

Vol. 16. No. 2. 1968

СЕНТРАЛНИ ИСТИТУТ



1968 APR 23

КФКИ

KÖZLEMÉNYEK

СООБЩЕНИЯ ЦЕНТРАЛЬНОГО ИНСТИТУТА ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

REPORTS OF THE CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS

Szerkeszti: Ádám András
Главный редактор: А.Адам
Editor: A. Ádám

MTA' KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KÖNYVTÁR- ÉS KIADÓI OSZTÁLYA
БИБЛИОТЕКА И ИЗДАТЕЛЬСКИЙ ОТДЕЛ
ЦЕНТРАЛЬНОГО ИНСТИТУТА ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ВЕНГЕРСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
HUNGARIAN ACADEMY OF SCIENCES
CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS LIBRARY AND DOCUMENTATION DEPARTMENT
BUDAPEST, 114. POB 49.

Technikai szerkesztő: Nagy Imréné
Megjelent: 1968. ápr. 5.

Példányszám: 320
Rotaszám: 3573

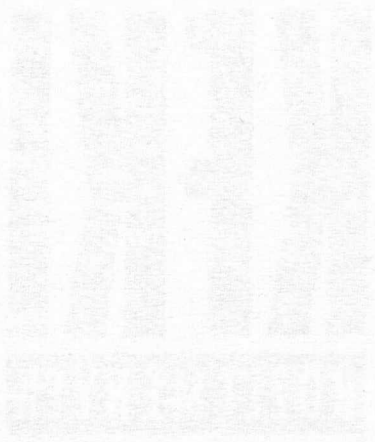
A kiadásért felelős: Jánossy Lajos

Megjelenik: kéthavonta
Előfizethető: a 173.144-52. MNB bevételi számlán
Előfizetési díj: egyes szám 5,-Ft, egy évre: 30,-Ft /6 szám/

Vol. 16. No. 2. 1968.

TARTALOM

1. Huszár Miklós és Nárayné-Ziegler Mária: A spin-pálya kölcsönhatás figyelembevétele a hidrodinamikai modellben 73
2. Krasznovszky Sándor és Telbisz Ferenc: Analitikus energia-hatótávolság formula buborékkamrákban . . 99
3. Grüner György, Tompa Kálmán, Tóth Ferenc és Pokó Zoltán: Az UO_3-H_2O rendszer vizsgálata MMR módszerrel 105
4. Gellai Borbála: Egy mátrixelméleti hiperdiagonalizáló módszerről 117
5. Kluge Gyula és Lajtai Albert: Átlagos neutronenergiák U-235 termikus és Cf-252 spontán hasadása esetén 129
6. Berecz György: A portartalom hatásának vizsgálata az átütési szilárdságra 137



РЕЗЮМЕ

1. Спин-орбитальное взаимодействие в гидродинамической модели квантовой механики

М. Гусар и М. Циглер-Нараи

К уравнению Паули добавляется член, описывающий спин-орбитальное взаимодействие. Показано, что данное уравнение взаимно однозначно можно привести к виду гидродинамических уравнений. Внешние силы, появляющиеся в уравнениях, интерпретируются классически.

2. Аналитическая зависимость пробег-энергия в пузырьковых камерах

Ш. Красновски и Ф. Телбис

Выработан аналитический вид зависимости $R = f(T)$ и $T = f(R)$ для Π , K и ρ в разных жидкостях. Даны константы для этих функций при $R \leq 200$ см и $R \leq 100$ см в водородной, $R \leq 100$ см дейтериевой, $R \leq 200$ см и $R \leq 100$ см пропановой и $R \leq 50$ см ксеноновой камерах.

3. Исследование системы $UO_3 - H_2O$ методом ядерного магнитного резонанса

Д. Грюнер, К. Томпа, Ф. Тот и З. Поко

Мы исследовали спектр протонного магнитного резонанса системы $UO_3 - H_2O$ при комнатной температуре и температуре в $77^\circ K$. На основании спектра ядерного магнитного резонанса установлено, что разновидность α и β , которые описываются формулой $UO_3 - 2 H_2O$, содержат группы H_2O и OH , в то время образец имеющий формулу $UO_3 \cdot 0,66 H_2O$ содержит только группы OH . Состояние движения группы OH в исследуемом диапазоне температур остается без изменений, — они, предположительно, не производят ни диффузного, ни ротационного движения, — в противоположность молекулам H_2O , движение которых в значительной мере зависит от температуры.

4. О методе матричной теории для преобразования матриц на приведенную форму

Б. Геллаи

Сообщается один специальный метод, при помощи которого могут быть преобразованы матрицы колебательных задач на приведенную форму. Используя структурные свойства матрицы задачи, преобразующая матрица, создающая приведенную форму конструируется только способом теории матриц, потом для установления, что полученная приведенная форма является ли полной приведенной формой, используется соображение теории представлений.

5. Средние энергии нейтронов при делении $U-235$ тепловыми нейтронами и спонтанном делении $Cf-252$

Д.Клуге и А.Лайтаи

На основе предположения статистической модели была рассчитана исходная температура отдельных осколков деления. Средняя энергия нейтронов, выпущенных из осколков, была определена при помощи результатов нейтронных каскадов Ле Кутера и Ланга. Наши результаты были сравнены с результатами работ [1], [2] в случае деления $Cf-252$ тепловыми нейтронами. Было получено хорошее согласие, которое дает возможность использовать расчеты даже в случаях, где такие измерения не проводились.

6. Исследование влияния порошка на электрическую прочность

Д.Берец

Было исследовано влияние электрода с порошком на электрическую прочность. Электростатическим путем были нанесены различные порошки на электрод Роговский и были проведены измерения при обоих полярностях в диапазоне давления I - 10 атм. Исследования были расширены и на влияние содержания влажности порошка.

S u m m a r i e s

1. Spin-Orbit Coupling in the Hydrodynamical Model of Quantum Mechanics
M. Huszár and Ziegler-Náray, M.

A spin-orbit coupling term is added to the Pauli equation and it is shown that the equation obtained can be transformed into hydrodynamical equations. Classical interpretation of terms describing outer forces are given.

2. Analytical Formulae for the Range-Energy Relations in Bubble Chambers
S. Krasznovszky, F. Telbisz

Analytical formulae are given for the $R = 1/T/$ and $T = f/R/$ functions for pion, kaon and proton. The constants have been evaluated for bubble chambers of various sizes, filled with different liquids /1 and 2 m for hydrogen, 1 m for deuterium, 1 m for propane, 0,5 m for xenon/.

3. NMR Study of the $UO_3 - H_2O$ System

G. Grüner, K. Tompa, F. Tóth, Z. Pokó

The proton magnetic resonance spectra of the $UO_3 - H_2O$ system have been measured at room temperature and at $77^{\circ}K$. The spectra taken on samples of α - or of β -type $UO_3 \cdot 2H_2O$ composition show the presence of H_2O and -OH groups. In the sample of the thermal decomposition product of $UO_3 - 2H_2O$, described by the formula $UO_3 \cdot 0,66 H_2O$, only -OH groups can be observed. The relative positions of the OH groups do not change appreciably in the crystal lattice; presumably neither diffusion nor rotation takes place, in contrast with the markedly temperature dependent movements of the H_2O molecule.

4. A Special Matrix Theoretical Method of Matrix Diagonalization

Barbara Gellai

A mathematical method is presented for the transformation of matrices of vibrational problems to quasi-diagonal form. The matrix that transforms the vibrational matrix to quasi-diagonal is constructed by pure matrix

theoretical methods using the structural properties of the vibrational matrix. The thus obtained quasi-diagonal form is compared with the maximum possible reduction obtainable from the theory of group representation.

5. Average Energy of Prompt Neutrons in Spontaneous Fission of Cf-252 and Thermal Neutron Induced Fission of U-235

Gy. Kluge and A. Lajtai

The initial temperatures of fission fragments are calculated with the use of a statistical model. The initial temperatures permit to evaluate the average neutron energies by making use of the result obtained by Le Couteur and Lang for an evaporation cascade. The average neutron energies thus predicted are compared with the experimental values reported for Cf-252 [1] and U-235 [2]. The good agreement between the predictions and the experimental values seems to indicate the usefulness of the method for the evaluation of average neutron energies in other cases of nuclear fission, too.

6. The Effect of Dust on the Electrical Breakdown between Electrodes

Gy. Berecz

The breakdown between electrodes has been investigated as a function of the nature and amount of dust on their surfaces. Various powders were deposited electrostatically on Rogowsky type electrodes and measurements were performed for either polarity at pressures from 1 to 10 atmospheres. The effect of the moisture content of the powders was also studied.

