpciót és a fononszórást a teljes hatáskeresztmetszetből levonva megkaphatjuk a mágneses szórás hatáskeresztmetszetét. Hogy ezt elvégezhessük, megmértük a próbatest teljes hatáskeresztmetszetét cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten is ugy, hogy a 3.ábrán ábrázolt Dewar-edényben helyeztük el a kályha helyett.

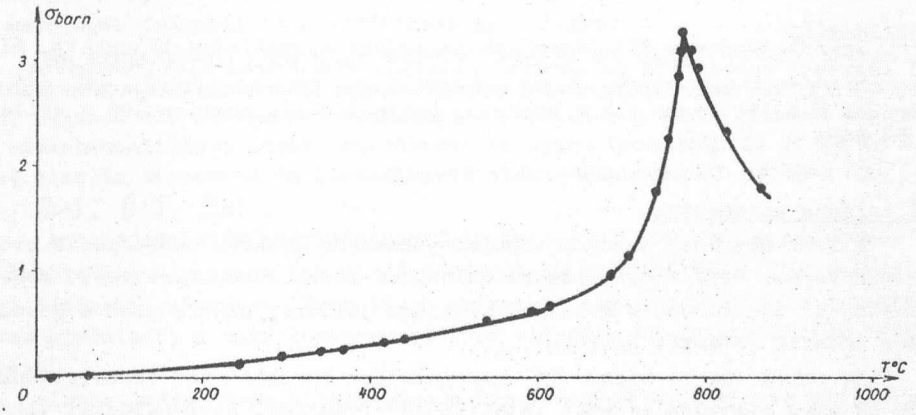


3.ábra

A mérés eredménye:

$$\sigma = 8{,}33 \pm 0{,}05 \text{ barn.}$$

Ezen mérés és a szobahőmérsékletü mérés által meghatározott egyenes az abszorpciós és fononszórás összege. Igy a fentiek értelmében a mágneses szórás hatáskeresztmetszete meghatározható.



4.ábra

Értéke 770 C°-on 3,3 ± 0,17 barn.
Ezt Squires méréseivel összevetve megnézhetjük, hogy összhangban vannak-e az elméleti $\sigma_{mágn}(T_c) \sim \lambda^2$ összefüggéssel.
A mérésekből

$$\frac{\sigma_{mágn}(T_c)_{Pb}}{\sigma_{mágn}(T_c)_{BeO}} = \frac{4{,}8 \pm 0{,}2}{3{,}3 \pm 0{,}17} = 1{,}45 \pm 0{,}15$$

Számolásból pedig

$$\frac{\bar{\lambda}^2_{Pb}}{\bar{\lambda}^2_{BeO}} = \frac{7{,}35^2}{6{,}03^2} = 1{,}48$$

Tehát a mérési hibán belül a λ^2-es hatáskeresztmetszetfüggéssel ezen mérések összhangban vannak.

I r o d a l o m

[1] Squires,G.L., Proc.Phys.Soc. A67, 248 /1954/
[2] Gordon J., Szabó P., Magyar Fiz.Folyóirat 8, 211 /1960/

Érkezett 1961. augusztus 21.
KFKI Közlemények, 9.évf. 4.sz. 1961.

LABORATÓRIUMI ELEKTROMÁGNES

Irta: Zsigmond György

Összefoglalás

Ismertetünk egy általános laboratóriumi használatra tervezett, állítható légrésü, cserélhető pólusokkal ellátott vizhütéses elektromágnest, amely 45 000 Oe. légréstérerősség előállitására alkalmas. Súlya kb. 560 kg, hűtéséhez 6-8 lit./perc viz szükséges. Maximális fogyasztása 100 V mellett, kb. 40 Amp.

1/ Általános szempontok

A ferromágneses anyagok tanulmányozásához gyakran szükségesek erős mágneses terek. Ezek előállitására különböző módszerek ismeretesek. Megválasztásuknál elsősorban a kutatási probléma jellege, másodsorban a gazdaságosság játszik jelentős szerepet.

Az egyik ismert módszerrel kapcsolatban korábban már ismertettünk közepes és erős mágneses tereket létesitő laboratóriumi szolenoidokat [1], [2], [3] és az irodalomban is nagy számban találhatók idevonatkozó közlemények [4], [5], [6], [7], [8].

A szolenoidok azonban, kedvező tulajdonságaik ellenére sem pótolhatják minden esetben az elektromágneseket, amelyeknek kétségtelenül igen nagy előnyük a szolenoidokkal szemben a légrés minden oldalról való hozzáférhetősége mellett az aránylag kis elektromos teljesitménnyel elérhető nagy térerősség. Ez utóbbi abból következik, hogy a szolenoidok hosszu, a levegőn keresztül záródó mágneskörével szemben az elektromágnes vas járma és pólusai a mágneses tér energiájának nagy részét a pólusok között légrésbe koncentrálja.

Igen nagy hátrányuk azonban a vas mágnesezési karakterisztikája miatt fellépő nonlineáris, és a hiszterézis következtében fellépő nem egyértelmü összefüggés a mágnesező áram és a tér erőssége között.

Ezért ellentétben a szolenoidokkal, amelyeknél a mágnesező áram és a tekercsre jellemző "K" tekercsállandó ismeretében a mindenkori térerősség pontosan ismert, az elektromágnes légrésében a térerősség méréséről külön gondoskodni kell /pl. Hall szonda, rotációs térmérő vagy nagyobb pontosságot megkivánó esetekben proton rezonancia-jel méréssel/.

Számolni kell még az elektromágnesek alkalmazása esetén az u.n. "mágneses tükörhatás" jelenségével is, amelynek az az oka, hogy az elektromágnes pólusai közé helyezett ferromágneses minta /próbatest/ és a pólusok kölcsönhatása következtében a pólusokban az egyébként homogén tér erősen eltorzul, ennek következtében a próbatest sem mágneseződik egyenletesen.

Mindezen hátrányok ellenére is célszerü elektromágnest alkalmazni olyan esetekben, amikor igen erős mágneses terekre van szükség és a mágneses tér merőleges irányból is hozzáférhető kell legyen.

Az irodalomban elég nagy számban találhatók laboratóriumi használatra tervezett elektromágnesek részletes leirásai. Bár a hivatkozott cikkek közül egyesek már elavultnak tekinthetők [9] , [10] , mégis érdekes és értékes összehasonlitásra adnak lehetőséget az ujabb konstrukciós elvek és szemlélet alapján tervezett és kivitelezett elektromágnesekkel szemben [11], [12], [13], [14], [15], [16] .

A tapasztalatok szerint speciális esetektől eltekintve elégséges ha egy laboratóriumi mágnes 4-5 cm légréstávolság mellett 12-13 kOe. térerősséget biztosit, mivel az ilyen térbe helyezett legkedvezőtlenebb geometriáju vas próbatest, a nagy lemágnesező tere ellenére is gyakorlatilag telitésbe kerül.

Ahhoz pedig, hogy a légrésben a tér irányára merőlegesen elég homogén legyen a mágneses tér, célszerü a pólusokat legalább 10-12 cm átmérőre választani.

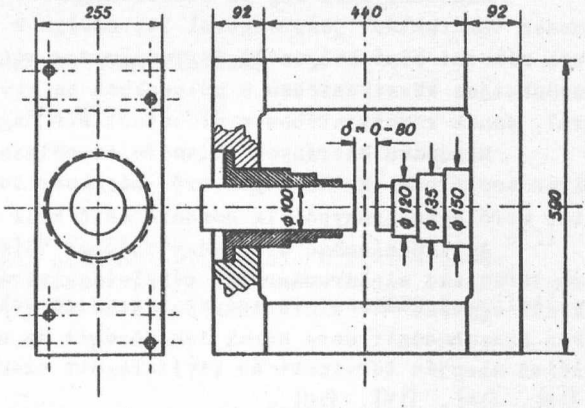
Fontos követelmény a légrés állithatósága és a pólusfejek cserélhetősége, mert a légrésben a legtöbb esetben nem csupán a vizsgálandó anyagot /próbatestet/ kell elhelyezni, hanem egyéb szerelvényeket is /pl. kályha, mérőtekercsek, hütőköpeny, magnetométer, kriosztát, stb./. Állitható légréssel és cserélhető, a célnak legjobban megfelelő idomu pólusfejekkel pedig mindig a legkedvezőbb viszonyokat teremthetjük meg egy kisérlet elvégzéséhez.

Ezért egy olyan elektromágnes tervezését határoztuk el, amelynek légrése 0-80 mm távolságig folyamatosan állitható, a mágnespofák könnyen cserélhetők, és követelménynek állitottuk, hogy 100 mm Ø sikpólusok esetén 50 mm légrésben 5 kW-nál nem nagyobb elektromos fogyasztás mellett legalább 10 000 Oe, illetve 10 mm Ø-ra szükitett kúpos pofákkal 2 mm légrésben legalább 40 000 Oe légréstérerősség legyen elérhető. Emellett hatásos hütés biztositsa a tartós üzemeltetés lehetőségét, és egyszerü módon biztositsuk a kikapcsolási áramlökések elleni védelmet.

Több közelitő számitás elvégzése után a járommal kapcsolatban támasztott mágneses követelmények és a mágnesező tekercsek aránylag legkedvezőbb jellemzőinek összhangba hozása után az 1.ábrán látható fő méretek alakultak ki.

A jármot erősen túldimenzionáltuk, hogy ugyanazon méretü előre gyártott járomanyag felhasználásával, nagyobb /200-250 mm Ø/pólusok alkalmazását is lehetővé tegyük. Ez esetben természetesen lemondanánk a pólusok állithatóságáról.

A tervezés menetére nem kivánunk részletesen kitérni, helyette ismertetjük a számitások alapján kapott lényegesebb adatokat.



1.ábra

A mágneses út hossza a járomban	l_v = 145 cm
A járom keresztmetszete	q_v = 240 cm^2
A lépcsős pólushüvely ármérői	Dh_1 = 150 mm
	Dh_2 = 135 mm
	Dh_3 = 120 mm
A pólusmag átmérője	D_p = 100 mm
A pólusok közötti légrés	δ = 0-80 mm
Légréstérerősség δ = 50 mm-nél	H_ℓ = 10 000 Oe
Ehhez szükséges hasznos gerjesztő Amper-menetek száma:	Θ_h = 40 200 Am
A szórás figyelembevételével szükséges össz.gerjesztő Amper-menetszám:	$\Theta_{\ddot{o}}$ = 72 000 Am
Maximális mágnesáram:	I = 40 A
Max. áramsürüség a vezetőben:	σ_v = 4 A/mm^2
A szükséges vezető keresztmetszete:	q_r = 10 mm^2
A tekercs anyaga Cu, mérete 10x1 mm, diagonál szövésü 2x papir szigetelés, impregnálva	
Tápfeszültség:	U = 100 V
Összmenetszám: $/N_{\ddot{o}} = \frac{\Theta_{\ddot{o}}}{I}$ /	$N_{\ddot{o}}$ = 1800
Tekercsek száma /pólus/:	S_p = 12
Összes tekercselemek száma:	$S_{\ddot{o}}$ = 24
Egy tekercs közepes menetszáma:	n_t = 75
A tekercsek max. külső átmérője:	D_t = 345 mm

A sorositott 24 db tekercs ellenállása $\Delta t = 40\ C^o$ tulmelegedés esetén;	$R_m = 2{,}45\ \Omega$
A tekercs sorositások, csatlakozások átmeneti ellenállásának figyelembevételével:	$R_m' = 2{,}57\ \Omega$
A mágnestekercseken 40 A áram áthajtásához szükséges feszültség:	$U_ü = 102{,}8$ V
A tekercsekben felszabaduló veszteség	$P_v = 4100$ W
Az egyes ikertekercsekben "	$P_t = 340$ W
Az ikertekercseknek a hőátadás irányába mutatott felülete	$F_t = 560\ cm^2$
A tekercsek fajlagos hőterhelése /a hőátadás irányába/	$\sigma_p = 0{,}6\ W/cm^2$
A pólusonkénti 6-6 db ikertekercset körülvevő 7-7 db hütőborda felülete	$F_b = 28\ 000\ cm^2$
A hütőtárcsákra eső fajlagos hőterhelés	$\sigma_h = 0{,}15\ W/cm^2$

A mágnesező tekercsek elektromos szigetelési követelményei miatt a fém hütőbordák és a tekercsek közé egy rossz hővezetésü anyag kerül, ami szükségszerüen rontja a hőátadást. A bizonytalan felületi érintkezések és a sok rossz hővezetésü anyag annyira bonyolitja a hőtechnikai számitásokat, hogy a végzett közelitő számitások mellett szükségesnek láttuk egy modellkisérlet elvégzését is, hogy megnyugtató módon tisztázhassuk a hőátadás és a hütés lehetőségét a tervezett módszer mellett.

Ezért felépitettünk egy a végleges tekercsformát tökéletesen imitáló, rétegenként szigetelt, az egyik oldalán a számitás szerinti hütőfelülettel ellátott tekercselemet, amelyet egy peremhütéses vörösréz tárcsára fektettünk illetőleg szoritottunk rá.

A tekercs másik / hütött/ oldalát a lehetőségekhez képest elzártunk minden hőleadási lehetőségtől.

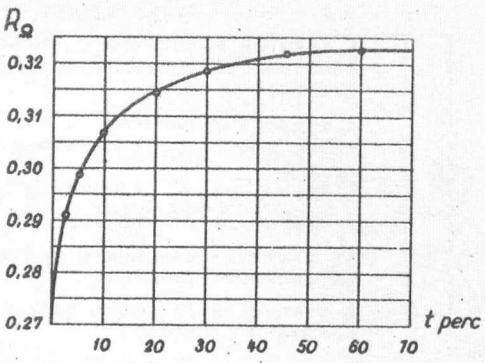
Az igy elkészitett fél-tekercsbe az ikertekercsekre eső elektromos teljesitménynek a felét vezettük be, azaz 340 W helyett 170 W-ot. A termikus egyensuly beálltáig mértük a tekercs ellenállásváltozását és a

$$\Delta t = \left(\frac{R_m}{R_h} - 1\right)\frac{1}{\alpha}$$

összefüggés alapján ahol is R_m = a tekercs melegellenállása, R_h = a tekercs ellenállása 20 C^o-on, $\alpha = 0{,}00429$ /vörösrézre/ azt találtuk, hogy a tekercs tulmelegedése $\Delta t = 39{,}4\ C^o$.

Ez a kisérletileg meghatározott érték a közelitő számitásokkal meghatározottával igen jól egybeesett. A termikus egyensulyi állapot beállását

a 2.ábra szemlélteti. A modellkisérletet a maximális üzemi veszteségi körülményeknek megfelelő feltételek mellett végeztük, bár üzemszerüen ilyen állapot csak a legritkább esetben fordulhat elő, mert amint azt a későbbi térmérések is igazolták, a fele teljesitménnyel /2 kW/ üzemeltetett mágnessel is elérhető a maximális légréstérerősség 90-95 %-a.



2.ábra

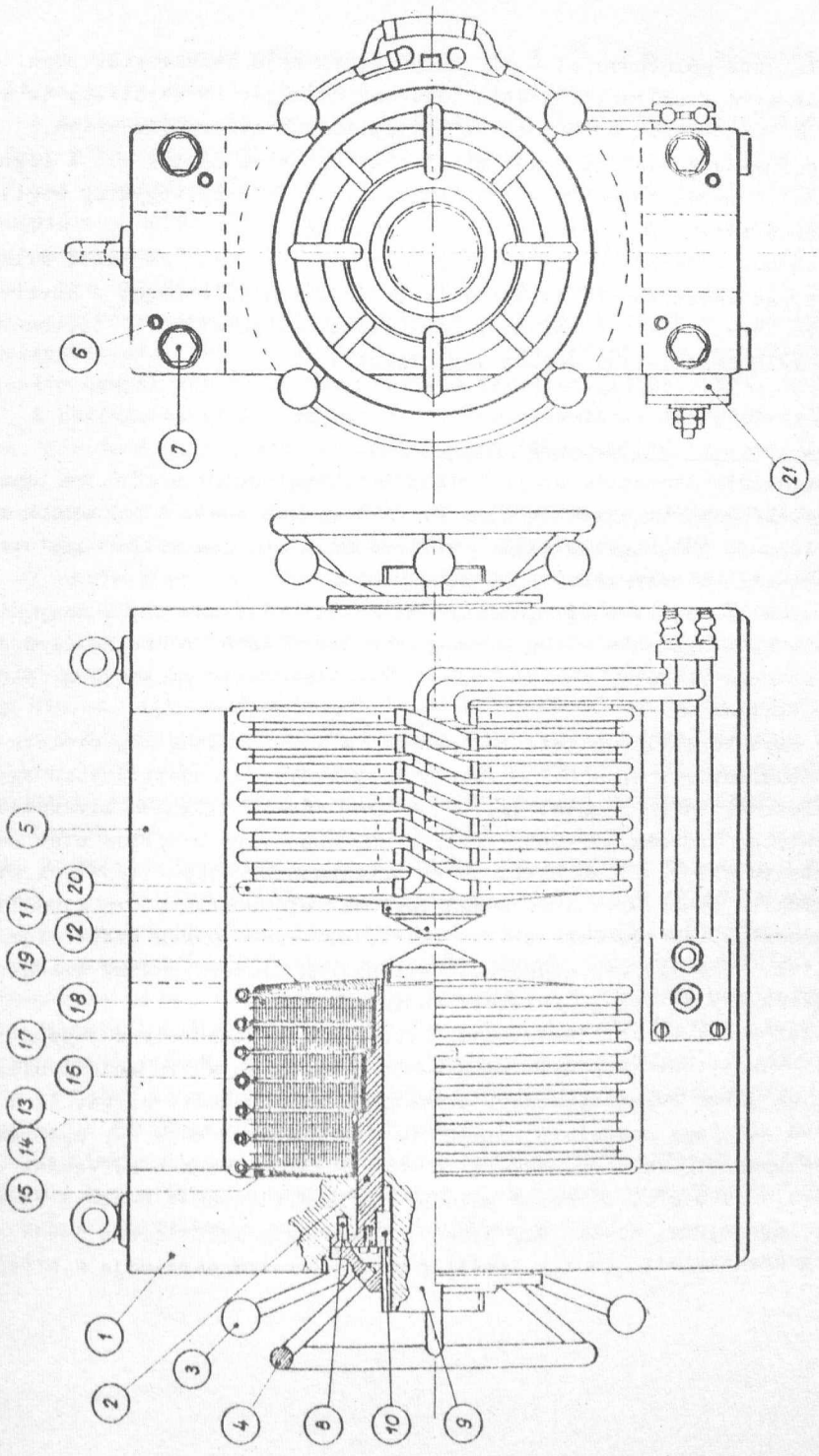
Az elektromágnes felépitését és lényegesebb alkatrészeit a 3.ábra szemlélteti. Az ábrán alkalmazott jelölésekre az illető alkatrész vagy alkatrészcsoport tárgyalásánál hivatkozunk.

2/ Mágnesjárom, pólusok és pólushüvely

Az elektromágnes jármához, pólushüvelyeihez és pólusaihoz szükséges ARMCO vasat a Csepeli Vas és Acél Müvek készitették el. Az öntecset kovácsolás és hőkezelés után 15-20 mm mélységig lehántoltuk, hogy a felületi rétegekbe belevert esetleges oxidzárványokat és felületi repedéseket eltávolitva egy minőségileg megfelelő anyagot kapjunk.

Az előmunkált járom illeszkedő felületeit köszörüléssel illesztettük, gondosan mérve a szereléshez feltétlenül szükséges pontos derékszögek állapotát. A két 1. oldaljáromba előre elkészitettük a 2. pólushüvelyek, a 3. állitótárcsák, és a 4. rögzitőtárcsák üléseit és meneteit, valamint a sülyesztett járomszoritó csavarok és előfurt brezoncsapok helyeit.

A két 5. keresztjármot középen egy kb. 80 mm Ø furattal törtük át, hogy a légrésbe a jármon keresztül hosszabb szerelvényeket is bevezethessünk. A készre munkált járom oszlopokat sikasztalon összeraktuk, beszereltük a pólushüvelyeket, és ezeken egy illesztett köszörült tüskét dugva keresztül, egytengelybe állitottuk az oldaljármokat. Megvizsgáltuk, hogy az ideiglenes összeszerelés után nem keletkeztek-e az illeszkedő felületek között rések, egytengelybe esnek-e a pólusok, stb. Ezután a kisebb felfekvési pontatlanságokat a felület tusirozásával elháritottuk, és az ujabb ellenőrzés után átjelöltük a brezon csapok furatait az ellendarabra. A furatok feldörzsölése után a jármot a 6. brezoncsapokkal véglegesen rögzitettük, majd oldalanként a 7. 4-4 db M 24 acélcsavarral összeszoritottuk.



3. ábra

A lépcsős pólushüvelyt a 8. süllyesztett fejü csavarokkal rögzitettük a járom erre a célra kiképzett ülésében. Belsejét köszörültük, és a benne mozgó 9. pólusmagot a 10. ékkel biztositottuk elfordulás ellen.

A pólusmagok mindkét végét menetes kiképzéssel láttuk el. A légrés felöli oldal menetes csonkjára a 11. hollandi anyás szoritógyürük segitségével különböző idomu 12. pólusfejek csavarhatók fel.

A pólusmag járom felöli menetes részébe a 3. kézi kerékkel ellátott menetes tárcsa kapaszkodik, amelynek forgatásával a pólusmagot a hüvelyben előre-hátra lehet tolni. A pólusmag beállitott helyzetét a 4. tárcsa rögziti, amely 1/12 fordulattal rögzit vagy felold.

3/ Mágnestekercsek, hütőtárcsák, szigetelés

A kiszámitott tekercsadatok alapján elkészitettük a 10x1 mm lapos, papirszigetelésü vörösrézszalagból a 24 db sik tekercset. A tekercsek menetszámai a lépcsős pólushüvely átmérő változásai miatt nem voltak egyformák. Közepes értékben minden tekercs 75 menet volt.

A tekercselést vastag oldaltárcsák között végeztük el, a nagy átmérőjü tekercseket a szétesés ellen a tekercs belső /kezdő/ része felől 6 db. radiális irányba /kifelé/ haladó cikk-cakk-ba vezetett pamutszalag átkötéssel biztositottuk.

Az egyenként elkészitett tekercseket a lépcsőzetnek megfelelően kettesével párositottuk, és a belső végeit folytatólagos menetirányban egymással összeforrasztva beszigeteltük. Igy minden véget illetve kivezetést a külső kerületen tudtunk kivezetni, ami a mágnesbe való beépités után nagyon megkönnyitette a további sorositások és összekötések elkészitését. A kivezetéseket oldalra elcsavarva a szomszéd tekercs felé nézően előre kihajlitottuk és beónoztuk. Az igy elkészitett ikertekercseket csak a beszerelés előtt impregnáltuk, hogy igy még alakitható állapotban biztosithassuk a hőátadás szempontjából oly fontos jó felületi felfekvéseket.

A tekercsek beszerelése előtt elhuztuk a pólushüvelyek lépcsőire a 13. papir-bakelitből készitett szigetelőcsöveket, és a 14. oldal szigetelő tárcsákat. A járom belső oldalához támaszkodó 15. bakelit szigetelő tárcsa elhelyezése után egy megfelelő méretü 16. hütőtárcsa, majd egy 0,25 mm vastag prespann lemezből készitett 17. szigetelő tárcsa behelyezése után a lépcső méretének megfelelő belső méretü 18. ikertekercset huztunk rá a pólushüvely lépcsőjére. Ezután egy ujabb 0,25 mm szigetelő tárcsa, majd egy hütőtárcsa következett, és igy ismétlődött a szerelés sorrendje a befejezésig.

A készre szerelt pólustekercs-köteget a 19. kúpos, sárgarézből készitett záróanya szoritotta össze.

A tekercsekben az áram kikapcsolásakor nagy feszültséglökések lépnek fel. Ezek többszáz, esetleg többezer V sec-ra tehetők. A vörösréz hütőtárcsák fémes összekötése esetén a teljes kikapcsolási csúcsfeszültség egyetlen hütőtárcsa kétoldali szigetelésére esik. A jó hőátadás és aktiv hütés érdekében azonban ez a szigetelés nem lehetett 0,2-0,25 mm-nél vastagabb. Emiatt a fém hütőtárcsákat nemcsak a járomtól, hanem egymástól is elszigeteltük, ugy hogy vászonbetétes gummicsővel kötöttük össze a vizhütött peremek csővezetékeit. Igy a szigetelések is sorositódtak, és egy hütőtárcsa szigetelésére csupán két tekercsben fellépő feszültséglökés eshet.

A hütőtárcsákat 1,5 mm vastag vörösrézlemezből, fémnyomással készitettük. Korrózió elleni védelem miatt galvanikus úton Cd bevonattal láttuk el, majd 2-2 darabot egymással szembe forditva összeszegecseltünk. A kihajló peremükbe beforrasztottuk a 20. 9/7 mm Ø vörösréz hütőcsöveket, majd méretre vágva és kihajlitva a sorositásra alkalmassá tettük.

A hütőbordák mint rövidrezárt menetek, elektromos csillapitó hatásuknál fogva tökéletes védelmet nyujtanak a kikapcsolási áramlökésekkel szemben.

A hütőbordákat körülvevő hütőcsöveket egy rövid szakaszon kihajlitottuk, ami részben az elemek könnyebb sorositását eredményezte, részben pedig az igy kialakitott üregben "rejtve" helyezhettük el az egyes tekercselemek elektromos összekötéseit is. Ez részben érintésbiztonsági, részben pedig esztétikai szempontból is kedvező volt. Az előre kihajlitott, méretre vágott és beónozott tekercsvégeket a szükséges sorositási rendbe elhelyezve egymásra boritottuk, majd egy U alaku lemezkével összefogva gondosan megforrasztottuk. A tekercs kezdetét és végét 16 mm^2 rézkábelhez forrasztva a elektromos csatlakozó táblához vezettük ki, ahol sines áthidalással soros vagy párhuzamos kapcsolást létesithetünk a két pólustekercs között.

A tekercsek vizhütéséhez szükséges nyomó, illetőleg elfolyó vezetéket és csaptelepét a mágnes alsó járma szereltük. A vezetékrendszeren egy-egy csappal ellátott külön csatlakozási lehetőséget biztositottunk a mágnes egyéb szerelvényeinek, kisérleti eszközeinek stb. esetleges hütésére.

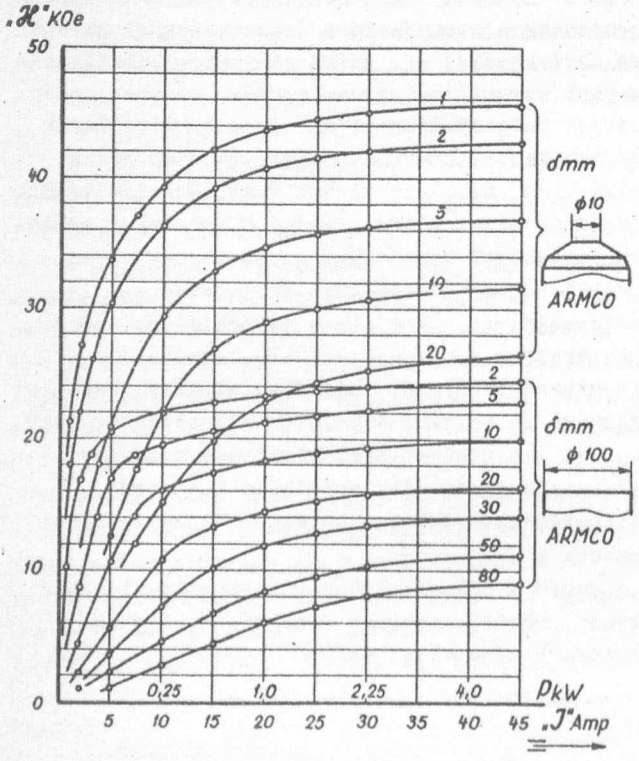
A mágnes könnyebb szállithatósága érdekében a felső, és egyik oldal járman 2-2 db emelőhorgot helyeztünk el.

Az elektromágnes egyik oldalán a pólusállitószerkezet eltávolitható, és helyére egy a járomba besülyedő rögzitőszerkezet szerelhető. Igy az elektromágnes függőleges helyzetben is üzemeltethető.

4/ A mágneses tér vizsgálata

A mágnesező áram - légréstérerősség összefüggését ballisztikus módszerrel vizsgáltuk. Több mérőtekercset készitettünk, hogy a nagy térerősség intervallumban elvégzendő mérés még kis tereknél is jól leolvasható galvanométer kitérést adjon. A tekercsek menetszámait és geometriáját nagy pontossággal állapitottuk meg, hogy a mérési hibát ezzel is csökkentsük. A tekercsváltás a mérési eredményekben nem okozott hibát, amit egyébként a grafikus ábrázolások is bizonyitanak.

A ballisztikus eljárással kapott mérési adatokat néhány ponton egy hiteles térmérővel is ellenőriztük. Az ellenőrző mérések a mérési pontosságon belül megegyeztek. Mindkét esetben azonban kb. 10 %-kal nagyobb térerősségeket kaptunk a várt, illetőleg számitott értékeknél. Ennek az volt az oka, hogy az igen nehezen számolható mágneses szórást jó közelitéssel, de kellő óvatossággal becsültük, és a légrésbe koncentrálható hasznos fluxust a ténylegesnél alacsonyabbra értékeltük.



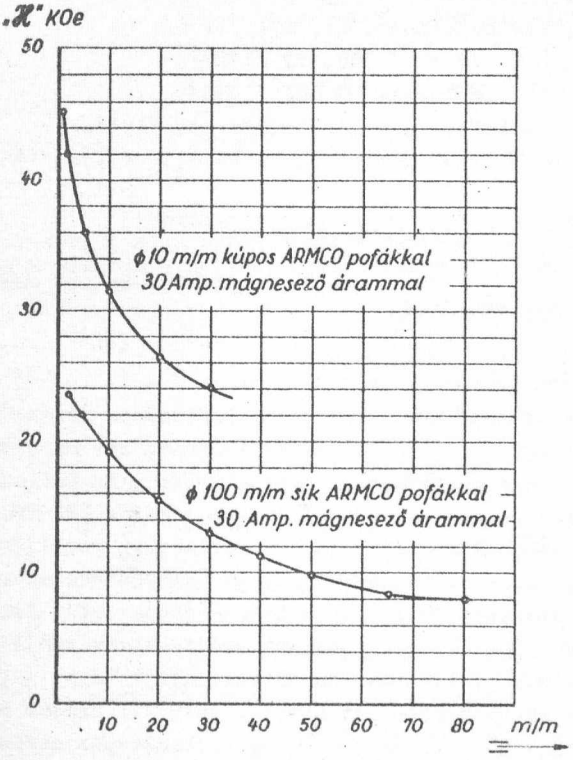
4.ábra

Az elektromágnes mágnesező áram - légréstérerősség összefüggését az 4.ábra mutatja, amelyen a mágnesező áram intenzitása mellett a hozzátartozó P_{kW} elektromos teljesitményt is ábrázoltuk.

A méréseket 100 mm Ø sik és 10 mm Ø kupositott ARMCO pólusokkal végeztük. Az elkészités alatt álló 36 % Fe-Co pólusok alkalmazásával kb. 12 %-os térerősség növekedéssel számolhatunk.

Az 5.ábrán I = 30Amp állandó gerjesztő áram mellett a légréstérerősségnek a légréstávolságtól való függését ábrázoltuk 100 mm Ø sik, és 10 mm Ø kúpos pofák alkalmazása esetén.

Megvizsgáltuk az elektromágnes remanenciáját



5.ábra

is, és azt találtuk, hogy maximális árammal való felgerjesztés után 1 mm légrésben a tér kikapcsolása után 30 sec-al 45 Oe remanens térerősség maradt.

A pólusokra és a mágnestekercsekre ható vonzóerő tetemes, de a járom mechanikai szilárdságát figyelembevéve teljesen veszélytelen. A fellépő erő 100 mm Ø sikpólusokkal 25 kG-nál kb. 2000 kg.

Az elektromágnes nagyobb gépmunkáinak elvégzéséért a Központi Mühely dolgozóit, a szerelés, tekercsek elkészitése, beállitás, stb. kényes és nagy pontosságot igénylő munkáiért pedig a Szilárdtestfizikai Laboratórium müszerészeit illeti dicséret és köszönet.

I r o d a l o m

[1] Pál L., Zsigmond Gy., KFKI Közlemények, 3 300 /1955/
[2] Zsigmond Gy., KFKI Közlemények, 3 690 /1955/
[3] Zsigmond Gy., Tarnóczi T., KFKI Közlemények, 6 420 /1958/
[4] Heddle,A.T., Br.J.Appl.Phys. 3, 95 /1952/
[5] Lewis,B., Br.J.Appl.Phys. 1, 239 /1950/
[6] Puzej,I.M., Fizicseszkije Metodi Iszledovanyija 176 /1949/
[7] Gardner,M.E., Jungermann,J.A., Lichtenstein,P.G., Patten,C.G., Rev.Sci. Instr.Vol. 31. No.9. 929 /1960/
[8] Barker,I.R., Brit.J.Appl.Phys. 1, 238 /1950/
[9] Weiss,P., J.de Phys. 4^{e} serie VI. /1907/

[10] Boas,H., Pederzani,Th., Z.f.Physik 19, 351 /1923/
[11] Bitter,F., Reed,E., Rev.Sci.Instr. 22, 171 /1955/
[12] Cotton,M.A., C.R.Ac.Sci. /Paris/ 187, 77 /1928/
[13] Lange,H., Kohlhaas,R., Z.F.Physik 10 461 /1958/
[14] Sucksmith,W., Anderson,S.P., J.Sci.Instr. 33 234 /1956/
[15] Bates,L.F., Modern Magnetism. Cambridge University Press /1951/

Érkezett 1961. november 30.

KFKI Közlemények 9.évf. 5-6.sz. 1961.

A MÁGNESEZETTSÉG MEGHATÁROZÁSA ALACSONY HŐMÉRSÉKLETEN A GREEN-FÜGGVÉNY MÓDSZER ALAPJÁN.[x]

Irta: Praveczki Endre

Összefoglalás

A Green-függvény módszer segitségével meghatározzuk a Heisenberg-modell mágnesezettségét a Dyson-féle spinhullámelmélet keretei között: olyan eredményt kapunk, amely csak a T^4 -es tagban mutat kis eltérést Dyson eredményeitől.

1. A ferromágneses anyagok leggyakrabban használt modelljének, a kvantum-mechanikai Heisenberg-modellnek az alacsony hőmérsékletek tartományában /az abszolut zérus foktól kb. a Curie-hőmérséklet feléig/ érvényes közelitő tárgyalási módját a spinhullám elmélet adja, amelynek alapjait Bloch [1] vetette meg, felismervén, hogy a ferromágneses anyagok legalacsonyabban gerjesztett állapotaiban a kompenzálatlan elektronspinek /ferromágneses spinek/ egymáshoz képest szabályos, bizonyos irányokban állandó fázis különbséget mutató processziót végeznek /spinhullám/. Feltehető, hogy az elemi gerjesztések /ferromagnonok/ egymás hatására nem változtatják meg állapotukat /nincs köztük kölcsönhatás/, tehát a magnonok komplexuma szabad gáznak tekinthető. Ezen feltevés alapján azt kapta, hogy a $\sigma = \langle S_k^z \rangle / S$ = spontán mágnesezettség

$$\sigma = 1 - \alpha_0 T^{3/2}$$

alakban változik a hőmérséklettel, ahol α_0 numerikus állandó.

Utána többen megpróbálkoztak avval, hogy Bloch elméletét tovább fejlesztve a spinhullámok kölcsönhatását is figyelembe vegyék a mágnesezettség és egyéb mennyiségek kiszámitásához. Ezen törekvések két irányba vezettek. Az egyik irányt követve Dyson [2] , a másik irányt követve pedig Holstein, Primakoff [3] és Oguchi [4] alapozták meg a spinhullámok kölcsönhatásának elméletét.

A két elmélet különbségét abban foglalhatjuk össze, hogy mig Dysonnál az

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, b_k^+$$

$$S_k^- = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_k}{2S}\right) c_k$$

$$S_k^z = S - n_k \,, \qquad n_k = b_k^+ c_k$$

$$c_k b_\ell^+ - b_\ell^+ c_k = P_k \delta_{k\ell} \qquad P_k = 1 - \frac{2S+1}{(2S)!} \prod_{\nu=0}^{2S-1} (n_k - \nu)$$

[x] A dolgozat megirása után értesültünk arról, hogy más formalizmussal hasonló eredményhez jutott R.A. Tahir-Kheli and D.ter Haar, Phys.Rev. 127, 1. 88./1962/

relációkkal , addig Holstein, Primakoff és Oguchi elméletében az

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, a_k^+ \sqrt{1-\frac{n_k}{2S}} \ ,$$

$$S_k = \sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{n_k}{2S}}\, a_k \ ,$$

$$S_k^z = S - n_k \ , \quad n_k = a_k^+ a_k$$

$$a_k a_\ell^+ - a_\ell^+ a_k = P_k \delta_{k\ell} \ , \qquad P_k = 1 - \frac{2S+1}{(2S)!}\prod_{\nu=0}^{2S-1}(n_k - \nu)$$

relációkkal állitjuk elő az S_k^+, S_k^-, S_k^z spinoperátorokat, ahol a b_k^+, c_k illetőleg a_k^+, a_k operátorok jelentése: Fourier-transzformáltjaik a spinhullámok emissziós, illetőleg abszorpciós operátorait adják az egyik, illetőleg másik elméletben.

A mágnesezettséget Dyson, illetőleg Oguchi határozta meg kellő pontossággal. A két elmélet közel azonos eredményhez vezetett:

$$\sigma(T) = 1 - \frac{1}{S}\left\{\left(\frac{kT}{8\pi JS}\right)^{3/2}\xi\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{3\pi}{4}\left(\frac{kT}{8\pi JS}\right)^{5/2}\xi\left(\frac{5}{2}\right) - \right.$$

$$\left. - \frac{33\pi^2}{32}\left(\frac{kT}{2\pi JS}\right)^{7/2}\xi\left(\frac{7}{2}\right) - \frac{3\pi}{2S}\left(\frac{kT}{8\pi JS}\right)^{4}\xi\left(\frac{3}{2}\right)\xi\left(\frac{5}{2}\right)\left(1+\frac{c}{S}\right)\right. \ ,$$

ahol a T^4 -es tag irja a kölcsönhatást / az előzőek még a spinhullámok kinetikus energiáiból származnak / és a különbség csupán az, hogy a Dyson-elméletben $c = 0{,}3$, a Holstein-Primakoff-Oguchi-elméletben pedig $c = 0{,}2$.

Mind Dyson, mid pedig Oguchi a klasszikus módszerekkel határozták meg a mágnesezettséget: kiszámitották az állapotösszeget, s ebből diferenciálással nyerték a mágnesezettséget. Uj momentumot jelent ezért Jakovlev [5] munkája, aki a spinhullám kölcsönhatások Holstein-Primakoff-Oguchi-elméletében a statisztikai Green-függvény-módszert alkalmazta és hasonló eredményhez jutott, mint Oguchi - azzal a különbséggel, hogy nála $c=0{,}2$ helyett $c=0$ jött ki.

Jakovlev eljárásának előnye, hogy viszonylag könnyen el lehet jutni a mágnesezettség képletéhez. A következőkben ezért alkalmazzuk a statisztikai Green-függvény módszert a Dyson elméletben is a mágnesezettség meghatározására.

2. Tekintsük a ferromágnesek Heisenberg-modelljének Hamilton-operátorát:

$$H = -\mu g \mathcal{H}\sum_k S_k^z - \sum_{k\ell} J_{k-\ell}\left[\frac{1}{2}S_k^+ S_\ell^- + \frac{1}{2}S_k^- S_\ell^+ + S_k^z S_\ell^z\right] .$$

Ez a b_k^+, c_k, n_k operátorokkal a következő alakot ölti:

$$H = E_0 + \mu g \mathcal{H}\sum_k n_k + \sum_{k\ell} J_{k-\ell}\left[(n_k - b_k^+ c_\ell)2S + b_k^+ n_\ell c_\ell - n_k n_\ell\right] . \qquad /1/$$

Ha meghatározzuk a

$$G_{k\ell}(t-t') = \langle\langle c_k(t) \mid b_\ell^+(t')\rangle\rangle$$

Green-függvényt, akkor könnyen megkapjuk a $\langle b_\ell^+(t')\, c_k(t)\rangle$ korrelációs.

függvényt, illetőleg a

$$\sigma = 1 - \langle n_k \rangle / S$$

mágnesezettséget. A Hamilton-operátor /1/ alakjával azonban bonyolult, több fajta magasabbrendü Green-függvényt tartalmazó differenciál egyenletet kapunk $G_{k\ell}(t-t')$ számára:

$$\frac{d}{dt} \ll c_k | b_\ell^+ \gg = \langle P_k \rangle \delta_{k\ell} - i\{\mu g \mathcal{H} \ll c_k | b_\ell^+ \gg + \sum_f J_{k-f} [2S \ll c_k | b_\ell^+ \gg -$$

$$- 2S \ll P_k c_f | b_\ell^+ \gg + \ll P_k n_f c_f | b_\ell^+ \gg + \ll b_f^+ c_k c_k | b_\ell^+ \gg - \ll P_k n_f c_f | b_\ell^+ \gg \} .$$

/ Itt felhasználtuk, hogy

$$\frac{d}{dt} A(t) = i[H, A(t)]$$

alapján kell képeznünk a differenciál-hányadost./ .