A SPIN-PÁLYA KÖLCSÖNHATÁS FIGYELEMBEVÉTELE A HIDRODINAMIKAI MODELLBEN

Irta: Huszár Miklós és Nárayné-Ziegler Mária

Összefoglalás

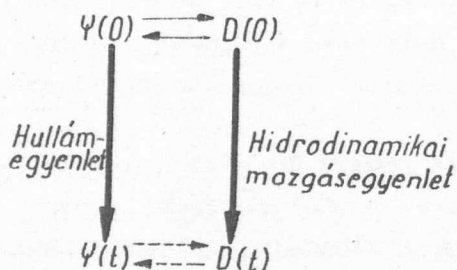
A Pauli-egyenletet a spin-pálya kölcsönhatást leíró taggal egészítjük ki, és megmutatjuk, hogy az így kapott hullámegyenlet kölcsönösen egyértelműen hidrodinamikai mozgásegyenletekké írható át. Az egyenletekben szereplő külső erőtagok következetesen klasszikusan értelmezhetők.

Bevezetés

Megmutatható [lásd [1], [2], [3]], hogy a külső elektromágneses teret is figyelembe vevő Schrödinger- és Pauli-egyenlet hidrodinamikai változókra vonatkozó egyenletekké írható át, és a hidrodinamikai változók a hullámfüggvény-nyel egy-egyértelmű kapcsolatban vannak. Jelen dolgozatban a spin-pálya kölcsönhatással kiegészített Pauli-egyenlet hidrodinamikai modelljét adjuk meg.

Legyen adott egy ψ hullámfüggvényre vonatkozó hullámegyenlet, akkor a hidrodinamikai modell felállítására kitűzött program a következő feladat megoldását követeli: be kell vezetni a ψ hullámfüggvénnyel kifejezett mennyiségeket - a hidrodinamikai változókat, - és leszámaztatni ezek mozgásegyenleteit, úgy, hogy a hidrodinamikai változók és a mozgásegyenletek az alábbi követelményeknek tegyenek eleget.

- 1/ Bármely időpontban a hullámfüggvény és a hidrodinamikai változók egymásból kölcsönösen egyértelműen kiszámíthatók legyenek. Az így adott leképezésben az összetartozó hullámfüggvényt és hidrodinamikai változókat egymásnak megfelelő mennyiségeknek fogjuk nevezni.
- 2/ Legyen $\psi(0)$ és $D(0)$ a hullámfüggvény, illetve az ennek megfelelő hidrodinamikai változók összességének $t=0$ pillanatban felvett értéke, akkor ezen mennyiségek t időpontban felvett értékei - $\psi(t)$ és $D(t)$ - a hullámegyenletből, illetve a hidrodinamikai egyenletekből kiszámíthatók. Megköveteljük, hogy az így nyert $\psi(t)$ és $D(t)$ az 1. pont értelmében egymásnak megfelelő mennyiségek legyenek. Ez a feltétel a következőképpen szemléltethető:



A szaggatott vonallal megjelölt mennyiségek közti megfeleltetés teljesülését követeljük meg az 1. követelmény értelmében.

3/ A hidrodinamikai változók a szimmetriatranszformációk során legyenek invariánsak, illetve transzformálódjanak ugyanúgy, mint a nekik megfelelő klasszikus mennyiségek. /Tehát például az áramlási

sebességet leíró hidrodinamikai változó elforgatások során vektorként transzformálódik és legyen mértékinvariáns, s.i.t./

4/ a/ A hidrodinamikai változók egész térre integrált mozgásegyenletének minden tagja a klasszikus fizika alapján értelmezhető kell hogy legyen.

b/ A hidrodinamikai mennyiségek meg kell hogy egyezzenek kísérletileg megfigyelt értékeikkel.

A fenti követelményekhez a következő megjegyzéseket fűzzük. Nyilvánvaló, hogy ψ -ből és ψ^* -ből végtelen sokféleképp definiálhatunk hidrodinamikai változókat, még akkor is, ha a bevezetett változók az 1, 2 és 3. követelménynek eleget tesznek. A fizikai szempontból alapvetően fontos megszorítást a 4.a. és b. követelmény tartalmazza. A Pauli-egyenlet hidrodinamikai modellje [3] ad példát arra, hogy még az 1, 2, 3 és 4a követelmény teljesülése esetén is bizonyos szabadsággal rendelkezünk a hidrodinamikai mennyiségeket illetően, és ez a szabadság éppen elegendő - és szükséges is - ahhoz, hogy eleget tegyünk a 4b pontnak is, és így a kísérleti tényeket helyesen írjuk le.

Hangsúlyozzuk, nem nyilvánvaló, hogy egyáltalán léteznek e négy követelménynek eleget tevő hidrodinamikai változók.

A hullámegyenlet

Legyen E és B a külső elektromos, illetve mágneses térerősség, és mozogjon ezek terében egy e töltésű, m mágneses momentumu részecske. Ha a részecske nyugszik, akkor az elektromágneses térrel való kölcsönhatásának energiája

$$\mathcal{E}_1 = -mB \quad |1|$$

Ha azonban a részecske mozog, fellép egy

$$p_0 = \frac{1}{c} v \times m \quad |2|$$

nagyságú elektromos dipólmomentum is, mely az elektromos térrel lép kölcsönhatásba. Így \mathcal{E}_1 -en kívül a részecske és a tér közt a következő kölcsönhatási energia jön létre

$$\mathcal{E}_2 = -p_0 E = -\frac{1}{c} (\mathbf{v} \times m) E : \quad |3|$$

Relativisztikus effektusok miatt azonban - a Thomas-precesszió következtében - még egy /3/-hoz hasonló típusú kölcsönhatás is létrejön. Mozogjon a részecske az S_1 laborrendszerben a t pillanatban \mathbf{v} sebességgel, majd a $t + \Delta t$ pillanatban $\mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}$ sebességgel. Legyen a részecske nyugalmi rendszere a t illetve a $t + \Delta t$ pillanatban rendre S_2 és S_3 . Ha az S_1 -ből S_2 -be, illetve az S_1 -ből S_3 -ba vivő Lorentz-transzformáció nem is tartalmaz forgást, az S_2 -ből S_3 -ba vivő transzformáció általában tartalmaz. A részecske spinje tehát saját rendszerében precessziós mozgást végez, melynek szögsebessége v^2/c^2 rendig [4]:

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{a} \approx \frac{e}{2mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E},$$

ahol \mathbf{a} a részecske gyorsulása, e és m pedig a töltése, illetve tömege. Rendelkezzék a részecske $\mathbf{s} = \frac{mc}{e} \mathbf{m}$ saját impulzusmomentummal, akkor a Thomas-precesszió következtében létrejött energia:

$$\mathcal{E}_3 = -\mathbf{s} \boldsymbol{\omega} = -\frac{1}{2c} m (\mathbf{v} \times \mathbf{E}). \quad |4|$$

Igy /1/, /3/ és /4/ figyelembevételével a következő kölcsönhatási energiát kapjuk:

$$\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_3 = -mB + \frac{1}{2c} m (\mathbf{v} \times \mathbf{E}), \quad |5|$$

ami így is írható:

$$\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_3 = -mB + \frac{1}{4c} m [\mathbf{v} \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \mathbf{v}] \quad |6|$$

A fenti átalakítást azért végeztük el, mert ha /5/-ből közvetlenül térünk át a megfelelő kvantummechanikai kifejezésre /lásd /9/ /, akkor a Hamilton-operátor nem adódik hermitikusnak. A /6/-hoz hozzávéve a kinetikus és elektrosztatikus energiát tartalmazó

$$\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2} m v^2 + e\phi$$

tagot, végül a következő energiakifejezéshez jutunk:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 + \mathcal{E}_3 = \frac{1}{2} m v^2 + e\phi - mB + \frac{1}{4c} m [\mathbf{v} \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \mathbf{v}].$$

A kvantummechanikai Hamilton-operátorra való áttérésnél az

$$\mathbf{m} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{G}, \quad \mathbf{v} = \frac{1}{m} (-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \quad |7|$$

megfeleltetést kell alkalmaznunk, ahol \mathbf{G} a Pauli-mátrixokból alkotott vektor [3], \mathbf{A} pedig a mágneses tér vektorpotenciálja. Így a hullámmegyenlet

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad |8|$$

alakú lesz, ahol

$$H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi - \mu (GB) + \lambda \mathcal{G} \left[\left(-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \left(-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right] \quad |9|$$

Mivel a továbbiakban gyakran fog szerepelni, bevezettük a

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad \lambda = \frac{e\hbar}{8mc^2}$$

jelölést.

A Hamilton-operátor utolsó, \mathcal{G} -ből származó tagja a spin-pálya kölcsönhatás, az első három tag pedig a Pauli-egyenlet Hamilton-operátora. Megjegyezzük, hogy a Dirac-egyenletből a spin-pálya kölcsönhatásra adódó kifejezés megegyezik a fenti szemléletes megfontolással kapott alakokkal [5].

Tömegsűrűség és tömegáram

A /8/ egyenletből a szokásos módon kontinuitási egyenletet kaphatunk: megszorozva /8/-at balról $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*)$ -gal, valamint m -mel, majd a kapott kifejezésből kivonva saját komplex konjugáltját, a következő egyenletre jutunk:

$$\frac{\partial \rho'_m}{\partial t} + \text{div}(\rho'_m \mathbf{v}') = 0, \quad |10|$$

ahol,

$$\rho'_m = m \psi^\dagger \psi, \quad |11|$$

$$\rho'_m \mathbf{v}' = \frac{\hbar}{2i} (\psi^\dagger \nabla \psi - (\nabla \psi)^\dagger \psi) - \frac{e}{c} \psi^\dagger \mathbf{A} \psi - 2m\lambda (\psi^\dagger \mathcal{G} \psi) \times \mathbf{E}. \quad |12|$$

A /10/ alatti kontinuitási egyenletből azonban ρ'_m és $\rho'_m \mathbf{v}'$ nem állapítható meg egyértelműen. Végtelen sok nem-ekvivalens - a kontinuitási egyenletnek eleget tevő - tömegsűrűség és tömegáram adható meg.

E többértelműség vizsgálata céljából írjuk a /10/ egyenletet formálisan

$$\sum_{\nu=0}^3 \frac{\partial j'_\nu}{\partial x_\nu} = 0 \quad |13|$$

alakban, ahol $j'_0 = \rho'_m$, $\mathbf{j}' = \rho'_m \mathbf{v}'$, valamint $x_0 = t$.

Legyen $k_{\nu\mu}(r, t)$ egy tetszőleges 4x4-es antiszimmetrikus helytől

és időtől függő mátrix, és tekintsük a

$$j_v'' = \sum_{\mu=0}^3 \frac{\partial k_{\nu\mu}}{\partial x_{\mu}} \quad |14|$$

vektort. $k_{\nu\mu}$ antiszimmetrikus voltát felhasználva egyszerűen belátható, hogy amennyiben j_v' kielégíti a /13/ kontinuitási egyenletet, akkor

$$j_v = j_v' + j_v'' \quad |15|$$

is ugyanilyen tulajdonsággal rendelkezik. Az 1. függelékben kimutatjuk, hogy j_v'' /14/ alatti alakja egyben a legáltalánosabb.

A $k_{\nu\mu}$ mátrixnak 6 független komponense van, ezt két tetszőleges vektorral - a -val és b -vel - fogjuk reprezentálni. Pontosabban, legyen

$$k_{\nu\mu} = \begin{pmatrix} 0 & -a_1 & -a_2 & -a_3 \\ a_1 & 0 & b_3 & -b_2 \\ a_2 & -b_3 & 0 & b_1 \\ a_3 & b_2 & -b_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |16|$$

ahol az a és b vektorok a helynek és időnek tetszőleges függvényei. A /16/-ot /14/-be helyettesítve és külön kiírva a $\nu=0$, $\nu=1,2,3$ esetet kapjuk:

$$j_0'' = \rho_m'' = -\operatorname{div} a \quad |17|$$

$$j'' = \rho_m'' v'' = \operatorname{rot} b + \frac{\partial a}{\partial t} \quad |18|$$

Az eredmény annyit jelent, hogy ha a /10/-nek eleget tevő ρ' és $\rho'v'$ helyett a

$$\rho_m = \rho_m' - \operatorname{div} a \quad |19|$$

$$\rho_m v = \rho_m' v' + \operatorname{rot} b + \frac{\partial a}{\partial t} \quad |20|$$

tömegsűrűséget és tömegáramot vezetjük be, ez ugyancsak eleget tesz a kontinuitási egyenletnek. A /19/ és /20/-ban adott matematikailag lehetséges alakok közül olyan a és b értéket kell választani, hogy ρ_m és $\rho_m v$ megfeleljen a 4a. és 4b. követelménynek. A Pauli-egyenletnél /lásd [3] / ennek figyelembevételével

$$a = 0, \quad b = \frac{\hbar}{4} \psi' \delta \psi \quad |21|$$

értéket kell választani. A spin-pálya kölcsönhatást is figyelembevevő /8/, illetve /9/ egyenlet esetében ugyancsak a /21/ alatti a és b értéket használjuk. Ennek jogossága utólag nyer igazolást azáltal, hogy kimutatjuk, hogy a fenti hidrodinamikai változók és ezek mozgásegyenletei eleget tesznek az 1., 2., 3 és 4 követelménynek.

Igy /11/, /12/ és /21/ felhasználásával a tömegsűrűség és sebesség következő kifejezését kapjuk:

$$\rho_m = m\rho = m\psi^+\psi \quad |22|$$

$$v = \frac{1}{\rho} \frac{\hbar}{2mi} (\psi^+\nabla\psi - (\nabla\psi)^+\psi) - \frac{e}{mc} A + \frac{1}{\rho} \frac{\hbar}{4m} \text{rot } s - \frac{2\lambda}{\rho} s \times E, \quad |23|$$

ahol a $\rho = \psi^+\psi$ és $s = \psi^+\sigma\psi$ jelölést vezettük be.

Az effektív töltés- és áramsűrűség

A tömegsűrűség és tömegáram /22/ és /23/ alatti kifejezésében a /19/ és /20/-ban megadott matematikai lehetőség csak részben valósul meg, amennyiben $\alpha=0$ választással éltünk. Az effektív töltés- és áramsűrűségben azonban - mint látni fogjuk - megjelenik egy vektor divergenciája, illetve időderiváltja.

Tekintsünk egy $\rho_e(r,t)$ elektromos töltéssűrűséggel, $v(r,t)$ sebességgel, $M(r,t)$ és $P(r,t)$ mágneses illetve elektromos dipólsűrűséggel rendelkező folyadékot. Effektív töltés- illetve áramsűrűségnek nevezzük azt a valódi töltést, illetve áramot, mely ugyanazt az elektromágneses teret kelti, mint a fenti mágnesesen és elektromosan polarizált töltött folyadék. Ezek a mennyiségek a következőképpen írhatók fel / lásd [6] /:

$$\rho_{eff} = \rho_e - \text{div } P \quad |24|$$

$$j_{eff} = \rho_e v + c \text{rot } M + \frac{\partial P}{\partial t}. \quad |25|$$

Először határozzuk meg a tömegáram által szállított ρ_e töltés- , illetve $\rho_e v$ áramsűrűséget. A /22/ egyenletet $\frac{e}{m}$ -mel, a /23/-at ρ_e -vel szorozva kapjuk:

$$\rho_e = e\psi^+\psi, \quad |26|$$

$$\rho_e v = \frac{e\hbar}{2mi} (\psi^+\nabla\psi - (\nabla\psi)^+\psi) - \frac{e}{mc} \rho_e A + c \frac{\mu}{2} \text{rot } s - 2e\lambda(s \times E). \quad |27|$$

Figyelembevétel az Einstein - de Haas kísérletet, továbbá azt a tényt, hogy a hidrogénatom alapállapotában az elektron μ nagyságu mágneses momentummal rendelkezik, a Pauli-egyenlet esetében

$$M = \frac{\mu}{2} s \quad |28|$$

permanens mágneses momentum-sűrűséget kell felvenni [3]. Ez a helyzet a spin-pálya kölcsönhatás esetében is, azonban míg az előbbi esetben $P=0$ volt, most eleve az elektromos dipóleloszlást is figyelembe kell venni. Ugyanis a mozgó mágneses dipólmomentum-sűrűség elektromos dipólmomentum-eloszlásnak felel meg. Ennek alakját legegyszerűbben a /6/ egyenlet segítségével kaphatjuk

meg. Ez ugyanis így írható:

$$-m\mathbf{B} + \frac{1}{4c} m [\mathbf{v} \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times \mathbf{v}] = -m\mathbf{B} - \rho \mathbf{E}, \quad |29|$$

ahol

$$\rho = \frac{1}{4c} (\mathbf{v} \times m - m \times \mathbf{v}). \quad |30|$$

/29/ jobboldala a mágneses momentumnak a mágneses térrel, illetve a mozgó mágneses momentum miatt létrejött elektromos momentumnak az elektromos térrel való kölcsönhatását írja le. /30/-ból /7/ alapján a következő elektromos dipól-sűrűséget kapjuk:

$$\rho = \lambda \psi^+ [(i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \times \mathbf{G} - \mathbf{G} \times (i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A})] \psi, \quad |31|$$

ahol a ∇ módon irt nabla hátrafelé, ψ^+ -ra hat.