Végezzük el ezért elöször is azt a közelitést, hogy a P_k projekciós operátort / amelynek sajátértéke a maximálisan gerjesztett, tehát az alacsony hőmérsékleten ritkán előforduló állapotot kivéve mindegyikben +1 /— +1 -el helyettesitjük, ahogy azt hallgatólagosan Jakovlev is teszi. Akkor azt kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt} G_{k\ell}(t-t') = \delta_{k\ell} \delta(t-t') - i\{\mu g \mathcal{H} G_{k\ell}(t-t') + \sum_f J_{k-f} [2S G_{k\ell}(t-t') -$$

$$- 2S G_{f\ell}(t-t') + G_{fff\ell}(t-t') + G_{fk k\ell}(t-t') - 2G_{ffk\ell}(t-t')]\} , \qquad /2/$$

ahol

$$G_{fgk\ell}(t-t') = \ll b_f^+(t) c_g(t) c_k(t) | b_\ell^+(t') \gg .$$

A $G_{fgk\ell}(t-t')$ Green-függvényeket - felhasználva, hogy alacsony hőmérsékleten jó közelitést jelent a spinhullámokat függetleneknek, a b_k^+ , c_ℓ operátorokat, tehát Bose-operátoroknak tekinteni - a Wick-teoréma alapján vezethetjük vissza a $G_{k\ell}(t-t')$ Green-függvényekre:

$$G_{fff\ell}(t-t') = 2\langle n_o \rangle G_{f\ell}(t-t')$$

$$G_{fk k\ell}(t-t') = 2\langle b_f^+ c_o \rangle G_{k\ell}(t-t')$$

$$G_{ffk\ell}(t-t') = \langle n_o \rangle G_{k\ell}(t-t') + \langle b_f^+ b_o \rangle G_{f\ell}(t-t') .$$

Ezeket figyelembe véve /2/-ből azt kapjuk tehát, hogy

$$\frac{d}{dt} G_{k\ell}(t-t') = \delta_{k\ell} \delta(t-t') - i\left\{\mu g \mathcal{H} G_{k\ell}(t-t') + 2S \sum_f J_{k-f} \left[1 - \frac{\langle n_o \rangle + \langle b_f^+ c_o \rangle}{2S}\right] \left[G_{k\ell}(t-t') - G_{f\ell}(t-t')\right]\right.$$

Ezt az egyenletet már könnyen megoldhatjuk. Elvégezve a

$$G_{k\ell}(t-t') = N^{-1} \sum_\varkappa G_\varkappa(t-t') e^{i(\ell-k)r}$$

$$G_\varkappa(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} G_\varkappa(E) e^{-iE(t-t')} dE$$

transzformációkat - a következő eredményhez jutunk:

$$G_{\varkappa}(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - E_{\varkappa}} ,$$

ahol

$$E_{\varkappa} = \mu g \mathcal{H} + 2S \sum_f \mathcal{J}_f \left[1 - \frac{\langle n_0 \rangle + \langle b_f^+ c_0 \rangle}{2S} \right] (1 - e^{if\varkappa}) .$$

Használjuk most fel, hogy a $\langle b_f^+ c_0 \rangle$ korrelációs függvény

$$\langle b_f^+ c_0 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{J}_f(E) dE$$

előállitásában szereplő $\mathcal{J}_f(E)$ spektrálintenzitás a spektrálteoréma alapján a következő összefüggéssel adódik:

$$\mathcal{J}_f(E) = \frac{G_{f0}(E - i\varepsilon) - G_{f0}(E - i\varepsilon)}{e^{\beta E} - 1} , \quad \varepsilon \longrightarrow 0 .$$

Ezzel

$$\mathcal{J}_f(E) = N^{-1} \sum_{\varkappa} \frac{e^{-if\varkappa}}{e^{\beta E_{\varkappa}} - 1} \delta(E - E_{\varkappa}) ,$$

tehát

$$\langle b_f^+ c_0 \rangle = N^{-1} \sum_{\varkappa} \frac{e^{-if\varkappa}}{e^{\beta E_{\varkappa}} - 1} .$$

A $\sigma(T, \mathcal{H})$ mágnesezettséget $\mathcal{H}=0$ mellett számoljuk ki numerikusan / amikor a $\sigma_0(t)$ spontán mágnesezettséggel azonos./ Egyszerü számolással adódik, hogy

$$\sigma(T) = 1 - \frac{1}{S} \left\{ \left(\frac{kT}{8\pi \mathcal{J} S} \right)^{3/2} \xi\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{3\pi}{4} \left(\frac{kT}{8\pi \mathcal{J} S} \right)^{5/2} \xi\left(\frac{5}{2}\right) - \right.$$

$$\left. - \frac{33\pi^2}{32} \left(\frac{kT}{8\pi \mathcal{J} S} \right)^{7/2} \xi\left(\frac{7}{2}\right) - \frac{3\pi}{2S} \left(\frac{kT}{8\pi \mathcal{J} S} \right)^{4} \xi\left(\frac{3}{2}\right) \xi\left(\frac{5}{2}\right) \right\} .$$

Eredeményünk azt mutatja, hogy a statisztikai Green-függvény módszer a spinhullámok kölcsönhatásának Dyson-elméletében is ugyan ahhoz az eredményhez vezet, mint a Holstein-Primakoff-Oguchi elméletben: a kölcsönhatást leiró T^4-es tagban $c=0$ áll.

I r o d a l o m

[1] Bloch,F., Zs.F. Phys. 53. 216 /1929/

[2] Dyson,F.J., Phys. Rev. 102, 1217, 1230 /1956/

[3] Holstein,T. és Primakoff,H., Phys. Rev. 58, 1908 /1940/

[4] Oguchi,S., Phys. Rev. 117, 117 /1959/

[5] Praveczki E., Физ. Мет. и Металлов I2.2.296. /I06I/

[6] Изюмов Э.Д.: Доклады Академии Наук, 6,I25, I227 /I059/

[7] Яковлев Е.Н.: Физ. Твёрдого Тела. IУ. I. I79 /I962/

Érkezett 1962. okt. 23.

KFKI Közl. 10. évf. 6.szám, 1962.

A HEISENBERG-MODELL MÁGNESEZETTSÉGÉNEK MEGHATÁROZÁSA A GREEN-FÜGGVÉNY MÓDSZER ALAPJÁN $S > \frac{1}{2}$ ESETÉN.[x]

Irta: Praveczki Endre

Összefoglalás

Megmutatjuk, hogy a Pauli-operátorokkal analóg operátorok bevezetésével $S > \frac{1}{2}$ esetén is elérhetők hasonló eredmények, mint amilyent $S = \frac{1}{2}$ esetén kapott Bogoljubov és Tyablikov.

1. A ferromágnesség elméletének egyik legfontosabb feladata meghatározni a mágnesezettséget a ferromágneses anyagok Heisenberg- modellje alapján. E feladatot a fellépő matematikai nehézségek miatt eddig nem sikerült pontosan megoldani. Ismerünk azonban több olyan eredményt, amely a feladat közelitő megoldását jelenti. A mágnesezettséget közelitőleg meghatározó képletek általában vagy az alacsony hőmérsékleteken, a spinhullám-tartományban /Bloch [1] , Dyson [2] , Oguchi [3] , stb./ vagy magas hőmérsékleteken, a Curie-pont környékén /Osanger [4] , Opechowski [5]/ jelentenek jó közelitést.

Bogoljubovnak és Tyablikovnak [6] a statisztikai /hőmérséklet-függő/ Green-függvények segitségével elért eredménye azonban azon kevés számu munkák közé tartozik, amelyek mind az alacsony, mind a magas hőmérsékletek tartományában jó közelitő eredményt adnak. De Bogoljubov és Tyablikov csak arra az esetre alkalmazták a Green-függvény módszert, amelyben minden rácspontban egyetlen kompenzálatlan elektron spint tartalmaz a ferromágneses anyag. Ismeretes viszont, hogy a leggyakrabban előforduló ferromágneses anyagoknál /vas, kobalt, nikkel/ egynél több kompenzálatlan spinnel kell számolnunk rácspontonként. Felmerül tehát az a kivánság, hogy Bogoljubov és Tyablikov módszerét azokra az esetekre is alkalmazzuk, amelyekben kettő, három stb. spin tartózkodik egy-egy rácspontban / $S = 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \cdots$, ahol S a maximális spinkvantum $\hbar$ egységekben/.

Bogoljubov és Tyablikov eljárása nem alkalmazható minden további meggondolás nélkül az $S > \frac{1}{2}$ esetekre, mivel az általuk használt b_k^+ , b_ℓ Pauli-operátorok - melyeket az alábbi relációkkal definiálhatunk:

$$b_\ell b_k^+ - b_k^+ b_\ell = \sigma_k \delta_{k\ell} , \qquad \sigma_k = 1 - 2n_k , \qquad n_k = b_k^+ b_k ,$$

[x] A dolgozat megirása után értesültünk arról, hogy más formalizmussal ugyanehhez az eredményhez jutott R.A. Tahir-Kheli and D. ter Haar, Phys.Rev. 127, 1. 95. /1962/

- $S>\frac{1}{2}$ esetén nem használhatók.

Annak érdekében, hogy a problémát $S>\frac{1}{2}$ esetén is megoldhassuk, alkalmazzuk azokat az előző munkánkban bevezetett operátorokhoz hasonló, a Pauli-operátorokkal analóg b_k^+, c_k, n_k operátorokat, amelyeket az alábbi relációk határoznak meg:

$$c_k b_\ell^+ - b_\ell^+ c_k = P_k \delta_{k\ell}$$

$$P_k = 1 - \frac{2S+1}{(2S)!} \prod_{\nu=0}^{2S-1} (n_k - \nu) \qquad /1/$$

$$n_k = b_k^+ c_k \,, \quad (b_k^+)^{2S+1} = (c_k)^{2S+1} = 0 \,.$$

2. Abból a célból, hogy a Green-függvény módszert alkalmazhassuk, írjuk fel az $S_k^+ = S_k^x + iS_k^y$, $S_k^- = S_k^x - iS_k^y$, S_k^z spin operátorokat, majd a Heinsenberg-modell

$$H = -\mu g \mathcal{H} \sum_k S_k^z - \sum_{k\ell} \mathfrak{I}_{k-\ell} [\vec{S}_k \vec{S}_\ell] \qquad /2/$$

Hamilton-operátorát az /1/ -ben definiált b_k^+, c_k, n_k operátorokkal. Az S_k^+, S_k^-, S_k^z operátorokra vonatkozó ismert

$$S_k^+ S_\ell^z - S_\ell^z S_k^+ = - S_k^+ \delta_{k\ell}$$

$$S_k^- S_\ell^z - S_\ell^z S_k^- = S_k^- \delta_{k\ell}$$

$$S_k^+ S_\ell^- - S_\ell^- S_k^+ = 2 S_k^z \delta_{k\ell}$$

relációk alapján könnyen beláthatjuk, hogy

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, b_k^+ \left(1 - \frac{n_k}{2S}\right),$$

$$S_k^- = \sqrt{2S}\, c_k \,,$$

$$S_k^z = S - n_k \,,$$

valamint /2/ alapján

$$H = E_0 + \mu g \mathcal{H} \sum_k n_k + \sum_{k\ell} \mathfrak{I}_{k-\ell} [2S(n_k - b_k^+ c_\ell) + b_k^+ n_k c_\ell - n_k n_\ell] \,. \qquad /3/$$

Ezekből kitünik, hogy a

$$\sigma = \langle S_k^z \rangle / S$$

mágnesezettség meghatározásához elég az $\langle n_k \rangle = \langle b_k^+ c_k \rangle$ átlagértéket kiszámitanunk. Definiáljuk ebből a célból a következő Green-függvényt:

$$G_{k\ell}^{(1)}(t-t') = \ll c_k(t) \mid b_\ell^+(t') \gg .$$

Erre a Hamilton-operátor /3/ alakjával, és a

$$\frac{d}{dt} A(t) = i[H, A(t)]$$

képlet felhasználásával az alábbi differenciál-egyenletet kapjuk:

$$\frac{d}{dt} G_{k\ell}^{(1)}(t-t') = P^{(1)}\delta_{k\ell}\delta(t-t') - i\Big\{\mu g \mathcal{H} G_{k\ell}^{(1)}(t-t') + \sum_f \mathcal{J}_{k-f}[2SG_{k\ell}^{(1)}(t-t') -$$

$$- 2SG_{f\ell}^{(1)}(t-t') - G_{fk\ell}(t-t') + G_{kf\ell}(t-t')]\Big\} , \qquad /4/$$

ahol

$$P^{(1)} = \langle P_k \rangle ,$$

és fellépett a következő magasabbrendü Green-függvény:

$$G_{fk\ell}(t-t') = \ll n_f(t) c_k(t) \mid b_\ell^+(t') \gg .$$

E magasabb rendü Green-függvénytől megszabadulhatunk, ha ugyanugy, mint Bogoljubov és Tyablikov, elvégezzük a következő " levágást " / a magasabb rendünek alacsonyabb rendüvel való közelitését /:

$$G_{fk\ell}(t-t') = nG_{k\ell}(t-t') ,$$

ahol $n = \langle n_f \rangle$. Ezzel a /4/ -ből azt kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt} G_{k\ell}^{(1)}(t-t') = P^{(1)}\delta_{k\ell}\delta(t-t') - i\Big\{\mu g \mathcal{H} G_{k\ell}(t-t') +$$

$$+ 2S\sigma \sum_f \mathcal{J}_{k-f}[G_{k\ell}^{(1)}(t-t') - G_{f\ell}^{(1)}(t-t')]\Big\} \qquad /5/$$

Ismeretlen mennyiséget jelent azonban még mindig a $P^{(1)}$ kifejezés. Ennek egyszerübb meghatározása céljából szoritkozzunk a következőkben az $S = 1$ esetre /amikor minden egyes rácspontban két kompenzálatlan spin tartózkodik/. Ekkor - mint azt az /1/ relációk alapján beláthatjuk -

$$P^{(1)} = 1 + \frac{3}{2}\langle n_k\rangle + \frac{3}{2}\langle n_k^2\rangle \ ,$$

tehát $P^{(1)}$ helyett elég $\langle n_k^2\rangle$ -et meghatároznunk. Ezt ujabb Green-függvény bevezetésével tehetjük meg. Legyen

$$G_{k\ell}^{(2)}(t-t') = \ll c_k(t) \mid n_\ell(t') b_\ell^+(t') \gg \ .$$

Erre - alkalmazva az előbbi "levágást" - a következő differenciálegyenletet nyerjük:

$$\frac{d}{dt} G_{k\ell}^{(2)}(t-t') = P^{(2)}\delta_{k\ell}\,\delta(t-t') - i\left\{\mu g \mathcal{H} G_{k\ell}^{(2)}(t-t') + \right.$$

$$\left. + 2S\sigma \sum_f \mathfrak{I}_{f-k}\left[G_{k\ell}^{(2)}(t-t') - G_{f\ell}^{(2)}(t-t')\right]\right\} . \qquad /6/$$

Az itt szereplő $P^{(2)} = \langle [c_k, n_k b_k^+]\rangle$ -vel már valóban nem jutottunk ujabb nehézséghez, hiszen - hasonló eljárással, mint az előbb - adódik, hogy

$$P^{(2)} = 1 + \frac{13}{2}\langle n_k\rangle - \frac{9}{2}\langle n_k^2\rangle \ ,$$

Tehát ez is csak az $\langle n_k\rangle$, $\langle n_k^2\rangle$ mennyiségeket tartalmazza.

Oldjuk meg e zárt egyenlet-rendszert alkotó /5/ , /6/ egyenleteket. Elvégezve a

$$G_{k\ell}^{(\nu)}(t-t') = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{k\ell}^{(\nu)}(E)\, e^{-iE(t-t')}\, dE \ ,$$

$$G_{k\ell}^{(\nu)}(E) = N^{-1}\sum_{\varkappa} G_{\varkappa}^{(\nu)}(E)$$

$$\nu = 1, 2$$

transzformációkat - azt kapjuk, hogy

$$G_{\varkappa}^{(\nu)}(E) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{P^{(\nu)}}{E - E_{\varkappa}} \ ,$$

ahol

$$E_{\varkappa} = \mu g \mathcal{H} + 2S\sigma \sum_f \mathfrak{I}_f (1 - e^{if\varkappa}) \ .$$

E Green- függvényekkel a

$$\mathfrak{I}_{k\ell}^{(\nu)}(E) = \frac{G_{k\ell}^{(\nu)}(E - i\varepsilon) - G_{k\ell}^{(\nu)}(E + i\varepsilon)}{e^{\beta E} - 1}$$

spektrálteoréma alapján meghatározhatjuk az $\mathfrak{I}^{(\nu)}_{k\ell}(E)$ spektrálintenzitásokat, ezek alapján pedig az ismeretlen mennyiségeket:

$$\langle n_k^\nu \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{I}^{(\nu)}_{kk}(E)\,dE \quad ,$$

melyekkel

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{3}{2}w\right)\langle n_k\rangle + \frac{3}{2}w\langle n_k^2\rangle &= w \quad , \\ -\frac{13}{2}w\langle n_k\rangle + \left(1 + \frac{9}{2}w\right)\langle n_k^2\rangle &= w \quad , \end{aligned} \qquad /7/$$

ahol

$$w = N^{-1}\sum_k \frac{1}{e^{\beta E_\varkappa} - 1}$$

/7/ -et könnyen megoldhatjuk. A keresett mennyiség:

$$\langle n_k\rangle = \frac{w + 3w^2}{1 + 3w + 3w^2}$$

Végül is tehát

$$\sigma = \frac{1 + 2w}{1 + 3w + 3w^2} \qquad /8/$$

3. A mágnesezettségre kapott /8/ kifejezést vizsgáljuk meg a különböző hőmérsékleti intervallumokban, azonban az egyszerüség kedvéért zérus mágneses tér mellett: $\mathcal{H} = 0$.

a/Alacsony hőmérsékleten, $T \approx 0$ esetén $w \approx 0$, tehát sorbafejtve

$$\sigma = 1 - w + 3w^3 + \dots \quad ,$$

amiből az $E_\varkappa = \alpha_0 \varkappa^2$ közelitéssel azt kapjuk, hogy

$$\sigma = 1 - \left(\frac{kT}{8\pi\mathfrak{I}\sigma}\right)^{3/2} \xi\left(\frac{3}{2}\right) - \frac{3\pi}{4}\left(\frac{kT}{8\pi\mathfrak{I}\sigma}\right)^{5/2} \xi\left(\frac{5}{2}\right) \dots .$$

ahol α_0 numerikus állandó. Ez az egyenlet szukcessziv approximációval oldható meg. Az eredmény:

$$\sigma = 1 - \left(\frac{kT}{8\pi\mathfrak{I}}\right)^{3/2} \xi\left(\frac{3}{2}\right) \dots .$$

b/Magas hőmérséklet, $T \approx T_c$ esetén célszerü /8/ -at a következő alakra hozni:

$$2-3\sigma+\sqrt{4-3\sigma^2} = N^{-1}\sum_{x}\frac{\sigma}{e^{\beta\sigma\varepsilon_x}-1} ,$$

ahol $\varepsilon_x = \sum_f (1-e^{if x})$. Mindkét oldalt sorbafejtve σ szerint

$$\frac{2}{3} - \frac{1}{8}\sigma^2 + \cdots = \frac{J_1}{\beta} + \frac{J_2\beta}{12}\sigma^2 + \cdots ,$$

ahol

$$J_1 = N^{-1}\sum_x \frac{1}{\varepsilon_x} , \qquad J_2 = N^{-1}\sum_x \varepsilon_x .$$

σ^2-ig bezárólag az adódik tehát, hogy

$$\sigma = \alpha\sqrt{1-\frac{T}{T_c}} , \qquad \alpha = \text{const.} ,$$

ahol $T_c = \frac{2}{3kJ_1}$.

Láthatjuk, hogy az $S=1$ esetre vonatkozó /8/ formula hasonló eredményt ad, mint $S=\frac{1}{2}$ esetén a Bogoljubov-Tyablikov-formula. A fentihez hasonló eljárást vezetne célhoz az $S=\frac{3}{2}, 2$, stb esetekben is, ezekkel az esetekkel azonban itt nem foglalkozunk.

I r o d a l o m

[1] Bloch,F., Zs.f.Phys., 53, 216 /1929/
[2] Dyson,F.I., Phys.Rev. 102, 1227, 1230 /1956/
[3] Oguchi,S., Phys.Rev. 117, 117 /1959/
[4] Osanger , lsd.Vonszovszkij.Sur,: Ferromagnetizm
[5] Opechowski , Physica IV. 191 /1937/
[6] Боголюбов,Н.М. и Тябликов,С.В.:Докл.Академии Наук СССР. 126, 53 /1959/

Érkezett 1962. okt. 23.

KFKI Közl. 10. évf. 6.szám, 1962.

Fe_3Al RENDEZŐDÉS-KINETIKÁJÁNAK VIZSGÁLATA MÁGNESES MÉRÉSSEL

Irta: Tarnóczi Tivadar

Összefoglalás

Az Fe_3Al összetételü vas-aluminium ötvözet rendeződése során diszperz szerkezet alakul ki para- és ferromágneses fázisokból. E szerkezet kialakulása következtében fellépő belső lemágnesező tér időfüggését vizsgáltuk a mágneses intenzitás mérése utján.

Bevezetés

A vas-aluminium ötvözetek a 25 atomszázalék aluminium tartalom környékén anomális fizikai tulajdonságokat mutatnak. Az anomáliákat nagyrészt az atomi rendeződés következményének tekinthetjük. Korábbi munkáinkban [1] , [2] ismertettünk egy-két fontosabb eredményt, amelyeket a vas-aluminiumra vonatkozó néhány éves kutatásaink során kaptunk.

Jelen dolgozat célja az, hogy bővebben beszámoljunk egyik részeredményünkről, amelyet az eddigi átfogó jellegü cikkekben csak futólag emlitettünk meg. A jelenség az Fe_3Al rendeződésének időbeli lefolyásával kapcsolatos.

Általános meggondolások

A rendeződés időbeli lefolyását a vas-aluminium ötvözeteken már mások is tanulmányozták [3] , [4] , [5] elsősorban elektromos ellenállás mérése utján, azonban célszerü ezeket a vizsgálatokat kiterjeszteni más fizikai paraméterek mérésére is, mivel a folyamat mechanizmusa mind a mai napig nincs tisztázva. Mivel az Fe_3Al ferromágneses tulajdonságu, kézenfekvő, hogy valamilyen mágneses paraméter mérése értékes adatokat szolgáltathat a kérdés tisztázásához.

Eltekintve Ivanovszkij [6] munkájától nem találkozunk más müvel az irodalomban, amely mágneses, paraméterek mérése utján komolyan foglalkozna ezen ötvözet rendeződésének kinetikájával. Ezért tartjuk fontosnak és hasznosnak e vizsgálat véghezvitelét.

Mint már idézett dolgozatainkban rámutattunk elméleti meggondolások arra a következtetésre vezetnek, hogy az atomi rendeződés befolyásolhatja a mágneses Curie-hőmérsékletet. Valóban Sykes és Evans azt találták [3] , hogy az Fe_3Al összetételü ötvözetnek rendezetlen állapotban magasabb hőmérsékleten van a Curie-pontja mint rendezett állapotban. A rendeződés kritikus hőmérséklete viszont a két Curie-pont között van.

Eszerint, ha a rendezetlen ötvözetet lassan /egyensulyi állapotokon keresztül/ hütjük, akkor egy $T_1 = \Theta_d$ hőmérsékleten ferromágnesessé válik, majd egy $T_2 = T_c$ hőmérsékleten paramágneses, és végül egy $T_3 = \Theta_0$ hőmérsékleten ismét ferromágneses lesz. Itt Θ_d -vel a rendezetlen /disorder/ állapot Curie-pontját T_c -vel a rendeződés kritikus hőmérsékletét és Θ_0 -val a rendezett /order/ állapot Curie-pontját jelöltük. A valóságban azonban nem ilyen egyszerü a helyzet. Mint Sucksmith [7] mérései kimutatták a telitési mágneses intenzitás (J_s) nem válik zérussá a (Θ_0, T_c) hőmérsékleti intervallumban, csupán egy plató jelenik meg az $J_s(T)$ görbén. Sykes és Evans azért vonták le téves következtetésüket, mert tulságosan gyenge mágneses teret alkalmaztak méréseiknél.

Felmerül a kérdés, hogy gyenge mágneses tér alkalmazása esetén miért csökken le a mágneses intenzitás a (Θ_0, T_c) intervallumban oly nagy mértékben, hogy a mérési eredmények alapján ezt az állapotot össze lehet téveszteni a paramágneses állapottal. Ezzel a problémával kapcsolatban több szerző különböző véleményt képvisel. Mint ismeretes Sykes és Evans azt tartották, hogy az Fe_3Al tipusu rendeződés hatására tiszta paramágneses állapot jön létre a kérdéses intervallumban. Ugyancsak tiszta paramágneses állapot létrejöttét feltételezik Taylor és Jones [8] , azonban ők az FeAl tipusu rend kialakulásával magyarázzák a jelenséget, mert szerintük az FeAl tipusu rendezett fázis legalább is ezen a hőmérsékleten /~ 500 C°/ nem mágneses. Taylor és Jones magyarázatával szemben felhozható Szelisszkij [9] mérési eredménye, aki kimutatta, hogy a 25 atomszázalék aluminium tartalmu vas-aluminium ötvözet esetén az FeAl tipusu rendezett fázis mágneses Curie-pontja valamivel 600 C° fölött van. Szelisszkij más magyarázatot kiván adni az Fe_3Al anomális mágneses tulajdonságaira. Elveti azt a nézetet, hogy a (Θ_0, T_c) intervallumban paramágneses állapot jön létre, mivel erős mágneses terekben a mágneses intenzitás nem csökken lényegesen. Elképzelése szerint a Sykes és Evans által tapasztalt jelenség az un. Hoppkinson-effektussal rokon, amely abból áll, hogy a lágy mágneses anyagok kezdő permeabilitása a Curie-pont környékén maximumot mutat. Ez az elképzelés nem ad kielégitő magyarázatot arra, hogy miért csökken a mágneses intenzitás olyan nagy mértékben a (Θ_0, T_c) intervallumban. E nagy mértékü csökkenést fentemlitett dolgozatainkban nagy belső lemágnesező tér fellépésével magyaráztuk. Feltettük ugyanis, hogy a rendeződés kezdeti stádiumában, vagyis közvetlenül a T_c alatti hőmérsékleteken a rendezett és rendezetlen fázis finom diszperz eloszlásban van jelen. E feltevés annál is inkább indokolt, mivel közvetlenül a rendeződés kritikus hőmérséklete alatt az antifázisu tartományok viszonylag kis méretüek lehetnek és igy a közöttük kialakuló falak mintegy a rendezetlen fázist képviselik. Elképzelésünk szerint a rendezetlen fázis mágneses Curie-hőmérséklete magasabb, mig a rendezett fázis mágneses Curie-hőmérséklete alacsonyabb mint a rendeződés kritikus hőmérséklete; vagyis $\Theta_0 < T_c < \Theta_d$,

ugyanugy, mint ahogy azt Sykes és Evans találták. A különbséget a két felfogás között csak az általunk feltételezett diszperz eloszlásu kétfázisu rendszer képezi. A ferromágneses rendezetlen és a paramágneses rendezett fázisok diszperz eloszlásu rendszere nagy belső lemágnesező teret hoz létre és igy érthetővé válik a gyenge terekben mért mágneses intenzitás erős csökkenése a (Θ_0,T_c) hőmérsékleti intervallumban.

A kinetika vizsgálata

A belső lemágnesező tér időbeli kialakulását a következő módon tanulmányozhatjuk.

A próbatestet $T_1 > T_c$ hőmérsékleten tartjuk annyi ideig, hogy az egyensulyi állapot beálljon, azután a lehető legnagyobb sebességgel, kb. 90 C°/perc lehütjük egy T_2 hőmérsékletre, ahol $\Theta_0 < T_2 < T_c$. A T_2 hőmérséklet elérése után állandó hőmérséklet és állandó külső mágneses tér mellett mérjük a próbatest mágn ses intenzitását. Az alkalmazandó külső mágneses tér erősségét ugy kell megválasztani, hogy a belső lemágnesező tér értékével azonos nagyságrendben legyen. Tulságosan nagy tér alkalmazása "elfedi" az effektust, tulságosan gyenge tér esetén viszont a belső lemágnesező tér kialakulásának már kezdeti stádiumában is annyira lecsökken az effektiv ható tér, hogy a mérés megkezdése után már csak lényegtelen változást tapasztalunk. A mágneses intenzitás a következő tényezők miatt változik meg.

1/ Az eredetileg homogén ferromágneses ötvözetben Fe_3Al tipusu rendezett fázis válik ki, amely az adott hőmérsékleten nem ferromágneses. Ez a kivált fázis térfogatarányában csökkenti a próbatest mágneses intenzitását.

2/ A nem ferromágneses tartományok mágnesesen elszigetelik egymástól a ferromágneses tartományokat és igy erős belső lemágnesező teret hoznak létre, amely csökkenti a külső tér hatását, igy a ferromágneses tartományok mintegy kisebb térbe kerülnek, tehát minden tartománynak külön-külön is csökken a mágneses intenzitása.

3/ Minthogy a méréseket véges próbatesteken végeztük, figyelembe kell venni a próbatest alakjától függő külső lemágnesező teret is. Forgási ellipszoid alaku próbatestet alkalmaztunk, hogy a lemágnesező tényező pontosan számolható legyen az alábbi összefüggés szerint /pl. [10] /:

$$N = 2\pi ab^2 \int_0^\infty \frac{ds}{(s+a^2)^{3/2}(s+b^2)}$$

ahol N = a lemágnesező tényező
a = a fél nagytengely /forgástengely/
b a fél kistengely.

Igy a külső lemágnesező tér $H_k = -N\bar{J}$, ahol $\bar{J}$ a próbatest átlagos mágneses intenzitása.

Jelöljük a ferromágneses tartományok szuszceptibilitását χ -vel, mágneses intenzitását J -vel, térfogati hányadát q -val / $q \leq 1$ / valamint a külső teret H -val.

Az effektiv tér egy ferromágneses tartományon belül

$$H_{eff} = H + H_k + H_b \qquad /1/$$

Ha feltesszük, hogy a belső lemágnesező tér arányos a ferromágneses tartományok mágneses intenzitásával, vagyis $H_b = -cJ$, akkor mivel $\bar{J} = qJ$,/1/ a következő alakban irható fel:

$$H_{eff} = H - (Nq + c)J \qquad /2/$$

Felhasználva az $J = H_{eff} \cdot \chi(H_{eff})$ összefüggést, azt kapjuk, hogy

$$H_{eff} = H - (Nq + c) H_{eff} \cdot \chi(H_{eff}) \qquad /3/$$

Innen a

$$H_{eff} = \frac{H}{1 + [Nq + c]\chi(H_{eff})} \qquad /4/$$

összefüggésre jutunk. Az általunk használt próbatestekre az $N = 0{,}0848$, a q értéke 1 és 0 között változhat. A c az un. belső lemágnesező tényező értéke a rendeződés alatt időben szintén változik, viszont az egyensulyi érték megközelitése után elképzelésünk szerint aránylag nagy érték. A c egyensulyi értékének becslése céljából tegyük fel, hogy az egyes ferromágneses szemcsék elszigeteltsége egymástól olyan nagy mértékü, hogy a közöttük müködő mágneses kölcsönhatás elhanyagolható. Az egyszerüség kedvéért tegyük még fel, hogy az egyes ferromágneses tartományok gömb alakuak. Ekkor a c az egyedi gömb lemágnesező tényezője, tehát $c = 4\pi/3$. Látható, hogy e durva becslés szerint a /4/-ben Nq elhanyagolható c mellett, tehát

$$H_{eff} \approx \frac{H}{1 + c\chi(H_{eff})} \qquad /5/$$

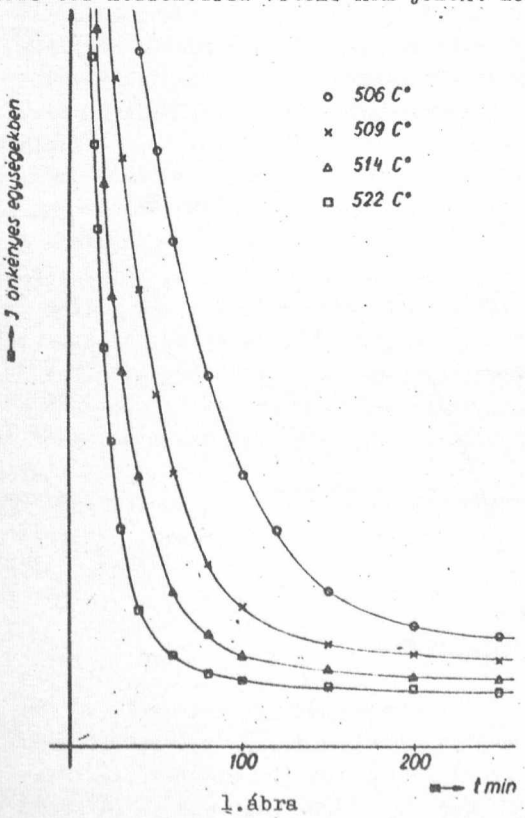
Ha most meggondoljuk, hogy a (Θ_0, T_c) intervallum közel van a rendezetlen tartományok Curie-pontjához, hiszen a $\Theta_d - \Theta_0 < 100\ C^0$, akkor világos, hogy a rendezetlen tartományok mint ferromágneses szemcsék aránylag nagy szuszceptibilitással rendelkeznek viszonylag kis térerősségek esetén. Ez azt jelenti, hogy az effektiv térerősség, amely a ferromágneses tartományokra hat, sokkal kisebb, mint a külső tér. Ilyen módon a mért mágneses intenzitás $\bar{J} = qJ = qH_{eff} \cdot \chi(H_{eff})$ lényegesen kisebb lesz mintha a külső tér változatlanul hatna. Természetesen ahhoz, hogy $\bar{J}$ érték lényegesen csökkenjen, fel kell

tennünk, hogy a H_{eff} csökkenése nem hozza létre a $\chi(H_{eff})$ függvény erős növekedését, tehát az effektiv térnek már a folyamat kezdetén is kisebbnek kell lenni, mint a maximális szuszceptibilitásnak megfelelő térerősség.

Itt meg kell még jegyeznünk, hogy a próbatest végessége nem jelent semmi elvi nehézséget, mert a külső lemágnesező tér korrekcióba vehető, ha az $\bar{J}$ helyett a $\bar{\chi}$ -t mérjük, ahol

$$\bar{\chi} = \frac{\bar{J}}{H+H_k} = \frac{\bar{J}}{H-N\bar{J}}$$

Mérési eredményeink értékelése folyamán azt találtuk, hogy a külső lemágnesező tér korrekcióba vétele nem jelent lényeges változást.



1.ábra

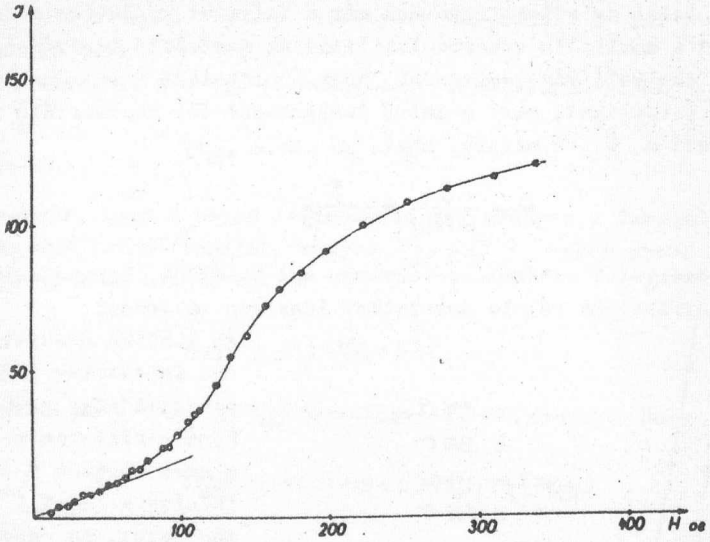
A mágneses intenzitás időbeli csökkenése 506 C°, 509 C°, 514 C°, 522 C°. Az alkalmazott külső mágneses tér 56 Oe.

Az 1.ábrán bemutatjuk a mágneses intenzitás időbeli csökkenését. A négy görbét különböző hőmérsékleteken vettük fel minden esetben T_1 = 700 C°-ról indulva a (Θ_0, T_c) intervallumon belül. Az egyes hőmérsékletek, 506, 509, 514 és 522 C° voltak. A méréskor alkalmazott külső mágneses tér itt minden esetben 56 Oe. volt.

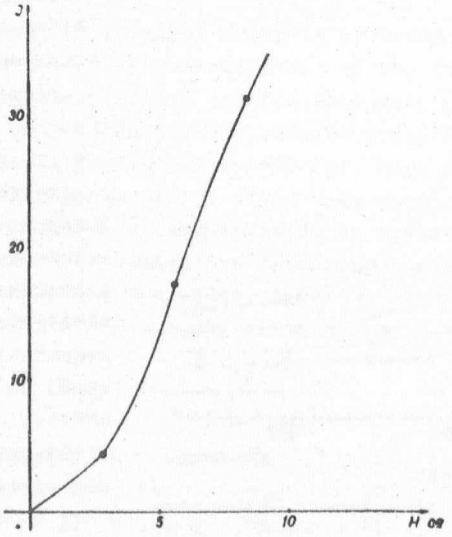
Sajnos a H_{eff} -en kivül még a q mennyiség is az idő függvénye és a H_{eff} -en keresztül χ is függ az időtől, igy nem követhető tisztán a belső lemágnesező tér kialakulásának a hatása.

A görbék kvantitativ értelmezését még az a körülmény is megnehezíti, hogy mint Ivanovszkij [6] rámutatott az Fe_3Al ötvözet mágneses szuperviszkozitás jelenséget mutat és ennek az effektusnak a mértéke függ a rendezettségi állapottól. Kvalitative annyi mindenesetre megállapitható, hogy magasabb hőmérsékleten gyorsabb a lemágnesező tér kialakulása. A magasabb hőmérsékletek felé az egyensulyi $\bar{J}$ átlag érték csökken, ami valószinüleg azzal magyarázható, hogy a Curie-ponthoz közeledve rohamosan csökken a mágneses in-

tenzitás. A 2.ábrán bemutatjuk a mágnesezési görbéket a rendeződés előrehaladott /a/ és kezdeti /b/ szakaszában 506 C^{o}-on. Mivel a kezdeti szakaszon



a/



b/

2.ábra
Mágnesezési görbék 506 C^{o}-on
a/ A rendeződés előrehaladott állapotában
b/ A rendeződés kezdeti szakaszában

a változás nagyon gyors volt a szokástól eltérően nem a kommutációs görbét vettük fel, hanem különböző mágneses tér mellett azonos, aránylag gyors hűtési sebességgel /7,5 C^{o}/perc/ hűtöttük a próbatestet és közben ballisztikus galvanométerrel mértük a mágneses intenzitást. A megfelelő hőmérsékleten mért értékeket ábrázoltuk a térerősség függvényében. Bár a b/ görbén a mérési pontok száma igen kevés, az ábráról mégis leolvasható, hogy míg a rendeződés kezdeti szakaszán 5 Oe. alatt van a kezdő permeabilitás tartománya, addig az egyensúlyi állapotban ez kb. 44 Oe-ig terjed. Itt a térerősségek a külső teret jelentik.

Egy korábbi dolgozatunkban [2] kísérletileg kimutattuk, hogy az általunk vizsgált 25 atomszázalék alumínium tartalmú vas-alumínium ötvözetnél szoba hőmérsékleten elhanyagolhatóan kicsiny a kezdő permeabilitás tartománya, valamint rámutattunk arra is, hogy nincs okunk feltételezni a kezdő permeabilitás tartományának lényeges megnövekedését magasabb hőmérsékleten.

Így tehát azt a következtetést vonhatjuk le, hogy a kezdő permeabilitás tartományának látszólagos megnövekedése a belső lemágnesező tér kialakulása miatt van. A belső lemágnesező tér jóval kisebb a rendeződés kezdeti szakaszán, mint amikor az adott hőmérsékleten a rendeződés előrehaladott állapotban van. Ez a kísérleti eredmény is alátámasztja azt az elképzelést, hogy a kialakuló paramágneses rendezett tartományok mágnesesen elszigetelik egymástól a ferromágneses rendezetlen tartományokat; tehát a folyamat kezdetén, amikor még nem olyan tökéletes ez az elszigetelés, sokkal kisebb a lemágnesező tér, mint az egyensúly elérése után.

A 2.ábrán bemutatott mérési eredményekből arra következtethetünk, hogy a mágneses intenzitás csökkenésében, amelyet az 1.ábra szemléltet, egyéb tényezők mellett a belső lemágnesező tér kialakulása döntő szerepet játszik.

Megköszönöm Pál Lénárd igazgató-helyettes elvtársnak, a Magyar Tudományos Akadémia levelező tagjának a téma felvetését és értékes útmutatásait.

I r o d a l o m

[1] Pál L., Tarnóczi T., KFKI Közl. 7.évf. 5. /1959/
[2] Pál L., Tarnóczi T., Phys.Chem. Solids /sajtó alatt/
[3] Sykes,C., Evans,H., J.Iron Steel Inst. 131, 225 /1935/
[4] Роде, В.Е., Изв. А.Н. СССР орг. физ. 21, 1234 /1957/
[5] Feder R. and Cahn,R.W., Phil.Mag. 5, 343 /1960/
[6] Ивановский, В.И., Физ. металлов и металловидение 4,70 /1957/
[7] Sucksmith,W., Proc.Roy.Soc A171, 525 /1939/
[8] Taylor,A. Jones R.M., Phys.Chem.Solids 6, 16 /1958/
[9] Селиский,Ю.П., Журнал неорган.химии 5 2435 /1960/
[10] Stratton,J.A., Electromagnetic Theory 257. old. McGraw-Hill Book Company Inc. 1941.

Érkezett 1962. január 12.

MÉRÉSI MÓDSZER FÉMEK ÉS FÉMES ÖTVÖZETEK DIFFERENCIÁLIS TERMOFESZÜLTSÉGÉNEK MEGHATÁROZÁSÁRA

Irta: Tóth József

Összefoglalás

Módszert ismertetünk fém, illetve fémes ötvözet-huzalok és fóliák differenciális termofeszültségének különböző hőmérsékleten történő pontos mérésére. A módszert Cu_3Au ötvözet rend-rendezetlenség átmenetének vizsgálatára alkalmaztuk.

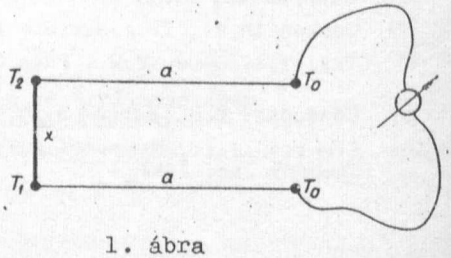
Ismeretes, hogy fémek és fémes ötvözetek bizonyos fizikai tulajdonságai rekriszhallizációnál, spin- vagy atomi rendeződésnél és különböző tipusu rácshibák létrehozása esetén megváltoznak. Egy adott tipusu átalakulás mértékére, sebességére, stb. e fizikai tulajdonságok mérése alapján következtethetünk. A különböző fizikai mennyiségek azonban nem azonos módon függnek az anyag strukturális változásaitól. Néha megelégedhetünk egyetlen fizikai mennyiség változásának a figyelésével, részletesebb vizsgálat, vagy bonyolultabb átalakulások esetén azonban már több mennyiség mérésére is szükség van. Rendeződő ötvözetek vizsgálatánál legtöbbször a diffrakciós felvételeken fellépő szuperrácsvonalak intenzitása és az elektromos ellenállás szerepel indikátorként. A Cu_3Au ötvözet rendeződési kinetikájának vizsgálatához kidolgoztuk a differenciális termofeszültség egy mérési módszerét. A módszer alkalmas fém és fémes ötvözet huzalok és fóliák differenciális termofeszültségének gyors és pontos mérésére.

A mérés differenciális termopárok segitségével történik. Az 1-es ábrán látható differenciális termopár termoelektromos ereje:

$$\Delta V_{xa} = \int_{T_1}^{T_2} S_x dT + \int_{T_2}^{T_0} S_a dT + \int_{T_0}^{T_1} S_a dT = \int_{T_1}^{T_2} (S_x - S_a) dT = \int_{T_1}^{T_2} S_{ax} dT \quad (T_2 > T_1) \quad /1/$$

ahol S_{ax} az "a" anyagnak az "x" anyaghoz viszonyitott differenciális termofeszültsége, ($S_{ax} = -S_{xa}$), S_a, S_b és S_x pedig az "a", "b", ill. "x" anyag abszolut differenciális termofeszültsége. Kis hőmérséklet-különbségeknél S_{ax} állandónak tekinthető, ezért:

$$\Delta V_{xa} \approx S_{ax}(T')(T_2 - T_1) , \quad /2/$$

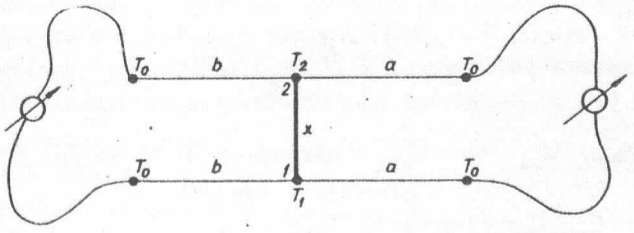


1. ábra

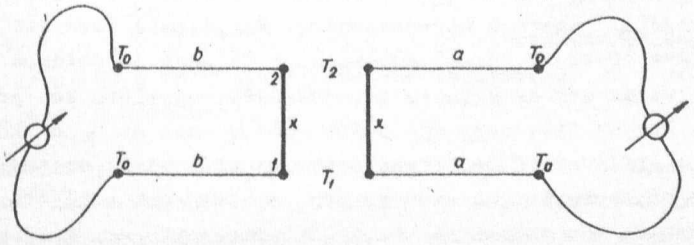
ahol, T' a T_1 és T_2 között alkalmasan választott hőmérséklet, innen:

$$S_x(T') = \frac{\Delta V_{xa}}{\Delta T} + S_a(T') \,, \qquad (\Delta T = T_2 - T_1) \,, \qquad /3/$$

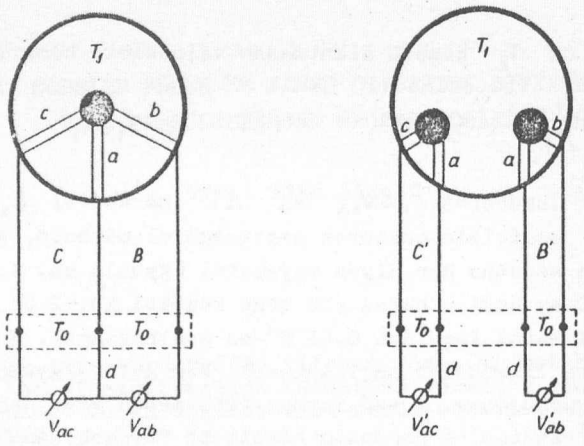
tehát $S_a(T')$ ismeretében, ΔV_{xa} és ΔT mérésével $S_x(T)$ meghatározható. ΔV_{xa} megfelelő müszerek segitségével mérhető, a hőmérséklet-különbség mérése azonban nem ilyen egyszerü. Ugyanis kb. 1,0 - 0,1 mm átmérőjü kb. 20-40 mm hosszu huzal két vége közötti kb. 2 C^o hőmérséklet-különbséget kell mérni legalább 0,01 C^o-os pontossággal. Ez megoldható a 2/a ábrán látható elrendezés segitségével. Meg kell jegyezni, hogy az ábra 1-es és 2-es pontjában, a szó szoros értelmében véve nem termopár van, hanem hármas forrasztás. A gondosan készitett "termohármas" három termopárja azonban független termopárnak tekinthető. Függetlenség alatt azt értjük, hogy a 3. ábrán látható kétféle elrendezésnél /forrasztási helyek kinagyitva/ egy adott $T_1 - T_o$ hőmérsékletkülönbségnél azonos feszültségeket kapunk; $V_{ac} = V'_{ac}$ és $V_{ab} = V'_{ab}$, ha a termoelektromos erőt mérő müszer belső ellenállását végtelen nagynak számitjuk. Igy a 2/a és 2/b ábrán látható elrendezés is, a kapott termoelektromos erők szempontjából azonos, vagyis a 2/a két egymástól független differenciális termopárnak tekinthető.



2.a.ábra



2.b.ábra



3. ábra

ΔT hőmérsékletkülönbség fenntartásánál a 2/a ábra két körében fellépő termoelektromos erő a következő:

$$\Delta V_{xa} = S_{ax}\Delta T \qquad /4/$$

$$\Delta V_{xb} = S_{bx}\Delta T$$

Ezek alapján:

$$\Delta T = \frac{\Delta V_{xa} - \Delta V_{xb}}{S_{ab}} \qquad /5/$$

S_{ab} ismeretében V_{xa} és V_{xb} mérésével T a kívánt pontossággal meghatározható. Ezt /3/-ba helyettesítve kapjuk:

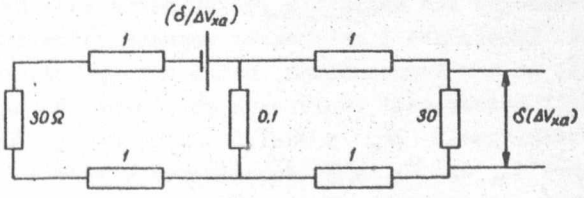
$$S_x(T') = \frac{1}{1 - \frac{\Delta V_{xb}}{\Delta V_{xa}}} S_{ab}(T') + S_a(T') = \frac{1}{1 - m} S_{ab}(T') + S_a(T') \,, \qquad /6/$$

ahol, $\Delta V_{xb} / \Delta V_{xa} = m$ jelölést vezettük be. Láthatjuk, hogy nincs szükségünk a ΔV_{xa} és ΔV_{xb} feszültségek abszolut értékére, csak a $\Delta V_{xb} = m\Delta V_{xa}$ egyenes meredekségére. Figyelembe véve azt, hogy ezen feszültségek 10-20 μV között mozognak, a feladat jelentősen egyszerüsödik. Határozzuk meg az egyenes meredekségét, egyelőre két pontjának megadásával. Tegyük fel, hogy egy adott $(\Delta T)_o$ -nál az x, a körben lévő $S_{xa}(\Delta T)_o$ differenciális termoelektromos erőn kivül valamilyen V_p un. "parazita termoelektromos erő" is van, a hidegpont tökéletlensége és a mérőkör összes kontaktusainál fellépő termoelektromos erők miatt. Tehát a mért feszültség: $S_{ax}(\Delta T)_o + V_p$. Változtassuk meg a hőmérséklet-

különbséget $(\Delta T)_1$ -re, és tegyük fel, hogy ezen idő alatt a parazita termofeszültségek nem változnak meg. A kapott feszültség $S_{ax}(\Delta T)_1 + V_p$ lesz. Az x, b körben teljesen hasonló módon $(\Delta T)_0$ -nál $S_{bx}(\Delta T)_0 + V_p'$ és $(\Delta T)_1$ -nél $S_{bx}(\Delta T)_1 + V_p'$ feszültséget kapunk. A két esetben mért feszültségek különbségének hányadosa a kivánt meredekség:

$$\frac{S_{bx}(\Delta T)_1 + V_p' - [S_{bx}(\Delta T)_0 + V_p']}{S_{ax}(\Delta T)_1 + V_p - [S_{ax}(\Delta T)_0 + V_p]} = \frac{S_{bx}\,\Delta T}{S_{ax}\,\Delta T} = m \,. \qquad /7/$$

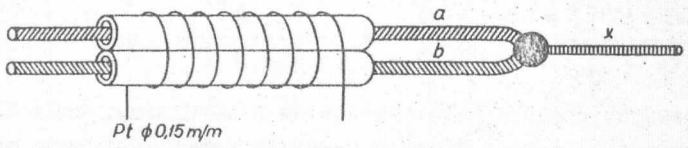
A mérés pontosságát döntően befolyásolja az a körülmény, hogy a hőmérsékletkülönbség megváltoztatása alatt a parazita termoelektromos erők állandók maradnak-e, vagy sem. A méréseket ezért igen nagy gondossággal, állandó hőmérsékletü szobában ajánlatos végezni. A meredekség értékét pontosabban megkaphatjuk, ha kettőnél több hőmérsékletkülönbséghez tartozó differenciális termoelektromos erők mérése al ján legkisebb négyzetek módszerével számolunk. Ilyenkor azonban egy adott meredekség meghatározásához szükséges időtartam is megnő, ami nem mindig engedhető meg. Vegyük figyelembe azt a tényt, hogy a 2/a ábrán látható müszerek belső ellenállása nem végtelen nagy, és becsüljük meg az ebből eredő hibát, a 4. ábra tipikus értékeinek felhasználásával. 30 Ω a kompenzátor munkaellenállása + galvanométer belső ellenállása, 1 Ω a termopárok egy-egy ágának ellenállása, 0,1 Ω a vizsgálandó minta ellenállása és a differenciális termoelektromos erő: 20 μV, a leosztott feszültség pedig ($\delta(\Delta V_{xa}) = 0{,}06\,\mu V$/. A kompenzátoron mérhető legkisebb feszültség 0,1 μV. A leosztásból származó szisztematikus hiba a differenciális termofeszültség értékében ~ 0,5 %. A leosztás annál kisebb, minél kisebb a minta ellenállása. Azonban nagyon kis ellenállás esetén a próbatest hővezetése is károsan megnő, és a méréshez szükséges hőmérsékletkülönbség csak ugy állitható elő, hogy a minta egész terjedelmében a vizsgálati hőmérséklet fölé melegszik. A próbatest alakját és méreteit ugy kell megválasztani, hogy elektromos ellenállása minél kisebb legyen, és a felületéről történő lesugárzás és hőelvezetés nagyobb legyen, mint a hővezetés.



4. ábra

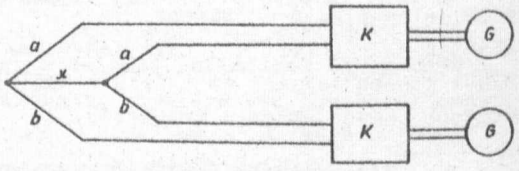
Fázisátalakulásoknál legtöbbször egy adott hőmérsékleten egy tulajdonság időbeli változását mérjük. A differenciális termofeszültségre kapott értékek mindig egy hőmérséklet- és időintervallumra vonatkoznak. A $(T_1, T_1 + \Delta T)$ és $(t_1, t_1 + \Delta t)$ intervallumban kapott értéket a

$T = T_1$ hőmérséklethez és a $t = (t_1 + t_1 + \Delta t) \cdot 1/2$ időpillanathoz rendeltük. /A $T = T_1$ választás azért történt, mert a tényleges mérés időtartamán kivül a próbatest teljes terjedelmével T_1 hőmérsékleten van./ A $S_T(t)$ görbe nyilván annál jobban leirja a valóságos változást, minél kisebbre választjuk a hőmérséklet- és idő-intervallumot.



5. ábra

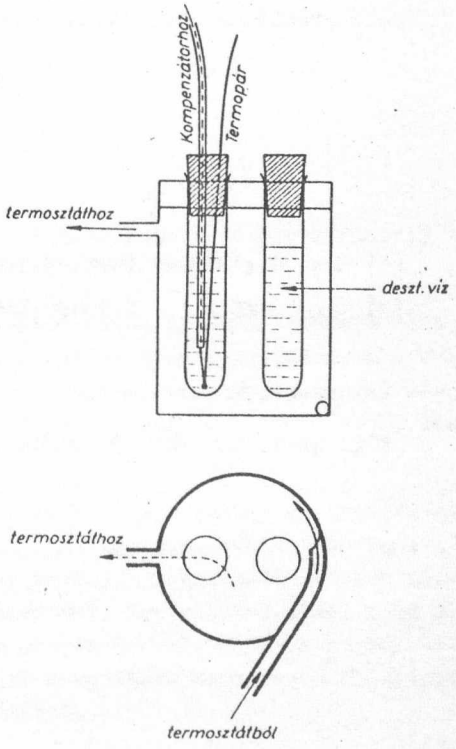
Vizsgáljuk meg egy tényleges mérés elvégzéséhez szükséges idő csökkentésének a lehetőségét. Az eddig használatos módszerek hibája az volt, hogy a hőmérsékletkülönbség létrehozására a kályha természetes [1], vagy mesterségesen alakitott [2] gradiensét használták fel. A hőkezelő kályhák hőtehetetlensége pedig meglehetősen nagy. Az általunk használt hőkezelő kályha leghomogénebb részében helyeztük el az 5. ábrán látható próbatestet. A hőmérsékletkülönbség létrehozására kb. 1 W teljesitményü, kerámia kapillárisra csévélt, kis kályhát használtunk. A kályhát közvetlenül a potenciálvezetékekre helyeztük, és a forrasztási pont hővezetés utján melegszik fel. Ezzel az elrendezéssel a differenciális termopár egyik pontját 1 percnél rövidebb idő alatt kb. 2 C^o-kal magasabb hőmérsékletü e g y e n s u l y i helyzetbe lehetett hozni. Igy a tényleges méréshez szükséges idő nagyobbik részét már a kézi kompenzálás elvégzése töltötte ki. Lehetséges a meredekség meghatározásának idejét jelentősen csökkenteni, ha nem kompenzálunk, hanem a kompenzátorok galvanométereinek kitéréseit közvetlenül leolvassuk /6. ábra/. Ha ugyanis az egyik galvanométer érzékenysége α_a a másiké α_b, akkor $\Delta V_{xa} = \alpha_a K_a$ és $\Delta V_{xb} = \alpha_b K_b$, ahol K_a és K_b a galvanométerek kitérése osztásrészekben. Igy $m = \alpha K_a / K_b$, ahol $\alpha = \alpha_a / \alpha_b$. Nagyon fontos, hogy hogy a két leolvasás pontosan egy időben, vagyis azonos hőmérséklet-különbségnél történjen. Ez ugy is megoldható, hogy a hőmérsékletkülönbséget növelni kezdjük, majd lassan csökkentjük, és a maximális K_a és K_b értékeket tekintjük összetartozóknak. Itt nem várjuk meg a kis kályha árama által meghatározott uj hőmérsékletkü-



6.ábra

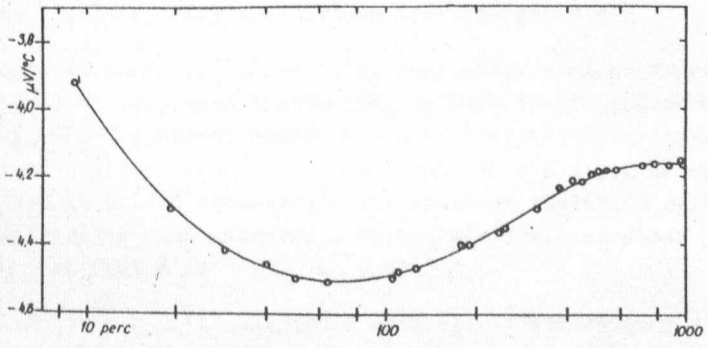
lönbség egyensulyának beállását, hanem a galvanométerek kitéréseit a. ballisztikus galvanométeréhez hasonló módon olvassuk le. Ezzel a módszerrel a meredekség két pont alapján történő meghatározásának ideje 30 sec alá szoritható. A mérés pontossága természetesen csökken, de termofeszültség ilyen módon történő mérésével 5-15 perc alatt lezajló változások is nyomon követhetők.

Gyakran előfordul, hogy a vizsgálandó anyag az átalakulás hőmérsékletén oxidálódik. Ilyen esetben a problémát ugy oldottuk meg, hogy a differenciális termopárt evakuált, vagy véd-gázzal töltött üvegcsőbe forrasztottuk. A Pt, és tapasztalataink szerint a 10 %-os PtRh ötvözet normál jénai üvegbe jól forraszthato, és a mérések az üveg lágyuláspontjáig kiterjeszthetők. A termopárokat közvetlenül kell kivezetni az üvegballonból, mert bármilyen toldás egy uj, nem kivánatos differenciális termoelemnek a mérőkörbe való beépitését jelentené.



A hidegpontot nem jéggel, hanem termosztát segitségével valósitottuk meg. Az elrendezés a 7. ábrán látható. A hidegpont hőmérséklete 30 C° volt.

7. ábra



8. ábra

A 8. ábrán a Cu_3Au ötvözet 365 C^o-on történő rendeződése következtében a differenciális termofeszültség megváltozásának időbeli lefolyását láthatjuk.

Megköszönöm dr.Nagy Elemér professzor urnak a méréseknél előfordult problémák megoldásához nyujtott hasznos tanácsait.

Irodalom

[1] Erez,G.; Rudman,P.S., J.Phys.Chem. Solids 18, 307 /1961/

[2] Рудницкий А.А., Ж.Неорг.Хим. I, 1305 (1956)

Érkezett:1962. szept. 20.

KFKI Közl. 10. évf. 5. szám, 1962.

BÓRTRIFLUORID TÖLTÉSŰ PROPORCIONÁLIS SZÁMLÁLÓCSÖVEK

Irta: Madarász Zoltán

Összefoglalás

Ismertetjük az 1959-62. évek folyamán készitett bórtrifluorid töltésü neutronszámlálócső-tipusokat, ezek jellemző adatait.

Az Intézetben folyó neutronfizikai vizsgálatokhoz szükség volt bórtrifluorid töltésü számlálócsövek kifejlesztésére és gyártására. A csövekkel szemben támasztott főbb követelmények voltak: nagy érzékenység, alacsony müködési feszültség, hosszú élettartam és hőállóság /kb. 200 C^{o}-ig/, minél kisebb gamma-érzékenység.

A nagyobb neutronérzékenység kedvéért igyekeztünk a töltőgáz nyomását a lehetőséghez képest nagyra választani. Igy 250, 400 és 500 Hgmm nyomásra töltöttük csöveinket. Az alacsony müködési feszültség elérése céljából az anódszálat kellő vékonyra választottuk. Igy előbb 0,1 mm, majd 0.05mm átmérőjü volfrámszálat alkalmaztunk. A csövek burkolata jénai normál 16/III. jelü üvegcső. A csövek kivitele megfelel a szokásos hengeres számlálócsöveknek. Katódanyaguk 0,15 mm vastagságú nikkel.

A csövek minősége és hosszú élettartama szempontjából elsőrendü jelentőségü a töltőgáz tisztasága. Az elektronegativ gázok jelenléte rontja a plato meredekségét és csökkenti a hatásfokot. Elektronegativ gázok közé tartozik az oxigén, vizgőz, továbbá üvegrendszerekben bórtrifluorid jelenlétében meleg hatására keletkező SiF_4 és SO_2. E kettőből további vegyi reakcióval SF_6 is képződik, mely igen erősen elektronegativ gáz.

Aponte és Korff [1] vizsgálatot folytattak ezen szennyezettségek hatásáról olymódon, hogy igen tiszta BF_6 gázhoz fenti szennyezésekből / SiF_4, SO_2, SF_6 / pontosan lemért kis mennyiségeket adagoltak. Ezen gázkeverékekkel bórtrifluoridos számlálócsöveket töltöttek meg és megvizsgálták müködésüket különböző összetételü szennyezések esetén. A megengedhető szennyezésmennyiségek alsó határául a következőket állapitották meg: SiF_4 -re 0,04 %, SO_2 -re 0,01 % és SF_6 -ra 2.10^{-6} %.

A betöltött gáz tisztaságának biztositása érdekében a cső belső fa-

lának és alkatrészeinek tisztasága elengedhetetlen. Ennek érdekében a csövek belső felületét és alkatrészeit szerelés előtt gondosan tisztitani kell. Az alkatrészekre az alábbi mosási eljárást alkalmaztuk. Üveg alkatrésznél: 10 %-os salétromsav-oldat, vizöblités, 10 %-os KOH-oldat, vizöblités, 100 C^{o} desztillált vizben mosás 5 percig, alkoholöblités. Fémalkatrészekre alkalmazott mosás: 10 %-os KOH-oldat, vizöblités, 10 %-os ecetsav-oldat, vizöblités, 100 C^{o} desztillált vizben mosás 5 percig, alkoholöblités.

A gondosan mosott és összeszerelt csöveket felforrasztottuk a szivattyúra és 2.10^{-5} Hgmm vákuumra leszivattyúztuk. Szivattyúzás alatt 5 órán keresztül 380 C^{o}-os kályhában hőkezeltük azon célból, hogy az alkatrészek felületére tapadt viznyomokat eltávolitsuk, majd a csöveket nagyfrekvenciás módszerrel hőkezeltük, hogy a cső fémalkatrészeiből az adszorbeált gázokat és gőzöket eltávolitsuk. A nagyfrekvenciás kifütővel a fémalkatrészeket 700-800 C^{o}-ra fütöttük fel kb. 4 percig. A szennyező gázok kivonása céljából a szivattyúba betöltött bórtrifluoridot lekondenzáltattuk cseppfolyós nitrogénnel hütött csapdával, igy a nem kondenzálódó maradék gázokat újabb szivattyúzással eltávolitottuk, majd a lecsapatott bórtrifluorid felmelegitése és elgázositása után a folyamatot újra megismételtük. A lefagyott gáz felmelegitése és expandáltatása után a szivattyú kondenzációs csapdájára fagyasztott alkohol - folyékony alkohol keveréket helyeztünk a maradék vizgőzök kivonása céljából. Az igy megtisztitott bórtrifluoridot közvetlenül a csőbe töltöttük. A megtöltött csöveket szokásos üvegtechnikai szúrólánggal leválasztottuk a szivattyúról. A csöveket elláttuk bevezető sapkával.

A kisérleti szakaszban természetes izotópkeverékü, majd később rendszeresen B^{10} -ben dúsitott bórtrifluoriddal töltöttük a csöveket. A gázt egyrészt a Szovjetunióból szereztük be, másrészt a Magkémia I. Laboratórium által 87 %-ra dúsitott bórtrifluorid gázt használtuk fel, mely kiváló minőségünek bizonyult. A szovjet gáz dúsitási foka B^{10} -re 83 %.

Kilenc féle csőtipust készitettünk a különböző igényeknek megfelelően. Az egyes tipusok adatairól a mellékelt táblázat ad tájékoztatást.

A csövek mérésének eredményei

Mérés céljából a csöveket parafintömbben helyeztük el 1 mC erősségü PoBe-neutronforrás szomszédságában. Egyes esetekben, a gamma-érzékenység megállapitása céljából mértük a csöveket 0,65 mC erősségü Co gamma-forrás jelenlétében is.

Az intenzitás-mérés egyrészt a platómeredekség meghatározásához szkélerrel történt, másrészt az integrális és differenciális amplitudóel-

Tipusjel:	260/30	175/41	175/41	175/25	175/20	165/18	86/18	63/10	175/25 "H"
Aktiv hossz mm	250	160	170	160	160	150	70	60	170
Katód belső Ømm	30	41	41	25	20	18	18	10	27
Anód Ø mm	0,1	0,05	0,05	0,1 0,05	0,1	0,05	0,05	0,1	0,05
Katódfalvast.mm	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	--
Külső hossz mm	365	315	265	265	265	260	175	130	265
Külső Ø mm	35	49	49	30	24	22	22	13	30
BF_3nyomás mm	240	500	400	250	500	300	300	250	300
$B^{10}F_3$ dúsitás %	83	83	87	87	83	87	87	83	87
Müködési feszültség V.	2200	2200	2250	2200 1800	2350	1900	1900	1250	2200
Platóhossz V.	300	300	300	300	400	400	200	100	350
Platómeredekség %/100 V.	2	2,5	3	2,5	2,5	2,5	2,5	4	2

Táblázat a csövek adatairól

oszlás felvételénél diszkriminátort, ratemetert és szinkronmotor meghajtású irót használtunk [2]. A diszkriminátor szintszabályozóját egy másik, ugyancsak szinkronmotor hajtotta meg. Az 1., 2. és 3. ábrán közöljük két tipus platogörbéjét és egy tipus integrális és differenciális amplitudóeloszlását.

Közöljük továbbá a külön gamma-háttér hatásának megfelelő impulzuseloszlásgörbét, összehasonlitva a gamma-háttér nélkülivel / 4/a és b ábra/.

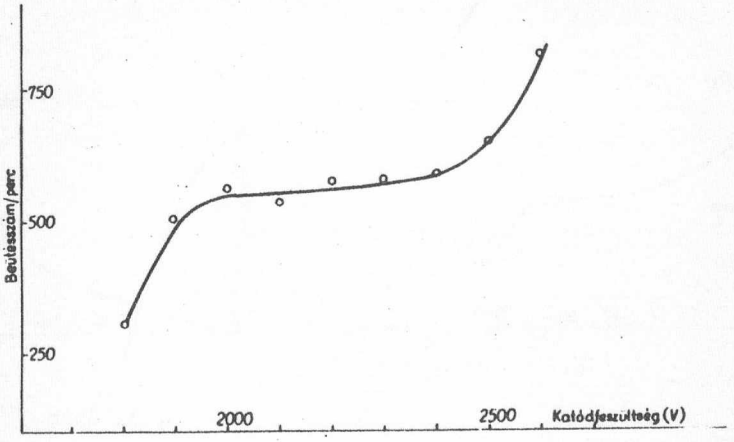
A γ-háttér hatására várható módon a csővel regisztrált "kis jelek" száma igen erősen megemelkedik. Ezt elsősorban a jelenlevő nikkel Compton-elektron jelei okozzák.

Kisérletképpen készitettünk hengeres katód nélküli csöveket is (175/25 H) jelzéssel . Ezeknél a katódot 6 darab 0,6 mm átmérőjü nikkelszál képezi. A szálak hatszögü hasáb éleit alkotják. Ezek közvetlenül a cső falának belső oldalán helyezkdenek el. Közöljük ezen csövek platógörbéjét és integrális amplitudó-eloszlásgörbéjét gamma-háttér mellett és anélkül /5. ábra/. Várható módon ezen csövek gamma-érzékenysége kisebb, mint a nikkelhengerrel készült csöveké. Kevesebb a Compton-elektront szolgáltató nikkel mennyisége, viszont mivel a hat nikkelszál a fal mentén van, a tér torzulást szenved, de igy is a platómeredekség még kielégitőnek mondható.

Megvizsgáltuk, vajon a csövek 100-200 C^o-os hőmérsékleti kezelés után ugyanolyan jól müködnek-e, mint előtte. E célbül két példányt 180 C^o kályhában hőkezeltünk 10 órán keresztül. A hőkezelés után felvettük a platógörbéjüket /6. ábra/. A hőkezelés után a csövek plátómeredeksége nem romlott, sőt a mérési pontosságon belül tekintve, javult. Ezen hőkezelés felfogható gyors öregitésnek is. Frőhlich [3] huzamosabb ideig raktározott csövei szintén javuló karakterisztikát mutattak. A hőkezeléssel feltételezhetően lejátszódik ugyanazon folyamt, ami hosszú idejü tárolásnál: a belső felületek gázcseréje a bórtrifluorid gáz tisztaságának javára történik.

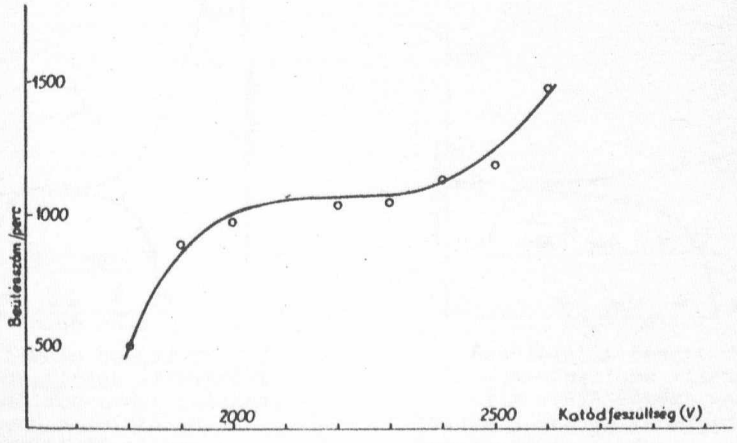
Meg kell jegyeznünk, hogy a táblázat harmadik oszlopában szereplő számlálócső tipus előnyösen alkalmazható kis intenzitású szükebb nyalábok detektálására. Ezek katódjának egyik vége a cső egyik végének közelében helyezkedik el. Igy nemcsak sugárirányú, hanem tengelyirányú detektálásra is alkalmasak.

Köszönetet mondok Fonódi Istvánnak és Zs.Tóth Sándornak a berendezések elkészitésénél, ugyszintén a csövek kivitelezésénél tanúsitott lelkes munkájukért.



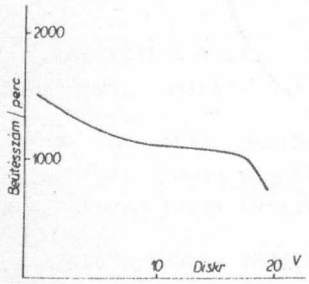
1/a ábra

175/25 tipusú számlálócső platógörbéje



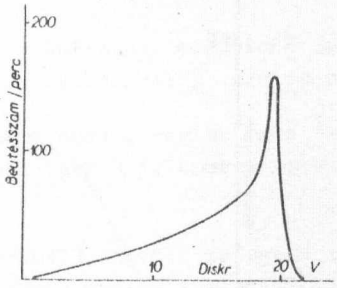
1/b ábra

260/30 tipusú számlálócső platógörbéje



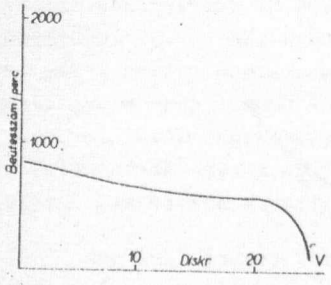
2. ábra

260/30 típusú számlálócső integrális amplitudó-eloszlása 2100 V katódfeszültségnél



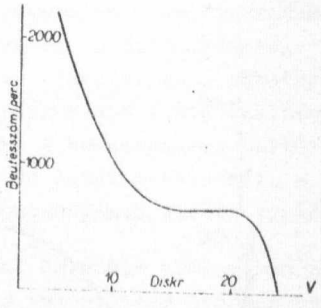
3. ábra

260/30 típusú számlálócső differenciális amplitudó-eloszlása 2100 V katódfeszültségnél



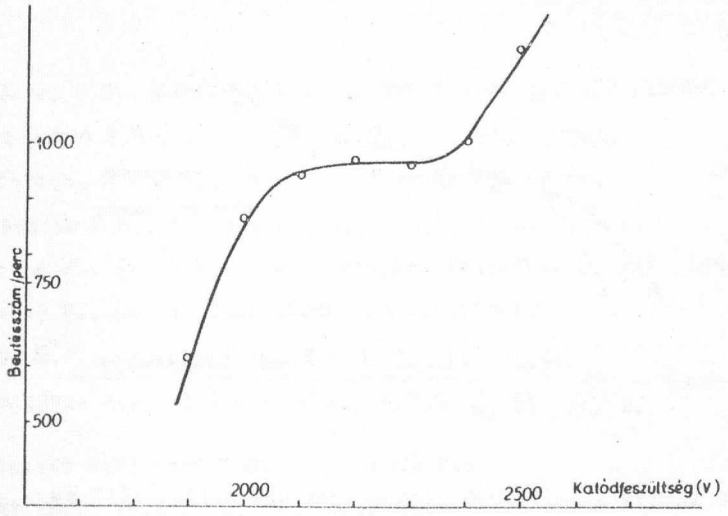
4/a ábra

175/25 típusú számlálócső integrális amplitudó-eloszlása gamma-háttér nélkül



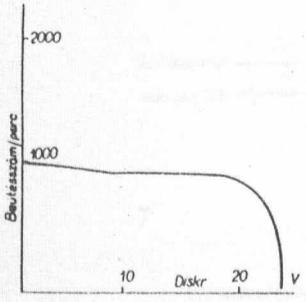
4/b ábra

175/25 típusú számlálócső integrális amplitudó-eloszlása gamma-háttérrel



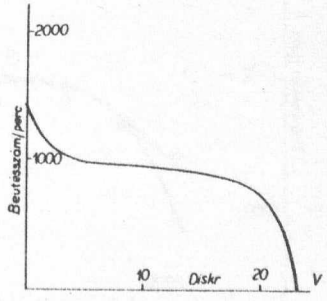
5/a ábra

175/25 H tipusú számlálócső platógörbéje



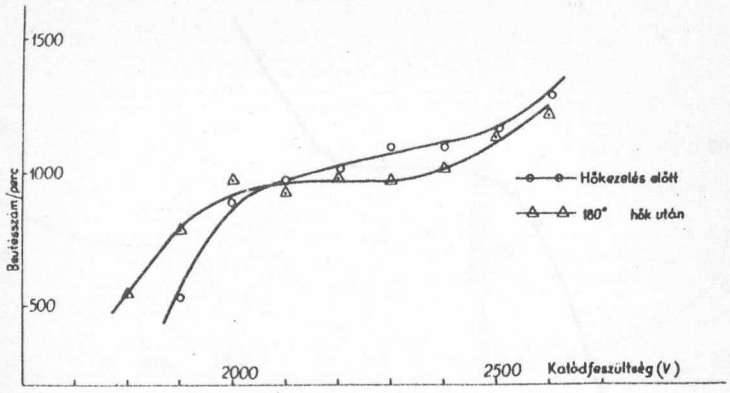
5/b ábra

175/25 H tipusú számlálócső integrális amplitudó-eloszlása gamma-háttér nélkül

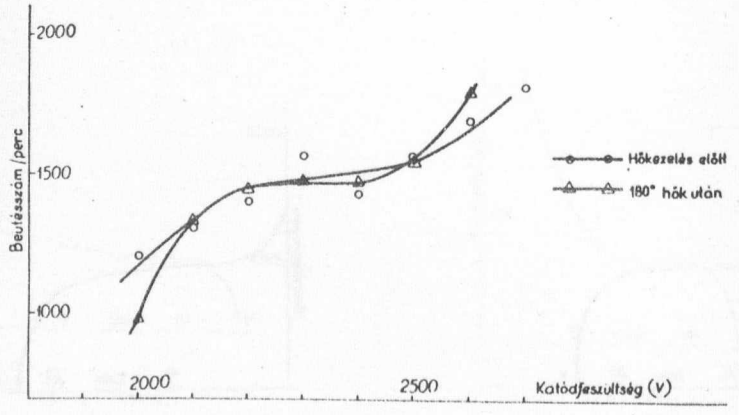


5/c ábra

175/25 H tipusú számlálócső amplitudó-eloszlása gamma-háttérrel



6/a ábra
260/30 tipusú számlálócső platógörbéi hőkezelés előtt és után



6/b ábra
175/41 tipusú számlálócső platógörbéi hőkezelés előtt és után

I r o d a l o m

[1] Aponte, J.D., Korff, S.A.: Rev.Sci.Instr. 31, 532 /1960/

[2] Сидоренко В.В., Уткин Г.А., П.Т.Э. 4, 133 /1960/

[3] Fröhlich, H.: Exp.Techn. der Phys. 6, 241 /1960/

[4] Савельев В.Я., Кононенко В.А., П.Т.Э. 1, 61 /1959/

[5] Gordon J., Szabó P.: Magyar Fizikai Folyóirat 8, 211 /1960/

[6] Buczkó M., Csikai Gy.: ATOMKI Közl. 1960/1.

[7] Абов Ю.Г., Аверкин Б.А., П.Т.Э. 1, 185 /1961/

[8] Димитриев А.Б., Воробьев М.Г., П.Т.Э. 1, 55 /1961/

Érkezett 1963 máj. 20.

KFKI Közl. 11.évf. 4. sz. 1963.

KOMBINÁLT PALLÁDIUMSZELEP

Irta: Madarász Zoltán és Szabó Zoltán

Összefoglalás

Készitettünk egy deutériumfejlesztővel kombinált palládiumszelepet, amely 7,3 W fütőteljesitmény esetén 50 normál cm^3/óra gázmennyiséget képes áteresztení.

A szelep gyorsitóberendezések ionforrásának gázellátását van hivatva biztositani. A készülék előnyei:

- kis fütőteljesitmény-szükséglet,
- automatikus /felügyelet nélküli/ üzem.

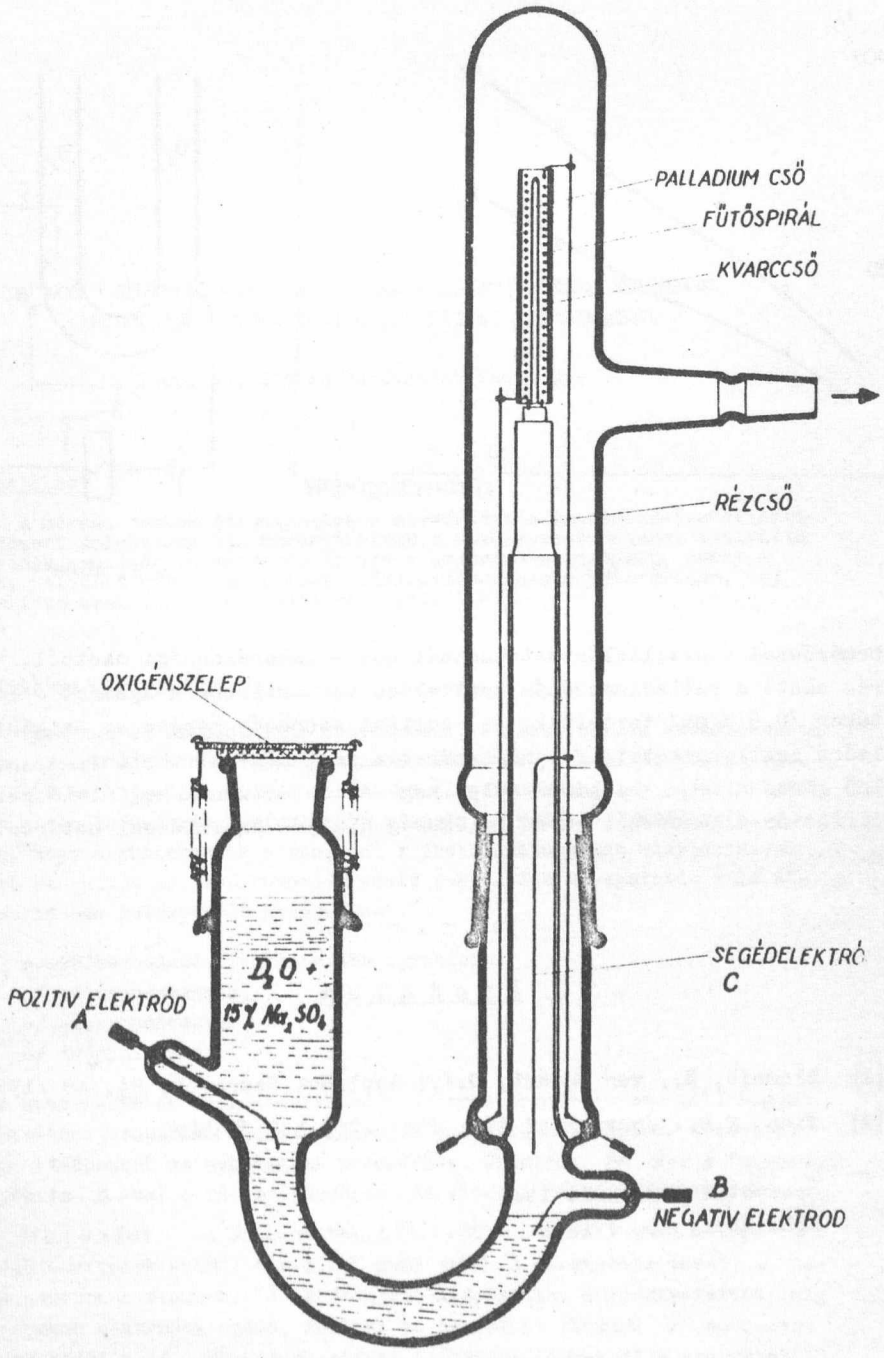
A készülék leirása a következő /1. ábra/.