A /28/ és /31/ képlet megadja a folyadék mágneses, illetve elektromos dipólsűrűségét, így /24/ és /25/ segítségével felírhatjuk az effektív töltés- illetve áramsűrűség kifejezését:

$$\rho_{eff} = e \psi^+ \psi - \lambda \operatorname{div} \left\{ \psi^+ \left[(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \times \mathbf{G} - \mathbf{G} \times (i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \psi \right\} \quad |32|$$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{eff} = & \frac{e\hbar}{2mi} (\psi^+ \nabla \psi - \nabla \psi^+ \psi) - \frac{e^2}{mc} \psi^+ \psi \mathbf{A} + c \mu \operatorname{rot} \rho - 2e\lambda \operatorname{rot} \mathbf{E} + \\ & + \lambda \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \psi^+ \left[(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \times \mathbf{G} - \mathbf{G} \times (i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \psi \right\} \quad |33| \end{aligned}$$

A 2. függelékben kimutatjuk, hogy ρ_{eff} és \mathbf{j}_{eff} fenti szemléletes megfontolással kapott /32/ és /33/ alatti értéke közvetlenül a /9/ Hamilton-operátorból levezethető.

Hidrodinamikai változók

A tömegáramra, illetve az effektív áramra vonatkozó kontinuitási egyenlet vizsgálata megmutatta, hogy az elektront töltött, áramló folyadék reprezentálja, mely mágneses, illetve ennek mozgása következtében elektromos polarizációval rendelkezik. Ezért hidrodinamikai változókként a következő mennyiségeket fogjuk használni:

a/ A folyadék tömegsűrűsége:

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = m \psi^+ \psi \quad |34|$$

Ha a formulák fizikai tartalma úgy kívánja, akkor természetesen /34/ helyett a $\rho = \psi^+ \psi$ és $\rho_e = e \psi^+ \psi$ változókat is igénybe vesszük.

b/ A tömeg áramlási sebessége:

$$v(r,t) = \frac{1}{\rho} \frac{\hbar}{2mi} (\psi^+ \nabla \psi - (\nabla \psi)^+ \psi) - \frac{e}{mc} A + \frac{1}{\rho} \frac{\hbar}{4m} \text{rot}(\psi^+ \mathcal{G} \psi) - \frac{2\lambda}{\rho} \psi^+ \mathcal{G} \psi \times E. \quad |35|$$

c/ A térfogatagség mágneses polarizációjára jellemző

$$s(r,t) = \psi^+ \mathcal{G} \psi \quad |36|$$

vektor. Vezessük be ezen kívül a

$$T(r,t) = \frac{1}{\rho} s \quad |37|$$

mennyiséget, melyről kimutatható, hogy a mágneses polarizáció irányába mutató egységvektor [3] .

d/ Az elektromos dipólsűrűséget megadó

$$P(r,t) = \lambda \psi^+ [(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A) \times \mathcal{G} - \mathcal{G} \times (i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A)] \psi \quad |38|$$

kifejezés a következő hidrodinamikai változó. Használni fogjuk ezen kívül az

$$R(r,t) = \frac{1}{\rho} P(r,t) \quad |39|$$

mennyiséget is.

Mivel s és T és hasonló módon P és R egymásból /37/ illetve /39/ alapján egyértelműen kiszámíthatók, mindegy, melyiket használjuk hidrodinamikai változóként. A továbbiakban mindig azzal a változóval fogalmazzuk meg az eredményeket, amelyikkel célszerűbb.

Megjegyezzük, hogy a fenti P mennyiség nem független az előzőektől, ugyanis megmutatható, hogy ρ, v és T segítségével kifejezhető. Ahhoz azonban, hogy a 4a követelménynek eleget tudjunk tenni, P -t önálló hidrodinamikai változóként kell kezelni.

A hidrodinamikai változók és a hullámfüggvény közti kapcsolat

Kimutatjuk, hogy az előzőekben bevezetett hidrodinamikai változók és a kétkomponensű ψ hullámfüggvény közt bármely t időpontban kölcsönösen egyértelmű kapcsolat van, és így az 1. pontban kirótt követelmény teljesül.

Ha adott a kétkomponensű ψ hullámfüggvény, mely eleget tesz az adott A és ϕ potenciálokat tartalmazó /8/ egyenletnek, akkor ebből /34/, /35/, /36/ és /38/ alapján a hidrodinamikai változók nyilvánvalóan egyértelműen kiszámíthatók. Így az állítás első része egyszerűen belátható volt. Részletes megfontolást igényel azonban annak igazolása, hogy a hidrodinamikai változók megadása rögzített A és ϕ esetén a hullámfüggvényt egyértelműen meghatározza.

/A különböző mértékek választásának lehetőségére később térünk ki./ A bizonyítás megegyezik a Pauli-egyenlet esetén követett gondolatmenettel /lásd [3] /, a különbség csupán a /23/ alatti sebesség kifejezéséből ered, ezért a lépéseket csak vázlatosan követjük.

Írjuk a ψ hullámfüggvény két komponensét

$$\psi_1 = R \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i(S - \frac{1}{2} \varphi)}$$

$$\psi_2 = R \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i(S + \frac{1}{2} \varphi)}$$

alakba, ahol R, S, ϑ, φ a helynek és időnek függvényei. Megmutatjuk, e mennyiségek a hidrodinamikai változókkal - bizonyos feltételek teljesülése esetén - egyértelműen kiszámíthatók.

Behelyettesítve ψ fenti előállítását /37/-be, T komponenseire kapjuk:

$$T_1 = \sin \vartheta \cos \varphi, \quad T_2 = \sin \vartheta \sin \varphi, \quad T_3 = \cos \vartheta,$$

ahonnan

$$\vartheta = -\frac{i}{2} \ln \frac{\frac{i T_3}{\sqrt{T_1^2 + T_2^2}} - 1}{\frac{i T_3}{\sqrt{T_1^2 + T_2^2}} + 1},$$

és

$$\varphi = -i \ln \frac{T_1 + i T_2}{\sqrt{T_1^2 + T_2^2}},$$

ahol mindenütt a négyzetgyök pozitív értéke veendő.

ψ_1 és ψ_2 fenti előállítását /35/-be téve a sebességet így írhatjuk:

$$v = \frac{\hbar}{m} \text{grad } S - \frac{\hbar}{2m} \cos \vartheta \text{grad } \varphi - \frac{e}{mc} A + \frac{\hbar}{4m} \frac{1}{\rho} \text{rots} - 2\lambda T \times E,$$

mindkét oldalt egy r_0 ponttól egy r pontig valamely a szinguláris pontokon át nem haladó vonal mentén integrálva:

$$S = \frac{m}{\hbar} \int_{r_0}^r \left[v + \frac{e}{mc} A + \frac{\hbar}{2m} \cos \vartheta \text{grad } \varphi - \frac{\hbar}{4m} \frac{1}{\rho} \text{rots} + 2\lambda T \times E \right] dr + S_0(r_0, t).$$

Rögzített r_0 és r -et tekintve olyan integrációs utak mentén, melyek nem fogják körül a hidrodinamikai változó szingularitásait, az integrál értéke független az uttól, így S egyértékű függvény. Azonban a fenti integrált szingularitásokat átfogó zárt görbe mentén véve nem kapunk zérust, így S -nek csak egy többértékű függvényét kapjuk. Ennek ellenére, ha megköveteljük, hogy

egy rögzített pontban S értékei egymástól - bármely uton is jutunk oda - csak 2π egészszámu többszörösében különbözzenek, akkor S többértékűsége ellenére ψ_1 - és ψ_2 -t a hidrodinamikai változók egyértelműen meghatározzák. Ezt tekintetbe véve kapjuk:

$$\oint v dr = 2\pi \frac{\hbar}{m} k + \oint \left[-\frac{e}{mc} A - \frac{\hbar}{2m} \cos \vartheta \operatorname{grad} \psi + \frac{\hbar}{4m} \frac{1}{\rho} \operatorname{rot} s - 2\lambda T \times E \right] dr,$$

ahol $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

A fenti feltétel értelmében a hidrodinamikai változók nem adhatók meg tetszés szerint, hanem eleget kell tenniök a fenti mellékfeltételnek. Ennek fennállásáról azonban csak a $t=0$ pillanatban kell gondoskodnunk, mert - mint megmutatható - ekkor bármely későbbi időpontban teljesül [3]. A továbbiakban, ha adott hidrodinamikai változókról beszélünk, ezt úgy értjük, hogy ezek a fenti mellékfeltételt is kielégítik.

Rögzített elektromágneses potenciálok esetén tehát a mellékfeltételt kielégítő hidrodinamikai mennyiségek a hullámfüggvényt az S kifejezésben jelentkező $S_0(r_0, t)$ függvény erejéig meghatározzák. Kiderül azonban, hogy amikor a 2. követelménynek akarunk eleget tenni, és a hullámfüggvénynek a hidrodinamikai változókkal kifejezett alakját a hullámfüggvénybe helyettesítjük, ψ csak akkor lesz megoldás, ha $S_0(r_0, t)$ egy konstans erejéig egyértelműen meghatározott függvény. /Részletesen lásd [3]. / ψ kifejezésében tehát csupán egy helytől és időtől független tetszőleges állandó marad.