Az A és B platinaelektródára kapcsolt egyenfeszültség hatására az oldatban elektrolizis jön létre. A B elektródán felszabaduló deutérium gáz az egyik végén zárt Pd cső belsejébe jut. Ez egy 50,8 mm hosszuságu, 1,59 mm átmérőjü, 0,076 mm falvastagságu ezüsttel ötvözött palládiumcső, melyet a gyártó cég /Johnson, Matthey és Ltd London/ rézcső közvetitésével bórszilikát üvegcsőhöz forrasztva szállit /S.D.T. 5. tipus/. Ez az üvegcső közüveglépcső közbeiktatásával csatlakozik a berendezés többi részéhez, amely rasotherm-üvegből készült.

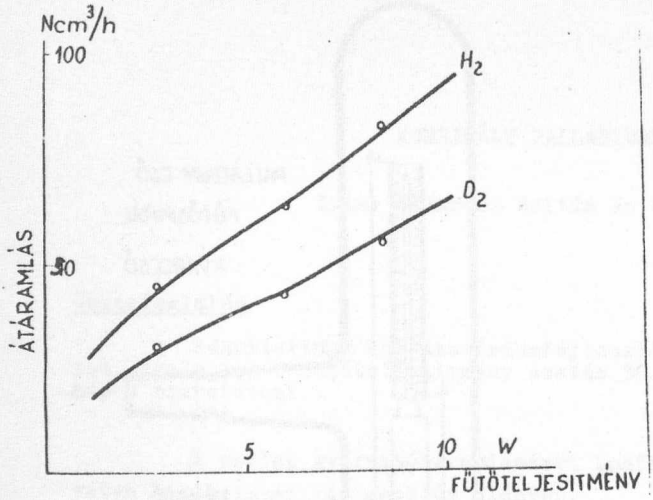
A palládiumcsövet 0,3 mm átmérőjü kanthal ellenálláshuzalból készült fütőspirális veszi körül, melyet egy 5 mm külső átmérőjü kvarccső tart. A palládiumcsövön keresztül a fütés hatására deutérium gáz diffundál keresztül. A palládiumcső külső része az ionforráshoz csatlakozik.

A C segédelektródára kapcsolt jelfogó /2. ábra/ a deutériumfejlesztést ugy kapcsolja ki - ill. be, hogy a folyadékszint mindenkor a B és C elektróda között legyen. A folyadékszint-különbségnek megfelelő térfogatkülönbséget célszerü kis /kb. 1 cm^3/ értéken tartani, ellenkező esetben ugyanis a szelepen belül nyomásingadozás lép fel, ami az átáramló gázmennyiség ingadozásához vezet.

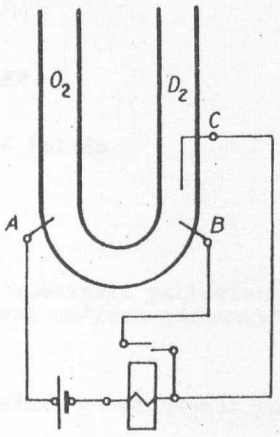
A 3. ábrán feltüntettük a készülék deutérium-hozamát /normál cm^3/óra/ a fütőteljesitmény /W/ függvényében. A görbe közel lineáris menetet mutat.


PALLADIUM CSŐ
FŰTŐSPIRÁL
KVARCCSŐ
RÉZCSŐ
OXIGÉNSZELEP
SEGÉDELEKTRÓ
C
POZITIV ELEKTRÓD
A
D_2O +
15% Na_2SO_4
B
NEGATIV ELEKTROD

1. ábra



2. ábra



3. ábra

A bemérésnél desztilláltvizet használtunk - takarékossági okokból. - A mérés alatt a palládiumcsőhöz csatlakozó vákuumtérben a nyomást állandó értéken /0,5 Hgmm/ tartottuk. Az áramlási sebesség mérése az oxigénszelep helyére csatlakoztatott folyadék-büretta segitségével történt. A kapott felső görbe a H_2 -hozamnak felel meg. A deutériumnak megfelelő görbét a diffuziós állandókból adódó különbség alapján számitással határoztuk meg.

- . -

I r o d a l o m

[1] Blomsjö, E., von Dardel, G.F.: Appl.Sci.Research, B4, 49 /1954/

[2] Winn, M.M.: Journal of Sci. Inst. 28, 152 /1951/

Érkezett: 1963 jul. 19.
KFKI Közl. 11. évf. 5. szám, 1963.

TERMIKUS NEUTRONOK TELJES HATÁSKERESZTMETSZETÉNEK MÉRÉSÉVEL KAPCSOLATOS MATEMATIKAI-STATISZTIKAI PROBLÉMÁKRÓL

Irta: Pál Lénárd és Kisdiné Koszó Éva

Összefoglalás

A mérési adatok feldolgozására következetes matematikai-statisztikai módszert dolgoztunk ki. Meghatároztuk a hatáskeresztmetszet optimális becslésének szórását és megkerestük azt a neutron-intenzitást, amely a szórást, telitési effektust mutató időanalizátor használata esetén, egy kiválasztott csatornában minimálissá teszi.

1/ A probléma áttekintése

Termikus és szubtermikus neutronokkal végzett teljes hatáskeresztmetszet mérések adatainak feldolgozása során néhány kérdés alaposabb vizsgálata vált szükségessé. Mindenekelőtt röviden ismertetjük a mérési eljárást és a mérőberendezés legfontosabb részeit. A mérési eljárásnak az a lényege, hogy meghatározzuk a repülési időbeli különbségek alapján kiválasztott energiáju neutronfluxusnak adott vastagságu anyagmintán való áthaladása közben bekövetkező gyengülését.

A mérőberendezés legfontosabb egységei:
a/ neutronszaggató,
b/ neutrondetektor,
c/ időanalizátor.

ad a/ A neutronnyaláb szaggatására egyenes résü forgórész szolgál. Legyen az átbocsátási időtartam kicsiny a zárási időtartamhoz képest. Rendeljük a $t = 0$ időpontot az átbocsátás kezdetéhez. Jelöljük $2R$ -rel a forgórész átmérőjét és Δ -val a rés szélességét. Az átbocsátási idő nyilván $\Theta = \frac{\Delta}{\omega R}$

Legyen $Mp(v,t)dt$ a szaggatóból a $(t,t+dt)$ intervallumban kilépő v sebességü neutronok száma. $M = \phi(v)S$, ahol $\phi(v)$ a szaggatóra beeső, v sebességü neutronok fluxusa, S a szaggató átbocsátási keresztmetszete, mig $p(v,t)$ azon neutronok száma, amelyek az egységnyi fluxusu v sebességü neutronok közül a t körüli egységnyi időközben lépnek ki a szaggatóból.

Ha a neutronok sebessége

$$v > 4\,\frac{\omega R^2}{\Delta}\ ,$$

akkor felirhatjuk /1/, hogy

$$p(v,t) = \begin{cases} \dfrac{2\omega R}{\Delta}\,t\ , & \text{ha} \quad 0 \le t \le \tilde{\Theta}_1 \\ 1 - \dfrac{\omega v}{4\Delta}\left[t - \left(\dfrac{\Delta}{2\omega R} + \dfrac{2R}{v}\right)\right]^2\ , & \text{ha} \quad \tilde{\Theta}_1 \le t \le \dfrac{\Delta}{2\omega R} \\ 1 - \dfrac{\omega v}{4\Delta}\left[t - \left(\dfrac{\Delta}{2\omega R} - \dfrac{2R}{v}\right)\right]^2\ , & \text{ha} \quad \dfrac{\Delta}{2\omega R} \le t \le \tilde{\Theta}_2 \\ 2\left(1 - \dfrac{\omega R}{\Delta}\,t\right)\ , & \text{ha} \quad \tilde{\Theta}_2 \le t \le \dfrac{\Delta}{\omega R} \end{cases} \qquad /1/$$

ahol

$$\tilde{\Theta}_1 = \frac{\Delta}{2\omega R} - \frac{2R}{v}\ , \qquad \tilde{\Theta}_2 = \frac{\Delta}{2\omega R} + \frac{2R}{v}\ .$$

Valamivel egyszerübb a helyzet, ha

$$\frac{\omega R^2}{\Delta} \le v \le 4\,\frac{\omega R^2}{\Delta}\ .$$

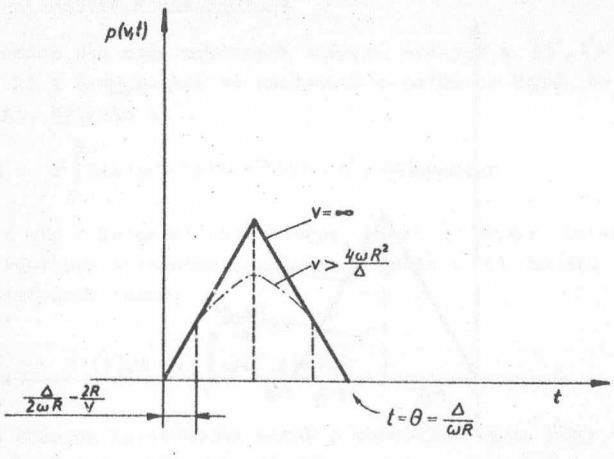
Ekkor ugyanis

$$p(v,t) = \begin{cases} 0\ , & \text{ha} \quad 0 \le t \le \Theta_1 \\ 1 - \dfrac{\omega v}{4\Delta}\left[t - \left(\dfrac{\Delta}{2\omega R} + \dfrac{2R}{v}\right)\right]^2\ , & \text{ha} \quad \Theta_1 \le t \le \dfrac{\Delta}{2\omega R} \\ 1 - \dfrac{\omega v}{4\Delta}\left[t - \left(\dfrac{\Delta}{2\omega R} - \dfrac{2R}{v}\right)\right]^2\ , & \text{ha} \quad \dfrac{\Delta}{2\omega R} \le t \le \Theta_2 \\ 0\ , & \text{ha} \quad \Theta_2 \le t \le \dfrac{\Delta}{\omega R} \end{cases} \qquad /2/$$

ahol

$$\Theta_1 = \frac{2R}{v} + \frac{\Delta}{2\omega R} - 2\sqrt{\frac{\Delta}{\omega v}}\ , \qquad /3/$$

$$\Theta_2 = \frac{2R}{v} + \frac{\Delta}{2\omega R} + 2\sqrt{\frac{\Delta}{\omega v}}\ . \qquad /4/$$



1. ábra
Egyenesrésü szelektor áteresztési függvénye
$v > 4\,\frac{\omega R^2}{\Delta}$ neutronsebességek esetén

A kritikus

$$v_k = \frac{\omega R^2}{\Delta} \qquad /5/$$

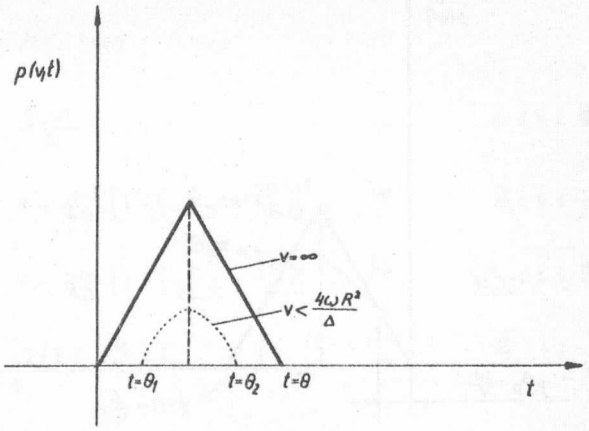
sebességnél kisebb sebességü neutronokat az egyenesrésü szelektor nem engedi át.

A $p(v,t)$ függvény alakját szemlélteti $v \geq 4\,\frac{\omega R^2}{\Delta}$ sebességek esetén az 1. ábra.

Ha $v \leq 4\,\frac{\omega R^2}{\Delta}$, akkor a 2. ábra ad megfelelő képet. Megjegyezzük, hogy a neutron-impulzus teljes szélessége

$$\tau_n = \begin{cases} \frac{\Delta}{\omega R}, & \text{ha} \quad v \geq 4 v_k \\ 4\left(\sqrt{\frac{\Delta}{\omega v}} - \frac{R}{v}\right), & \text{ha} \quad v \leq 4 v_k . \end{cases} \qquad /6/$$

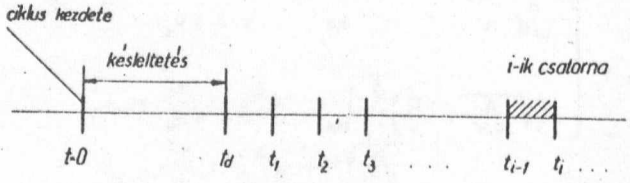
Látható, hogy $v < 4v_k$ esetében a neutron-impulzus teljes szélessége függ a neutronok sebességétől.



2. ábra
Egyenesrésű szelektor áteresztési függvénye
$v < 4\,\frac{\omega R^2}{\Delta}$ neutronsebességek esetén

ad b/ A neutronok a szaggatón áthaladva L hosszuságu röppályán sebességük szerint időben szétválnak és ennek a szétválásnak megfelelő időpontban érik el a neutrondetektort. Tegyük fel, hogy a detektorban megtett ut elhanyagolható a röppályához képest. Legyen a detektor hatásfoka $\varepsilon = \varepsilon(v)$.

ad c/ A kisérleteknél használt időanalizátor sajátossága, hogy egy analizálási ciklusban csatornánként legfeljebb egy eseményt regisztrálhat /telitési effektust mutat/. Az analizálási ciklus kezdetét a neutronnyaláb áthaladásának kezdetéhez szinkronizálhatjuk. Egy analizálási ciklus vázlatos képe látható a 3. ábrán.



3. ábra
Egy analizálási ciklus időbeli lefolyása

2/ Az alapösszefüggések meghatározása

Határozzuk meg azon neutronok számát, amelyek a $(t', t'+dt')$ időközben lépnek ki a szaggatóból és amelyeket a detektor a $(t, t+dt)$ időközben detektál. Nyilván a

$$w(t',t)dt'dt = S\int_0^\infty \varepsilon(v)\phi(v)p(v,t')\delta(t-t'-\frac{L}{v})dv\,dt'dt \qquad /7/$$

kifejezés adja meg a keresett mennyiséget. Mivel a $(0,\Theta)$ intervallumban minden időpillanatban áthaladnak neutronok, ezért a $(t, t+dt)$ időközben regisztrált neutronok száma:

$$i_0(t)dt = \int_0^\Theta w(t',t)\,dt'dt \,. \qquad /8/$$

Ennek alapján könnyen felírhatjuk annak a valószínüségét, hogy az időanalizátor (t_{i-1}, t_i) intervallumban müködő i -ik csatornáján egy analizálási ciklus alatt nem halad át detektorból származó feszültség-impulzus. Ez a valószínüség:

$$p_i = \exp\left(-\int_{t_{i-1}}^{t_i} i_0(t)\,dt\right) \qquad /9/$$

és

$$1-p_i = q_i$$

annak a valószínüsége, hogy egy analizálási ciklus alatt legalább egy neutron által kiváltott impulzus jut az i -ik csatornába. Ha az analizálási ciklusok száma N , akkor

$$P_N(n_i) = \binom{N}{n_i} p_i^{N-n_i} q_i^{n_i} \qquad /10/$$

annak a valószínüsége, hogy az i -ik csatornán n_i impulzus haladt át a tárolóba. Végeredményben N analizálási ciklus alatt annak a valószínüsége, hogy az analizátor első csatornáján n_1 , második csatornáján n_2 és igy tovább, a k -ik csatornáján n_k impulzus haladjon át, nem más, mint

$$P_N(n_1,\ldots,n_k) = \prod_{i=1}^{k} P_N(n_i) \,. \qquad /11/$$

Abban az esetben, ha $N \gg n_i$ és $N \gg 1$ felirhatjuk, hogy

$$P_N(n_i) \sim \frac{(Nq_i)^{n_i}}{n_i!} e^{-Nq_i} . \qquad /12/$$

Azokban az esetekben, amikor

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} i_o(t)dt << 1$$

további egyszerűsítés végezhető el, hiszen

$$q_i \sim \int_{t_{i-1}}^{t_i} i_o(t)dt . \qquad /13/$$

Helyezzük el közvetlenül a szaggató után a d rétegvastagságu anyagmintát, amelynek $\Sigma(v)$ makroszkópikus teljes hatáskeresztmetszetét kivánjuk meghatározni. Felirhatjuk, hogy

$$i(t) = S \int_0^\infty \int_0^\Theta \varepsilon(v)\phi(v)p(v,t')e^{-\Sigma(v)d}\delta(t-t'-\frac{L}{v})dt'dv . \qquad /14/$$

Vezessük be uj változóként a

$$t'' = \frac{L}{v}$$

mennyiséget.

$$dv = -L\frac{dt''}{t''^2}$$

alapján felirhatjuk, hogy

$$i(t) = SL \int_0^\infty \int_0^\Theta \varepsilon(t'')\phi(t'')p(t'',t')e^{-\Sigma(t'')d}\delta(t-t'-t'')\frac{dt'}{t''^2}dt'' . \qquad /15/$$

Megjegyezzük, hogy az egyszerüség kedvéért az alábbi átjelöléseket használtuk:

$$\phi(v) \rightarrow \phi(t''), \quad \varepsilon(v) \rightarrow \varepsilon(t''), \quad p(v,t') \rightarrow p(t'',t'), \quad \Sigma(v) \rightarrow \Sigma(t'').$$

A δ függvény t'' szerinti integrálását elvégezve kapjuk, hogy

$$i(t) = SL \int_0^{\Theta} \varepsilon(t-t')\phi(t-t')p(t-t',t')e^{-\Sigma(t-t')d} \frac{dt'}{(t-t')^2} . \qquad /16/$$

Tegyük fel, hogy $\Sigma(t-t')$ argumentumának gyenge függvénye. Fejtsük sorba $\Sigma(t-t')$ -t a

$$T_i = t_{i-1} + \frac{1}{2}\vartheta = t_d + (i-1)\vartheta + \frac{1}{2}\vartheta \qquad /17/$$

időpont körül / $\vartheta = t_i - t_{i-1}$ a választott csatornaszélesség és t_d a késleltetési idő/. Felirhatjuk, hogy

$$\Sigma(t-t') \sim \Sigma(T_i) + (t-t'-T_i)\Sigma'(T_i) . \qquad /18/$$

Ilyen módon,

$$e^{-\Sigma(t-t')d} \sim e^{-\Sigma_i d}\left[1 - d(t-t'-T_i)\Sigma'_i\right],$$

ahol $\Sigma_i = \Sigma(T_i)$ és $\Sigma'_i = \Sigma'(T_i)$.

Használjuk ki a sorfejtés adta lehetőséget és bontsuk fel a /16/ kifejezést több tagra:

$$i(t) \sim i_0(t)e^{-\Sigma_i d}(1 + \Sigma'_i T_i d) - j_0(t)e^{-\Sigma_i d}\Sigma'_i d, \qquad /19/$$

ahol

$$i_0(t) = SL \int_0^{\Theta} \varepsilon(t-t')\phi(t-t')p(t-t',t')\frac{dt'}{(t-t')^2} , \qquad /20/$$

$$j_0(t) = SL \int_0^{\Theta} \varepsilon(t-t')\phi(t-t')p(t-t',t')\frac{dt'}{t-t'} \qquad /21/$$

A p_i kiszámításához, mint láttuk, az

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} i(t)dt \sim e^{-\Sigma_i d}(1 + \Sigma'_i T_i d)\int_{t_{i-1}}^{t_i} i_0(t)dt - e^{-\Sigma_i d}\Sigma'_i d \int_{t_{i-1}}^{t_i} j_0(t)dt \qquad /22/$$

integrál-értékre van szükségünk.

Azokban az esetekben, amikor a teljes hatáskeresztmetszet energiafüggése nem erős, a /22/ kifejezés nagymértékben egyszerüsödik. Feltehetjük, hogy az időanalizátor csatornaszélessége által meghatározott energiaintervallumban a $\Sigma(v)$ állandó. Igy a folytonosan változó $\Sigma(v)$ függvényt lépcsőfüggvénnyel helyettesithetjük, ahol a lépcsők a helyesen megválasztott csatornaszélességhez igazodnak. Ekkor

$$p_i = \exp(-B_i e^{-\Sigma_i d}) , \qquad /23/$$

ahol

$$B_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} i_0(t)dt . \qquad /24/$$

A következőkben vizsgálatainkat erre az egyszerü esetre korlátozzuk és nem adunk utmutatást arra, hogyan célszerü a csatornaszélességet megválasztani, mivel ez utóbbi kérdés szorosan összefügg a meghatározandó $\Sigma(v)$ energiafüggésének természetével.

3/ A mérési adatok kiértékelése

Végezzünk méréseket $d_1, d_2, \ldots, d_r$ rétegvastagságok mellett és határozzuk meg annak a valószinüségét, hogy a j -ik rétegvastagságnál N_j analizálási ciklus alatt az i -ik csatornán n_{ji} impulzus halad át. Ez nyilván a

$$P_{N_j}(n_{ji}) = \binom{N_j}{n_{ji}} q_{ji}^{n_{ji}} p_{ji}^{N_j - n_{ji}} \qquad /25/$$

kifejezéssel adható meg. A következőkben csak az i -ik csatornán áthaladó impulzusok számából levonható következtetésekkel foglalkozunk, ezért hagyjuk el az i indexet és irjuk fel a hatáskeresztmetszet becslésére szolgáló eloszlásfüggvényt:

$$P(n_1, \ldots, n_r) = \prod_{j=1}^{r} P_{N_j}(n_j) . \qquad /26/$$

Vezessük be a következő jelöléseket

$$\Sigma = a_1 , \quad B = a_2 . \qquad /27/$$

A $P(n_1,\dots,n_r) = P(\underline{a},\underline{n})$ -ből az a_1 és a_2 paraméterekre a maximális valószínüség módszere alapján a

$$\frac{\partial \ln P(\underline{a},\underline{n})}{\partial a_\nu} = F_\nu(\underline{a},\underline{n}) = 0 \qquad /28/$$

$$(\nu = 1,2)$$

egyenleteket kielégitő

$$a_1 = \tilde{a}_1 \quad , \quad a_2 = \tilde{a}_2$$

becsléseket adhatjuk. A fenti kifejezésben szereplő $F_\nu(\underline{a},\underline{n})$ függvények alakja a következő:

$$F_\nu(\underline{a},\underline{n}) = \sum_{j=1}^{r} \left(\frac{N_j - n_j}{p_j} - \frac{n_j}{q_j} \right) \frac{\partial p_j}{\partial a_\nu} \quad . \qquad /29/$$

$$(\nu = 1,2)$$

Felhasználva a $p_j = \exp(-a_2 e^{-a_1 d_j})$ kifejezést, felirhatjuk, hogy

$$F_1 = a_2 \sum_{j=1}^{r} \left(N_j - \frac{n_j}{1-p_j} \right) d_j e^{-a_1 d_j} \quad , \quad F_2 = -\sum_{j=1}^{r} \left(N_j - \frac{n_j}{1-p_j} \right) e^{-a_1 d_j} \quad . \qquad /30/$$

Foglalkozzunk részletesebben a gyakorlatilag fontos $r = 2$ esettel. Ekkor az

$$\left(N_1 - \frac{n_1}{1-p_1} \right) d_1 e^{-a_1 d_1} + \left(N_2 - \frac{n_2}{1-p_2} \right) d_2 e^{-a_1 d_2} = 0$$

$$\left(N_1 - \frac{n_1}{1-p_1} \right) e^{-a_1 d_1} + \left(N_2 - \frac{n_2}{1-p_2} \right) e^{-a_1 d_2} = 0 \qquad /31/$$

egyenletrendszert kell megoldani. A megoldásnak adott d_2 mellett bármely véges, d_2 -től különböző d_1-re érvényesnek kell lennie. Ezért

$$N_1 - \frac{n_1}{1-p_1} = 0 \quad , \qquad N_2 - \frac{n_2}{1-p_2} = 0 \quad . \qquad /32/$$

A

$$p_1 = 1 - \frac{n_1}{N_1} \qquad \text{és} \qquad p_2 = 1 - \frac{n_2}{N_2} \qquad /33/$$

felhasználásával a teljes hatáskeresztmetszet

$$\tilde{a}_1 = \frac{1}{d} \ln \frac{\ln\left(1 - \frac{n_1}{N_1}\right)}{\ln\left(1 - \frac{n_2}{N_2}\right)} \quad , \qquad /34/$$

ahol

$$d = d_2 - d_1 \ .$$

Az anyagmintán beeső /egy ciklusban egy csatornára jutó/ neutronok száma:

$$\tilde{a}_2 = -e^{\tilde{a}_1 d_1} \ln\left(1 - \frac{n_1}{N_1}\right) = -e^{\tilde{a}_1 d_2} \ln\left(1 - \frac{n_2}{N_2}\right) \ . \qquad /35/$$

Ha $\frac{n_1}{N_1} << 1$ és $\frac{n_2}{N_2} << 1$ a /34/ alatti kifejezés az ismert

$$\tilde{a}_1 \sim \frac{1}{d} \ln \frac{n_1 N_2}{n_2 N_1} \qquad /36/$$

összefüggéssé egyszerüsödik, mig

$$\tilde{a}_2 \sim \frac{n_1}{N_1} \left(\frac{n_1 N_2}{n_2 N_1}\right)^{\frac{d_1}{d_2 - d_1}} \ . \qquad /37/$$

Határozzuk meg az $\tilde{a}_1$ szórásnégyzetét. A maximális valószinüség módszere szerint

$$\langle (\delta \tilde{a}_1)^2 \rangle = -\frac{\langle F_{22}(\underline{a}, \underline{n}) \rangle}{D} \quad , \qquad /38/$$

ahol D az $\langle F_{\nu\mu}(\underline{a}, \underline{n}) \rangle$ elemekből álló determináns és

$$F_{\nu\mu}(\underline{a}, \underline{n}) = \frac{\partial^2 \ln P(\underline{a}, \underline{n})}{\partial a_\nu \partial a_\mu} \qquad (\nu, \mu = 1,2) \ . \qquad /39/$$

A mi esetünkre alkalmazva:

$$\langle (\delta \tilde{a}_1)^2 \rangle = \frac{1}{(d_2 - d_1)^2 a_2^2} \sum_{j=1}^{2} \frac{1}{A_j} \quad , \qquad /40/$$

ahol

$$A_j = N_j \frac{\rho_j}{1 - \rho_j} e^{-2a_1 d_j} \ . \qquad /41/$$

Ebben a kifejezésben az a_1 és a_2 értékeit $\tilde{a}_1$ és $\tilde{a}_2$ becslésekkel helyettesithetjük. A /40/ alatti kifejezés különösen egyszerü, ha $\tilde{a}_1$ és $\tilde{a}_2$ becslésekben $\frac{n_1}{N_1} << 1$ és $\frac{n_2}{N_2} << 1$ hatását figyelembe vesszük. Ekkor

$$\langle(\delta\tilde{a}_1)^2\rangle \simeq \frac{1}{(d_2-d_1)^2}\left(\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}\right) .$$

4/ Az optimális neutron-intenzitás meghatározása

Mivel az analizátor bármelyik csatornája egy analizálási ciklusban legfeljebb csak egy feszültségimpulzust regisztrálhat, várható, hogy a szórásnégyzet minimumot mutat az a_2 függvényében. Egyszerüség kedvéért legyen

$$d_1 = 0 \quad , \quad d_2 = d .$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$u = e^{-a_1 d} \quad , \quad \frac{N_1}{N_2} = v \quad \text{és} \quad a_2 = x . \qquad /42/$$

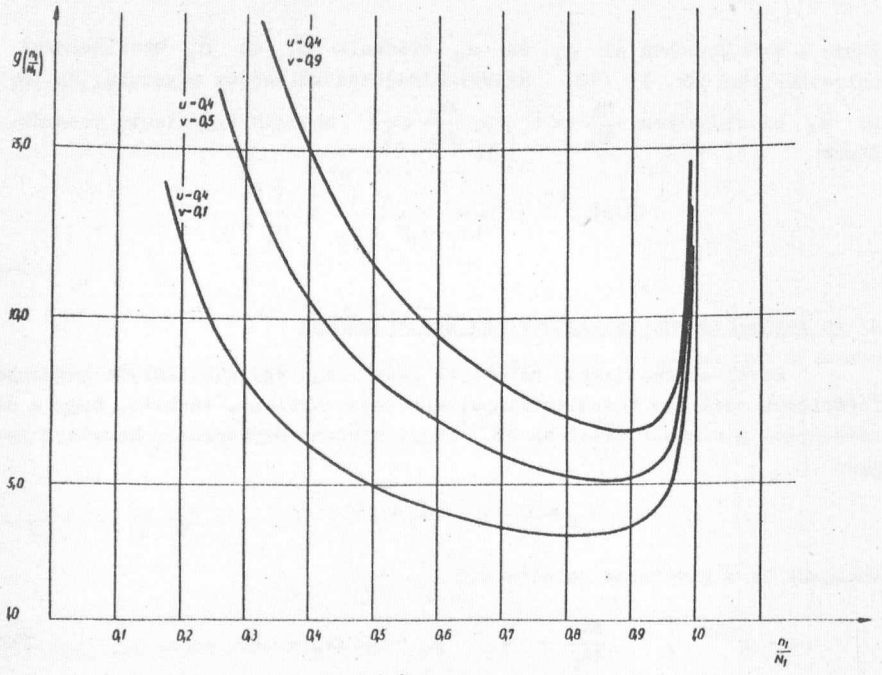
Ekkor /40/-ből

$$\langle(\delta\tilde{a}_1)^2\rangle = \frac{1}{N_1 d^2}\,\gamma(x) \quad , \qquad /43/$$

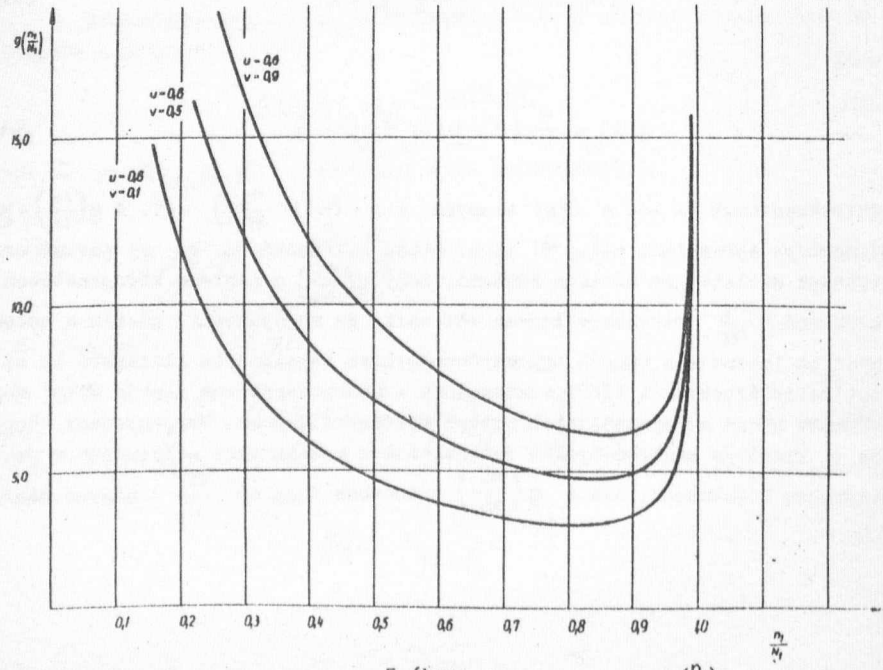
ahol

$$\gamma(x) = \frac{1}{x^2}\left(e^x - 1 + v\,\frac{e^{xu}-1}{u^2}\right) . \qquad /44/$$

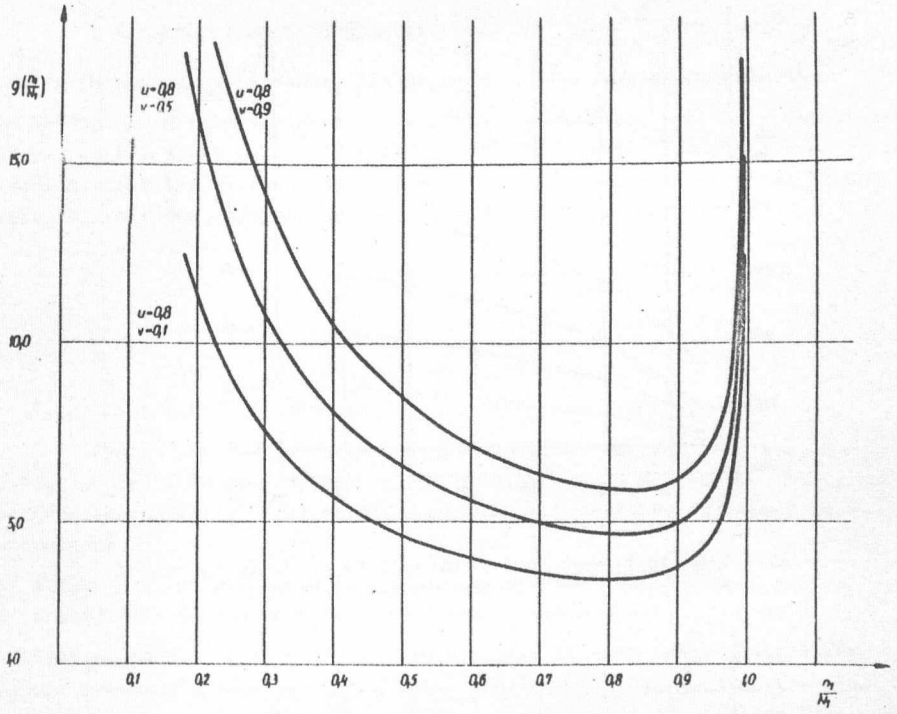
Helyettesitsük x-et a /35/ alapján $\tilde{x} = -\ln\left(1-\frac{n_1}{N_1}\right)$-el. A $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right) = \gamma(\tilde{x})$ függvényt ábrázoltuk a 4., 5. és 6. ábrán különböző u és v paraméterértékek mellett. Az ábrákon látható, hogy $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ a minimum környezetében csökkenő $\frac{n_1}{N_1}$ értékekre lassan változik. Ez megnyugtató, miután a beeső neutron intenzitás csupán egy mérőcsatornára vonatkozóan állitható be az optimális értékre. A többi csatornában a neutronspektrum alakja által megszabott módon az optimálistól eltérő értékeket kapunk. Megjegyezzük, hogy ha u kicsi /a neutron-nyaláb intenzitása a mintán való áthaladáskor jelentősen lecsökken/, akkor $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ erősebben függ az $\frac{n_1}{N_1}$ hányadostól.



4. ábra
A hatáskeresztmetszet szórásnégyzetével arányos $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ függvény $u = 0,4$ és $v = 0,1, 0,5, 0,9$ paraméterértékek mellett



5.ábra
A hatáskeresztmetszet szórásnégyzetével arányos $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ függvény $u = 0,6$ és $v = 0,1, 0,5, 0,9$ paraméterértékek mellett

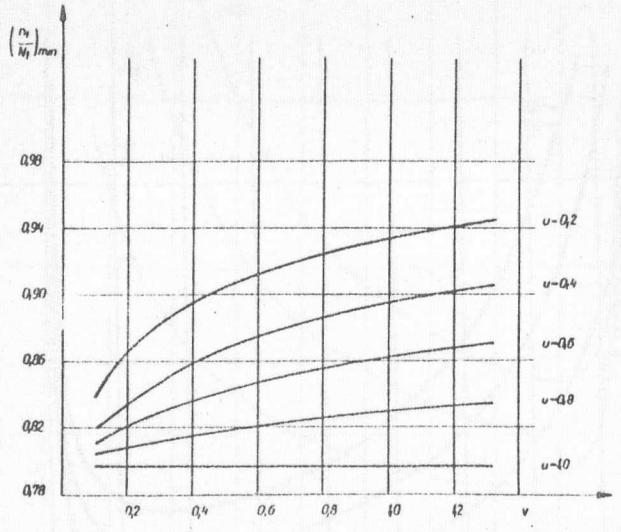


6.ábra
A hatáskeresztmetszet szórásnégyzetével arányos $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ függvény $u = 0,8$ és $v = 0,1,\ 0,5,\ 0,9$ paraméterértékek mellett

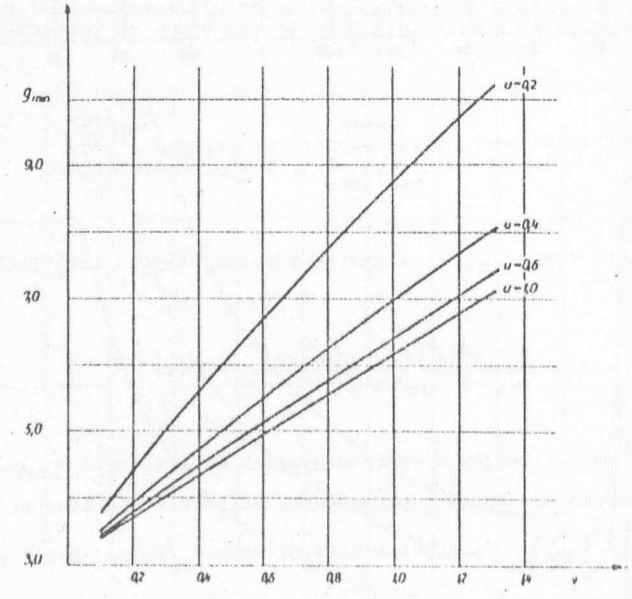
Határozzuk meg a $\gamma(x)$ függvény minimum helyét. Azt találjuk, hogy az

$$x = \frac{2}{u}\,\frac{u^2(e^x-1)+v(e^{xu}-1)}{ue^x+ve^{xu}} = \varphi(x) \qquad /45/$$

egyenlet gyökei szolgáltatják a szórásnégyzetet minimalizáló $x_{min} = (a_2)_{min}$ értéket. A különböző u és v paraméterek mellett meghatározott x_{min} gyökökhöz tartozó $\left(\frac{n_1}{N_1}\right)_{min}$ értékeket ábrázoltuk a 7. ábrán. Minél nagyobb az $\frac{N_1}{N_2} = v$ hányados, annál nagyobb $\left(\frac{n_1}{N_1}\right)_{min}$ viszony engedhető meg.



7.ábra
Az optimális bemenő neutronintenzitás $\left(\frac{n_1}{N_1}\right)_{min}$ különböző u és v paraméterértékek mellett



8.ábra
A szórásnégyzettel arányos $9\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ függvény értéke az $\left(\frac{n_1}{N_1}\right)_{min}$ helyen különböző u és v paraméterértékek mellett

A 8. ábrán a szórásnégyzettel arányos $g\left(\frac{n_1}{N_1}\right)$ függvény $\left(\frac{n_1}{N_1}\right)_{min}$ helyen felvett g_{min} értékeit láthatjuk a v paraméter függvényében, különböző u értékek mellett. Az ábráról leolvasható, hogy ha a szórásnégyzetet egy adott határ alá akarjuk szoritani, akkor optimális beeső neutronintenzitás mellett adott anyagminta vastagság esetén mennyivel tovább kell mérnünk anyagmintával, mint minta nélkül.

5/ A háttér figyelembevétele

Eddigi meggondolásainknál figyelmen kivül hagytuk azt, hogy a detektor az anyagmintán szóródás nélkül áthaladt lassu neutronokon kivül un. háttér-neutronokat is regisztrál. A háttér-neutronok két forrásból származhatnak:

a/ a környezet által reflektált kóbor neutronokból és
b/ a szaggatón és anyagmintán átmenő gyors neutronokból,

amelyek a szaggató résének zárása után jutnak át és a lassu neutronokkal együtt érkeznek a detektorhoz. A kóbor neutronoktól származó háttér minden csatornában állandónak tekinthető. A szaggatón zárás után átjutó neutronoktól származó háttér csatornánként különböző járulékokat jelenthet, mivel a szaggató rotorja különböző záró helyzetekben különböző abszorpciót okoz.

Célszerü nyitás előtt és után anyagmintával és anélkül külön méréssel meghatározni a háttér-neutronok intenzitását.

A mérések kiértékelésénél a háttér-neutronokat a következőképp vehetjük figyelembe. Egy ciklus alatt egy kiválasztott csatornának megfelelő időközben a detektorra eső neutronok száma nyilván

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} i(t)dt = e^{-\Sigma_i d_j} \int_{t_{i-1}}^{t_i} i_0(t)dt + h_{ij} \quad , \qquad /46/$$

ahol h_{ij} a d_j rétegvastagsággal történő mérésnél az i -ik csatornán egy ciklus alatt áthaladó háttér-impulzusok száma.

A p_{ji} valószinüségre ennek megfelelően most

$$p_{ji} = \exp\left\{-B_i e^{-\Sigma_i d_j} - h_{ij}\right\} \qquad /47/$$

adódik.

A /47/ összefüggést figyelembevéve egy tetszőleges mérőcsatornára /az i indexet nem irjuk ki/:

$$p_j = \exp\left\{-a_2 e^{-a_1 d_j} - h_j\right\} = 1 - \frac{n_j}{N_j} \qquad /48/$$

$$(j = 1,2)$$

A háttér-csatornákban viszont $a_2 = 0$, ezért

$$p_j^0 = e^{-h_j} = 1 - \frac{n_j^0}{N_j^0} \qquad /49/$$

$$(j = 1,2)$$

Itt n_j^0 az N_j^0 ciklus alatt, d_j vastagságú mintával a háttér-csatornában mért beütésszám.

/48/ és /49/ -et figyelembevéve a hatáskeresztmetszetre a következő becslés adható meg:

$$\tilde{a}_1 = \frac{1}{d_2 - d_1} \ln \frac{\ln\left(1 - \frac{n_1}{N_1}\right) - \ln\left(1 - \frac{n_1^0}{N_1^0}\right)}{\ln\left(1 - \frac{n_2}{N_2}\right) - \ln\left(1 - \frac{n_2^0}{N_2^0}\right)} , \qquad /50/$$

mig a becslés szórásnégyzete

$$\langle\langle(\delta\tilde{a}_1)^2\rangle\rangle = \frac{1}{(d_2 - d_1)^2}\left\{\frac{1}{N_1\left(\frac{N_1}{n_1} - 1\right)\left[\ln\left(1 - \frac{n_1}{N_1}\right) - \ln\left(1 - \frac{n_1^0}{N_1^0}\right)\right]^2} + \frac{1}{N_2\left(\frac{N_2}{n_2} - 1\right)\left[\ln\left(1 - \frac{n_2}{N_2}\right) - \ln\left(1 - \frac{n_2^0}{N_2^0}\right)\right]^2}\right\} \qquad /51/$$

Vizsgáljuk meg, miként változtatja a beeső neutronok optimális intenzitására vonatkozó kikötést a háttér figyelembevétele. Kiindulva ugyanis a szórásnégyzet /51/ kifejezéséből $\gamma(x)$ -re a következőt kapjuk:

$$\gamma(x) = \frac{1}{x^2}\left(e^{x+h_1} - 1 + v\,\frac{e^{xu+h_2} - 1}{u^2}\right) ,$$

ahol

$$e^{h_1} = \frac{1}{1 - \frac{n_1^0}{N_1^0}}$$

és

$$e^{h_2} = \frac{1}{1 - \frac{n_2^0}{N_2^0}} .$$

Ha az egy ciklusra eső háttér-neutronok száma csupán néhány ezrelék, akkor a beeső neutronok optimális intenzitására vonatkozó kikötést a háttér figyelembevétele nem módositja. Ha azonban a hasznos neutronok intenzitása is kicsi /összemérhető a háttér-neutronok intenzitásával/, akkor az optimális intenzitás nem is érhető el.

Irodalom

Hraskó P.: KFKI Közl., 8, 225 /1960/

Érkezett: 1962 dec.14.

KFKI Közl. 11.évf. 1. szám, 1963.

AZ IDEALIS SPINHULLÁM ELMÉLET HŐMÉRSÉKLETI RENORMÁLÁSA*/

Irta: Praveczki Endre

Összefoglalás

Ismeretes, hogy az ideális spinhullám elmélet csak az abszolut zérus fok környékén, alacsony hőmérsékleteken irja jól le a Heisenberg-ferromágnest: a ferromagnonok dinamikai és kinematikai kölcsönhatásai magasabb hőmérsékleteken igen erősekké válnak.

Több olyan eljárás ismeretes, amellyel - megjavitva a lineáris spinhullám elmélet eredményeit -, ki lehet terjeszteni az érvényességi határt. Ezek közül az egyik legátfogóbb a statisztikai Green-függvények használatán alapuló módszer, amelyet Bogoljubov és Tyablikov alapozott meg.

Problémák lépnek fel azonban a Green-függvény módszer alkalmazásánál akkor, ha olyan mennyiséget akarunk meghatározni, amely a magasabbrendü korrelációkat is tartalmazza /neutronszórási keresztmetszet, belső energia, stb./.

Dolgozatunkban kisérletet teszünk arra, hogy ezt a problémát bizonyos közelitésben megoldjuk: észre véve a Green-függvény módszerrel kapott eredmények formai hasonlóságát az ideális spinhullám elmélet alapján kapottakkal - renormáljuk bizonyos paraméterekkel az ideális spinhullám elmélet alapösszefüggéseit oly módon, hogy a Green-függvények segitségével kapott eredményekhez jussunk. Az igy renormált ideális spinhullám elmélet alapján meghatározzuk a magasabbrendü korrelációs függvényeket tartalmazó mennyiségeket is. A kapott eredményeket összehasonlitjuk az irodalomból ismert egyéb eredményekkel.

1/ Bevezetés

A ferromágneses anyagok legfontosabb jellemzőit, a mágnesezettséget, szuszceptibilitást, belső energiát, neutronszórási keresztmetszetet, stb. a ferromágnesség elméletének kvantummechanikai modellje, a Heisenberg-modell [1] alapján mindezideig nem sikerült pontosan meghatározni, ezért került sor a különböző közelitő módszerek alkalmazására.

A Heisenberg-modellre alkalmazott közelitő módszerek közül az egyik legismertebb a spinhullám elmélet amely Bloch [2] azon felismerésén alapul, hogy az alacsony hőmérsékleteken lefolyó ferromágneses jelenségeket ugy foghatjuk fel, mint energiával és kvázi-impulzussal rendelkező kvázi-részecskék, a ferromagnonok, más néven spinhullámok megnyilvánulásait. Bloch egymással kölcsönhatásban nem álló, Bose tipusu kvázi-részecskéknek tekintette a ferromagnonokat, és alacsony hőmérséklet mellett már ezzel az elmélettel /ideális spinhullám elmélet/ jó közelitő eredményhez jutottak a mágnesezettség, belső energia, neutron-

*/ Dolgozatunk tartalmát röviden közöltük: Physics Letters, /1963 szeptemberi szám/.

szórási keresztmetszet, és egyéb mennyiségekre vonatkozólag. Felmerült azonban hamarosan az a kívánság, hogy a spinhullám elmélet érvényességi határait kiterjesszék magasabb hőmérsékletek felé.

Ebből a kívánságból a ferromagnonok olyan elmélete született meg, amely még mindig Bose tipusuaknak tekinti őket, de számot ad az un. dinamikai kölcsönhatásról. /A másik az un. kinematikai kölcsönhatás a Bose-tipustól való eltérést jelenti./ A ferromagnonok dinamikai kölcsönhatásának két elmélete létezik. Az egyik Holstein, Primakoff [3] és Oguchi [4] , a másik pedig Dyson [5] nevéhez füződik. A különbség az, hogy mig Dyson szerint csak pár-kölcsönhatások lépnek fel, addig Holstein, Primakoff és Oguchi elmélete kettőnél több ferromagnon kölcsönhatásáról is számot ad.

A ferromagnonok dinamikai kölcsönhatásainak mindkét elmélete alapján sikerült kiterjeszteni a spinhullám elmélet érvényességi határát kb. a Curie-hőmérséklet feléig, az érvényességi határ további kiterjesztésére irányuló próbálkozások azonban nem jártak sikerrel: magasabb hőmérsékleteken már nem lehet elhanyagolni a kinematikai kölcsönhatást.

Uj oldalról közelitették meg a problémát azok a szerzők, akik a perturbációs módszer helyett renormalizációs eljárást alkalmaztak. E szerzők közül elsőnek Bogoljubovot és Tyablikovot [6] kell megemlitenünk, akik a statisztikus fizikai Green-függvények segitségével olyan eredményt kaptak a mágnesezettségre vonatkozólag, amely mind az alacsony, mind pedig a magas hőmérsékleteken jó közelitésnek tekinthető. Az általuk kapott eredményekhez később más szerzők is eljutottak: Englert [7] a véletlen fázisok módszerével - hangsulyozva a renormalizálási jelleget - majd elegáns módon Ginsburg és Fain [8] , és végül Mori és Kawasaki [9] .

Az emlitett szerzők az $S = 1/2$ esetre szoritkoztak. Igen fontos lépést jelent ezért Tahir-Kheli és Ter Haar dolgozata [10] , amelyben általános S mellett eljutnak olyan eredményekhez, amilyeneket az előbbi szerzők $S = 1/2$ esetén kaptak.

A fentiek után felmerül az az igény, hogy a mágnesezettségen /és a belőle származó szuszceptibilitáson/ kivül hasonló közelitésben egyéb mennyiségeket: a belső energiát, fajhőt, neutron szórási keresztmetszetet, stb. is kiszámitsuk. Az ilyen irányu probálkozásokhoz azonban az eddigiek nem jelentenek teljesen elégséges alapot.

A probléma tehát a következő: fogalmazzuk meg az ideális spinhullám elmélet általános renormálását ugy, hogy annak alapján

a mágnesezettségen kivül egyéb fontos mennyiségeket is meghatározhassunk a Bogoljubov-Tyablikov közelitéshez hasonló pontossággal.

Dolgozatunkban ezzel a problémával fogunk foglalkozni. A mozgásegyenlet linearizálása után megfogalmazzuk az ideális spin-hullám elmélet egyik lehetséges renormálását, majd az általános renormálás után, a ferromagnonok energiáinak Bogoljubov-Tyablikov közelitését véve meghatározzuk a ferromagnonok rendszerének belső energiáját, szabad energiáját, entrópiáját, és a neutronszóródási keresztmetszetét.

2/ Az általános spinhullám elmélet

Ismeretes, hogy az izotróp ferromágneses anyagok kvantummechanikai modelljének, a Heisenberg-modellnek Hamilton-operátora a következő alakba irható:

$$H=-\mu g \mathcal{H} \sum_k S_k^0 - \sum_{k\ell} J\left[S_k^+ S_\ell^- + S_k^0 S_\ell^0\right] , \qquad /1/$$

ahol $S_k^\pm = S_k^x \mp i S_k^y$, $S_k^0 = S_k^z$, amelyeket az alább' összefüggések határoznak meg:

$$\left[S_k^\pm , S_\ell^0\right] = \pm S_k^\pm \delta_{k\ell}$$
$$\left[S_k^- , S_\ell^+\right] = 2 S_k^0 \delta_{k\ell} \qquad /2/$$

$$\frac{1}{2} S_k^+ S_k^- + \frac{1}{2} S_k^- S_k^+ + S_k^0 S_k^0 = S(S+1) \qquad /3/$$

A /2/ csere-relációk és /3/ azt adja, hogy S_k^0 saját értékei a $-S, -S+1, \ldots S-1, S$ számok. Legyenek b_k^+ és c_k olyan operátorok, amelyeket a következő összefüggések definiálnak:

$$\left[c_k , b_\ell^+\right] = \rho_k \delta_{k\ell} , \qquad \rho_k = 1 - \frac{2S+1}{(2S)!} \prod_{\nu=0}^{2S-1} \left(b_k^+ c_k - \nu\right)$$

$$b_k^+ c_k = c_k^+ b_k \qquad \left(b_k^+\right)^{2S+1} = \left(c_k\right)^{2S+1} = 0 \qquad /4/$$

Beláthatjuk, hogy a belőlük képzett $m_k = b_k^+ c_k$ operátor saját értékei a nem negativ $0, 1, \ldots 2S$ egész számok. Ez pedig azt mutatja, hogy az $S \to \infty$ esetén Bose-operátorokká váló b_k^+, c_k, m_k operátorok és az $S_k^\pm$, S_k^0 spinoperátorok szoros összefüggésbe hozhatók.

Irhatjuk mindenek előtt, hogy $S_k^o = S - m_k$. Abból a célból, hogy az $S_k^{\pm}$ operátorokat is összefüggésbe hozhassuk b_k^+, c_k - val - tekintsük a /2/ és /3/-ból kapható

$$S_k^+ S_k^- = (S - S_k^o)(1 + S + S_k^o)$$

összefüggést. Ez az előbbi összefüggés és /4/ segitségével igy irható:

$$S_k^+ S_k^- = \sqrt{2S}\, b_k^+ \left(1 - \frac{m_k}{2S}\right) c_k \quad .$$

Két lehetőség kinálkozik arra, hogy a jobb oldalt is szétválasszuk S_k^+ és S_k^- -nek megfelelően. Az egyik:

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, b_k^+ \left(1 - \frac{m_k}{2S}\right)^{1/2} ,$$

$$S_k^- = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{m_k}{2S}\right)^{1/2} c_k , \qquad /5a/$$

a másik pedig:

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, b_k^+$$

$$S_k^- = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{m_k}{2S}\right) c_k . \qquad /5b/$$

Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy mind az /5a/, mint az /5b/ választással eleget teszünk a /2/ és /3/ összefüggésnek. Egyetlen követelmény, amit ki kell még elégitenünk - az, hogy S_k^+ és S_k^- hermitikus adjungáltjai legyenek egymásnak. Ekkor az /5a/ választás esetén a

$$b_k = c_k$$

összefüggést, az /5b/ választás esetén pedig a

$$b_k = \left(1 - \frac{m_k}{2S}\right) c_k$$

összefüggést kell kielégiteniök a bevezetett operátoroknak.

Az /5a/ választással a spinhullám elmélet azon reprezentációjához jutunk, amelyet Holstein és Primokoff fogalmazott meg először: a /4/ cserereláció az Izumov által bevezetett cserelációkba megy át [11] .

Az /5b/ választás - mint azt egy előző dolgozatunkban megmutattuk [12] - az általános spinhullám elmélet Dyson reprezentációjához vezet. A b_k^+ , c_k operátorokból a

$$b_\kappa^+ = N^{-1/2} \sum_k e^{ik\kappa}\, b_k^+$$

$$x_\kappa = N^{-1/2} \sum_k e^{-ik\kappa}\, c_k$$

transzformációkkal kaphatjuk meg azt a b_κ^+ operátort, amely a ferromagnonok keltő operátora, és azt a c_κ operátort, amely a ferromagnonok magsemmisitő operátora.

Az egyszerüség kedvéért a következőkben csak a Dyson reprezentációt fogjuk használni. Állitsuk össze a felhasználandó alapösszefüggéseket:

$$H = U + \sum_\kappa E_\kappa b_\kappa^+ c_\kappa + \sum_{\mu\nu\kappa} \Gamma_{\mu\nu}^\kappa b_{\mu+\kappa}^+ b_{\nu-\kappa}^+ c_\mu c_\nu$$

$$b_\kappa^+ = N^{-1/2} \sum_k e^{ik\kappa} b_k^+$$

$$c_\kappa = N^{-1/2} \sum_k e^{-ik\kappa} c_k$$

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, b_k^+ \qquad /6/$$

$$S_k^- = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{m_k}{2S}\right) c_k$$

$$S_k^0 = S - m_k \quad , \quad m_k = b_k^+ c_k$$

$$[c_k, b_\ell^+] = \vartheta_k \delta_{k\ell} \quad , \quad \vartheta_k = 1 - \frac{2\varrho+1}{(2S)!} \prod_{\nu=0}^{2S-1} (m_k - \nu) \quad , \quad (b_k^+)^{2S+1} = (c_k)^{2S+1} = 0,$$

$$U = -N\left\{\mu g \mathcal{H} S + J(0) S^2\right\} \quad , \quad \Gamma_{\mu\nu}^\kappa = (SN)^{-1}\left[\tfrac{1}{2} E_{\kappa+\mu} + \tfrac{1}{2} E_{\nu-\kappa} - E_\kappa\right]$$

$$E_\kappa = \mu g \mathcal{H} + 2\varrho \varepsilon_\kappa \quad , \quad \varepsilon_\kappa = J(0) - J(\kappa) \quad , \quad J(\lambda) = J \sum_d e^{id\lambda}$$

Ezek az összefüggések a Heisenberg-modell pontos átfogalmazását adják a ferromagnonok nyelvére. Ezen a nyelven - az általános spinhullám elméletben - beszélhetünk Dyson nyomán olyan ferromagnonokról, amelyek dinamikai és kinematikai kölcsönhatásban vannak. Ezen két fajta kölcsönhatás célszerü megkülönböztetése érdekében irjuk fel a b_κ^+ operátor mozgás-egyenletét, valamint a c_λ, b_κ^+ operátorok csere relációját. /6/-ból azt kapjuk, hogy

$$\frac{d}{dt} b_\kappa^+ = i\left\{E_\kappa b_\kappa^+ - (SN)^{-1} \sum_{\mu\nu} \left(E_{\kappa+\nu-\mu} - E_{\nu-\mu}\right) b_\mu^+ c_\nu b_{\nu-\mu+\kappa}^+\right\}$$

$$[c_\kappa, b_\lambda^+] = \delta_{\kappa-\lambda} - \Delta_{\kappa-\lambda} \qquad /7/$$

ahol $\Delta_{\kappa-\lambda}$ a következő operátort jelenti:

$$\Delta_{\kappa-\lambda} = \frac{2S+1}{(2S)!} N^{-1} \sum_k e^{ik(\kappa-\lambda)} \prod_{\nu=0}^{2S-1} (m_k - \nu) .$$

Az a tény, hogy a mozgás-egyenletben a b_κ^+ , c_κ operátorokban harmadrendü kifejezés is fellép - a dinamikai kölcsönhatást mutatja, az a tény pedig, hogy a cserereláció jobb oldalán $\delta_{\kappa-\lambda}$ mellett a $\Delta_{\kappa-\lambda}$ operátor szerepel - a kinematikai kölcsönhatás kifejezője.

3/ Az ideális spinhullám elmélet

A /6/ összefüggésekkel kitüzött feladatot - különböző fizikai mennyiségek meghatározásának feladatát - az összefüggések bonyolultsága miatt egyetlen esetben sem sikerült pontosan végrehajtani. A pontos helyett csak közelitő eredményeket adó elméletek közül a legismertebb az ideális spinhullám elmélet. Ennek az elméletnek az alap feltevése az, hogy viszonylag kisebb számu ferromagnon jelenléte esetén - tehát alacsony hőmérsékleten - jó közelitéshez jutunk, ha a ferromagnonok rendszerét ideálisnak tekintjük, amelyben sem dinamikai, sem pedig kinematikai kölcsönhatás nem történik.

Az ideális spinhullám elmélet ezen feltevését könnyü figyelembe venni az alap összefüggésekben. Hagyjuk el /7/-ből mind a dinamikai, mind pedig a kinematikai kölcsönhatást okozó tagot. Az alábbi összefüggésekhez jutunk:

$$\frac{d}{dt} a_\kappa^+ = iE_\kappa a_\kappa^+$$

$$[a_\kappa , a_\lambda^+] = \delta_{\kappa\lambda} \qquad /8/$$

amelyekben az a_κ^+ , a_λ ideális spinhullám-operátorok a b_κ^+ , c_λ operátorok helyett léptek fel. Ezen elhanyagolásnak megfelelően leegyszerüsödnek a /6/ összefüggések is:

$$H_0 = U + \sum_\kappa E_\kappa a_\kappa^+ a_\kappa$$

$$a_\kappa^+ = N^{-1/2} \sum_k e^{ik\kappa} a_k^+$$

$$a_\kappa = N^{-1/2} \sum_k e^{-ik\kappa} a_k \qquad /9/$$

$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, a_k^+$$

$$S_k^- = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_k}{2S}\right) a_k$$

$$S_k^0 = S - n_k \ , \quad n_k = a_k^+ a_k \qquad [a_k , a_\ell^+] = \delta_{k\ell}$$

$$U = -N\{\mu g \mathcal{H} S + J(0) S^2\} \ , \quad E_\kappa = \mu \mathcal{H} + 2S\varepsilon_\kappa$$

Ezen összefüggéseket alapul véve már könnyen meghatározhatjuk a különböző mennyiségeket. Vegyük például az egyik legfontosabb mennyiséget, a mágnesezettséget, amelyet a következő összefüggés definiál pontosan:

$$\sigma = \langle S_k^0 \rangle / S = 1 - S^{-1} \langle m_k \rangle \qquad /10/$$

E definició /9/ alapján a $\sigma = 1 - S^{-1} \langle n_k \rangle$ alakba megy át, amelyre egyszerű számolással azt kapjuk, hogy

$$\sigma = 1 - S^{-1} n \ , \qquad /11/$$

ahol

$$n = N^{-1} \sum_{\kappa} n_\kappa \ , \quad n_\kappa = \frac{1}{e^{E_\kappa / \vartheta} - 1}$$

Mint ismeretes, ϑ hatványai szerinti sorfejtéssel /11/ a következő eredményhez vezet:

$$\sigma = 1 - S^{-1} \left[\alpha_0(S) \vartheta^{3/2} + \alpha_1(S) \vartheta^{5/2} + \alpha_2(S) \vartheta^{7/2} + \ldots \right] ,$$

ahol $\alpha_0(S)$, $\alpha_1(S)$, $\alpha_2(S)$ az ismert hőmérséklettől független állandók.

A mágnesezettséghez hasonlóan meghatározhatjuk a belső energia, a fajhő, a neutron szórási keresztmetszet és egyéb mennyiségek felírásához jól felhasználható

$$\gamma_k^{\alpha\beta}(t) = \langle S_0^\alpha(0) S_k^\beta(t) \rangle$$
$$(\alpha, \beta = x, y, z)$$

spinkorrelációs függvényeket:

$$\gamma_k^{xx}(t) = \frac{S\sigma}{2N} \sum_{\kappa} \left\{ n_\kappa e^{i[k\kappa - t\omega_\kappa]} + (n_\kappa + 1) e^{-i[k\kappa - t\omega_\kappa]} \right\}$$

$$\gamma_k^{xy}(t) = \frac{S\sigma}{2iN} \sum_{\kappa} \left\{ n_\kappa e^{i[k\kappa - t\omega_\kappa]} - (n_\kappa + 1) e^{-i[k\kappa - t\omega_\kappa]} \right\}$$

$$\gamma_k^{zz}(t) = (S\sigma)^2 + S^2 N \sum_{\kappa\lambda} n_\kappa (n_\lambda + 1) e^{i[k(\kappa - \lambda) - t(\omega_\kappa - \omega_\lambda)]}$$

$$\gamma_k^{yx}(t) = -\gamma_k^{xy}(t) \ , \quad \gamma_k^{yy}(t) = \gamma_k^{xx}(t) \ , \qquad /12/$$

$$\gamma_k^{xz}(t) = \gamma_k^{zx}(t) = \gamma_k^{yz}(t) = \gamma_k^{zy}(t) = 0 \ ,$$

amelyekben $\omega_\kappa = \varepsilon_\kappa / \hbar$

Ezek az eredmények alacsony hőmérsékleteken jól megfelelnek a várakozásnak. Nem ez a helyzet azonban a magasabb hőmérsékleteken. A /11/ kifejezés pontossága pl. annyira elromlik, hogy $\vartheta_\kappa \to \infty$ esetén $\sigma \to -\infty$ Ennek a helytelen eredménynek nyilvánvalóan az az oka, hogy teljesen elhanyagoltuk a kölcsönhatásokat: magasabb hőmérsékleteken legalább közelítőleg számításba kell vennünk a ferromagnonok kölcsönhatásait.

4/ A dinamikai kölcsönhatás figyelembevétele energia-renormálással

Dyson [5], majd a Holstein-Primakoff-reprezentáció alapján [3] Ogutchi [4] megmutatta, hogy ki lehet terjeszteni az ideális spinhullám elmélet érvényességi határait ugy, hogy figyelembe vesszük a ferromagnonok dinamikai kölcsönhatásait, mint perturbációt, a kinematikai kölcsönhatástól azonban - ami S nagy értékei mellett megengedhető - továbbra is eltekinthetünk. Keffer és Laudon [13] , Brout és Englert [14], majd a hőmérséklettől függő Green függvények segitségével Tahir-Kheli és Ter Haar [15] , Ill. Tyablikov és Jakovlev [16], ugyanazokat az eredményeket érték el, pontosabban kiszámitva a mágnesezettséget: azt találták, hogy a dinamikai kölcsönhatás ϑ^4 -el jelentkezik először. E szerzők munkáinak közös vonásaként jelölhetjük meg, hogy a dinamikai kölcsönhatást az ideális ferromagnonok energiájának hőmérséklet szerinti renormálásával veszik figyelembe. Az utóbbi szerzők pl. az $\bar{E}_\kappa$ renormált ferromagnon energiára vonatkozólag az alábbi kifejezéshez jutottak:

$$\bar{E}_\kappa = \mu g \mathcal{H} + 2S\bar{\varepsilon}_\kappa \quad , \qquad /13/$$

amelyben

$$\bar{\varepsilon}_\kappa = \varepsilon_\kappa - (SN)^{-1} \sum_\lambda (\varepsilon_\kappa + \varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\kappa-\lambda}) n_\lambda + S^{-2} \varepsilon'_\kappa$$

ahol ε'_κ mindnyájuknál eléggé bonyolult, de nehézség nélkül kiértékelhető mennyiség.

A fenti eljárásokkal sikerült kiterjeszteni az ideális spinhullám elmélet érvényességi határát kb. a Curie-hőmérséklet feléig. A magasabb hőmérsékleteken - a Curie-hőmérséklet környékén és afelett - azonban ez az eljárás sem vezetett sikerhez még nagy S -ek mellett sem, pedig a dinamikai kölcsönhatással kapcsolatban lényegében csak S^{-1} kicsinységre volt feltételezve.

5/ A kinematikai kölcsönhatás figyelembe vétele általános energia-renormálás mellett

Az a tény, hogy az ideális spinhullám elmélet után a dinamikai

kölcsönhatás alapján renormált energiáju ferromagnonok elmélete sem vezetett kielégitő eredményekhez a magasabb hőmérsékletekre vonatkozólag - azzal magyarázható, hogy nem vették számitásba a ferromagnonok másik tipusu kölcsönhatását, a kinematikai kölcsönhatást. A következőkben azzal a problémával fogunk foglalkozni, hogy miképpen lehet számitásba venni a kinematikai kölcsönhatást a dinamikai kölcsönhatásra vonatkozó elég általános feltevések mellett.

Tegyük fel, hogy a dinamikai kölcsönhatást megfelelő pontossággal számitásba tudjuk venni az ideális ferromagnon energia hőmérsékleti renormálásával. Legyen a meg nem határozott módon renormált energia $\bar{E}_\kappa = \mu g \mathcal{H} + 2S\bar{\varepsilon}_\kappa$ Akkor a /7/ pontos mozgás-egyenlet helyett az alábbit tekinthetjük alapegyenletnek:

$$\frac{d}{dt} b_\kappa^+ = i\bar{E}_\kappa b_\kappa^+ \quad . \qquad /14/$$

Mivel azonban a kinematikai kölcsönhatást pontosan figyelembe szándékozunk venni, a többi alap összefüggést változatlanul kell átvennünk /6/, ill. /7/-ből:

$$[c_\kappa , b_\lambda^+] = \delta_{\kappa-\lambda} - \Delta_{\kappa-\lambda}$$
$$b_\kappa^+ = N^{-1/2} \sum_k e^{ik\kappa} b_k^+$$
$$c_\kappa = N^{-1/2} \sum_k e^{-ik\kappa} c_k$$
$$S_k^+ = \sqrt{2S}\, b_k^+$$
$$S_k^- = \sqrt{2S}\left(1 - \frac{m_k}{2S}\right) c_k$$
$$S_k^0 = S - m_k \; ; \quad m_k = b_k^+ c_k \quad .$$

Először a mágnesezettség, és egyéb mennyiségek meghatározásához szükséges $m = \langle m_k \rangle$ mennyiséget fogjuk kiszámolni. Módszerül a hőmérséklet függő Green-függvények módszerét választjuk.

Vezessük be a következő Green-függvényt:

$$G_{\kappa k}^{(0)}(t) = \ll b_\kappa^+(t) \,|\, c_k(0) \gg \quad .$$

Erre /14/ felhasználásával az alábbi differenciál-egyenletet irhatjuk fel:

$$-\frac{d}{dt} G_{\kappa k}^{(0)}(t) + i\bar{E}_\kappa G_{\kappa k}^{(0)}(t) = N^{-1/2} e^{ik\kappa} \varrho \quad . \qquad /15/$$

amelyben

$$\varrho = \langle [c_k , b_k^+] \rangle = \langle \varrho_k \rangle \quad .$$

/15/ megoldása alapján könnyen adódik, hogy

ahol $$m = \varrho \bar{n} \quad , \qquad /16/$$

$$\bar{n} = N^{-1} \sum_{\kappa} \bar{n}_\kappa \quad , \qquad \bar{n}_\kappa = \frac{1}{e^{\beta E_\kappa} - 1} \quad . \qquad /17/$$

Általában nem ismerjük azonban az itt fellépő ϱ mennyiséget, mert az $m = \langle m_k \rangle$ mennyiség mellett az $\langle m_k^2 \rangle, \ldots$ kifejezések is előfordulnak benne.

Vezessük be ezért a következő Green-függvényeket is:

$$G_{\kappa k}^{(\nu)}(t) = \ll b_\kappa^+(t) \,|\, m_k^\nu(0)\, c_k(0) \gg \quad .$$

Ezekre a Green-függvényekre /15/-höz hasonlóan az alábbi egyenleteket kapjuk:

$$-\frac{d}{dt} G_{\kappa k}^{(\nu)}(t) + i E_\kappa G_{\kappa k}^{(\nu)}(t) = N^{-1/2} e^{ik\kappa} \varrho^{(\nu)} \delta(t) , \qquad /18/$$

amely a $\varrho^{(0)} = \varrho$ jelöléssel /15/-öt is magába foglalja. Itt uj mennyiségek léptek fel a

$$\varrho^{(\nu)} = \langle [m_k^\nu c_k \, , \, b_k^+] \rangle$$

kifejezések formájában. Ezek a mennyiségek azonban már nem jelentenek uj problémát. Tekintsük ugyan is a /4/-ből következő

$$\prod_{\nu=0}^{2S} (m_k - \nu) = 0$$

egyenlőséget. Ennek alapján m_k^{2S+1} -et kifejezhetjük az $m_k^{2S}, m_k^{2S-1}, \ldots m_k$ operátorok segitségével, ami ahhoz vezet, hogy a $\varrho^{(\nu)}$ mennyiségeket felirhatjuk a $\langle m_k^{2S} \rangle, \langle m_k^{2S-1} \rangle, \ldots \langle m_k \rangle$ mennyiségekkel. Ha tehát /18/-at megoldjuk a $\nu = 0,1,\ldots 2S$ értékek mellett, akkor a megoldások alapján nyerhető

$$\langle b_k^+ m_k^\nu c_k \rangle = \varrho^{(\nu)} \bar{n}$$

egyenletekkel az $\langle m_k^\nu \rangle$ mennyiségekre vonatkozólag zárt algebrai egyenletrendszerhez jutunk.

A nyert egyenleteket S különböző értékei mellett könnyen meg lehet oldani. Megoldásként az alábbi eredményekhez jutunk:

$$\varrho\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{1 + 2\bar{n}\left(\frac{1}{2}\right)} \quad ,$$

$$\varrho(1) = \frac{1 + 3\bar{n}(1)}{1 + 3\bar{n}(1) + 3\bar{n}^2(1)} \quad ,$$

$$\varrho\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{1+4\bar{n}\left(\frac{3}{2}\right)+\sigma\bar{n}^2\left(\frac{3}{2}\right)}{1+4\bar{n}\left(\frac{3}{2}\right)+\sigma\bar{n}^2\left(\frac{3}{2}\right)+4\bar{n}^3\left(\frac{3}{2}\right)}\ ,$$

$$\varrho(2)=\frac{1+5\bar{n}(2)+10\bar{n}^2(2)+10\bar{n}^3(2)}{1+\Gamma\bar{n}(2)+10\bar{n}^2(2)+10\bar{n}^3(2)+\Gamma\bar{n}^4(2)}\ , \qquad /19/$$

Általánosan /a bizonyitást később fogjuk közölni/.

$$\varrho(S)=1-\frac{2S+1}{\bar{n}(S)}\,\frac{1}{\left[\left(1+\frac{1}{\bar{n}(S)}\right)^{2S+1}-1\right]}$$

/16/-ot felhasználva azt irhatjuk tehát, hogy a mágnesezettség:

$$\sigma(S)=1-S^{-1}\varrho(S)\bar{n}(S)\ . \qquad /20/$$

A mágnesezettséghez hasonlóan meghatározhatjuk a $\gamma_k^{\alpha\beta}(t)$ spinkorellációs függvényeket is - $\gamma_k^{zz}(t)$ kivételével. A

$$G_{\varkappa k}^{+-}(t)=\ll b_\varkappa^+(t)\,|\,b_k(0)\gg\ ,$$

$$G_{\varkappa k}^{++}(t)=\ll b_\varkappa^+(t)\,|\,b_k^+(0)\gg\ ,\qquad G_{\varkappa k}^{--}(t)=\ll b_\varkappa(t)\,|\,b_k(0)\gg\ ,$$

$$G_{\varkappa k}^{+0}(t)=\ll b_k^+(t)\,|\,m_k(0)\gg\ ,\qquad G_{\varkappa k}^{-0}(t)=\ll b_\varkappa(t)\,|\,m_k(0)\gg$$

Green-függvényekre felirt differenciál-egyenletek megoldása alapján a következő eredményeket kapjuk:

$$\gamma_k^{xx}(t)=\frac{S\sigma}{2N}\sum_\varkappa\left\{\bar{n}_k e^{i[k\varkappa-t\bar{\omega}_\varkappa]}+(\bar{n}_\varkappa+1)e^{-i[k\varkappa-t\bar{\omega}_\varkappa]}\right\}\ ,$$

$$\gamma_k^{xy}(t)=\frac{S\sigma}{2iN}\sum_\varkappa\left\{\bar{n}_\varkappa e^{i[k\varkappa-t\bar{\omega}_\varkappa]}-(\bar{n}_\varkappa+1)^{-i[k\varkappa-t\bar{\omega}_\varkappa]}\right\}\ ,$$

$$\gamma_k^{yx}(t)=\gamma_k^{xy}(t)\ ,\quad \gamma_k^{yy}(t)=\gamma_k^{xx}(t)\ ,$$

$$\gamma_k^{xz}(t)=\gamma_k^{zx}(t)=\gamma_k^{yz}(t)=\gamma_k^{zy}(t)=0 \qquad /21/$$

amelyekben $\bar{\omega}_\varkappa=\bar{E}_\varkappa/\hbar$

E spinkorellációs függvényeken kivül szükségünk lenne még természetesen a $\gamma_k^{zz}(t)$ függvényre is. Ezzel kapcsolatban azonban nem jutunk az előbbiekhez hasonló egyszerüséggel eredményhez. Az egyik lehetséges Green-függvénnyel, $\ll b_k^+(t)c_\ell(t)\,|\,m_0(0)\gg$ -val helytelen eredményt, a másik Green-függvénnyel, $\ll b_k^+(t)\,|\,n_k(0)c_\ell(0)\gg$-val pedig bonyolult kifejezést kaptunk. $\gamma_k^{zz}(t)$ általános kifejezése helyett csak speciális értékét, a

$\gamma_0^{zz}(0)$ mennyiséget tudjuk a fentiek alapján meghatározni: a/ /18/ megoldásaként nyert egyik egyenletből, a

$$\langle b_k^+ m_k c_k \rangle = \rho^{(1)} \bar{n}$$

egyenletből azt kapjuk, hogy

$$\gamma_k^{zz}(0) = (S\sigma)^2 + \left[S(S+1) - S\sigma(S\sigma+1) - 2S\sigma\bar{n}\right] \quad /22/$$

A $\gamma_k^{zz}(t)$ korellációs függvény teljes meghatározásának problémáját az előzőkben járt uttól eltérő módon fogjuk megoldani.

6/ Az ideális spinhullám elmélet általános renormálása

Vegyük észre, hogy az előző fejezetben nyert /20/, /21/ eredmények igen nagy hasonlóságot mutatnak az ideális spinhullám elmélet keretei között nyert /11/, /12/ kifejezésekkel. A hasonlóság azt a gondolatot sugallja, hogy a /20/ /21/ kifejezéseket az ideális spinhullám elmélet /11/, /12/ kifejezései renormáltjainak tekintsük.

Valóban, vegyük alapul az ideális spinhullám elmélet /9/ összefüggései helyett a következő összefüggéseket:

$$\bar{H} = \bar{U} + \sum_\kappa \bar{E}_\kappa a_\kappa^+ a_\kappa$$

$$a_\kappa^+ = N^{-1/2} \sum_k e^{ik\kappa} a_k^+$$

$$a_\kappa = N^{-1/2} \sum_k e^{-ik\kappa} a_k$$

$$S_k^- = \sqrt{2\bar{S}}\left(1 - \frac{\delta \cdot n_k}{2\bar{S}}\right) a_k$$

$$S_k^+ = \sqrt{2\bar{S}}\, a_k^+ \quad /23/$$

$$S_k^0 = \bar{S} - \delta n_k$$

$$[a_k^+, a_e^+] = \delta_{k-e} \quad , \quad n_k = a_k^+ a_k$$

ahol három uj paraméter, $\delta, \bar{U}$ és $\bar{S}$ szerepel.

Könnyen beláthatjuk, hogy ezek az összefüggések elvezetnek a /20/, /21/ és /22/ eredményekhez, ha ρ és C /19/ kapcsolatait megtartva $\bar{S}$ -t és δ -t az alábbi módon választjuk meg:

$$\bar{S} = S + (\delta - \varsigma)\bar{n} \qquad /24/$$

$$\delta^2 = \frac{S(S+1) - S\sigma(S\sigma+1) - 2S\sigma\bar{n}}{\bar{n}(\bar{n}+1)}$$

$\bar{U}$ -t az előbbi követelmények nem határozzák meg. Könnyen megkaphatjuk azonban egy további követelmény alapján. A belső energiát a /23/-ban szereplő $\bar{H}$ -al az alábbi módon számithatjuk ki:

$$E = Sp\left\{\bar{H} e^{-\bar{H}/\vartheta}\right\} / Sp\left\{e^{-\bar{H}/\vartheta}\right\} .$$

A belső energiához kell jutnunk azonban akkor is, ha $\bar{H}$ helyett abból a H_1 operátorból indulunk ki, amelyet /1/-ből az $S_k^{\pm}$, S_k^0 operátorok /23/ kifejezéseivel nyerünk:

$$E = Sp\left\{H_1 e^{-\bar{H}/\vartheta}\right\} / Sp\left\{e^{-\bar{H}/\vartheta}\right\} .$$

Ahhoz, hogy e két uton nyert belső energia azonos értékü legyen, $\bar{U}$ -t a következőképpen kell megválasztanunk:

$$\bar{U} = -N\left\{\mu g\left[S + (1-\varsigma)\bar{n}\right]\mathcal{H} + J(0)\left[2S(\sigma-\delta) + \delta^2(n^2+v^2)\right]\right\} \qquad /25/$$

amelyben

$$v = N^{-1}\sum_{\kappa} \bar{n}_{\kappa} e^{id\kappa}$$

A /23/ összefüggések - amelyeket az ideális spinhullám elmélet /9/ alapösszefüggéseinek renormált alakjaiként kezelhetünk, módot adnak arra, hogy bármely mennyiséget, a $\gamma_k^{zz}(t)$ spinkorellációs függvényt, a termodinamikai mennyiségeket, a neutronszórási keresztmetszetet meghatározzuk.