A mozgásegyenletek

Következő feladatunk, hogy a /8/ alatti hullámeqyenlet felhasználásával az előző pontban megadott hidrodinamikai változók mozgásegyenletét levezessük. E mozgásegyenletek segítségével a hidrodinamikai változók $t=0$ pillanatban megadott értékeiből bármely későbbi időpontban felvett értékei meghatározhatók. Mivel maga a /9/ Hamilton-operátor v^2/c^2 rendnél nem pontosabb, a következőkben is elhanyagoljuk a v/c -ben ennél magasabbrendű tagokat.

Jelöljük D -vel valamelyik vektor jellegű hidrodinamikai változót. Mint a /35/, /37/, /39/ egyenletekből leolvasható, D mindig ilyen alaku:

$$\rho D = \psi^+ d\psi + (d\psi)^+ \psi, \quad (40)$$

ahol d megfelelően választott vektor jellegű operátort jelöl. /Pl. $D=T$ esetén $d = \frac{1}{2} \sigma$. / D mozgásegyenletéhez a $\rho \frac{dD}{dt}$ mennyiséget kell kiszámítanunk. A levezetést lényegesen leegyszerűsíti, ha a következőképpen járunk el. Felhasználjuk a

$$\rho \frac{dD}{dt} = \frac{\partial(\rho D)}{\partial t} + \text{Div}(\rho \mathbf{v} \circ D) \quad |41|$$

azonosságot. Ide /40/-et behelyettesítve, valamint /8/ segítségével az idő szerinti deriválásokat elvégezve kapjuk:

$$\begin{aligned} \rho \frac{dD}{dt} = & \frac{1}{i\hbar} [\psi^* dH\psi - (H\psi)^* d\psi] + \frac{1}{i\hbar} [(d\psi)^* H\psi - (dH\psi)^* \psi] + \\ & + \psi^* \frac{\partial d}{\partial t} \psi + \left(\frac{\partial d}{\partial t} \psi\right)^* \psi + \text{Div}(\rho \mathbf{v} \circ D). \end{aligned}$$

Hozzáadva és levonva az

$$\frac{1}{i\hbar} \psi^* H d\psi + \frac{1}{i\hbar} (H d\psi)^* \psi$$

kifejezést:

$$\begin{aligned} \rho \frac{dD}{dt} = & \frac{i}{\hbar} \psi^* [H, d] \psi - \frac{i}{\hbar} ([H, d] \psi)^* \psi + \psi^* \frac{\partial d}{\partial t} \psi + \left(\frac{\partial d}{\partial t} \psi\right)^* \psi + \\ & + \text{Div}(\rho \mathbf{v} \circ D) + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \psi^* H d\psi - (H\psi)^* d\psi + \right. \\ & \left. + (d\psi)^* H\psi - (H d\psi)^* \psi \right\}. \quad |42| \end{aligned}$$

Ennek a szétválasztásnak az az előnye, hogy a kapcsos zárójelben lévő kifejezés egész térre vett integrálja H hermitikus volta következtében eltűnik, így az eredőt nem szolgáltat.

a/ A ρ_m sűrűség mozgásegyenlete maga a kontinuitási egyenlet:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \text{div}(\rho_m \mathbf{v}) = 0,$$

ahol \mathbf{v} kifejezését /23/ alatt adtuk meg. Ezt a tömegsűrűség totális deriváltjával is kifejezhetjük:

$$\frac{d\rho_m}{dt} = -\rho_m \text{div} \mathbf{v}. \quad |43|$$

b/ A sebesség mozgásegyenlete. /42/ és /8/ felhasználásával hosszadalmas számolás után a következő egyenletre jutunk:

$$\rho_m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = [\rho_e \mathbf{E} + \frac{1}{c} \rho_e \mathbf{v} \times \mathbf{B}] + \frac{\mu}{2} [(\mathbf{s} \text{ grad}) \mathbf{B} + \mathbf{s} \times \text{rot} \mathbf{B}] +$$

$$+ [(\mathbf{P} \text{ grad}) \mathbf{E} + \mathbf{P} \times \text{rot} \mathbf{E}] - [2m\lambda \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{s} \times \mathbf{E})] + \text{Div}(\underline{Q}^S + \underline{Q}^A), \quad |44|$$

ahol

$$\underline{Q}_{ik}^S = + \frac{\hbar^2}{4m} \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_i \partial x_k} + \frac{\mu}{2} \delta_{ik} \mathbf{s} \cdot \mathbf{B} - \frac{\mu}{4} (s_i B_k + s_k B_i) +$$

$$+ \frac{\hbar}{4} v_i \text{rot}_k \mathbf{s} + \frac{\hbar}{4} v_k \text{rot}_i \mathbf{s} - \frac{\hbar^2}{16m} \frac{1}{\rho} \text{rot}_i \mathbf{s} \text{rot}_k \mathbf{s} - \frac{\hbar^2}{4m} \rho \frac{\partial T_r}{\partial x_i} \frac{\partial T_r}{\partial x_k} -$$

$$- m\lambda (\mathbf{s} \times \mathbf{E})_i v_k - m\lambda (\mathbf{s} \times \mathbf{E})_k v_i + \frac{\hbar\lambda}{4} \frac{1}{\rho} (\mathbf{s} \times \mathbf{E})_i \text{rot}_k \mathbf{s} + \frac{\hbar\lambda}{4} \frac{1}{\rho} (\mathbf{s} \times \mathbf{E})_k \text{rot}_i \mathbf{s} -$$

$$- \frac{\hbar\lambda}{2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{s} \left(\frac{\partial T_r}{\partial x_i} + \frac{\partial T_i}{\partial x_k} \right) + \frac{\hbar\lambda}{2} E_r \left(s_k \frac{\partial T_r}{\partial x_i} + s_i \frac{\partial T_r}{\partial x_k} \right) \quad |45|$$

és

$$\underline{Q}_{ik}^A = \frac{\mu}{4} (s_i B_k - s_k B_i) + \frac{1}{2} (P_i E_k - P_k E_i) - \frac{\hbar\lambda}{2} \frac{\partial}{\partial x_r} (\rho \delta_{ir} E_k - \rho \delta_{kr} E_i) -$$

$$- \epsilon_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_p} \left\{ \frac{\hbar}{4} s_l v_p - \frac{\hbar^2}{16m} \frac{1}{\rho} s_l \text{rot}_p \mathbf{s} - \frac{\hbar^2}{8m} \rho \epsilon_{l r q} T_r \frac{\partial T_q}{\partial x_p} + \frac{\hbar\lambda}{2} s_l (\mathbf{s} \times \mathbf{E})_r \right\} |46|$$

Itt a következő jelöléseket vezettük be: δ_{ik} a Kronecker-delta, ϵ_{ikl} értéke pedig $+1$ illetve -1 , ha i, k, l az $1, 2, 3$ páros, illetve páratlan permutációja, nulla egyébként. A kétszer előforduló indexekre mindenütt 1 -től 3 -ig terjedő összegezés értendő. Az S és A index arra utal, hogy \underline{Q}_{ik}^S és \underline{Q}_{ik}^A indexeiben szimmetrikus vagy antiszimmetrikus.

Megjegyezzük, hogy maga a

$$\underline{Q}_{ik} \equiv \underline{Q}_{ik}^S + \underline{Q}_{ik}^A$$

feszültségi tenzor nem egyértelműen megállapítható, csak annak divergenciája. Ugyanis ha \underline{Q}_{ik} helyett egy

$$\underline{Q}'_{ik} \equiv \underline{Q}_{ik} + \frac{\partial}{\partial x_l} q_{ikl}(r, t)$$

alakú feszültségi tenzort használunk, ahol q_{ikl} az utolsó két indexben antiszimmetrikus, egyébként tetszőleges tenzor, akkor ugyanazt az erősrőséget kapjuk, ugyanis:

$$(Div \underline{Q}')_i = \frac{\partial Q'_{ik}}{\partial x_k} = \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k}.$$

Ennek a tetszőlegességnek a fizikai tartalma az, hogy egy térfogatelemre ható tömegerő nem határozza meg egyértelműen az őt helyettesítő felületi erőket, hiszen ezek mindig kiegészíthetők olyan felületi erőkkal, melyek a térfogatelemet határoló zárt felületre integrálva zérus eredőt szolgáltatnak. A /44/ egyenletben azonban \underline{Q} csak $Div \underline{Q}$ alakban szerepel, ami egyértelműen meg van határozva. \underline{Q} pontos alakjának megállapítására csak a belső erők forgatónyomatékának kimérésével volna lehetőség.

c/ A spinvektor mozgásegyenlete. /42/ és /9/ felhasználásával a T vektor következő mozgásegyenlete vezethető le :

$$\begin{aligned} \rho \frac{dT}{dt} = \frac{2\mu}{\hbar} \rho T \times B - \frac{1}{2c} \frac{2\mu}{\hbar} \rho T \times (v \times E) + \\ + 2\lambda \left[\rho (E \text{ rot } T) T - \rho ((T \times E) \text{ grad}) T - \frac{1}{2} T \times (E \times \text{rot } \rho T) \right] + \\ + Div \underline{Q}', \end{aligned} \quad |47|$$

ahol

$$\underline{Q}'_{ik} = \frac{\hbar}{2m} \epsilon_{irq} \rho T_r \frac{\partial T_q}{\partial x_k} + \frac{\hbar}{4m} T_i \text{rot}_k \rho T - 2\lambda \rho T_i (T \times E)_k - 2\lambda \epsilon_{ikr} \rho E_r.$$

d/ Az elektromos polarizációvektor mozgásegyenlete.

A P vektor helyett célszerűbb a /39/ alatt bevezetett

$$R = \frac{1}{\rho} P$$

vektor mozgásegyenletét felírni. Az előzőekhez hasonlóan kapjuk:

$$\rho \frac{dR}{dt} = -2e\lambda \rho (T \times E) + Div \underline{Q}'', \quad |48|$$

ahol

$$\underline{Q}''_{ik} = \rho R_i v_k.$$

A fent levezetett /43/, /44/, /47/ és /48/ mozgásegyenletek egyenértékűek a /8/ alatti Schrödinger-egyenlettel. Ugyanis a ρ, v, T, R hidrodinamikai változók és a (ψ_1, ψ_2) hullámfüggvény egymásból egyértelműen kiszámíthatók /részletesen lásd [3] /, és a fent levezetett mozgásegyenletek alkalmazásak a $t=0$ pillanatban megadott hidrodinamikai változók bármely későbbi időpontban felvett értékének kiszámítására.

Az impulzusmomentum mozgásegyenlete. Bár az impulzusmomentum nem külön hidrodinamikai változó - hiszen a többi változóval $r \times \rho_m v$ alakban fejezhető ki - a teljesség kedvéért vezessük le az elektront leíró folyadék összimpulzusmomentumának mozgásegyenletét. Irjuk a /44/ egyenletet röviden

$$\rho_m \frac{dv}{dt} = \rho f + \text{Div}(\underline{Q}^s + \underline{Q}^A)$$

alakban. Ennek felhasználásával

$$\frac{d}{dt} \int r \times \rho_m v d\tau = \int r \times \rho f d\tau + \int r \times \text{Div} \underline{Q} d\tau, \quad |49|$$

ahol

$$\underline{Q} = \underline{Q}^s + \underline{Q}^A.$$

A második tagban parciálisan integrálva az i -edik komponens a következő lesz:

$$\left(\int r \times \text{Div} \underline{Q} d\tau \right)_i = \frac{1}{2} \epsilon_{ikl} \int (\underline{Q}_{kl} - \underline{Q}_{lk}) d\tau = \epsilon_{iki} \int \underline{Q}_{kl}^A d\tau. \quad |50|$$

Látható tehát, hogy \underline{Q} szimmetrikus része kiesik, csak az antiszimmetrikus rész ad járulékot, pontosabban - mint ez /46/-ből leolvasható - \underline{Q}^A -nak is csak azok a tagjai, melyek nem teljes deriváltak, ez utóbbiak ugyanis az egész térre integrálva zérust adnak. /50/-et /49/-be helyettesítve kapjuk:

$$\frac{d}{dt} \int (r \times \rho_m v)_i d\tau = \int (r \times \rho f)_i d\tau + \epsilon_{ikl} \int \underline{Q}_{kl}^A d\tau. \quad |51|$$

Figyelembe véve \underline{Q}^A /46/ alatti alakját végül a teljes impulzusmomentum mozgásegyenletére kapjuk:

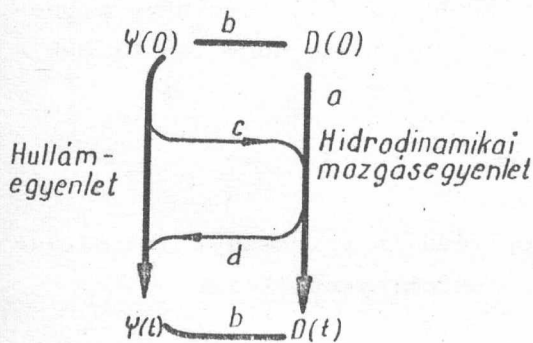
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int r \times \rho_m v d\tau &= \int r \times \left[\rho_c E + \frac{1}{c} \rho_e v \times B \right] + \frac{\mu}{2} \left[(s \text{ grad}) B + s \times \text{rot} B \right] + \\ &+ \left[(P \text{ grad}) E + P \times \text{rot} E \right] - 2m\lambda \left[\frac{\partial}{\partial t} (s \times E) \right] \} d\tau + \\ &+ \frac{\mu}{2} \int s \times B d\tau + \int P \times E d\tau. \end{aligned} \quad |52|$$

Az /51/ illetve /52/ egyenlet mutatja a \underline{Q} tenzor szimmetrikus és antiszimmetrikus részre bontásának fizikai jelentését: a szimmetrikus rész eredő forgatónyomatékot nem szolgáltat, az antiszimmetrikus rész pedig közvetlenül megadja a forgatónyomaték belső erőből eredő járulékát.

A mozgásegyenletek és a hullámegyenlet egyenértékűsége

Kimutattuk, hogy az 1. követelménnyel összhangban a hidrodinamikai változók és a hullámfüggvény közt egy-egyértelmű kapcsolat áll fenn. Az ily-

módon összetartozó hullámfüggvényt és a mellékfeltételt kielégítő hidrodinamikai változókat, mint már korábban is, egymásnak megfelelőnek fogjuk nevezni. A 2. pont megköveteli, hogy a fenti értelemben a $t=0$ pillanatban egymásnak megfelelő hullámfüggvény és hidrodinamikai változók a hullámegyenlet, illetve a mozgásegyenletek segítségével számított későbbi értékei is egymásnak megfelelőjenek. Másszóval a hidrodinamikai változók t pillanatban felvett értékének kiszámítása - a mellékfeltételnek eleget tevő $t=0$ pillanatban adott érték ismeretében - két uton lehetséges: a/ hidrodinamikai mozgásegyenlet segítségével, b/ a hidrodinamikai változók $t=0$ pillanatban megadott értékéből meghatározzuk a hullámfüggvény $t=0$ pillanatban felvett értékét, majd ebből a hullámegyenlet segítségével kiszámítva a hullámfüggvényt a t pillanatban, meghatározzuk a hidrodinamikai változók értékét a t időpontban. Az a/ és b/ eljárásnak azonos eredményt kell szolgáltatnia /lásd az ábrát/. Ugyanígy a hullámfüggvény egy t pillanatban felvett értékét is két uton határozhatjuk meg, egyrészt közvetlenül, másrészt a hidrodinamikai mozgásegyenleteken keresztül. E két utnak itt is azonos eredményt kell szolgáltatnia. A mellék-



feltételre csak annyiban kell figyelmet fordítani, hogy a $t=0$ pillanatban teljesüljön, hiszen, mint említettük, kimutatható [3], ekkor bármely t időpontban is teljesül.

Az előzőekben kimutattuk, hogy a hullámegyenletből levezethetők a hidrodinamikai mozgásegyenletek. Ez a tény az előzőekben már használt ábrán a c vonallal szemléltethető.

Ebből nyilvánvalóan következik, hogy a hidrodinamikai változók bármely t időpontban felvett értékét a $t=0$ pillanatban felvett értékük ismeretében akár direkt a hidrodinamikai mozgásegyenletekből, akár a hullámfüggvényen keresztül számítjuk ki, azonos eredményt kapunk. A 2. pont teljes igazolására azt is bizonyítani kellene, hogy a hullámfüggvény értéke is független attól, hogy a hullámegyenletből vagy a hidrodinamikai egyenleten keresztül határoztuk-e meg az értékét. Ennek igazolása annak kimutatásával történhet, hogy a hullámegyenlet - a mellékfeltétel teljesülése esetén - a hidrodinamikai mozgásegyenletekből levezethető. Ezt a lépést az előző ábrán a d vonal szemlélteti. Ez a számítás, bár elvileg igen egyszerű, olyan hatalmas volumenű munkát igényel, hogy nem végeztük el, azonban, mivel a Pauli-egyenlet esetén a visszahelyettesítés a kívánt eredményt szolgáltatotta [3], igen valószínűnek látszik, hogy a bizonyítás jelen esetben is eredményesen véghezvihető.

Forgás és mértékinvariancia

Egy R forgás során az r helyzetvektor transzformálódjék

$$r' = Q(R)r$$

szerint, ahol $Q(R)$ 3x3-as ortogonális mátrix. A transzformált hullámfüggvényt írjuk

$$\psi'(r', t) = U(R)\psi(r, t)$$

alakba, ahol $U(R)$ valamely - az R forgástól függő - 2x2-es mátrix, melynek konkrét alakját abból a feltételből határozzuk meg, hogy a $\rho = \psi^* \psi$ sűrűség skalárként, az $s = \psi^* \epsilon \psi$ spinvektor pedig vektorként transzformálódjék. E két feltétel az $U(R)$ mátrixra rendre a következő egyenleteket szolgáltatja:

$$U^*(R) \cdot U(R) = 1$$

$$U^*(R) \epsilon U(R) = Q(R) \epsilon$$

amelyek $U(R)$ -et egy lényegtelen konstans fázisfaktortól eltekintve meghatározzák. Ennek felhasználásával egyszerűen megmutatható, hogy fennállnak a

$$v'(r', t) = Q(R)v(r, t)$$

$$P'(r', t) = Q(R)P(r, t)$$

egyenletek, azaz a v és P mennyiség és így végülis valamennyi hidrodinamikai változó a helyes transzformációs tulajdonsággal rendelkezik.