7/ <u>A termodinamikai mennyiségek, a spinkorrelációs függvények és a neutron-szórási keresztmetszet meghatározása</u>

A ferromágneses anyagok egyik legfontosabb jellemzőjét, a belső energiát a renormált alapösszefüggések, /23/ és a hozzájuk tartozó /24/, /25/ összefüggések alapján könnyen meghatározhatjuk. Azt kapjuk, hogy

$$E = -N\left\{\mu g S\sigma \mathcal{H} + J(0)\left[(S\sigma)^2 + 2S\sigma v + \delta^2 v^2\right]\right\} . \qquad /26/$$

Ebből ϑ szerinti differenciálással jutunk a fajhőhöz. Irjuk fel most az állapot összeget:

$$Z = e^{-\frac{\bar{U}}{\vartheta}} \prod_{\kappa} \left(1 + \bar{n}_{\kappa}\right) . \qquad /27/$$

Ebből egyszerüen adódik a szabad energia:

$$F = \bar{U} - \vartheta \sum_{\kappa} \ln(1+\bar{n}_\kappa) \quad , \qquad /28/$$

ezt figyelembe véve pedig az entrópia is:

$$R = \sum_{\kappa} \left\{ \bar{n}_\kappa \bar{E}_\kappa / \vartheta + \ln(1+\bar{n}_\kappa) \right\} \qquad /29/$$

Felirjuk végül a mágneses intenzitás komponenseit:

$$\begin{aligned} M^x &= 0 \\ M^y &= 0 \\ M^z &= \mu_g \bar{S} N - \sum_{\kappa} \mu_g \delta \bar{n}_\kappa = \mu_g S \sigma N \end{aligned} \qquad /30/$$

A hiányzó $\gamma_k^{zz}(t)$ spinkorrelációs függvényt is meghatározva /23/ alapján - /21/-gyel az alábbiakban állíthatjuk össze a spinkorrelációs függvényeket:

$$\gamma_k^{xx}(t) = \frac{S\sigma}{2N} - \sum_{\kappa} \left\{ \bar{n}_\kappa e^{i[k\kappa - t\bar{\omega}_\kappa]} + (\bar{n}_\kappa + 1) e^{-i[k\kappa - t\bar{\omega}_\kappa]} \right\} \quad ,$$

$$\gamma_k^{xy}(t) = \frac{S\sigma}{2iN} \sum_{\kappa} \left\{ \bar{n}_\kappa e^{i[k\kappa - t\bar{\omega}_\kappa]} - (\bar{n}_\kappa + 1) e^{-i[k\kappa - t\bar{\omega}_\kappa]} \right\} \quad ,$$

$$\gamma_k^{zz}(t) = \frac{(S\delta)^2}{N^2} \sum_{\kappa\lambda} \bar{n}_\kappa (\bar{n}_\lambda + 1) e^{i[k(\kappa-\lambda) - t(\bar{\omega}_\kappa - \bar{\omega}_\lambda)]} + (S\sigma)^2$$

$$\gamma_k^{yx}(t) = -\gamma_k^{xy}(t), \quad \gamma_k^{yy}(t) = \gamma_k^{xx}(t)$$

$$\gamma_k^{xz}(t) = \gamma_k^{zx}(t) = \gamma_k^{yz}(t) = \gamma_k^{zy}(t) = 0. \qquad /31/$$

E korrelációs függvények segitségével kiszámithatjuk a neutronszórási keresztmetszetet is. Van Hove megmutatta, hogy bizonyos egyszerüsitő körülmények mellett az alábbi módon adható meg:

$$\frac{d^2\sigma(\Omega,\omega)}{d\Omega\, d\omega} = \left(\frac{2ge^2}{mc^2}\right)^2 \frac{p_1}{p_0} F^2(q) \sum_{\alpha\beta} \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{q_\alpha q_\beta}{q^2}\right) S_{\alpha\beta}(q,\omega)$$

$$(\alpha, \beta = x, y, z)$$

amelyben $\vec{q} = (\vec{p}_1 - \vec{p}_0)/\hbar$, valamint

$$S_{\alpha\beta}(q,\omega) = G(q) \frac{N}{2\pi} \int dt \sum_k \gamma_k^{\alpha\beta}(t) e^{i[kq - t\omega]} \quad ,$$

ahol $G(q)$ a Debye-Waller tényező. Ha $S_{\alpha\beta}(q,\omega)$ kiszámításához figyelembe vesszük /31/-et, akkor az alábbiakat nyerjük:

$$\frac{d^2\sigma(\Omega,\omega)}{d\Omega\, d\omega} = \left(\frac{2ge^2}{mc^2}\right)^2 \frac{\rho_1}{\rho_0} F^2(q)\, G(q)\left\{\left(1-\frac{q_z}{q}\right)\left[Q^0(q,\omega)+Q^{+-}(q,\omega)\right]+\left(1+\frac{q_z}{q}\right)\left[Q^{+}(q,\omega)+Q(q,\omega)\right]\right\}, \qquad /32/$$

amelynél a következő jelöléseket alkalmaztuk:

$$Q^0(q,\omega) = (S\sigma)^2 \sum_{\tau} \delta(q-\tau)\,\delta(\omega) \ ,$$

$$Q^{\pm}(q,\omega) = \frac{S\sigma}{2N} \sum_{\kappa\tau} \left[\bar{n}_\kappa + \frac{1\pm 1}{2}\right] \delta(q \mp \kappa - \tau)\,\delta(\omega \mp \omega_\kappa) \ , \qquad /33/$$

$$Q^{+-}(q,\omega) = \frac{(S\delta)^2}{N^2} \sum_{\kappa\lambda\tau} \bar{n}_\kappa(\bar{n}_\lambda+1)\,\delta(q+\kappa-\lambda-\tau)\,\delta(\omega+\bar{\omega}_\kappa-\bar{\omega}_\lambda) \ .$$

8/ A fizikai mennyiségek általános viselkedése

Különböző energia-renormalizációk

Az ideális spinhullám elmélet /9/ alapösszefüggéseinek /23/ alaku hőmérsékleti renormalizációjánál nyitva hagytuk azt a kérdést, hogy miképpen kivánjuk renormálni az ideális ferromagnonok E_κ energiáit. Ahhoz, hogy a különböző mennyiségeket, amelyek kifejezéseit /20/ , ill. /26/, /33/ adja, konkrétan elemezhessük - konkrétan meg kell adnunk az $\bar{E}_\kappa$ renormált energiát. Mielőtt azomban a ferromagnon energia renormálásának kérdésével foglalkoznánk, érdemes megvizsgálni röviden, hogy milyen eredményeket nyerünk az E_κ renormálatlan ferromagon-energiával. Ekkor ugyanis tisztán kapjuk meg a kinematikai kölcsönhatásnak a /23/-mal figyelembe vett hatását.

a/ Ebben az esetben tehát $\bar{E}_\kappa \equiv E_\kappa$. Az egyszerüség kedvéért a külső mágneses tér legyen zérus. Alacsony hőmérsékletek mellett akkor $\bar{n} \equiv n$ igen kicsi, tehát célszerü sorba fejteni szerinte. ϱ -ra a következő sorokat kapjuk.

$$\varrho\left(\frac{1}{2}\right) = 1 - 2n\left(\frac{1}{2}\right) + 4n^2\left(\frac{1}{2}\right) + O(n^3)$$

$$\varrho(1) = 1 - 3n^2\left(\frac{1}{2}\right) + O(n^3)$$

$$\varrho\left(\frac{3}{2}\right) = 1 + O(n^3)$$

$$\varrho(2) = 1 + O(n^4)$$

Ennek alapján /20/-at is sorok alakjában irhatjuk fel:

$$\sigma\left(\frac{1}{2}\right) = 1 - 2n\left(\frac{1}{2}\right) + 4n^2\left(\frac{1}{2}\right) - 8n^3\left(\frac{1}{2}\right) + O(n^4)$$

$$\sigma(1) = 1 - n(1) - 3n^3(1) + O(n^4)$$

$$\sigma\left(\frac{3}{2}\right) = 1 - \frac{2}{3}n\left(\frac{3}{2}\right) + O(n^4)$$

$$\sigma(2) = 1 - \frac{1}{2}n(2) + O(n^4) \ .$$

Használjuk most fel, hogy $n(S)$ -et sorba fejthetjük ϑ szerint a következő alakban:

$$n(S) = \alpha_0(S)\vartheta^{3/2} + \alpha_1(S)\vartheta^{5/2} + \alpha_2(S)\vartheta^{7/2} + \alpha_3(S)\vartheta^{9/2} + \dots$$

Ezzel $\sigma(S)$ előbbi sorai ϑ szerint haladó sorokba mennek át:

$$\sigma(\tfrac{1}{2}) = 1 - 2\alpha_0(1)\vartheta^{3/2} - 2\alpha_1(\tfrac{1}{2})\vartheta^{5/2} + 4\alpha_0^2(\tfrac{1}{2})\vartheta^3 - 2\alpha_2(\tfrac{1}{2})\vartheta^{7/2} + 8\alpha_0(\tfrac{1}{2})\alpha_1(\tfrac{1}{2})\vartheta^4 - 2\alpha_3(\tfrac{1}{2})\vartheta^{9/2} +$$

$$\sigma(1) = 1 - \alpha_0(1)^{3/2} - \alpha_1(1)\vartheta^{5/2} - \alpha_2(1)^{7/2} - \dots$$

$$\sigma(\tfrac{3}{2}) = 1 - \tfrac{2}{3}\alpha_0(\tfrac{3}{2})\vartheta^{3/2} - \tfrac{2}{3}\alpha_1(\tfrac{3}{2})\vartheta^{5/2} - \tfrac{2}{3}\alpha_2(\tfrac{3}{2})\vartheta^{7/2} - \tfrac{2}{3}\alpha_3(\tfrac{3}{2})\vartheta^{9/2} + \dots$$

$$\sigma(2) = 1 - \tfrac{1}{2}\alpha_0(2)\vartheta^{3/2} - \tfrac{1}{2}\alpha_1(2)\vartheta^{5/2} - \tfrac{1}{2}\alpha_2(2)\vartheta^{7/2} - \tfrac{1}{2}\alpha_3(2)\vartheta^{9/2} + \dots$$

Ebből láthatjuk, hogy a kinematikai kölcsönhatás az $S = 1/2$ esetben ϑ^3 mellett, $S > 1/2$ esetén azonban ϑ^4 -nél magasabb rendben jelentkezik először a mágnesezettségben. Dyson, Ogutchi, és mások azon feltevése tehát, hogy S nagy értékei esetén a kinematikai kölcsönhatástól ϑ^4 -ig eltekinthetünk - már $S > 1/2$ esetén igaz, az $S = 1/2$ esetben azonban figyelembe kell vennünk.

Nézzük most meg röviden a magas hőmérsékleteken való viselkedést, pontosabban tekintsük a $\vartheta \to \infty$ aszimptotikus esetet. Ekkor $\bar{n}$ igen naggyá válik, tehát $1/\bar{n}$ szerint célszerű sorba fejteni. S különböző értékei mellett az alábbiakat kapjuk:

$$\varrho(\tfrac{1}{2}) = \frac{1}{2\bar{n}}\left[1 - \frac{1}{2\bar{n}} + \dots\right] ,$$

$$\varrho(1) = \frac{1}{\bar{n}}\left[1 - \frac{1}{\bar{n}} + \dots\right] ,$$

$$\varrho(\tfrac{3}{2}) = \frac{3}{2\bar{n}}\left[1 - \frac{6}{5\bar{n}} + \dots\right] .$$

A mágnesezettségre vonatkozó sorok tehát így kezdődnek:

$$\sigma(\tfrac{1}{2}) = \frac{1}{2\bar{n}} + \dots , \quad \sigma(1) = \frac{1}{\bar{n}} + \dots , \quad \sigma(\tfrac{3}{2}) = \frac{6}{5\bar{n}} + \dots , \quad \dots$$

Ha felhasználjuk, hogy $\vartheta \to \infty$ esetén $n \sim \dfrac{\vartheta}{2SJ(0)\alpha}$ ahol

$$\alpha = N\left\{\sum_\kappa \frac{J(0)}{\varepsilon_\kappa}\right\}^{-1} ,$$

akkor azt irhatjuk végül is, hogy

$$\sigma\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{J(0)\alpha}{2}\,\frac{1}{\vartheta}\quad,\quad \sigma(1)=2J(0)\alpha\frac{1}{\vartheta}\quad,\quad \sigma\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{5J(0)\alpha}{6}\,\frac{1}{\vartheta}$$

Ezek az eredmények azt a fontos tényt mutatják, hogy a /20/-szal megadott mágnesezettség $\vartheta\to\infty$ esetén még akkor is zérushoz tart, ha a ferromagnon energiákat egyáltalán nem renormáljuk, vagyis teljesen eltekintünk a dinamikai kölcsönhatástól. Emlékeztetőül: az ideális spinhullám elmélet szerint $\vartheta\to\infty$ esetén $\sigma(S)\to-\infty$. Hasonlóan megvizsgálhatnánk a többi mennyiséget is.

b/ Az előbbiekben nyert eredmény lényegét nemcsak speciális esetben, hanem általánosan is bebizonyithatjuk: beláthatjuk, hogy a különböző fizikai mennyiségek számára - speciálisan a mágnesezettségre - a /23/ renormálizáció az $\bar{E}_\kappa$ renormált energiára vonatkozó egészen általános feltevések mellett is jó korlátot biztosit.

Valóban, tegyük fel, hogy $\vartheta=0$ esetén $\bar{E}_\kappa=E_\kappa$, $\vartheta>0$ esetén pedig $\bar{E}_\kappa>0$, és véges egészen a $\vartheta\to\infty$ határ esetig.

Ekkor $\vartheta=0$ esetén $\bar{n}=0$, $\varrho=1$, következésképpen $\sigma=1$, és $\vartheta\gtrsim 0$ esetén csökken σ értéke. Ha azon /véges, vagy végtelen/ ϑ_0 hőmérséklet felé haladunk, ahol $\bar{E}_n/\vartheta\to 0$, irhatjuk, hogy $\bar{n}\to\infty$, ezért - mint /19/ mutatja, de a /6/ csere-reláció alapján általánosan is beláthatjuk - $\varrho\bar{n}\to S$. Ez pedig azt jelenti, hogy $\vartheta\to\vartheta_0$ esetén $\sigma\to 0$. Ha még ϑ_0 véges, és $\vartheta_0\leq\vartheta$ esetén $\bar{E}_\kappa=0$, akkor $\sigma(\vartheta_0\leq\vartheta)\equiv 0$. Ez esetben ϑ_0 a Curie-hőmérséklet szerepét játssza.

Hasonló jó korlátokhoz jutnánk a többi mennyiségre vonatkozólag is.

c/ Vizsgáljuk most meg a konkrét renormálás lehetőségét. Az előbbi általános meggondolásunk azt mutatja, hogy ha egy bizonyos ϑ_0 fölött azt várjuk, hogy $\sigma\equiv 0$ legyen - akkor $\bar{E}_\kappa$ -t ugy kell megválasztanunk, hogy az $\bar{E}_\kappa(\vartheta\to\vartheta_c)\to 0$, $\bar{E}_\kappa(\vartheta>\vartheta_c)\equiv 0$ tulajdonságokkal rendelkezzék.

Ehhez az a legegyszerübb lehetőség, hogy $\bar{E}_\kappa=\sigma\varepsilon_\kappa$ legyen, vagyis selfkonsistensen renormáljuk az energiát a mágnesezettséggel:

$$\bar{E}_\kappa=\mu g\mathcal{H}+2S\sigma\varepsilon_\kappa \qquad /34/$$

A ferromagnon energiának ez a renormálása - amelyhez /7/-ből akkor jutunk, ha a $b_\mu^+c_\nu\to\langle b_\mu^+c_\nu\rangle$ helyettesitést végezzük el - azonos azzal a renormálással, amelyet $S=\frac{1}{2}$ esetén először Bogoljubov és Tyablikov, $S>\frac{1}{2}$ esetén pedig Tahir-Kheli, Ter Haar végeztek el. Dolgozataik alapján ismeretes,

hogy ez az energia-renormálás igen jó eredményekhez vezet a mágnesezettségre vonatkozólag. Azt várjuk, hogy jó eredményekhez jutunk e renormálással a többi mennyiségekkel kapcsolatban is, amelyeket a /23/ általános renormálás alapján határoztunk meg.

A mágnesezettségnek a /34/ energia renormálás melletti vizsgálatával nem foglalkozunk, hanem átvesszük Tahir-Kheli és Ter Haar ill. Bogoljubov és Tyablikov vizsgálatainak végeredményeit:

$$\gamma(S) = 1 + O(S^{-1})$$

$$\sigma(S) = 1 + O(S^{-1}) \qquad /35/$$

$$\sigma(S) = \frac{S+1}{3\bar{n}(S)} + O(\bar{n}^{-2}) \qquad (\vartheta \lesssim \vartheta_c)$$

$$\vartheta_c = \frac{2}{3} S(S+1) J(0) \alpha$$

$$\sigma^2(\varepsilon) = c_S \theta + D_S \theta^2 \qquad (\vartheta \lesssim \vartheta)$$

amelyekben $\theta = 1 - \vartheta/\vartheta_c$, a c_S; D_S mennyiségek pedig S -en kívül csak a kristályszerkezettől függnek.

9/ A renormált ferromagnonok tulajdonságai

Mielőbb hozzá fognánk a 7. fejezetben kiszámított mennyiségek vizsgálatához - nézzük meg, hogy milyen sajátságokkal rendelkeznek azok a renormált ferromagnonok, amelyeket a /23/ összefüggések mellett a /34/ energia jellemez. A külső mágneses tér a továbbiakban is legyen zérus, ill. infinitezimálisan kicsi.

a/ Láthatjuk mindenek előtt, hogy az $\bar{E}_\kappa$ energia közel esik a renormálatlan E_κ energiához, ha a hőmérséklet alacsony:

$$\bar{E}_\kappa = E_\kappa + O(\bar{n}/S)$$

A Curie-hőmérséklet felé haladva azonban először lassan, majd gyorsan csökken, a Curie-hőmérsékleten és affelett zérus.

b/ A ferromagnonok - mint /30/ mutatja - a mágneses térrel ellenkező irányu járulékot adnak a mágneses intenzitáshoz. Egy ferromagnon járuléka $\vec{\kappa}$ -től függetlenül $\mu g \delta$, ami a Curie-hőmérséklet felé tartva csökken és felette zérus.

c/ Tegyük fel most a következő kérdést: hogyan változik a hőmérséklettel az azonos $\hbar\vec{\kappa}$ kvázi-impulzussal /azonos hullám-vektorral/ gerjesztett ferromagnonok száma?

Ennek a kérdésnek a megválaszolásához az

$$\bar{n}_\kappa = \frac{1}{e^{\bar{E}_\kappa/\vartheta}-1}$$

függvényt kell megvizsgálnunk.

Az abszolut zérusfoktól nem messze eső hőmérsékleteken jó közelitéssel az ideális spinhullám elmélet eredményét kapjuk:

$$\bar{n}_\kappa = n_\kappa + O\left(\frac{n}{S}\right) .$$

Magasabb hőmérsékleteken azonban lényeges az eltérés n_κ -tól: közvetlenül a Curie-hőmérséklet alatt

$$\bar{n}_\kappa = \frac{\vartheta}{2S\varepsilon_\kappa}\,\frac{1}{\sigma} ,$$

tehát az azonos kvázi-impulzussal gerjesztett ferromagnonok száma a Curie-hőmérsékleten végtelen naggyá válik, és fölötte is az marad.

d/ A fentiek után önkénytelenül is felmerül ez a kérdés: hogyan változik a hőmersékletiel az azonos hullámvektorral gerjesztett ferromagnonok összenergiája, az

$$\bar{n}_\kappa \bar{E} = \frac{\bar{E}_\kappa}{e^{\bar{E}_\kappa/\vartheta}-1}$$

mennyiség?

Alacsony hőmérsékleteken várakozásunknak megfelelően ismét az ideális spinhullám elmélet eredménye jelent jó közelitést:

$$\bar{n}_\kappa \bar{E}_\kappa = n_\kappa E_\kappa + O\left(\frac{n}{S}\right)$$

Közvetlenül a Curie-hőmérséklet környezetében és afelett azonban a következő egyenlőség érvényes: $\bar{n}_\kappa \bar{E}_\kappa = \vartheta$. Ez azt jelenti, hogy az azonos hullám-vektorral gerjesztett ferromagnonok összenergiája - amelyeknek száma végtelen, energiájuk pedig külön-külön zérus, ha $\vartheta > \vartheta_c$ - véges értékkel, szám szerint a hőmérséklettel egyenlő a Curie hőmérsékleten, és afelett.

c/ Foglalkozunk végül az azonos hullám-vektorral gerjesztett ferromagnonoknak a mágneses intenzitáshoz való hozzájárulásával. Ekkor /30/ szerint az $M_\kappa = \mu g \delta \bar{n}_\kappa$ mennyiséget kell megvizsgálnunk.

Alacsony hőmérsékleten most is visszakapjuk az ideális spinhullám-elmélet eredményét:

$$M_\kappa = \mu g n_\kappa + O\left(\frac{n}{S}\right)$$

A magas hőmérsékletü viselkedést /35/ és /24/ alapján derithetjük ki. $\vartheta \lesssim \vartheta_c$ esetén azt kapjuk, hogy

$$M_\kappa = \mu g S \frac{\vartheta}{\vartheta_c}\,\frac{\varepsilon}{\varepsilon_\kappa}$$

ahol $\varepsilon = J(0)\alpha$, magán a Curie-hőmérsékleten tehát

$$M_\kappa = \mu g S \frac{\varepsilon}{\varepsilon_\kappa} \quad .$$

A Curie-hőmérséklet feletti viselkedését a χ szuszceptibilitás segitségével irhatjuk le, amelyet a következő összefüggés határoz meg:

$$N^{-1} \sum_\kappa \frac{\vartheta \chi}{(\mu g)^2 + 2\varepsilon\chi} = \frac{S(S+1)}{3} \quad . \qquad /36/$$

χ -vel az alábbi kifejezést kapjuk:

$$M_\kappa = \mu g \frac{3}{S+1} \frac{\chi \vartheta}{(\mu g)^2 + 2\varepsilon_\kappa \chi}$$

Mivel $\vartheta \gg \vartheta_C$ esetén /36/-ből az következik, hogy

$$\chi \approx \frac{(\mu g)^2 S(S+1)}{3\vartheta} \quad ,$$

a $\vartheta \to \infty$ határesetben azt kapjuk, hogy

$$M_\kappa = \mu g S \quad .$$

A fentiekből a következőket láthatjuk. Az abszolut zérus foktól a Curie-hőmérsékletig növekszik M_κ , még pedig annál inkább, minél kisebb $\vec{\kappa}$. A Curie-hőmérsékleten azonban lényegében véve megváltozik a helyzet: ϑ további növelésével csökken, vagy növekszik aszerint, hogy $\varepsilon_\kappa < \varepsilon$, vagy $\varepsilon_\kappa > \varepsilon$. Ha tehát $\vec{\kappa}$ igen kicsi, akkor M_κ -nak erős maximuma van a Curie-hőmérsékleten - ellentétben azzal az esettel, amikor $\vec{\kappa}$ nagy.

Ennek a ténynek a neutronok kritikus szóródásának magyarázatánál lesz fontossága: a lassu neutronok rugalmas, vagy kvázi-rugalmas szóródáskor éppen a kis hullám-vektorral rendelkező ferromagnonokkal lépnek kölcsönhatásba.

10/ A termodinamikai mennyiségek rövid vizsgálata

A meghatározott /27/ - /29/ termodinamikai jellemzőkről az előző fejezetbeli vizsgálatunk alapján megállapithatjuk, hogy alacsony hőmérsékleteken megegyeznek azokkal az értékekkel, amelyeket a maga érvényességi területén belül az ideális spinhullám elmélet ad. A magasabb hőmérsékletek mellett várhatók most is lényegesebb eltérések.

Vizsgáljuk meg elsőnek a belső energiát. Legyen $\vartheta \lesssim \vartheta_C$. Ekkor a /25/-ben bevezetett v -re vonatkozólag azt kapjuk, hogy

$$v = \frac{S+1}{3}(1-\alpha)\frac{1}{\sigma} \quad .$$

Ezt és az előző vizsgálatainkat figyelembe véve azt irhatjuk tehát, hogy a belső energiának a Curie-hőmérsékleten felvett értéke:

$$E(\vartheta_c) = -S(S+1)(1-\alpha)\left(1-\frac{\alpha}{3}\right)J(0)N \ .$$

Érdemes összehasonlitani ezt az értéket a zérus hőmérsékletbeli $E(0)$ értékkel:

$$\frac{E(\vartheta_c)}{E(0)} = \left(1+\frac{1}{S}\right)\begin{cases} 0{,}266 \\ 0{,}215 \\ 0{,}193 \end{cases},$$

ahol felhasználtuk, hogy $\alpha = 0{,}659 \ ; \ 0{,}718 \ ; \ 0{,}744$ az egyszerü köbös, tércentrált köbös, ill. lapcentrált köbös szerkezetü kristályokra vonatkozólag.

A belső energiának a Curie-hőmérséklet környékén való viselkedését $\Theta = 1 - \vartheta/\vartheta_c$ szerinti sorfejtéssel érdemes megvizsgálni. Azt találjuk, hogy

$$E(\vartheta) = E(\vartheta_c) + C_S^{\pm}\,\Theta + \ldots$$

amelyben C_S^- értendő, ha $\vartheta < \vartheta_c$, és C_S^+ , ha $\vartheta > \vartheta$. Mivel $C_S^+ \neq C_S^-$, a belső energiának törése, a belőle kapható fajhőnek pedig ugrása van a Curie-hőmérsékleten.

Beláthatjuk végül, hogy $\vartheta \to \infty$ esetén a belső energia ϑ^{-1} -el, a faji hő tehát ϑ^{-2} -vel arányosan zérushoz tart.

Az állapot-összegnek, szabadenergiának és az entrópiának a Curie-hőmérséklet alatti viselkedését / $\vartheta \lesssim \vartheta_c$ esetén/ a következő kifejezések adják meg:

$$z \sim \left(\frac{1}{\sigma}\right)^N \ ,$$

$$F \sim N \ln\sigma \ ,$$

$$\sim -N \ln\sigma \ .$$

A Curie-hőmérsékleten és afelett tehát az állapot-összeg és az entrópia pozitiv végtelen, a szabad energia pedig negativ végtelen értékü. Ezek az eredmények értelmezhetők az előző fejezetbeli vizsgálataink alapján.

11/ A spinkorrelációs függvények és a neutronszóródási keresztmetszet vizsgálata

A ferromágnesség elméletében mind nagyobb szerepet játszanak a spinkorrelációs függvények és a neutronszórási keresztmetszet, aminek az

a magyarázata, hogy a szórási kisérletekkel olyan információkat is lehet szerezni a ferromágneses anyagokról, amelyek más vizsgálatoknál rejtve maradnak. A probléma fontosságának megfelelően több szerző foglalkozott már eddig is e mennyiségek elméleti meghatározásával.

A szórási keresztmetszetre vonatkozó vizsgálatokkal kapcsolatban a Halperntől (Johnsontól [17] származó szórási képletnek az ideális spinhullám elmélet alapján meghatározott kifejezéseket kell megemlitenünk, amelyekkel Moorhouse [18] és Malejev [19] foglalkozott.

Különös figyelmet érdemel Van Hove [20] munkássága. Megmutatta, hogy a neutron-szórásnak a nem statikus első Born-közelités alapján meghatározott Halpern-Johnson képlete visszavezethető a spinkorrelációs függvényekre.

Először ő, később mások is foglalkoztak a spinkorrelációs függvények meghatározásának problémájával. A spinhullám elmélet alapján ő irta fel először az $S=1/2$ speciális esetben a /12/ spinkorrelációs függvényeket /elhagyva $\gamma_k^{zz}(t)$ -ből a második tagot/.

A Curie-hőmérséklet környékén, és afelett érvényes közelitéshez mind a korrelációs függvényekkel, mind pedig a szórási keresztmetszettel kapcsolatban fenomenológikus meggondolásokat alkalmazott. Ismertté váltak azonban azóta mikroszkópikus számitások eredményei is: Elliott és Marshall [21] az első Bethe-közelités alapján, statikus közelitésben meghatározta $\gamma_k^{zz}(0)$-t/a többivel nem foglalkoztak/, Moori és Kawasaki [22] pedig egy sajátos módszerrel kapott olyan eredményeket, amelyeknek egy része azonos a mieinkkel /lásd később/.

Az alábbiakban megvizsgáljuk az általunk kapott /31/ spinkorrelációs függvényeket és /32/ neutronszórási keresztmetszetet az $\bar{\varepsilon}_\kappa = \sigma \varepsilon_\kappa$ energiarenormálás mellett.

a/ A korrelációs függvények is az ideális spinhullám elmélet eredményeit adják vissza, ha a hőmérséklet közel esik az abszolut zérusfokhoz.

Magasabb hőmérsékletek mellett csak a $\gamma_k^{\alpha\beta}(0)$ statikus közelitésekkel foglalkozunk: $\vartheta \gtrsim \vartheta_c$ esetén $\gamma_k^{\alpha\beta}(t) \equiv \gamma_k^{\alpha\beta}(0)$, tehát itt elég is.

A $\gamma^{\alpha\beta}(0)$ értékek triviálisak:

$$\gamma_0^{xx}(0) = S\sigma\left(\bar{n}+\tfrac{1}{2}\right) \quad , \quad \gamma_0^{xy}(0) = \tfrac{i}{2} S\sigma \quad , \quad \gamma_0^{y\lambda}(0) = -\tfrac{i}{2} S\sigma \, ,$$

$$\gamma_0^{yy}(0) = S\sigma\left(\bar{n}+\tfrac{1}{2}\right) \quad , \quad \gamma_0^{xz}(0) = \gamma_0^{zx}(0) = \gamma_0^{yz}(0) = \gamma_0^{zy}(0) = 0$$

$$\gamma_0^{zz}(0) = (S\sigma)^2 + (S\delta)^2 \bar{n}(\bar{n}+1)$$

Ezeknek a hőmérséklet szerinti változását ismerjük.

Vizsgáljuk most meg a $\gamma_k^{\alpha\beta}(0)$ statikus korrelációs függvényt nagy távolságok mellett. $|k| \gg |d|$ esetén elég E_κ -nak kis $\vec{\kappa}$ melletti értékeit pontosan számításba venni: nagy $\vec{\kappa}$ melletti értékei nem játszanak lényeges szerepet. Az ideális spinhullám elméletből ismeretes, hogy ilyen közelitést jelent az $E_\kappa = a\kappa^2$ előállitás. Ha ebben a közelitésben összegezés helyett integrálunk $\vec{\kappa}$ szerint, akkor az alábbi eredményekhez jutunk:

$$\gamma_k^{xx}(0) = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{v}{4\pi} \frac{e^{-\kappa_0 k}}{k_0^2 k} \quad ,$$

$$\gamma_k^{xy}(0) = \gamma_k^{yx}(0) = 0 \, ,$$

$$\gamma_k^{yy}(0) = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{v}{4\pi} \frac{e^{-\kappa_0 k}}{k^2 k} \quad ,$$

$$\gamma_k^{xz}(0) = \gamma_k^{zx}(0) = \gamma_k^{yz}(0) = \gamma_k^{zy}(0) = 0 \quad ,$$

$$\gamma_k^{zz}(0) = (S\sigma)^2 + \frac{1}{3} S(S+1) \left(\frac{v}{4\pi} \frac{e^{-\kappa_0 k}}{k_1^2 k} \right)^2 \quad , \qquad /37/$$

amelyekben v az elemi cella térfogata, továbbá

$$k_0^2 = \frac{d^2}{6a} \frac{\vartheta_c}{\vartheta} \quad ,$$

$$k_1^2 = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{S\sigma}{\delta} k_0^2 \quad ,$$

$$\kappa_0 = 0 \quad (\vartheta < \vartheta_c) \quad , \qquad /38/$$

$$\kappa_0 = \frac{1}{k_0} \left(\frac{\chi_0}{\chi} \right)^{1/2} \quad (\vartheta > \vartheta_c) \quad ;$$

$$\chi_0 = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{(\mu g)^2}{\vartheta} \quad .$$

Ezen eredményeink lényege a következőkben fogalmazható meg:

I/ a Curie-hőmérséklet alatt $\gamma_k^{xx}(0)$, $\gamma^{yy}(0)$ a távolsággal forditott arányban csökken és a hőmérséklettel arányosan növekszik, $\gamma_k^{zz}(0) - (S\sigma)^2$ a távolság négyzetével forditott arányban csökken és a hőmérséklet négyzetével arányosan növekszik. A többi korrelációs függvény zérus.

II/ A Curie-hőmérséklet felett a távolsággal való csökkenést az exponenciális tagok gyorsitják meg, a hőmérséklettel pedig nem növekednek, hanem csökkennek a zérustól különböző korrelációs függvények.

Felirhatjuk végül az általunk kapott korrelációs függvényeknek a

$\vartheta \to \infty$ esetre vonatkozó aszimptotikus értékeit is:

$$\gamma_k^{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{3} S(S+1)\delta_{\alpha\beta}\delta_k$$

Ezek a paramágneses állapot pontos korrelációs függvényei.

b/ A /32/ szórási keresztmetszetnek, ill. a benne szereplő /33/ szórási mennyiségeknek a kiértékeléséhez felhasználhatjuk előbbi vizsgálatainkat. Alacsony hőmérsékleten visszakapjuk első lépésben az ideális spinhullám elmélet alapján nyerhető eredményeket: Q^0 a ferromagnon változással nem járó, Q^+ ill. Q^- az egy ferromagnon emittálás, ill. abszorbeálás közben történő szóródás, Q^{+-} pedig az egy ferromagnon emittálás és egy ferromagnon abszorbeálás közben végbemenő neutron szóródást írja le.

Ha a hőmérséklet közvetlenül a Curie-hőmérséklet alá esik, akkor $\bar{E}_\kappa \approx 0$, tehát alkalmazhatjuk a statikus közelitést. /36/ és /37/ alapján a következőket kapjuk:

$$Q^0(q,\omega) = 0 \quad ,$$

$$Q^{\pm}(q,\omega) = \frac{1}{6} S(S+1) \frac{1}{k_0^2} \sum_\tau \frac{\delta(\omega)}{|q-\tau|^2} \quad , \qquad /39/$$

$$Q^{+-}(q,\omega) = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{v}{16 k_1^4} \sum_\tau \frac{\delta(\omega)}{|q-\tau|^2} \quad ,$$

Ha $\vartheta > \vartheta_c$, akkor $\gamma_k^{\alpha\beta}(t) \equiv \gamma_k^{\alpha\beta}(0)$, tehát ω -ra vonatkozó közelités nélkül kapjuk, hogy kis szórási szögek esetén

$$Q^0(q,\omega) = 0 \quad ,$$

$$Q^{\pm}(q,\omega) = \frac{1}{6} S(S+1) \frac{1}{k_0^2} \sum_\tau \frac{\delta(\omega)}{|q-\tau|^2} \quad , \qquad /40/$$

$$Q^{+-}(q,\omega) = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{1}{k_1^4} N^{-1} \sum_{\kappa\tau} \frac{\delta(\omega)}{[\kappa_0^2+\kappa^2][\kappa_0^2+(\kappa+q-\tau)^2]}$$

Tekintsük végül azt a határesetet, amikor $\vartheta \to \infty$. Ebben az esetben

$$Q^0(q,\omega) = 0 \quad ,$$

$$Q^{\pm}(q,\omega) = \frac{1}{6} S(S+1) \quad ,$$

$$Q^{+-}(q,\omega) = \frac{1}{3} S(S+1) \quad ,$$

a szórási keresztmetszet tehát

$$\frac{d^2\sigma(\Omega,\omega)}{d\Omega\, d\omega} = \frac{2}{3} S(S+1) \left(\frac{2ge^2}{c^2}\right)^2 G(q) F^2(q) \delta(\omega)$$

A szórási keresztmetszettel kapcsolatos vizsgálatunk a követke-

zőket mutatja:

I/ A kritikus hőmérséklet környékén a neutron szóródásban maximumnak kell fellépnie: a Bragg-szóródást kivéve a Curie-hőmérsékletig nő, a Curie-hőmérséklet felett pedig csökken a különbözőképpen szórt neutronok intenzitása. Ezt a jelenséget ismert kritikus szóródással azonosithatjuk.

II/ A Curie-hőmérsékletet jóval meghaladó hőmérsékleteken a paramágneses szóródás ismert képletéhez jutottunk.

12/ Összefoglalás és következtetések

E dolgozatunkban - mint azt a bevezetőben is jeleztük - annak a feladatnak a megoldására tettünk kisérletet, hogy az ideális spinhullám elmélet összefüggésein végezzünk olyan renormálást, amellyel nemcsak az alacsony, hanem a magasabb hőmérsékleteken: a Curie-hőmérséklet környékén és afelett is elfogadható eredményhez jutunk.

A renormálást az ideális spinhullám elmélet alap összefüggésein és alapmennyiségein hajtottuk végre, mégpedig

a/ renormáltuk - pontosabban általános feltételek mellett renormáltnak feltételeztük - a ferromagnonok energiáit;

b/ renormáltuk a ferromagnonok rendszerének alapenergiáját /vakuum-energiát/ - ami lényeges vonás, mert enélkül a belső energia $E = U + \sum_{\kappa} \bar{E}_{\kappa} \bar{n}_{\kappa}$ kifejezése/ miként Ginzburg és Fain Hamilton-operátora alapján/ [8] végtelen naggyá válna $\vartheta \to \infty$ esetén, holott zérussá kell válnia;

c/ renormáltuk végül a spin-operátoroknak a Dyson-reprezentációban előállitott Malejev-kifejezéseit. Ezzel kapcsolatban az alábbi értelmezést végezhetjük el. A renormált spinek gerjesztetlen állapotban a mágneses tér irányába mutatnak. Vetületük $\bar{S}$, amely a hőmérséklettől függ. Gerjesztés folytán megváltoznak vetületeik, a kvantumszám változás azonban nem egységnyi, hanem δ értékü. A Curie-hőmérséklet felé haladva δ csökken: a Curie-hőmérsékleten zérussá válik.

Az alap-összefüggések renormálása után meghatároztuk a mágnesességhez a termodinamikai mennyiségeket /belső energia, szabad energia, entrópia, állapotösszeg/, a spinkorrelációs függvények teljes rendszerét és a neutron-szórási keresztmetszetet.

Ezután tértünk át a renormált ferromagnonok energiái konkrét megválasztásának kérdésére. A renormált ferromagnonok energiájául először az

ideális spinhullám elméleti kifejezést választottuk, amely nem tartalmazza azt az energia-járulékot, amelyet a dinamikai kölcsönhatás okoz. Ez a speciális, a valódi értéket csak alacsony hőmérsékleten közelitő kifejezés alkalmazása azért volt érdekes, mert igy külön megnézhettük, milyen hatása van a kinematikai kölcsönhatásnak. Láttuk, hogy a mágnesezettségben az $S=\frac{1}{2}, 1$ esetekben ϑ^3 -el, az $S>1$ esetekben pedig - összhangban Dyson és mások eredményeivel - ϑ^4 -nél magasabb rendben jelentkezik hatása. Azt is láttuk, hogy a kinematikai kölcsönhatást figyelembe vevő /20/ formula a magasabb hőmérsékleteken jó alsó korlátot biztosit a mágnesezettség /és egyéb mennyiségek értékei/ számára - azaz nem válik negativvá - már ezzel az energia feltevéssel is.

Az utóbbi állitás helyességéről általános energia renormálás mellett is meggyőződtünk.

A termodinamikai és a szórással kapcsolatos mennyiségeket a ferromagnon energiának a mágnesezettséggel történt, tehát selfkonzisztens renormálását a Bogoljubov-Tyblikov közelités alapján végeztük el.

E közelitésben azt találtuk, hogy az állapot-összeg és az entrópia pozitiv végtelenné, a szabad energia pedig negativ végtelenné válik a Curie-ponton, a belső energia és a fajhő azonban - a mérhető mennyiségek - a várakozásnak megfelelő viselkedést mutat, pl. mindkettő zérushoz tart, midőn $\vartheta \to \infty$ - ellentétben az ideális spinhullám elmélet kifejezéseivel, amelyek végtelen értékhez vezetnek.

A részleteket nem tekintve megállapithatjuk, hogy jó közelitéshez jutottunk a spinkorrelációs függvényekkel és a neutronszórási keresztmetszettel kapcsolatban is: alacsony hőmérsékleten az ideális spinhullám elmélet eredményeit, egészen magas hőmérsékleteken pedig a paramágnesség elméletének eredményeit kaptuk vissza. Külön vizsgálat alá kell azonban vennünk a közbülső tartományra - a Curie-hőmérséklet környékére - vonatkozó eredményeinket.

a/ Azt kaptuk, hogy a $\gamma_k^{\alpha\beta}(t)$ spinhorrelációs függvények csak a Curie-hőmérséklet alatt függnek az időtől, a Curie-hőmérséklet fölött nem, ami ugy értelmezendő, hogy a ferromagnonok rendszerében a spinek között csak a Curie-hőmérséklet alatt folynak le véges sebességgel a fluktuációk; a Curie-hőmérséklet felé haladva tehát mind lassubbakká válnak az időbeli változások. /Ez a megállapitásunk természetesen csak ebben a közelitésben igaz/.

b/ Részletesebben megvizsgáltuk a $\gamma_k^{\alpha\beta}(0)$ függvényeket, amelyek $\vartheta < \vartheta_c$ esetén pontos, $\vartheta < \vartheta_c$ esetén pedig statikusan közelitő értékei a $\gamma_k^{\alpha\beta}(t)$ függvényeknek. Azt találtuk, hogy a zérustól különböző korre-

lációs függvények közül nagy távolság esetén $\gamma_k^{xx}(0)$, $\gamma_k^{yy}(0)$ a távolság, $\gamma_k^{zz}(0)$ helytől függő része pedig a távolság négyzetével fordított arányban csökken - ha $\vartheta < \vartheta_c$. A $\gamma_k^{zz}(0)$ -ben $(S\sigma)^2$ a távolsággal nem csökkenő korrelációt /távoli rendet/ jelent. A Curie-hőmérséklet felett fokozzák a csökkenést az exponenciális tényezők.

Megállapithatjuk, hogy a korrelációs tartományok méretei egészen az abszolut zérus pontig nőnek a $\vartheta \to \infty$ határesettől kezdve.

Vessük össze a spinkorrelációs függvényekre kapott eredményeinket egyéb eredményekkel. Van Hove a Curie-pontot közvetlenül megelőző hőmérsékletek mellett nem határozta meg a spinkorrelációs függvényeket. A Curie-hőmérsékletnél magasabb hőmérsékletek felé is csak egy átlagos spinkorrelációs függvényt határoz meg. Ennek térfüggése $\gamma_k^{xx}(0), \gamma_k^{yy}(0)$ térfüggésével egyezik meg.

Elliott és Marshall azt kapta, hogy a $\gamma_k^{zz}(0)$ függvény /a többit nem határozta meg/ $e^{-\kappa_1 k}/k$ alakban csökken a távolsággal, amelyben κ_1 nemcsak a Curie-hőmérséklet felett, hanem az alatt is különbözik zérustól. / $\vartheta = \vartheta_c$ esetén zérus/. A mi $e^{-2\kappa_0 k}/k^2$ alaku eredményünk mellett látszik szólni azonban az a tény, hogy 1./ az exponenciális csökkenés a renormálatlan spinhullámok tartományában nincs meg, 2./ ugyancsak ebben a tartományban $1/k^2$ -el csökken a szóban forgó korrelációs függvény.

A mieinkhez leginkább hasonló eredményeket kapott Moori és Kawasaki [22]. $\gamma_k^{zz}(0)$-t azonban ők is csak a Curie-hőmérséklet feletti tartományra vonatkozólag határozták meg, és a $e^{-\kappa_2 k}/k$ alaku eredményükkel az előbbiekkel azonos okok miatt nem egészen értünk egyet.

A szórási keresztmetszetre kapott eredményünknek egyéb eredményekkel való összehasonlitását a spinkorrelációs függvényekre vonatkozó fenti összehasonlitás határozza meg. A szórási mennyiségeknek kis szögek mellett történő /37/ alaku változásait az alacsony hőmérséklet melletti változásokat meghatározó ideális spinhullám elmélet eredményeire való hivatkozással indokolhatjuk. A Curie-hőmérséklet felett ugy változik /lásd 31/, mint más szerzők szerint és Q^{+-} is átmegy olyan változásba, ha nem közvetlenül a Curie-hőmérsékletnél vagyunk.

A Bogoljubov-Tyablikov közelités alapján kapott kifejezéseink: a szórási keresztmetszet, korrelációs függvények, termodinamikai mennyiségek kifejezései - részletesebb vizsgálatot igényelnek, amelyhez későbbi cikkünkben szándékozunk visszatérni. Felmerülnek azonban további kérdések is a dolgozatunkban foglaltakkal kapcsolatban. E kérdések az alkalmazott feltevésekhez füződnek.

Az ideális spinhullám elmélet renormálására tett kisérletünk során három fontosabb feltevéssel éltünk:

1/ a dinamikai kölcsönhatás figyelembe vehető a ferromagnonok energiáinak renormálásával / a mozgásegyenlet linearizálásával/;

2/ a renormálás végrehajtható a spin-operátorok Dyson-reprezentációbeli ideális kifejezésein keresztül;

3/ a ferromagnonok renormált energiáit jól adja meg a Bogoljubov-Tyablikov közelités.

Az első feltevéssel kapcsolatban szükség lenne további vizsgálatokra. A probléma azonban bonyolultnak látszik.