Kimutattuk, hogy - egy lényegtelen konstans fázistól eltekintve - rögzített A és ϕ vektorpotenciál esetén a hullámfüggvény és a hidrodinamikai mennyiségek közt egy-egyértelmű kapcsolat áll fenn. Azonban a potenciálok minden

$$A \rightarrow A' = A + \text{grad} f$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$$

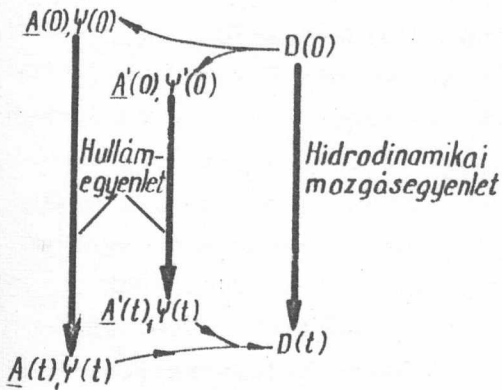
alaku mértéktranszformációjakor /ahol f tetszőleges függvény/ a térerősségek változatlanul maradnak. Ki kell tehát mutatnunk, hogy a hidrodinamikai mennyiségek függetlenek a mérték választásától.

Legyenek adva a $t=0$ pillanatban a hidrodinamikai mennyiségek és valamely A, ϕ mértékben a hozzá tartozó $\psi(0)$ hullámfüggvény. S kifejezéséből leolvasható, hogy amennyiben az A' és ϕ' potenciálokra térünk át és megköveteljük, hogy a hidrodinamikai változók a $t=0$ -ban mértékfüggetlenek legye-

nek, a hullámfüggvény mértéktranszformációkor így kell, hogy transzformálódjék:

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\frac{e}{\hbar c} f} \psi.$$

Tehát új mértékre való áttérésnél a $t=0$ pillanatban minden (A, ϕ) potenciálértékhez tartozik egy hullámfüggvény. Meg kell mutatnunk, hogy a/ bármelyik összetartozó $(A(0), \phi(0))$ potenciálból és $\psi(0)$ hullámfüggvényből számítjuk ki $\psi(t)$ és ebből $D(t)$ értékét, ugyanarra az eredményre jutunk, b/ $D(t)$ így számított értéke megegyezik a hidrodinamikai mozgásegyenletekből számított $D(t)$ értékkel. A bizonyítandó állítást az alábbi ábra szemlélteti:



Az a/ állítás belátáshoz azt kell megmutatni, hogy a hidrodinamikai változók - bármely időpontban - invariánsak a fenti $\psi \rightarrow \psi', A \rightarrow A', \phi \rightarrow \phi'$ mértéktranszformációval szemben. Ezt példaként a /38/ alatti polarizációvektor esetére mutatjuk meg, de hasonlóan egyszerűen igazolható a többi változó esetén is:

$$P' = \lambda \psi'^{\dagger} \left[(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A') \times \mathcal{B} - \mathcal{B}_x (i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} A') \right] \psi' =$$

$$= \lambda (\psi^{\dagger} e^{-i\frac{e}{\hbar c} f}) \left[(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A) \times \mathcal{B} - \mathcal{B}_x (i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} A) \right] (\psi e^{i\frac{e}{\hbar c} f}) + 2\lambda \psi^{\dagger} (\mathcal{B}_x \frac{e}{c} \nabla f) \psi =$$

$$= \lambda \psi^{\dagger} \left[(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} A) \times \mathcal{B} - \mathcal{B}_x (i\hbar \vec{\nabla} - \frac{e}{c} A) \right] \psi = P.$$

Az állítás b/ részének belátáshoz azt kell csak figyelembe venni, hogy a hidrodinamikai mozgásegyenletek mértékinvariánsak, és azt már a 2. követelmény bizonyításakor beláttuk, hogy rögzített, de tetszőleges mértékválasztás esetén a hidrodinamikai mennyiségek t pillanatban felvett értéke független attól, hogy az időbeli fejlődést a mozgásegyenleteken vagy a hullámfüggvényen keresztül határozzuk meg.

A mozgásegyenletek értelmezése

a/ Foglalkozzunk először a /44/ alatti erősűrűséggel. Az egyenletet az egész térre integrálva a folyadékra ható eredő erőt kapjuk. Az erősűrűségnek az a része, amely a \underline{Q} tenzor divergenciájaként írható fel, az integrálásakor zérust ad, ez írja le tehát a közegben fellépő belső erőket, maga a \underline{Q} tenzor pedig ezen belső erők feszültségi tenzora.

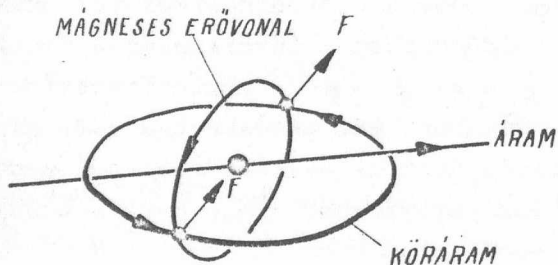
A külső erők közül az első szögletes zárójelben álló rész

$$f = \rho_c E + \frac{1}{c} \rho_c v \times B \quad |53|$$

a Lorentz-erősűrűség . A második zárójel

$$f_{\mu} = \frac{\mu}{2} [(s \text{ grad})B + s \times \text{rot} B] \quad |54|$$

a közeg permanens mágneses momentumára ható erősűrűség. A fél Bohr-magneton együttható a /21/ egyenletben adott választásból ered: az elektron mágneses momentumának felét, mint permanens mágnesezettséget , felét mint konvekciós áram fogjuk fel. Ez a felbontás az Einstein-de Haas kísérlettel összhangban helyes eredményt szolgáltat az elektron giromágneses faktorára . /lásd [3] /. Így a másik fél Bohr-magnetonra ható erőt az /53/ Lorentz-erő tartalmazza.



/54/ első tagjának fizikai jelentése az elektro- és magneto-sztatikából ismert: a mágneses momentumra inhomogén térben ható transzlációs erőt írja le. Részletes megfontolást igényel azonban /54/ második tagja. Ennek jelentését egyszerű modellen mutatjuk be. Tekintsük a mágneses momentumot kis merev körá-

ramnak. Látható, hogy a $\frac{\mu}{2} s \times \text{rot} B$ erő csak akkor különbözik zérustól, ha a mágneses momentum helyén vezetési vagy eltolási áram folyik. Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy, a kis köráramot átfuró egyenes vezetőt /lásd az ábrát/, mely nem áll merőlegesen a köráram síkjára. Az egyenes vezető mágneses erővonalai koncentrikus körök alakjában veszik körül a vezetőt. Ebben a mágneses térben foglal helyet a mágneses momentumot reprezentáló köráram. Ez utóbbira az ábrán leolvasható irányban Lorentz-erő hat, ez lényegében az /54/ erő második tagja. Látható, hogy amennyiben az egyenes vezető nem a körvezetőn át, hanem mellette halad, akkor a fenti Lorentz-erő a köráram két szemben álló pontjában nem egyirányba, hanem ellentétes irányba mutat, így csak annyi eredő erő marad, amennyit a köráram szemben lévő pontjaiban lévő térerősségek különbsége szolgáltat, azaz ebben az esetben csak /54/ első tagja szolgáltat járulékot. A fenti gondolatmenet ugyanígy elismételhető, ha a körbefutó mágneses erővonalak nem vezetési, hanem a körvezetőn áthaladó eltolási áramtól erednek.