A második feltevéssel kapcsolatban - annak ellenére, hogy lényegesen leegyszerüsitette a problémát - szintén szükségesek további vizsgálatok.

A harmadik feltevés ujabb lehetőségeket vet fel. Hasznos lenne megnézni, hogy az energiarenormálás egyéb utjain milyen eredményhez jutnánk. Megjegyezzük pl.,hogy a 4. fejezetben felirt energiával a mágnesezettség /20/ képlete a Dyson eredményekhez vezet, ha $S > 1/2$.

Azt is el tudjuk képzelni, hogy a /23/ összefüggéseket egy félfenomenologikus módszer alapjává tegyük: attól függetlenül, hogy összhangban maradunk-e a Heisenberg-modellel vagy sem - az $\bar{E}_k$ renormált ferromagnon-energiát valahogyan meghatározva következtethetünk egyéb mennyiségekre. Ennél a módszernél tehát a ferromagnon energiájának és a hullámvektornak a hőmérséklettől függő kapcsolatát, a diszperziós összefüggést kellene meghatároznunk.

Ezekkel a kérdésekkel is későbbi dolgozatunkban kivánunk foglalkozni.

Befejezésül köszönetet mondok Pál Lénárd igazgatóhelyettesnek, szakmai vezetőmnek - sokrétü segitségéért, támogatásáért; Siklós Tivadar főosztályvezetőnek és Zawadovski Alfrédnek kritikai megjegyzéseikért és tanácsaikért, valamint Hargittai Csabának, Gordon Jánosnak és másoknak - érdeklődésükért.

Irodalom

[1] Heisenberg, W.: Zs.f.Phys. 49, 31 1929

[2] Bloch, F.: Zs.f.Phys. 61, 206 1930

[3] Holstein, T., Primakoff, H.: Phys.Rev. 58, 1908 1940

[4] Oguchi, T.: Phys.Rev. 117, 117 1960

[5] Dyson, F.J.:Phys.Rev. 102, 1317; 1230 1956

[6] Н.Н.Боголюбов,С.В.Тябликов, Докл.Акад.Наук.I26.53.I959.

[7] Englert, F.: Phys.Rev. 5, 102 1960

[8] В.Л.Гинзбург,В.М.Файн, ЖЭТФ,39,II,I960.

[9] Mori, H., Kawasaki, K.: Rifp-14, Kyoto University, Japan, 1961

[10] Tahir-Kheli, R.A., Haar, D.ter,: Phys.Rev. 127, 88 1962

[11] Ю.А.Изюмов,Докл.Акад.Наук,I25,6,I227,I959.

[12] Praveczki, E.: Fiz.Met. i Metallov. 12, 2 296. 1961

[13] Keffer, F., Loudon, R.: Suppl.J.Appl.Phys. 32, 2 1961

[14] Brout, R., Englert, E.: Bull.Am.Phys.Soc. 6, 55 1961

[15] Tahir-Kheli, R.A., Haar, D.ter.,: Phys.Rev. 127, 95 1962

[16] С.В.Тябликов, Е.Н. Яковлев, Докл. Акад. Наук СССР, I44,№2,303, I962

[17] Halpern, O., Johnson, M.H.: Phys.Rev. 55, 898 1937

[18] Moorhause, R.G.: Proc.Phys.Soc. A 64, 1097 1951

[19] С.В.Малеев, ЖЭТФ,33,4,IOIO,I957.

[20] Van Hove, L.: Phys.Rev. 89, 1189 1953

[21] Elliott, R.J., Marshall, W.: Rev.Mod.Phys. 30, 1, 89 1958

Érkezett: 1963 jun. 10.
KFKI Közl. 11.évf. 5. szám, 1963.

„SZÉLES-JELŰ" (WIDE-LINE) MAG MÁGNESES REZONANCIA SPEKTRÓMÉTER*

TOMPA KÁLMÁN és TÓTH FERENC
MTA Központi Fizikai Kutató Intézete

A felépített térmodulációs rendszerű, oszcillátor detektort tartalmazó mag mágneses rezonancia spektrométert 1...15 MHz frekvencia tartományban próbáltuk ki. Széles-jelek vizsgálatára alkalmazható, a jelek regisztrálása automatikusan történik. Az oszcillátor rácsköri rezgőkörén fellépő rádiófrekvenciás feszültség amplitúdója a frekvenciától függetlenül szabályozható, maximális értéke 400 mV. A berendezés stabilitásának relatív értéke $\pm 6 \cdot 10^{-5}$, a mágneses tér gradiensének értéke az állandó mágneses térre merőleges síkban kisebb, mint 0,3 oersted/cm. A ^{63}Cu izotóp rezonancia abszorpciós görbéje fém mintán.

Bevezetés

A mag mágneses rezonancia spektroszkópia 1945-ben történt felfedezése óta olyan kísérleti módszerré fejlődött, amely nemcsak a magfizika számára nyújt értékes információkat (pl. a mag mágneses dipólmomentumának, μ-nek és elektromos kvadrupólmomentumának, Q-nak a meghatározása), hanem sajátos bepillantást enged a gáz, folyadék és szilárd fázisban levő atomok és molekulák fizikájába is. Nem magfizikai szempontból nézve a módszert, nem kutatjuk μ és Q eredetét, értéküket az atommag jellemző adataként ismertnek tekintjük.

A módszer, amint ismeretes, pl. [1], [2], az atommagok saját impulzusmomentumának, $I\hbar$ (I: magspin; $\hbar$: Planck-állandó) és paramágneses dipólmomentumának, $\mu = \gamma I\hbar$ (γ: az atommag giromágneses faktora) az iránykvantálásán alapszik. Állandó mágneses térben az atommagok különböző potenciális energiával rendelkeznek aszerint, hogy mekkora a mágneses momentumuk mágneses térre eső vetülete. Ezen energianívók között megfelelő energiájú és polaritású elektromágneses sugárzással $\Delta m = \pm 1$ kiválasztási szabálynak megfelelően, átmenetek hozhatók létre. A gerjesztő sugárzás frekvenciája $\nu = (2\pi)^{-1} \cdot \gamma \cdot H_{eff}$ (H_{eff}: az atommag által érzett mágneses tér) rádiófrekvenciás tartományba esik. Természetesen az átmenet a környezetükkel kölcsönhatásban levő atommagok esetén nem egyetlen frekvencián (ν_0), hanem egy véges frekvencia tartományban történik.

A rezonancia abszorpciós görbét a következő paraméterekkel jellemezhetjük: helyzet, intenzitás, amplitúdó, szélesség és alak. A paraméterek függnek a mag helyén levő elektromos térgradiens és mágneses térerősség értékétől. A tereket viszont — az alkalmazott külső terektől eltekintve — a rezonáns mag környezetében levő atomok és elektronok határozzák meg. Természetesen várható, hogy az atomok ill. elektronok számát, vagy elrendeződését befolyásoló jelenségek (fázisátalakulás, összetételváltozás, rácshibák, diffúzió, külső körülmények megváltozása stb.) megváltoztatják a rezonancia-jel egy, vagy több paraméterét. Például fémek esetén az ötvözés az összes paramétert, hidrosztatikus nyomás csak a görbe helyzetét változtatja meg. Így a kapott mag mágneses rezonancia spektrum alapján az anyag-

* Érkezett 1962. nov. 6.

minta belső elektromos térgradiensérőI, belső mágneses térerősségéről (pl. antiferro és ferro-mágneses anyagokban a rezonáns atommagok helyén levő térerősségről), a rezonáns magot tartalmazó kristály szerkezetéről, ill. ezek változásairól az anyagmintában végbemenő folyamatokról (diffúzió, rendeződés, egyes molekulacsoportok mozgása stb.) kapunk felvilágosítást.

Felhasználásuk szerint a folyamatos gerjesztésű spektrométerek két csoportját különböztetjük meg:

1. Nagyfelbontású mag mágneses rezonancia spektrométerek kémiai eltolódás, spin—spin kölcsönhatás vizsgálatánál molekula-szerkezet meghatározásánál, kémiai reakciók kinetikájának tanulmányozásánál, kvantitatív kémiai analízisnél stb. használhatók. Általában egy, vagy több fix frekvenciára hangolt berendezések. Felbontóképesség 10^{-8}.

2. Széles-jelű mag mágneses rezonancia spektrométerek szilárdtestfizikai vizsgálatoknál, relaxációs idő méréseknél, precíz giromágneses faktor meghatározásánál stb. használhatók fel. Az előbbi típusú berendezésekkel szemben, általában széles frekvencia tartományban hangolhatók. Az előírt homogenitási követelmény az anyagminta körülbelül 1 köbcentiméteres térfogatára értendő, szemben a nagyfelbontású berendezések anyagmintájának néhányszor tíz köbmilliméteres térfogatával. Felbontóképesség $10^{-4}...10^{-6}$. Detektálási módszer szerint a berendezések a következőképpen oszthatók fel:

1. egytekercses módszerek
   a) oszcillátoros detektálás
   b) váltóáramú hidas detektálás,
2. kéttekercses módszerek (Bloch-típusú, vagy indukciós).

A Bloch- és a váltóáramú hidas módszer előnye, hogy mindkét módus (abszorpciós és diszperziós) detektálására alkalmas, és a diszperziós módus használata ismeretlen jelek keresésénél előnyös, továbbá nagyobb frekvencia stabilitást tesznek lehetővé mint az oszcillátoros módszer. Hátrányuk bonyolultabb felépítésük, és külön gondot igényel az abszorpciós és diszperziós módusok tiszta szétválasztása.

Az oszcillátoros módszer csak az abszorpciós módus detektálására alkalmas, általában kisebb frekvencia stabilitást biztosít, egyszerűbb felépítésű. Egyszerűsége miatt alkalmaztuk az oszcillátoros detektálást a felépített mag mágneses rezonancia spektrométerben.

A tervezés általános szempontjai

Bármilyen detektálási módszert választunk is a rezonancia abszorpció a mérőtekercset tartalmazó rezgőkör sarkain levő rádiófrekvenciás feszültség kis változásában nyilvánul meg. Lineáris az a detektor, melynek a kimenetén levő egyenfeszültség változás arányos a rádiófrekvenciás bemenő feszültség amplitúdójának változásával, tehát a rezonancia abszorpciós jel amplitúdójával. A detektálandó jel amplitúdójának nagyságával kapcsolatban két mennyiséget kell meghatározni: a rezonancia esetén fellépő feszültséget, és a berendezés által detektálható legkisebb jelfeszültséget, azaz a berendezés jel/zaj viszonyát.

Jelfeszültség. Az appendixben meghatároztuk a rádiófrekvenciás feszültségváltozás értékét. Ennek csúcsértéke (A, 5) alapján:

$$\Delta E_0 = KN_0\gamma^2 I(I+1)\frac{1}{T}\nu_0^2\xi Q_0 D^2 n g(\nu_0)\frac{H_1}{1+0{,}5\gamma^2 H_1^2 T_1 g(\nu_0)} \text{ [Volt]},$$

ahol bevezettük a $K=300\cdot\pi^2h^2(6\text{ k c})^{-1}$ rövidítést, a használt szimbólumok jelentése pedig a következő: k: Boltzmann állandó, c: fénysebesség, N_0: az anyagminta egy köbcentiméterében levő rezonáns atommagok száma, T: abszolút hőmérséklet, ξ: kitöltési tényező, Q_0: az anyagmintát tartalmazó mérőtekercs jósági tényezője, D, ill. n: a tekercs átmérője, ill. menetszáma, $g(\nu_0)$ a telítetlen abszorpciós görbe normált alakfüggvényének értéke ν_0 frekvencián, H_1: a nagyfrekvenciás mágneses tér fél-amplitúdója, és T_1 a spín-rács relaxációs idő.

A formula alapján látható, hogy a méréseket alacsony hőmérsékleten, nagy mágneses térben, nagy ξ és Q_0 értékeknél célszerű végezni. Látható továbbá, hogy ΔE_0-nak H_1 függvényében, $H_1^{\text{opt}}=(\gamma\sqrt{0{,}5\,T_1 g(\nu_0)})^{-1}$ értéknél szélsőértéke van. A maximum értéke:

$$\Delta E_0^{\max} = KN_0\gamma I(I+1)\frac{1}{T}\nu_0^2\xi Q_0 D^2 n\sqrt{\frac{g(\nu_0)}{2T_1}} \text{ [Volt]}.$$

Határozzuk meg a várható jelfeszültségek értékét ^{63}Cu atommagra tiszta fémminta esetén, a következő kísérleti feltételek mellett: $Q_0=100$; $D=1{,}1$ cm; $n=15$; $\xi=0{,}1$ cm^3; $\nu_0=7$ MHz; $T=300$ K° *Redfield A.* [3] mérései szerint ^{63}Cu izotópra $g(\nu_0)=(0{,}228\pm0{,}02)\cdot10^{-3}$ sec; $T_1(3\pm0{,}6)\cdot10^{-3}$ sec. Így $H_1^{\text{opt}}=0{,}24$ oersted és $\Delta E_0^{\max}=4{,}7\cdot10^{-5}$ Volt. Talán nem érdektelen megemlíteni, hogy egy szokásos oszcillátortípusnál $H_1=5\cdot10^{-3}$ oersted térerősség könnyen megvalósítható, és itt a várható feszültség értéke $\Delta E_0=2\cdot10^{-6}$ Volt. Hasonló nagyságrendű feszültség várható azonos számú rezonáns magot tartalmazó fém alumínium minta esetén is.

Jel/zaj viszony. A berendezés jel/zaj viszonyának meghatározásához szükséges ismerni az F zajszámmal jellemzett, Δf effektív sávszélességű erősítő rendszer bemenetére vonatkoztatott zajfeszültséget, melynek értéke az ismert formula alapján (lásd pl. [4]): $\Delta V=(4R_pKTF\Delta f)^{\frac{1}{2}}$, $Rp=\omega_0 LQ_0$ a rezgőkör rezonancia ellenállása.

A jel/zaj viszony pedig a következő formulával adható meg:

$$\varrho = BN_0\gamma^2 I(I+1)\frac{1}{T^{3/2}}\nu_0^{3/2}\xi\frac{D^2Q_0^{1/2}n}{L^{1/2}}\frac{1}{(F\Delta f)^{1/2}}g(\nu_0)\frac{H_1}{1+0{,}5\gamma^2H_1^2T_1g(\nu_0)},$$

ahol a $B=\dfrac{\pi^{3/2}h^2}{\sqrt{2}\,12ck^{3/2}}$ rövidítést vezettük be.

A jelfeszültséggel kapcsolatban elmondottakhoz annyi hozzáfűzni valónk van, hogy olyan erősítőrendszer megépítése célszerű, melynél a zajszám és az effektív sávszélesség kicsi. F nem csökkenthető minden határon túl.

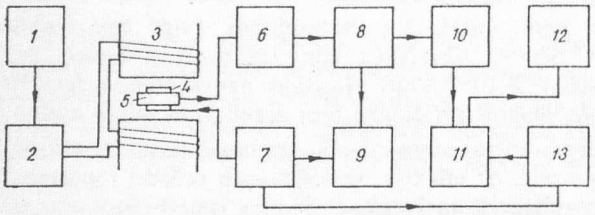
A sávszélességgel kapcsolatban érdemes megemlíteni, hogy lineáris egyenirányítás esetén az effektív sávszélesség $\Delta f=(2\Delta f_1\cdot\Delta f_2)^{\frac{1}{2}}$, ahol Δf_1 a rádiófrekven-

ciás Δf_2 a hangfrekvenciás erősítő sávszélessége, fázisérzékeny egyenirányításnál Δf-et az RC kör időállandójának a reciproka határozza meg, és tized Hz nagyságrendű effektív sávszélesség is könnyen elérhető. A megengedhető legkisebb sávszélességet az egész spektrométer időbeli stabilitása határozza meg.

A jel/zaj viszony értéke a jelfeszültség számolásnál megadott feltételek és $F=3$; $\Delta f=2/3\ \mathrm{sec}^{-1}$; $L=2\ \mu$ henry értékek mellett, 5 moersted rádiófrekvenciás térnél: $\varrho=1{,}2\cdot 10^2$.

A berendezés tömbvázlata és működése

Az 1. ábrán látható az általunk felépített széles-jelű mag mágneses rezonancia spektrométer tömbvázlata. A vizsgálandó anyagmintát a mérőfejben elhelyezett induktivitás tartalmazza, amely egy párhuzamos kapacitással az oszcillátor rácsköri rezgőkörét alkotja. Abban az esetben, ha az állandó mágneses tér térerőssége és a rezgőkör sajátfrekvenciája kielégíti az $\omega_0=\gamma H_{\mathrm{eff}}$ rezonancia feltételt, rezonancia abszorpció lép fel és az oszcillációs amplitúdó csökken. Ennek az amplitúdó változásnak — ellentétben az amplitúdó véletlenszerű változásaival — az a jellemző tulajdonsága, hogy függ a mágneses térerősségtől. A modulátor és a Helmholtz tekercspár segítségével modulálva a mágneses teret, az eredő térerősség $H=H_0+H_{\mathrm{m}}\cos\omega_{\mathrm{m}}t$ alakú lesz, és az amplitúdó változás pedig az idő periodikus függvénye ($(2\pi)\omega_{\mathrm{m}}^{-1}$ periódusidővel) lineáris egyenirányítás után egy felül áteresztő szűrővel leválasztható a véletlenszerű ingadozás okozta amplitúdó változásoktól. Ha a modulációs amplitúdó nagyobb az abszorpciós görbe szélességénél, úgy alacsony frekvenciás erősítés után az oszcilloszkópon az abszorpciós görbe figyelhető meg, ha az oszcilloszkóp vízszintes eltérítő lemezpárjára fázistolón keresztül a modulátor feszültségét visszük.



1. ábra. A „széles-jelű" mag mágneses rezonancia spektrométer tömbvázlata. 1: háromszög-jel generátor, 2: tápegység, 3: elektromágnes, 4: Helmholtz tekercspár, 5: mérőfej, 6: oszcillátor, 7: modulátor, 8: alacsonyfrekvenciás erősítő, 9: oszcilloszkóp, 10: szelektív erősítő, 11: fázisérzékeny egyenirányító, 12: regisztráló, 13: fázistoló

Kis intenzitású jelek esetén az oszcilloszkópos detektálás nem megfelelő a nanyobb sávszélességek miatt. Láttuk, hogy a sávszélesség csökkentésével a jel/zaj viszony javítható. Hogy torzulás ne lépjen fel a sávszélesség miatt a térmodulációs amplitúdót jóval kisebbre választjuk, mint az abszorpciós görbe szélessége. Ebben az esetben a lineáris egyenirányítás után kapott $2\pi/\omega_{\mathrm{m}}$ periódusú jelfeszültség amplitúdója jó közelítéssel az abszorpciós görbe mágneses tér szerinti deriváltjával lesz arányos. Lineárisan változtatva a mágneses teret a háromszögjel generátor segítségével a derivált értéke az abszorpciós görbe minden pontján meghatározható, vagy regisztrálható.

Temészetesen a sávszélesség csökkentésének a legegyszerűbb módja az lenne, hogy szelektív erősítőt használunk. Nagyon kis intenzitású jelek vizsgálatánál tized Hz nagyságrendű sávszélesség szükséges, ezért egyszerű szelektív erősítő helyett fázisérzékeny detektort, vagy másnéven lock-in detektort használnak.

Először a hangfrekvenciás jelet $\Delta\omega_m \ll \omega_m$ sávszélességű szelektív erősítővel a zajfeszültséggel együtt erősítjük. A szelektív erősítő kimenetén levő $y(t) = E_j \sin\omega_m t + v(t)$ (ahol $v(t)$ a zajfeszültség pillanatnyi értéke, E_j pedig a megfelelően felerősített jelfeszültség amplitúdója) feszültséget összekeverjük egy periodikus feszültséggel, $R(t) = E_r \sin(\omega_m t + \varphi)$ és a kapott feszültséget $\tau \gg 1/\Delta\omega_m$ tartományra integráljuk. Az integrálás után a kimeneten levő jel/zaj viszony ugyanaz, mintha $\Delta f = 2/\tau$ sávszélességű szűrőt használtunk volna [5]. $E_j \sin\varphi_m t$ és $R(t)$ között fáziskoherenciának kell fennállnia, amit úgy biztosítunk, hogy a mágneses tér modulálását ugyanaz a generátor végzi, mint amelyik a fázisérzékeny detektor $R(t)$ referencia feszültségét szolgáltatja. A következőkben a spektrométer egyes elemeinek részletesebb ismertetésével foglalkozunk.

Elektromágnes

Az állandó mágneses teret ≈ 200 mm (8 inch) pólusátmérőjű 40 mm pólustávolságú Newport gyártmányú D tip. elektromágnes állítja elő. A pólusok átlagos távolsága nem változtatható, csak felületeik párhuzamosíthatók. A mágnes felállítása után a pólusok párhuzamosságát mechanikusan ellenőriztük, 0,05 mm osztású lyukmikrométerrel négy ponton végezve méréseket. Becslésünk alapján a pólusok párhuzamostól való eltérése kisebb, mint 0,02 mm. A mágneses tér homogenitását a következőképpen határoztuk meg: A mágneses térre merőleges síkban levő egymásra merőleges két irányban végeztünk tér mérést mag mágneses rezonancia módszerrel (proton rezonancia alapján). A mágnes-pólusok középpontjától jobbra és balra, egymástól 4 cm távolságra elhelyezett két mérőtekercscsel meghatároztuk a mágneses tér két-két azonos térerősségű pontját, és ezen pontok álta határolt tartományokon belül egy-egy tekercset tartalmazó mérőfejet mozgatva mértük a rezonancia görbe eltolódását, az előre bekalibrált oszcilloszkóp ernyőn (a modulációs amplitúdó meghatározott értékénél) 10 MHz frekvencián. Eltolódást a leolvasási hiba határán belül nem figyeltünk meg. Feltéve, hogy a mágneses tér a vizsgált intervallumok felében (2 cm) monoton változik és leolvasási pontosságunk egy osztásrész (2,4 kHz) úgy, a mágneses térerősség gradiensének értéke mindkét irányban kisebb, mint 0,3 oersted/cm. A mágneses térrel párhuzamosan nem végeztünk térerősség mérést. A kapott érték a térerősség változás felső határa.

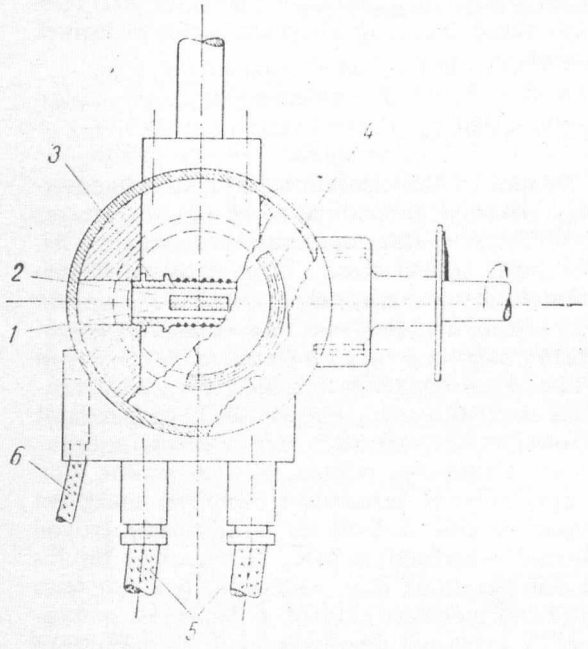
Meghatároztuk a mágneses térerősség értékét a gerjesztő áram függvényében ^1H és ^7Li magok rezonanciája alapján, IMI-2 szovjet gyártmányú térerősség mérővel, Marconi standard szignál-generátorral frekvencia összehasonlítási módszerrel mérve a frekvenciát. A légrésben előállított mágneses térerősség 0,75...10 A gerjesztő áram tartományban 1400...9200 oersted.

Tápegység

Az elektromágnes táplálását Newport gyártmányú, B Mark II. típusú tápegység végzi. Az áramstabilitás 3...8 A tartományban $= \pm 1 \cdot 10^{-4}$. A tápegység árama külső háromszögjel generátor segítségével vezérelhető. 1 A kimenő áramváltozáshoz -25 V vezérlőjel feszültség szükséges. A megengedett maximális sweep sebesség esetén a kimenő áram változásának a sebessége 0.25 A/sec.

Mérőfej

A mérőfej legfontosabb része a rádiófrekvenciás mágneses teret előállító induktivitás. Láttuk, hogy lehetőleg minél jobb jósági tényezőjű tekercset kell alkalmaznunk, ezért a plexi tartókra tekercselt induktivitások ezüst huzalból készültek és a tekercset az oszcillátorral összekötő vezetéket úgy készítettük, hogy minél rövidebb, és kisebb ellenállású legyen. A mérőtekercsek a kívánt frekvenciasávnak megfelelően könnyen cserélhetők, és értékük mikrohenry nagyságrendű.



2. ábra. Mérőfej. 1: anyagminta, 2: anyagminta tartó, 3: mérőtekercs, 4: modulációs tekercs, 5: mérőfej-oszcillátor összekötő kábelek, 6: modulációs vezeték

A mérőfejben helyezkedik el a Helmholtz elrendezésű modulációs tekercspár, segítségével 0...13 oersted térerősségű 30 Hz frekvenciájú modulációs tér állítható elő.

Különös gondot fordítottunk a tekercsek árnyékolására, a modulációs tekercspár egyszeres, a mérőtekercs kétszeres 0,3 cm vastagságú árnyékoló dobozban van.

A mérőfej konstrukciója az anyagminta gyors cseréjét és az állandó mágneses térre merőleges tengely körüli forgatását is lehetővé teszi. Felépítése a 2. ábrán látható.

Háromszög-jel generátor

A mágneses teret adott időtartamon belül időben lineárisan háromszög-jel generátor változtatja, amelynek kimenő jele vagy az elektromágnes tápegységét vezérli, vagy a közvetlenül a mérőfejen elhelyezett tekercspárra vihető. A generátornak nem szabad rontania a mágneses tér időbeli stabilitását, ezért nullpont ingadozásából eredő hibának kisebbnek kell lennie, mint a mágnes tápegység áramának maximális ingadozása, amelynek relatív értéke $\pm 1 \cdot 10^{-4}$. Ilyen nagy pontosságú hosszú időtartamú jelet motorral forgatott helipottal szoktak előállítani [6], azonban e módszerrel nem mindig lehet megvalósítani a kívánt pontosságot és hátránya, hogy periódusideje tág határok között nehezen változtatható. Ehelyett az időben lineárisan változó amplitúdójú feszültséget nagypontosságú nem terhelt referencia feszültség elektronikus integrálásával állítjuk elő. Az áramkör működése a Miller-integrátorra vezethető vissza, lényege, hogy egy nagy erősítésű erősítő bemenetére kondenzátoron keresztül visszacsatoljuk a kimenő feszültséget, és R ellenálláson keresztül pedig egyenfeszültséget adunk, amelynek polaritását periódikusan vál-

toztatjuk egy megadott kimenőszint elérése után. A 3. ábrán látható az áramkör vázlata. A négypólus átviteli függvényének Laplace transzformáltja a következő:

$$\frac{E_{be}(p)-Eg(p)}{R}=\frac{Eg(p)-E_{ki}(p)}{1/pC},$$

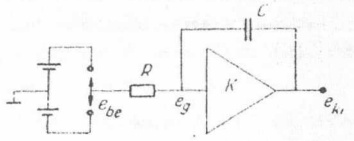
és $E_{ki}(p)=KE\ (p)$, ahol $E(p)$ a feszültség Laplace-transzformáltja, p a d/dt differenciál operátor, K az erősítési tényező, a többi betű jelentése a 3. ábrán látható.

Ha K értéke elég nagy, akkor

$$E_{ki}(p)=-\frac{E_{be}(p)}{pCR},$$

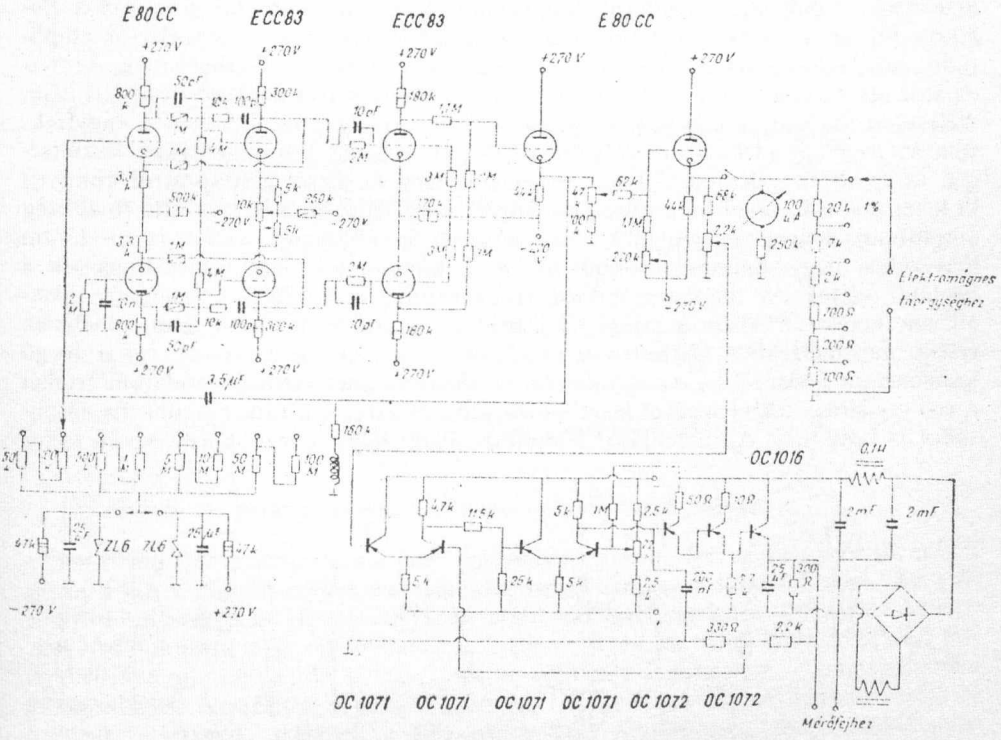
illetve

$$e_{ki}=-\frac{1}{RC}\int e_{be}dt.$$



3. ábra. Háromszög-jel generátor elvi kapcsolási rajza

Konstans e_{be} esetén a kimenő feszültség az időnek lineáris függvénye lesz. A periódus-idő kényelmesen változtatható 1 sec...$3\cdot10^3$ sec tartományban a kifejezésben szerepelő bármelyik mennyiség, legegyszerűbben R változtatásával. Az erősítő direktcsatolt nagyerősítésű egyenfeszültség-erősítő, kis értékű nullpont ingadozás-



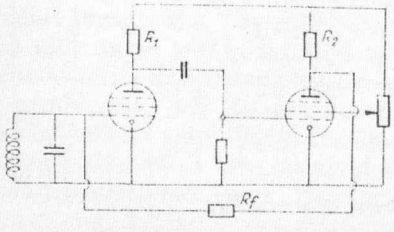
4. ábra. Háromszög-jel generátor

sal (250 μV) és 10^{-11} A-nél nem nagyobb rácsárammal. Így a kimenő feszültség driftje $\pm$ 50 V kimenő jel esetén kisebb, mint 5 mV. A visszacsatoló C kapacitás átvezetési ellenállásának a lehető legnagyobbnak kell lennie, hogy ne csökkentse az erősítést és ne növelje az integrálás hibáját. A mágnes tápegységre vitt vezérlő feszültség le van osztva, alapvonala el van tolva úgy, hogy a kimeneten kapott vezérlőjel 0 és -25 V között változik.

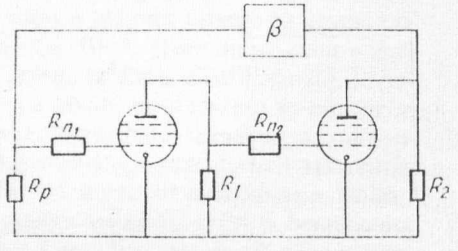
Közvetlenül a mérőfejre vihető feszültséget egy nagystabilitású egyenáramú tranzisztoros erősítő kimenetéről vehetjük le, 3 ohm-os terhelő impedancia esetén a kivehető maximális áram 2 A. A jel amplitúdója 10 dB-es lépcsőkben összesen 60 dB-t osztható. A generátor kapcsolási rajza a 4. ábrán látható.

Oszcillátor

Magrezonancia mérések céljára kizárólag rácsáram nélküli A osztályú oszcillátor típusok jöhetnek számításba. Mivel a rácsáram okozta amplitúdó szabályozás elmarad, az oszcilláció előírt szinten való tartásához a visszacsatolást nagyon pontosan kell beállítani, ezért üzemük nagyon kényes, a hangolás, az üzemi feszültségek kismértékű ingadozása a beállított oszcillációs szintet megváltoztatja. Az irodalomból ismert [7] autodyn típusnál lényegesen jobban használható a *Pound, Knight, Watkins* [8] típusú oszcillátor, melynek automatikus szintszabályozója nagymértékben stabilizálja a beállított amplitúdót. Még jobb stabilitás érhető el a *Robinson* [9] típusú mérőoszcillátorral, amelynél a frekvencia és az oszcillációs amplitúdó szabályozás teljesen függetlenül, egymásrahatás nélkül valósítható meg. Az oszcillátor alapkapcsolása az 5. ábrán látható. Az első fokozat nagyerősítésű, kis zajú, szélessávú fokozat, a második a limiter fokozat, amely a rácskörében a nagyfrekvenciás jelet egyenirányítva szolgáltatja az automatikus szintszabályozó feszültséget, és egyúttal a demodulált magrezonancia jelet is. Erről a fokozatról könnyen ki lehet mutatni, hogy ha a rácsáram folyási szöge $2\vartheta \approx \pi$ és a rácsváltó feszültség amplitúdója lényegesen nagyobb a cső levágási feszültségénél, akkor az anódáram lényegében négyszögimpulzusokból áll, és a kimenő jel amplitúdója független a bemenő jelétől. Az alapharmonikust visszacsatolva a rezgőkörre egy nagy ellenálláson keresztül, állandó szintértékű rezgés amplitúdó tartható fenn, amelynek értéke nagymértékben független a rezgőkör rezonanciaellenállásától, így a forgó kondenzátor állásától is. Az ugyanazon rácsfeszültséghez tartozó anódáram értékét a cső segédrács feszültségével lehet változtatni, és ezzel a kívánt oszcillációs amplitúdót is beállítani. Az oszcillátor felépítése olyan, hogy a rezgőkörön kívüli foko-



5. *ábra.* Oszcillátor elvi kapcsolási rajza



6. *ábra.* Az oszcillátor zajtényezőjének a meghatározásához

zatok aperiódikusak azért, hogy a gerjesztő rendszernek ne legyen fázistolása és ezzel együtt ennek számottevő ingadozása se, ami a frekvencia stabilitás értékét rontaná.

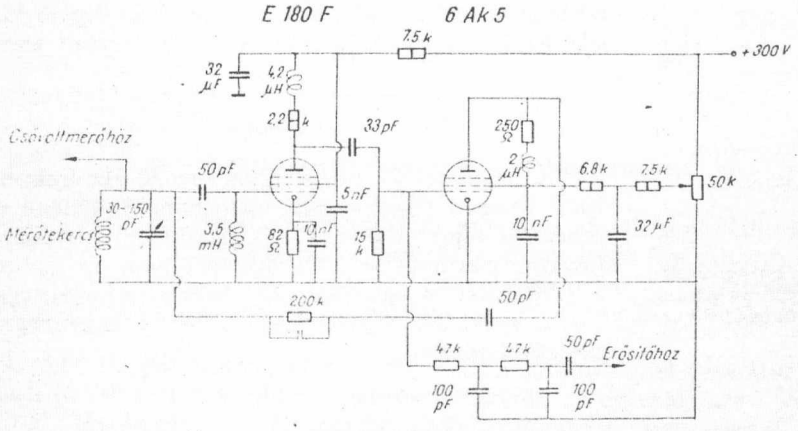
Az oszcillátor zajtényezőjét a 6. ábra alapján számíthatjuk ki. A csőzajok jelenlétében a rezgőkörből kifolyó Δf sávszélességbe eső zajáram négyzetének átlaga:

$$\overline{I^2} = 4KT\Delta f\left\{\frac{1}{R_p} + [S_1^2(R_p + R_{n1})R_1^2 + R_{n2}]\,S_2^2\beta^2\right\},$$

ahol R_{ni} az i-edik cső ekvivalens zajellenállása, S_i a meredeksége, a többi szimbólum jelentése a 6. ábrán látható. Zajmentes oszcillátor fokozat esetén a rácskörből kifolyó zajáram négyzetének átlaga $\overline{I_0^2} = 4\,kTR_p\Delta f$. Defeniáljuk az oszcillátor zajszámát a következőképpen: $F = \overline{I^2}/\overline{I_0^2}$. Felhasználva, hogy oszcilláció esetén az oszcillátor által képviselt negatív ellenállás a veszteségi ellenállással egyenlő, F-re a következő értéket kapjuk:

$$F = 2 + (R_{n1}/R_p) + R_{n2}S_2^2\beta^2$$

$R_{n1} = 500$ ohm és $R_p \approx 5000$ ohm értékek behelyettesítésével $F = 2{,}1$ érték adódik. Az oszcillátor kapcsolási rajza 7. ábrán látható.



7. ábra. Az oszcillátor kapcsolási rajza

Erősítő és fázisérzékeny egyenirányító fokozat

Az oszcillátor demodulált jelét szélessávú alacsony-frekvenciás erősítő erősíti olyan szintre, hogy a magrezonancia jelet oszcilloszkópon látni lehessen. Az erősítő frekvenciasávja 20 Hz-től 15 kHz-ig terjed, maximális erősítés 10^6-szoros. Az erősítő első fokozata úgy van méretezve, hogy az ilyen alacsony frekvenciáknál fellépő flicker zaj aránylag kicsi legyen, és ne növelje számottevően a magrezonancia jel zajszintjét. A szélessávú erősítő után egy 30 Hz frekvenciára hangolt szelektív fokozat következik, melynek a túlságosan nagy amplitúdójú zajok csökkentése a feladata. A szelektív erősítő kimenő jelét a fázisérzékeny egyenirányító bemene-

tére visszük. A fázisérzékeny egyenirányító fokozat kapcsolása és vektorábrája a 8. ábrán látható. Az áramkörre felírhatók a következő egyenletek:

$$E_1 = (E_r^2 + E_j^2 + 2E_r E_j \cos\varphi)^{1/2},$$

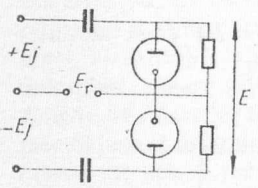
$$E_2 = (E_r^2 + E_j^2 - 2E_r E_j \cos\varphi)^{1/2},$$

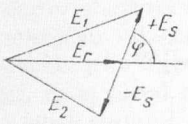
a jelölések a 8. ábrán láthatók.

A két feszültség különbségére a következő kifejezést kapjuk:

$$E = 2E_j \cos\varphi \left[1 - \frac{x^2}{2}(1 - \cos^2\varphi) + \frac{x^4}{8}(3 - 10\cos^2\varphi + 7\cos^4\varphi) + \ldots\right],$$

ahol $x = E_j/E_r$. Ha a feszültségeket úgy választjuk meg, hogy $E_r \approx 10\,E_j$, akkor a zárójelben levő kifejezés értéke 1-től 0,5%-nál kisebb értékkel tér el, tehát a kimenő feszültség $E \approx 2\,E_j \cos\varphi$. A referencia feszültség és a jelfeszültség közötti fázisszöget célszerű 0-nak választani. A fázisérzékeny egyeniárnyítás után megkapjuk a jelfeszültséget, zajban eltemetve. Több sec-os integráló RC szűrőkör a zajfeszültséget kiátlagolja és ha a jel regisztrálására megfelelően hosszú idő áll rendelkezésre, aránylag jó kimenő jelet kapunk 1/10—1/50 bemenő jel/zaj viszony esetén is.





8. ábra. Fázisérzékeny egyenirányító és vektorábrája

Modulátor

A mágneses tér modulálását egy 30 Hz frekvenciájú 10 W kimenő teljesítményű változtatható kimenő szintű generátor végzi. Ugyanez a generátor ad jelet az oszcilloszkóp vízszintes eltérítő lemezpárjának, és szolgáltatja a fázisérzékeny egyenirányító referencia-feszültségét is.

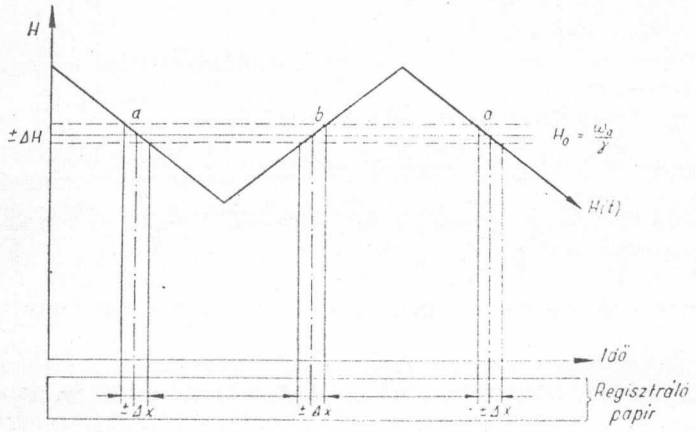
A spektrum regisztrálása EPP-09 kompenzográf segítségével történik.

A berendezés bemérése

K a l i b r á l á s . Mérés közben a háromszög-jel generátor lineárisan változtatja a mágneses teret, és a regisztráló sebessége pedig állandó. Meghatározható, hogy időegységre mekkora mágneses tér változás jut, pontosabban, hogy a felvételen adott távolság mekkora mágneses térerősség-változásnak felel meg. A kalibrációt a következőképpen végeztük el: A mérőfejben levő anyagminta (teflon tartóban víz) két könnyen regisztrálható rezonáns magot tartalmazott, az ^1H és ^{19}F atommagokat. Egy frekvencián, lineárisan változtatva a mágneses teret, együtt felvettük a két mag mágneses rezonancia spektrumát. Mivel a két atommag giromágneses faktora különböző, azonos frekvencián rezonancia görbéjük különböző mágneses térben jelenik meg. A rezonancia feltétel alapján ez a különbség, $H_H - H_F = \frac{\omega}{\gamma_H} - \frac{\omega}{\gamma_F}$-el egyenlő, ami ω mérésével a giromágneses faktorok isme-

retében meghatározható. Másrészt mérve a két regisztrált görbe távolságát a kalibráció elvégezhető.

Stabilitás vizsgálat. A homogenitás mellett a berendezés másik fontos jellemzője a stabilitás, amit több faktor határoz meg. A méréshez olyan módszert választottunk, amely az összes faktor együttes hatásának a tanulmányozását teszi lehetővé. A módszer a 9. ábra alapján könnyen megérthető. Háromszög-jellel modulálva a mágneses teret, mindannyiszor kapunk egy rezonancia jelet, ahányszor a rezonancia feltétel ki van elégítve. Ha a rádiófrekvenciás oszcillátor frekvenciája, vagy



9. ábra. A spektrométer stabilitásának meghatározásához

a mágneses térerősség, vagy a háromszög-jel generátor amplitúdója változik, úgy a regisztrált görbék középpontjának egymástól való távolsága fog változni. Mindhárom változás egyforma hatást gyakorol a távolságra, ezért az egyszerűség kedvéért ekvivalens térerősségváltozás formájában vesszük figyelembe mindhárom változását.

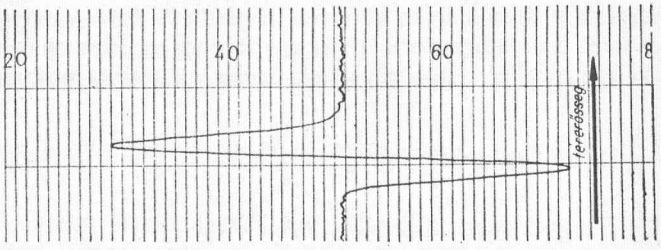
A 9. ábra alapján látható, hogy addig, amíg a háromszög-jel generátor periódusidejénél ($6 \cdot 10^2$ sec) hosszabb periódusú változások az egyenlő fázisú jelek (9. ábrán „*a-a*") távolságát nem változtatják, addig az ellenkező fázisú jelek (9. ábrán „*a-b*") távolságát igen. Tekintettel arra, hogy egy jel felvételénél a rövid periódusú ingadozások ismerete szükséges, az „*a-a*" típusú jelpárok távolság-ingadozását vizsgáltuk. Az ábráról látható az is, hogy $\pm\Delta H$ ekvivalens térerősség ingadozás a távolságban $\pm 2\,\Delta x$ változást okozhat. Egy rezonancia jel felvételénél természetesen $\pm\Delta x$ távolságnak megfelelő mágnese térerősség ingadozást kell figyelembe venni.

Kilenc mérés alapján meghatározott négyzetes középhiba, $\pm\Delta H = \pm 0{,}12$ oersted (ill. ennek relatív értéke $\pm 0{,}12/2000 = \pm 6 \cdot 10^{-5}$) és a maximális ingadozás $\pm 0{,}48$ oersted (ill. ennek relatív értéke $\pm 2{,}4 \cdot 10^{-4}$).

Hasonló változást okozhat az is, ha a regisztráló papír mozgási sebessége változik. Elvégeztük a fenti mérést úgy is, hogy a mágneses tér ugyanakkora idő alatt, 10-szer akkora értéket futott be, a mért távolság-ingadozás középértéke tizedére csökkent, mivel azonban most Δx-nek tízszer akkora ΔH változás felel meg, az ekvi-

valens mágneses térerősség ingadozás maradt ugyanaz. A papír mozgási sebességének ingadozásából eredő hiba elhanyagolható.

Amplitúdó mérések hibájának a maghatározásánál ismerni kell a spektrométer amplitúdó stabilitását is, amit célszerű mérés közben több rezonancia görbe amplitúdójának statisztikus kiértékelésével meghatározni.



10. ábra. ^{63}Cu mag-mágneses rezonancia jel 1 g fém fóliában

A 10. ábrán látható az 1 g tömegű, fóliákból álló fémmintán felvett ^{63}Cu mag mágneses rezonancia görbéje. A kísérleti feltételek: $\nu_0 = 8$ MHz, $\tau = 3$ sec, $H_m = 1{,}5$ oersted és $H_1 \approx 10$ moersted nagyságrendű. Az abszcisszán 1 mm $\approx 0{,}94$ oerstednek felel meg. Az ábrán látható jel/zaj viszony nagyságrendben egyezik a számolttal.

Szeretnénk köszönetet mondani *Pretz József* műszerésznek, a berendezés elektronikus egységeinek a felépítéséért, és *Antonighel Tibor* műszerésznek a mérőfej elkészítéséért.

IRODALOM

[1] *E. R. Andrew:* Nuclear Magnetic Resonance, Cambridge, 1956.
[2] *Faragó P., Gécs M., Mertz J.*, Magyar Fiz. Folyóirat, *1*, 9, 1953.
Gécs M., Mertz J., MTA KFKI Közlemények, *2*, 73, 1954.
[3] *A. Redfield,* Phys. Rev., *98*, 1787, 1955.
[4] *A. van der Ziel:* Noise, Prentice-Hall Inc., 1956.
[5] *A. Abragam:* The Principles of Nuclear Magnetism, Oxford, 1961.
[6] *M. W. P. Strandberg,* Rev. Sci. Instrum., *27*, 596, 1956.
[7] *A. Lösche:* Kerninduktion. Berlin 1957.
[8] *R. V. Pound,* Progr. in Nuclear Phys., *2*, 21, 1953.
[9] *F. N. H. Robinson,* J. Sci. Instr. *36*, 481, 1959.
[10] *R. Kitai,* Electronic and Radio Engineer., 124, 1957.
[11] *N. Bloembergen, E. M. Purcell, R. V. Pound,* Phys. Rev. *73*, 679, 1948.
[12] *P. Grivet:* La Resonance paramagnetique Nucléaire. Paris, 1955.

Appendix

Célunk egy olyan formula meghatározása, amely tartalmazza a berendezést leíró és az anyagmintát jellemző paramétereket abszorpciós módus esetén kis rádiófrekvenciás térerősség tartományban, tetszőleges térerősségnél, amely érvényes dipól-csatolt spineket tartalmazó szilárd testekre. Csak a levezetés fő lépéseit közöljük, mivel az hasonló az irodalomban található levezetésekhez.

Redfield [4] meggondolásai és mérési eredményei alapján a fenti feltételek mellett érvényes a *Bloembergen—Purcell—Pound* [11] elmélet, és meggondolásainkban felhasználjuk az elmélet alapfeltevésével ekvivalens spin-hőmérséklet fogalmát

Helyezzük az N rezonáns magot tartalmazó anyagmintát H_0 állandó és erre merőleges $2H_1 \cdot \cos \omega t$ rádiófrekvenciás térbe. Annak a valószínűsége, hogy egy atommag a rádiófrekvenciás térből történő energiaabszorpció hatására az m kvantumszámmal jellemzett állapotból m-1 állapotba megy át *B.—P.—P.* szerint:

$$W_{m \to m-1} = \frac{1}{4} \gamma^2 H_1^2 g(\nu)(I+m)\cdot(I-m+1), \qquad \text{(A, 1)}$$

ahol $g(\nu)$ a telítetlen abszorpciós görbe normált alakfüggvénye. Mivel az indukált emisszió és abszorpció átmeneti valószínűsége egyenlő, tiszta abszorpció tehát azért lép fel, mert az alacsonyabb energiaállapotban több atommag tartózkodik, mint a magasabban. Termikus egyensúly esetén a szintek betöltöttségét a Boltzmann eloszlás határozza meg. A rádiófrekvenciás térből történő energia felvétel és az ellentétes irányú spin-rács relaxációs mechanizmus hatására egy új egyensúlyi állapot alakul ki. Ha a két ellentétes irányú átmenet valószínűsége ugyanúgy függ a mágneses kvantumszámtól, akkor [5] szerint, az új egyensúlyi állapot — $I \neq 1/2$ esetén is — a spinhőmérséklet segítségével továbbra is a Boltzmann-eloszlással jellemezhetjük, pontosabban az m állapotban levő atommagok száma: $N_m = N/(2I+1)\cdot \exp\{-E_m/kT_s\}$, ahol $E_m = -\mu H_0 m/I$ és [1] alapján $T_s = T[1+0{,}5\gamma^2 H_1^2 T_1 g(\nu)]$.

A rádiófrekvenciás térből a rezgés egy periódusa alatt felvett energia:

$$P = \frac{N}{2I+1} \frac{h^2 \nu}{kT_s} \sum_{m=I}^{-I+1} W_{m \to m-1}. \qquad \text{(A, 2)}$$

A szokásos jósági tényezőhöz hasonlóan definiáljunk egy abszorpciós jósági tényezőt a következőképpen:

$$\frac{1}{Qa} = \frac{1}{2\pi} \frac{P}{\frac{1}{8\pi} \int_{V_t} (2H_1)^2 \, dv}, \qquad \text{(A, 3)}$$

ahol, az integrál a tekercs térfogatára veendő, homogén rádiófrekvenciás teret tételezve fel, egyszerűen elvégezhető.

A magrezonancia abszorpció következtében a tekercs eredeti, Q_0 jósági tényezője leromlik, a jósági tényező változása: $\Delta Q \approx Q_0^2/Q_a$. Állandó áramú generátor esetén a mérőtekercset tartalmazó rezgőkörön eső feszültség változása a rezonancia abszorpció következtében (rezgőköri rezonanciát tételezve fel):

$$\Delta E = i\omega_0 L \Delta Q, \qquad \text{(A, 4)}$$

ahol i a generátor árama, és L a tekercs induktivitása. Felhasználva az $LiQ_0 = LI_0 = \Phi/c$, ahol Φ a fluxus, ismert összefüggést és bevezetve a kitöltési tényezőt, ξ-t*, akkor a feszültségváltozás amplitúdója $\nu = \nu_0$ frekvencián a következőképpen adható meg:

$$\Delta E = \frac{\pi^2 \cdot h^2}{6kc} N_0 I(I+1) \frac{1}{T} \nu_0^2 \xi Q_0 D^2 n g(\nu_0) \frac{H_1}{1+0{,}5\gamma^2 H_1^2 T_1 g(\nu_0)} \; [cgs]. \qquad \text{(A, 5)}$$

A kapott formula Lorentz-görbét és optimális rádiófrekvenciás teret tételezve fel, *P. Grivet* [12] által kapott formulával egyezik meg.

* ξ-t a következőképpen vezethetjük be: legyen $N = N_0 V_m$, ahol N_0 a térfogategységben levő atommagok száma, V_m az anyagminta térfogata, és legyen a kitöltési tényező, $\xi = V_m/V_t$.

HIDEG HENGERLÉS ÉS HŐKEZELÉS HATÁSA ^{63}Cu MAG MÁGNESES REZONANCIA SPEKTRUMÁRA RÉZ FÓLIÁKBAN

Irta: Tompa Kálmán és Tóth Ferenc

Összefoglalás

^{63}Cu magok mágneses rezonancia spektrumát vizsgáltuk hidegen hengerelt és hőkezelt réz fóliákon, szobahőmérsékleten, az anyagmintának a külső mágneses térhez viszonyitott különböző orientációi esetén. A rezonancia görbe második momentuma és a derivált görbe csucstól-csucsig mért amplitudója a fém előéletétől függő anizotrópiát mutat. Hőkezelés hatására a rezonancia görbe második momentuma csökken, a csucstól-csucsig mért amplitudó nő, a hengerelt fóliákon kapott görbék megfelelő mennyiségeihez viszonyitva. Hőkezelt mintán kapott mag mágneses rezonancia görbék második momentumának az anizotrópiája értelmezhető a Van Vleck elmélet alapján (100) [001] tipusu köbös rektisztallizációs texturát tételezve fel, azonban a mért értékek nagyobbak, mint az elmélet alapján számolhatók, hasonlóan a pormintákon és az egykristályokon kapott eredményekhez.

Bevezetés

Hideg hengerlés hatására a fémekben általában kétféle változás mehet végbe: a./ rácshibák keletkeznek; és b./ a hengerlés előtt statisztikusan elhelyezkedő krisztallitok rendeződnek, a fém szerkezete "hengerlési" texturát mutat [1] . F folyamatok jellegzetes hatást gyakorolnak a mag mágneses rezonancia /NMR/ spektrum paramétereire /integrális intenzitás, derivált jel csucstól-csucsig mért amplitudója stb./.

Az atommagok az alkalmazott külső mágneses terek mellett, kölcsönhatásban vannak a környezetük által keltett belső mágneses térrel is. A belső mágneses tér atommagtól atommagig változik, és inhomogenitása határozza meg első közelitésben, szoba hőmérsékleten a szilárd testek NMR spektrumának a vonalszélességét. Egykristályok és kitüntetett orientációval rendelkező polikristályok /texturák/ esetén a dipól-dipól kölcsönhatás anizotróp, ami a paraméterek /pl. a rezonancia görbe második momentuma/ anizotrópiáját vonja maga után [2] .

Rácshibák hatására az eredetileg köbös szerkezetü fémben a belső elektromos tér köbös szimmetriája eltünik [3] , és ha a rezonáns atommagok rendelkeznek elektromos kvadrupól momentummal /magspin, I > 1/2/, ugy a dipól-dipól kölcsönhatás mellett a kvadrupól kölcsönhatás is megjelenik. Inhomogén

elektromos térgradiens hatására a spektrumvonal kiszélesedik, integrális intenzitása csökken.

Erősen deformált /pl. hidegen hengerelt/ fémek hőkezelése következtében egyrészt a diszlokációk átrendeződése és számuknak a csökkenése, másrészt a krisztallitok ujfajta elrendeződése, az un. "rekrisztallizációs" textura kialakulása várható [1] . A diszlokációk átrendeződése és számának a csökkenése következtében a zérótól különböző elektromos térgradiensü helyen lévő atommagoknak a száma jelentősen lecsökken. A rekrisztallizációs texturának megfelelően, a korábbitól eltérő anizotrópia várható.

A korábbi, rézen végzett mag mágneses rezonancia mérések eredményeit a következőkben foglalhatjuk össze:

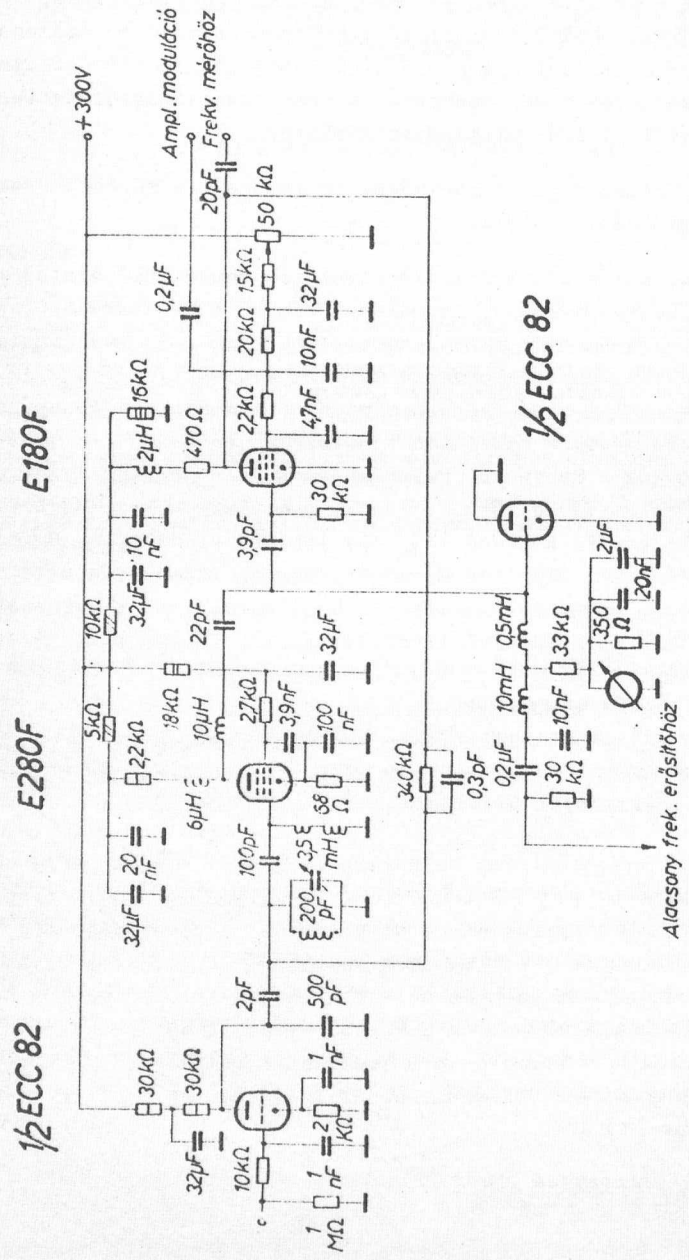
Két tipusu, kitüntetett orientációval nem rendelkező mintán végeztek méréseket. Pormintákon az erősen deformált mintán mért intenzitás, g /H_0/ 40-50 %-a a jól hőkezelt mintán mért intenzitásnak [4] . Az integrális intenzitás, a derivált görbe csucstól-csucsig mért amplitudója, illetve az intenzitás 44, 39, illetve 41 %-a a hőkezelt mintán mért megfelelő mennyiségeknek, és a rezonancia görbe második momentuma a hőkezelés hatására ~ 30 %-kal csökken [5] . Az eredmények a kvadrupól kölcsönhatást, mint perturbációt figyelembe vevő perturbáció-számitás elsőrendü közelitése alapján értelmezhetők. Megemlitjük még Bloembergen és Rowland [4] egy további eredményét. Ha a deformált port rövid ideig maró oldatban maratták, ugy az intenzitás változás csak 40 %. Az eredmény arra enged következtetni, hogy maratással a szemcsék felületéről a legjobban deformált réteget távolitották el. Faulkner E. 25 /u vastagságu réz fóliákon végzett méréseket a deformáció függvényében [6] . A 99 %-ra deformált mintákon kapott eredményekhez viszonyitva a csucstól-csucsig mért amplitudó 33 %-kal nő, a rezonancia görbe második momentuma 27,5 ± 5 %-kal csökken, és az integrális intenzitás csak néhány százalékkal nő hőkezelés hatására.

Kitüntetett orientációval rendelkező mintákon végzett mérésekről Faulkner E. tett említést [7] . A hengerlési tengelyre merőleges tengely körül forgatva, a 45 /u vastag fóliákból álló mintát, a vonalszélesség anizotrópiát mutat. A rezonancia görbe második momentumának eltérése az átlagértéktől ± 15 %. Deformált mintán szintén talált anizotrópiát. Hőkezelés hatására a rezonancia görbe második momentuma csökken, kivéve a 45° körüli szögeket A mérések pontosságát erősen korlátozta a behatolási mélységgel /szkin-mélységgel/ összemérhető vastagságu fóliákon, az örvény-áram veszteségek következtében fellépő torzitás [8] .

Kisérleti berendezés és anyagminta

A méréseket egy korábbi közleményben [9] ismertetett "széles-jelü"

mag mágneses rezonancia spektrométerrel végeztük. A jel/zaj viszony növelése érdekében elkészitettük az ott közölt mérő-oszcillátor továbbfejlesztett változatát, amely magasabb rádiófrekvenciás tér előállitására alkalmas /jelnövelés/, ugyanakkor kisebb saját zajjal rendelkezik.



1. ábra

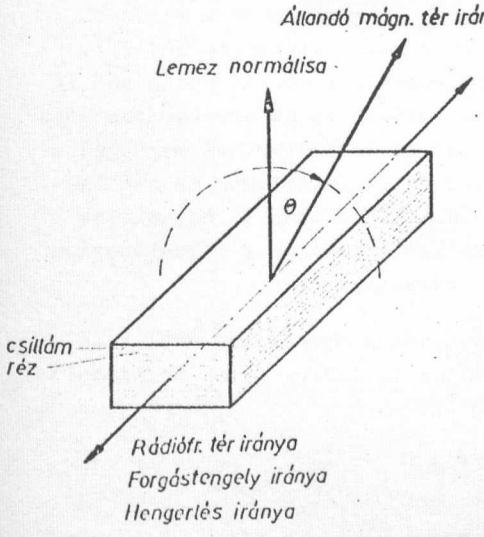
Mérő-oszcillátor kapcsolási rajza.

Az oszcillátor kapcsolási rajza az 1. ábrán látható. A rádiófrekvenciás rezgést előállitó rész egy aperiódikus szélessávu fokozatból és az automatikus szintstabilizáló limiterből áll. A szélessávu fokozat soros és párhuzamos kompenzálásu, erősitése 48-szoros. 500 kc/s... 12 Mc/s frekvencia tartományban az erősités változás $\pm$ 3 db-nél kisebb. A limiter fokozat rácskörében előállitott negativ feszültség végzi az oszcillátor szint szabályozását ugy, hogy a pozitiv visszacsatolt feszültség értékét változtatja, amelyet még a limiter segédrács feszültségével is befolyásolhatunk /szintbeállitás/. A segédrács feszültséggel a rezgőkörön lévő rádiófrekvenciás feszültséget 30 mV... 500 mV tartományban változtatjuk, a feszültség értéke a rezgőkör rezonancia ellenállásának változásától alig függ.

Az oszcillátor rövid idejü /15 perc/ frekvenciastabilitása $\pm$ 2.10^{-5}.

Az NMR jel demodulálása viszonylag alacsony impedancián történik azért, hogy az egyenirányitás, a radiofrekvenciás szürés, valamint az alacsonyfrekvenciás erősitő járulékos zaja ne legyen jelentős. Az oszcillációs szintet jelző müszer is ebben a fokozatban van. Az ECC 82 cső másik fele amplitudó markereket állit elő, melyekkel a berendezés érzékenysége kalibrálható.

Az oszcillátor mért kimenő zaja nem lépi tul a rezgőkör rezonancia ellenállásából származó értéket, igy járulékos zajt nem termel. A méréseket szobahőmérsékleten, a következő kisérleti feltételek mellett végeztük: rezonanciafrekvencia, ν_0 = 7,600 Mc/s; modulációs tér frekvenciája, ν_m = 280 c/s és amplitudója; H_m = 2,8 gauss, mágneses tér lineáris változtatási sebessége 0,2 gauss / sec fázisérzékeny detektor időállandója, τ = 3 sec.



2. ábra
Fólia-rakás tipusu anyagminta és helyzete a mágneses terekben.

Anyagminta

Méréseinket OFHC réz mintán végeztük, a minta tömege 1 g. A fóliarakás tipusu minta és elhelyezése a berendezésben a 2. ábrán látható. Tartalmaz kb. 75 db. 12 μ vastagságu fóliát. A fóliák között csillám szigetelés van. Az egész rakás csillámdobozban van elhelyezve ugy, hogy kényelmesen hőkezelhető. A minta mérete 4x8x18 mm^3. A fóliákat egyirányu hengerléssel állitottuk elő, 99 %-nál nagyobb deformációval. Az igy nyert fóliák vastagsága 20 μ . A fóliák további vékonyitása maratással történt.

A hőkezelést 540° C hőmérsékleten, 10^{-5} Hgmm vákuumban végeztük. A mintát a meleg zónába vittük be, 3 órán keresztül volt ott, és a kályhával együtt hült le.

A kisérleti eredmények kiértékelése

A mag mágneses rezonancia jel következő paramétereit határoztuk meg a lemezek normálisa és az állandó mágneses tér által bezárt Θ szög függvényében:

a./ a derivált görbe csucstól-csucsig mért amplitudóját, D_0 ,

b./ a derivált görbe maximum- és minimum-helyen vett amplitudójának a hányadosát, D_a/D_m ,

c./ az abszorpciós görbe integrális intenzitását, $I=\int_0^\infty g(H)dH$,

d./ az abszorpciós görbe második momentumát, $M_2=\frac{1}{I}\int_0^\infty (H-H_0)^2 g(H)dH$.

A használt betük jelentése: H mágneses térerősség, H_0 mágneses térerősség az abszorpciós görbe maximum helyén, és $g(H)$ a tolitetlen abszorpciós görbe alakfüggvénye.

A méréseket a Θ =-90°...90° tartományban végeztük, 15°-onként $\pm$ 1° leolvasási pontossággal, az állandó mágneses térre merőleges és a hengerlési iránnyal párhuzamos tengely körül forgatva a mintát. A kapott eredmények 0°-ra szimmetrikusak, ezért csak a 0°...90° tartományba eső értékeket közöljük.

Ugy találtuk, hogy a derivált görbe nem pontosan antiszimmetrikus, az alacsony térben lévő jeloldal amplitudója, D_a nagyobb mint a magasabb térben lévőé D_m . A torzulás az örvény-áram veszteségek miatt lép fel. Az integrális intenzitás és a második momentum értékének a meghatározásánál feltettük, hogy a derivált görbe zéró-pontja nem tolódik el az örvény-áram veszteségek miatt. Ugy gondoljuk, hogy a közelités kis torzulásoknál megengedhető. A görbékre átlátszó milliméteres beosztásu hálót fektettünk és segitségével a görbéken ~ 45 nem-zéró ordináta értéket olvastunk le egyenletes abszcissza osztás mellett. Az integrálok közelitő értékének a meghatározása /Simpson-formula alapján/ URAL számológéppel történt.

A kapott második momentumok értékét a véges modulációs amplitudó következtében fellépő kiszélesedésre korrigáltuk az Andrew által levezetett összefüggés alapján [10] :

$$M_2 = M_2' - H_m^2/4 ,$$

ahol M_2' a mért és M_2 a korrigált második momentum. A modulációs korrekció értéke: $H_m^2/4$ = 1,8 /$\pm$ 0,2/ gauss^2. A megadott hiba nem statisztikus jellegü.

Az 1. és 2. táblázatokban található és a 3. és 4. ábrán feltüntetett M_2 értékeknél a fenti hibát nem tüntettük fel, mivel értéke az anizotrópia jellegét nem befolyásolja, csak az M_2 mennyiségeket ugyan akkora értékkel megváltoztatja.

Hengerelt mintán kapott eredmények

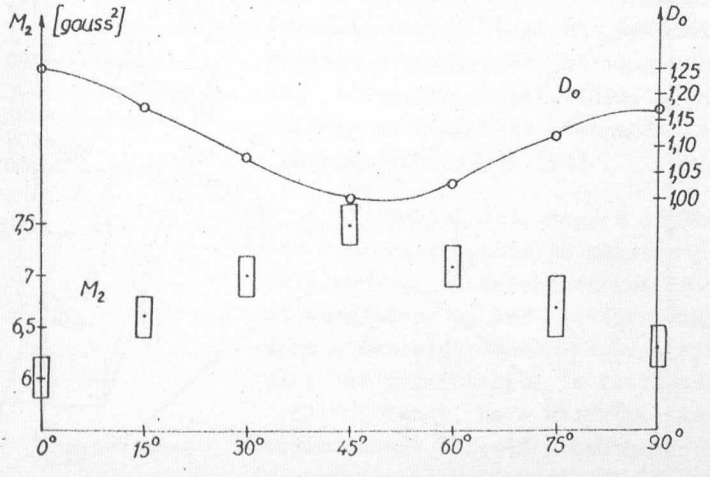
A paraméterek közül a D_a/D_m mennyiség független a forgatási szögtől, értéke: 1,07± 0,01, és az integrális intenzitás a hibahatáron belül /± 2,5%/ izotróp. A csucstól-csucsig mért amplitudó és a második momentum mért és korrigált értékeit az 1. táblázatban adtuk meg és a 3. ábrán ábrázoltuk. A feltüntetett középértéket és négyzetes középhibát hat mérés alapján határoztuk meg.

1. táblázat

Hidegen hengerelt réz NMR spektrumának jellemzői a forgatási szög függvényében

Mért menny.	0°	15°	30°	45°	60°	75°	90°
M_2' [gauss^2]	7,8±0,2	8,4±0,2	8,8±0,2	9,3±0,2	8,9±0,2	8,5±0,3	8,1±0,2
M_2 [gauss^2]	6,0±0,2	6,6±0,2	7,0±0,2	7,5±0,2	7,1±0,2	6,7±0,3	6,3±0,2
D_0 [tetszől.]$^+$	1,25	1,17	1,08	1,00	1,03	1,12	1,17

$^+$ a négyzetes középhiba kisebb, mint ± 0,01



3. ábra

^{63}Cu izotóp NMR spektrumának anizotrópiája hidegen hengerelt fóliákon.

Hőkezelt mintán kapott eredmények:

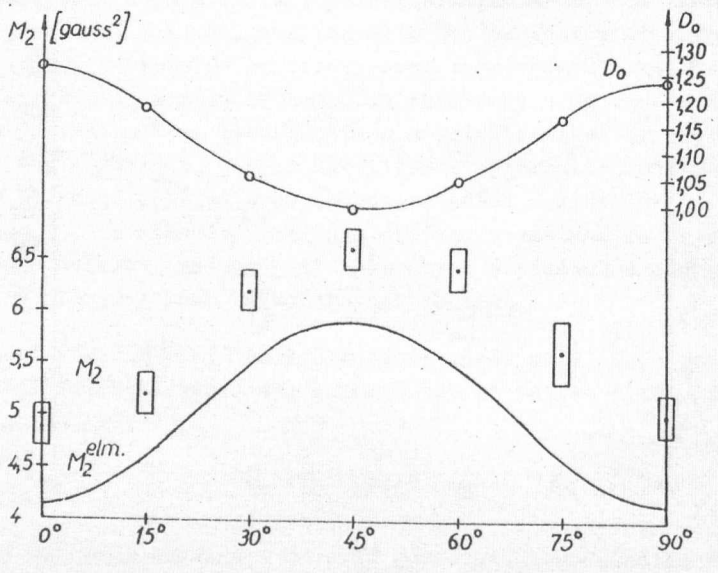
Hasonlóan mint a hengerelt mintán a $D_o/D_m = 1,06 \pm 0,01$ mennyiség és az integrális intenzitás /ez utóbbi ± 2 % hibán belül/ sem függ a forgási szögtől. A csucstól-csucsig mért amplitudó és a momentumok értékét a 2. táblázatban foglaltuk össze és a 4. ábrán ábrázoltuk. A 2.táblázatban található még Sagalyn P.L. és Hofmann J.A. [11] rézegykristályon mért második momentum értékei (M_2^{ek}), valamint a Van Vleck elmélet alapján számolt, egykristályra vonatkozó második momentum értékek (M_2^{elm}).

2. táblázat

Hőkezelt réz NMR spektrumának jellemzői a fogatási szög függvényében

Mért menny.	0°	15°	30°	45°	60°	75°	90°
M_2' [gauss^2]	6,7±0,2	7,0±0,2	8,0±0,2	8,4±0,2	8,2±0,2	7,4±0,3	6,8±0,2
M_2 [gauss^2]	4,9±0,2	5,2±0,2	6,2±0,2	6,6±0,2	6,4±0,2	5,6±0,3	5,0±0,2
M_2^{ek} [gauss^2]	4,9±0,5	-	-	6,3±0,8	-	-	4,9±0,5
M_2^{elm} [gauss^2]	4,15	4,59	5,47	5,91	5,47	4,59	4,15
D_o [tetszől.]+	1,27	1,19	1,06	1,00	1,05	1,17	1,24

+ a négyzetes középhiba kisebb mint ± 0,01



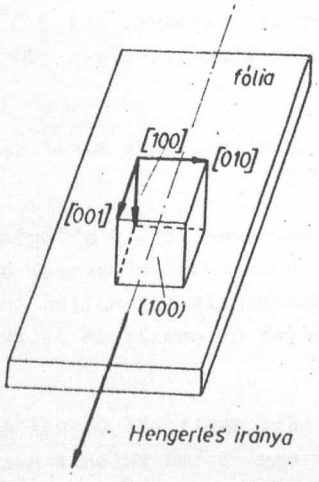
4. ábra

^{63}Cu izotóp NMR spektrumának anizotrópiája hőkezelt réz fóliákon.

A mérési eredményekkel kapcsolatban a következő megjegyzést kívánjuk tenni. Az 1. és 2. táblázat utolsó sorában megadott D_0 mennyiség egységei nem azonosak. Külső referencia minta alkalmazásával a berendezés érzékenysége kalibrálható, és különböző időben mért jelek amplitudói összehasonlíthatók. Tekintettel arra, hogy a kalibrálás anyagminta cserét igényel, a csere alatt a berendezés érzékenysége változhat, ezért a következő adataink csak tájékoztató jellegüek. A hőkezeletlen mintához képest, a hőkezelt mintán mért derivált jelek D_0 amplitudója 25; 18; ill. 20%-kal nő meg 90; 45; ill. 0^o-nál, valamint az integrális intenzitás néhány százalékos növekedése figyelhető meg. A második momentumban és a csucstól-csucsig mért amplitudóban a hőkezelés hatására fellépő változás kisebb mint a Faulkner által mért értékek. Feltehető, hogy a maratás a legjobban deformált réteget távolitotta el, hasonlóan a pormintán kapott eredményekhez [4] .

Kisérleti eredmények értelmezése

Foglalkozzunk először az egyszerübb, a hőkezelt mintán kapott mérési eredményekkel. Baldwin és mások /lásd pl. [1] / röntgen-diffrakciós mérései szerint, lapcentrált köbös szerkezetü fémek /pl. réz, aluminium/ esetén, ha hideg hengerléssel nagyfoku deformációt hozunk létre, és kialakul a hengerlési textura, akkor hőkezelés hatására "köbös" rekrisztallizációs textura fellépte várható. A köbös rekrisztallizációs textura a következőképpen jellemezhető: a krisztallitok egy kristálytani sikja /réz esetén az (100) sik /párhuzamos a fólia felületével, és az elemi cella egyik tengelye /réz esetén a [001] tengely/ párhuzamos a hengerlési iránnyal /5.ábra/. A textura tehát az (100)[001] szimbolummal jellemezhető. A textura tökéletessége függ a hengerlési deformációtól és a hőkezelés hőmérsékletétől. 95 %-nál nagyobb deformáció és 500^o C körüli hőmérséklet esetén Baldwin szerint gyakorlatilag minden krisztallit (100)[001] orientációju. A textura kialakulását az elvégzett röntgendiffrakciós vizsgálatok alátámasztják [12] .



5. ábra
Krisztallitok elhelyezkedése az (100)[001] köbös texturában.

Tegyük fel, hogy a jól hőkezelt rézben a hőkezelés után is megmaradó rácshibák mellett és a szemcsehatárokon lévő rácshelyek atommagjainak az NMR spektrumra gyakorolt hatása a detektálhatóság határán kivül esik /amint ezt pormintáknál is felteszik [4] , [5] , [13] /. Tehát, ha a krisztallitok mind tökéletesen azonos orientációban helyezkednek el, ugy a minta egykristályként fog viselkedni. A vonalszélességet első közelitésben a dipól-dipól kölcsönhatás határozza meg. A Van Vleck elmélet

alapján meghatározható a dipól-dipól kölcsönhatás járuléka a második momentumhoz. Két izotóp fajtát rendezetlen eloszlásban tartalmazó lapcentrált köbös szerkezetü mintára - Lösche A. [14] eredményeinek a felhasználásával - a második momentum a következőkép irható fel:

$$M_2^{elm} = 132,52/3 \cdot \hbar^2 \left[\gamma_1^2 I_1(I_1+1) p_1 + \frac{4}{9} \gamma_2^2 I_2(I_2+1) p_2 \right] d^{-6} \cdot$$

$$\left[2,171 - (\lambda_1^4 + \lambda_2^4 + \lambda_3^4) \right] ,$$

ahol $\hbar$ a 2π -vel osztott Planck állandó, γ_1 , I_1 és p_1 a rezonáns atommag giromágneses faktora, spin kvantumszáma és előfordulási valószinüsége, γ_2 , I_2 és p_2 a nem rezonáns magfajtára vonatkozó fenti tulajdonságok, d: a kristályrács elemi cellájának élhossza, λ_i pedig H_0 -nak, az állandó mágneses tér vektorának a kristály koordináta rendszerére vonatkozó irány-cosinusai. Ha a H_0 vektor a krisztallitok (001) sikjában forog, az irány-cosinusok a Θ forgásszöggel egyszerüen kifejezhetők: $\lambda_1 = \cos\Theta$; $\lambda_2 = \sin\Theta$; $\lambda_3 = 0$. A formulába a megfelelő számértékeket és az irány-cosinusok fenti értékét behelyettesitve a következő összefüggés adódik a második momentum forgásszögtől való függésére:

$$M_2^{elm} = 3,54\left[2,171 - (\sin^4\Theta + \cos^4\Theta) \right] \text{gauss}^2 .$$

Az összefüggés alapján kiszámitott értékeket adtuk meg a 2. táblázatban és a 4. ábrán. A táblázat alapján látható, hogy mérési eredményeink a hibahatáron belül megegyeznek Sagalyn P. és Hofmann J. egykristályon kapott eredményeivel, Az egyezés feltételezéseink jogosságát bizonyitja. Látható azonban, hogy a kisérletileg meghatározott momentumok nagyobbak a merev rács feltételezésen alapuló Van Vleck elmélet alapján számolhatóknál, hasonlóan mint polikristályos mintáknál [13] , és egykristályoknál [11] . A többlet- kiszélesedés értékére Gutowsky H. és munkatársai [13] 0,7 gauss^2 értéket kaptak, ami jól egyezik az általunk mért értékkel. Szerintük a többlet-kiszélesedés a rövid spin-rács relaxációs idő következménye.

A többlet-kiszélesedés szögfüggéséről a nagy mérési hiba miatt nem tudunk következtetést levonni.

Az integrális intenzitás nem függ a minta mágneses térben elfoglalt helyzetétől, ami azt jelenti, hogy a rezonanciához hozzájáruló atommagok száma minden Θ értékre ugyanaz. Amennyiben a vonal integrális intenzitás nem változik, várható, hogy a vonal-szélesség növekedésével az amplitudó csökkenni fog, és forditva.

Arra vonatkozóan, hogy a csucstól-csucsig mért amplitudó 0°-nál és 90°-nál felvett értéke miért különbözik, nem tudunk egyértelmü választ adni.

A hidegen hengerelt mintákon kapott eredmények értelmezése sokkal,

bonyolultabb, és csak a jelenségek kvalitativ leirását kisérelјük meg. A spektrumvonal további kiszélesedése az atommagok kvadrupól momentumának és a rácshibák következtében fellépő, inhomogén elektromos térgradiensnek a kölcsönhatásából származik. A kevésbbé torzult rácshelyeken lévő atommagok rezonancia frekvenciájának az eltolódása nem lényegesen nagyobb mint a dipól-dipól kölcsönhatásából származó vonalszélesség. Ezek az atommagok még hozzájárulnak a vonal integrális intenzitásához, azonban a rezonancia görbe második momentuma nagyobb lesz, mint a hőkezelt mintán. A diszlokáció centrumokban lévő atommagokra a rezonancia frekvencia eltolódása olyan nagy lehet, hogy ezek az atommagok már nem járulnak hozzá az integrális intenzitáshoz és ez az oka az integrális intenzitás néhány százalékos csökkenésének.

Amint emlitettük, a hengerlés hatására kialakul az un. hengerlési textura, ami általában több orientáció keveréke lehet [1] . A textura a következő szimbólummal jellemezhető: (110)[112] + (112)[111] + (100)[001] ++. A textura sokkal bonyolultabb, mint a köbös textura, és a hatására keletkező anizotrópia értelmezése sem olyan egyszerü mint hőkezelt esetben. Meg kell emlitenünk azt is, hogy semmi okunk nincs azt feltételezni, hogy a kvadrupól kölcsönhatás izotróp, tehát a mag mágneses rezonancia jel anizotrópiájának értelmezéséhez ismernünk kellene a diszlokációk számát és eloszlását is.

Szeretnánk köszönetet mondani Nagy E. professzornak az értékes diszkussziókért, Antonighel T. müszerésznek az anyagminta elkészitéséért. Köszönet illeti Lőcs Gy. matematikust a programozásért és Hegyháti Magdát néhány numerikus számolás elvégzéséért.

++ Más szerzők szerint további orientáció-tipusok is felléphetnek.

Irodalom

[1] Barett C.S.: Structure of Metals, McGraw Hill Publ. Company LTD /1952/

[2] Van Vleck J.H.: Phys. Rev. 74, 1168 /1948/

[3] Cohen M., Reif F.: Solid State Physics, 5 köt. Akademic Press, New York, /1957/

[4] Bloembergen N., Rowland T.J.: Acta Met. 1, 731, /1953/

[5] Павловская В.С., Старк Ю.С., Физика твердого тела, 4, 285 /1962/

[6] Faulkner E.A.: Phys. Mag. 5, 843 /1962/

[7] Faulkner E.A.: Nature /London/ 183, 1043 /1959/

[8] Chapman A.C., Rhodes P.: Seymour E.F.W.: Proc. Phys. Soc. B, 70, 345 /1957/

[9] Tompa K., Tóth F.: Magyar Fizikai Folyóirat, megjelenés alatt.

[10] Andrew E.R.: Phys. Rev. 91,425 /1953/

[11] Sagalyn P.L., Hofmann J.A.: Phys. Rev. 127, 68 /1962/

[12] Krén E.: magánközlemény

[13] Gutowsky H.S., McGervey B.R.: J.Chem.Phys. 20, 1472 /1952/

[14] Lösche A.: Kerninduktion, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, /1957/

Érkezett 1963. márc. 22.

KFKI Közl. 11.évf. 3. szám, 1963.

M.T.A. KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KÖNYVTÁRA

Felelős kiadó: Pál Lénárd
Felelős szerkesztő: Menyhárd Nóra
Technikai szerkesztő: Nagy Imréné
Készült a KFKI Sokszorositójában
F.v.: Gyenes Imre Munkaszám: 5340