A fenti szemléletes gondolatmenetet számolással is végigkövethetjük. Az egyes lépéseket a szokásosnál kissé részletesebben tárgyaljuk, mivel a levezetésben nem egészen triviális lépések is szerepelnek. Legyen $j(r)$ a köráram áramsűrűsége, akkor a ráható erő

$$F = \frac{1}{c} \int j(r) \times B(r) d\tau. \quad |55|$$

Tételezzük fel, hogy a köráram olyan kicsiny átmérőjű, hogy ebben a tartományban $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ nem változik lényegesen. Ekkor kiválasztva a köráram által átfogott területen egy \mathbf{r}_0 pontot, a mágneses teret első rendig sorbafejthetjük \mathbf{r}_0 körül:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}_0) + [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \nabla_0] \mathbf{B}(\mathbf{r}_0). \quad |56|$$

Vezessük be a továbbiakban a

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}_0) = \mathbf{B}_0 \quad \text{és} \quad \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 = \mathbf{R}$$

rövid jelölést, és írjuk be az /56/ sorfejtést /55/-be:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{c} \left\{ \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) d\tau \times \mathbf{B}_0 + \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) \times (\mathbf{R} \nabla_0) \mathbf{B}_0 d\tau \right\}, \quad (d\tau \equiv d^3\mathbf{r}). \quad |57|$$

Megmutatjuk, hogy az első integrál - mint ez szimmetria okokból várható is - zérust ad eredményül. Integráljunk parciálisan, és használjuk fel, hogy $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ a végtelenben eltűnik:

$$\int \mathbf{j}(\mathbf{r}) d\tau = \int (\mathbf{j} \nabla) \mathbf{r} d\tau = - \int \mathbf{r} \operatorname{div} \mathbf{j} d\tau = 0,$$

ugyanis stacionárius köráramról lévén szó

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0. \quad |59|$$

A második integrált a két vektor skalárszorzatának gradiensére vonatkozó azonosság alapján így alakíthatjuk át:

$$\begin{aligned} \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) \times (\mathbf{R} \nabla_0) \mathbf{B}_0 d\tau &= \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) \times \nabla_0 (\mathbf{R} \mathbf{B}_0) d\tau + \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}_0 d\tau - \\ &- \int \mathbf{j}(\mathbf{r}) \times (\mathbf{R} \times \operatorname{rot}_0 \mathbf{B}_0) d\tau. \end{aligned} \quad |60|$$

A második integrál /58/ miatt eltűnik, az első integrandusát pedig így alakíthatjuk át:

$$\mathbf{j} \times \nabla_0 (\mathbf{R} \mathbf{B}_0) = - \operatorname{rot}_0 [\mathbf{j}(\mathbf{r}) (\mathbf{R} \mathbf{B}_0)].$$

Tekintsük az

$$\int \mathbf{B}_0 \times (\mathbf{R} \times \mathbf{j}) d\tau = \int (\mathbf{B}_0 \mathbf{j}) \mathbf{R} d\tau - \int (\mathbf{B}_0 \mathbf{R}) \mathbf{j} d\tau \quad |62|$$

azonosságot. Kimutatjuk, hogy a jobboldali két integrál egymással ellentétben egyenlő, ugyanis

$$\begin{aligned} \int j_k R_i d\tau &= \int \frac{\partial}{\partial x_r} (R_k j_r) R_i d\tau = - \int R_k j_r \frac{\partial R_i}{\partial x_r} d\tau = \\ &= - \int j_i R_k d\tau. \end{aligned} \quad |63|$$

Ezt felhasználva /62/ a

$$\int \mathbf{j} \times (R \mathbf{B}_0) d\tau = -\frac{1}{2} \int \mathbf{B}_0 \times (R \times \mathbf{j}) d\tau \quad |64|$$

alakba megy át, így /60/, /61/ és /64/ felhasználásával kapjuk:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2c} \operatorname{rot}_0 (\mathbf{B}_0 \times \int R \times \mathbf{j} d\tau) - \frac{1}{c} \int \mathbf{j} \times (R \times \operatorname{rot}_0 \mathbf{B}_0) d\tau. \quad |65|$$

Figyelembe véve /63/-at, továbbá a Jacobi-identitást, mely szerint a kettős vektorszorzat három tényezőjének ciklikus felcserélésével nyert vektorszorzatok összege zérus, a második integrált tovább alakíthatjuk, így az

$$\int \mathbf{j} \times (R \times \operatorname{rot}_0 \mathbf{B}_0) d\tau = -\frac{1}{2} \int (R \times \mathbf{j}) \times \operatorname{rot}_0 \mathbf{B}_0 d\tau \quad |66|$$

egyenlőséget kapjuk. Mivel egy \mathbf{j} áramsűrűség által létrehozott mágneses momentum

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2c} \int R \times \mathbf{j} d\tau$$

alakban adható meg, így /65/ és /66/-ból végül is a következő erő kifejezést nyerjük:

$$\mathbf{F} = (\mathbf{m} \nabla_0) \mathbf{B}_0 + \mathbf{m} \times \operatorname{rot}_0 \mathbf{B}_0,$$

ami teljes összhangban áll /54/-gyel.

A /44/ egyenlet következő erőtagja f_μ elektromos megfelelője:

$$\mathbf{f}_p = (\mathbf{P} \operatorname{grad}) \mathbf{E} + \mathbf{P} \times \operatorname{rot} \mathbf{E}. \quad |67|$$

Attól függetlenül, hogy az elektromos dipólmomentum miként jött létre /jelen esetben mágneses momentum mozgása révén/, modellezhetjük egy mágnesruddal, mely a rá merőleges tengely körül forog. A $\mathbf{P} \times \operatorname{rot} \mathbf{E}$ erőtag magyarázatához szükséges körbefutó elektromos erővonalakat most a mágneses tér változása indukció révén hozza létre, mivel mágneses egypólusok vezetési árama nem létezik. Ezután a mágneses erőre adott gondolatmenet az elektromos esetre is elismételhető.

Végül az időderiváltat tartalmazó

$$\mathbf{f}_t = -2m \lambda \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{s} \times \mathbf{E}) \quad |68|$$

erősűrűség a következő jelentéssel rendelkezik. Modellezzük a mágneses dipólust ismét kis merev körárammal. Ekkor, ha az elektromágneses teret bekapcsoljuk, olyan köráram indukálódik, mely a mágneses momentumot csökkenteni igyekszik, ezért a mágneses momentumot konstansan tartó erők impulzust kell, hogy a köráramnak adjanak ahhoz, hogy a mágneses momentum állandó maradjon.

/68/-cal kapcsolatban még a következőt jegyezzük meg. Kézenfekvőnek látszik az idő szerinti deriválást elvégezni, és $\partial \mathbf{E} / \partial t$ értékét a Maxwell-

egyenletekből helyettesíteni $c \text{ rot } \mathbf{B}$ -vel, ekkor ugyanis /68/-nak ez a tagja az /54/ erősítéség $\frac{\mu}{2} \mathbf{s} \times \text{rot } \mathbf{B}$ tagjával kioltaná egymást. Azonban - mint ez a fentiekből kiderül - az eredményeknek a megadott /68/, illetve /54/ alakban külön-külön van fizikai jelentése. Ez a tény akkor válik legszembetűnőbbé, ha észrevesszük, hogy pontosan véve az említett két tag nem ejti ki egymást. Vegyük figyelembe, hogy az elektron anomális mágneses momentummal rendelkezik, azaz a mechanikai és mágneses momentum hányadosára jellemző g -faktor nem pontosan 2, hanem $g = 2,0022906$. Ez a tény a fenti hidrodinamikai modellbe minden további nélkül beépíthető, és a fentiek nyomán a g -faktorral megisméltelt számítás szerint az említett két tag összevonásakor nem zérus, hanem

$$(g-2) \frac{g-1}{2g} \frac{\mu}{2} \mathbf{s} \times \text{rot } \mathbf{B}$$

tag keletkezik.

b/ A mágneses polarizációvektor /47/ alatti mozgásegyenletében a tenzor divergenciájaként felírt tag belső forgatónyomaték, mely az egész térre integrálva eltűnik. A szögletes zárójelben álló forgatónyomaték is zérust ad, ha a folyadék homogéne mágnesezett, ez tehát a közeg inhomogenitása miatt fellépő külső elektromágneses tér által kifejtett forgatónyomaték-sűrűséget szolgáltatja. Az első két tag $\frac{\hbar}{2}$ -szerese:

$$\mathbf{N}_T = \mu \rho \mathbf{T} \times \mathbf{B} - \frac{1}{2c} \mu \rho \mathbf{T} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \quad |69|$$

ugy interpretálható, hogy az elektron saját rendszerében nem \mathbf{B} , hanem

$$\mathbf{B}' = \mathbf{B} - \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}$$

térerősséget érez. A Thomas-precesszió - mint sok más esetben is - azt eredményezi, hogy a ténylegesen fellépő elektromos térerősségnek csak a fele érvényesül, így az elektronra ható effektív mágneses tér:

$$\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{B} - \frac{1}{2c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}.$$

Egy \mathbf{m} momentumu mágnesre

$$\mathbf{n}_m = \mathbf{m} \times \mathbf{B}_{eff} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} - \frac{1}{2c} \mathbf{m} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \quad |70|$$

forgatónyomaték hat, ami éppen \mathbf{N}_T /69/ alatti alakjának felel meg. Vezessük most le pontosabban a /70/ egyenletet. Egy \mathbf{v} sebességgel mozgó, \mathbf{m} mágneses momentumu részecske elektromágneses térben felvett helyzeti energiája /3/, /4/ és /5/ alapján:

$$\mathcal{E} = -\mathbf{m} \cdot (\mathbf{B} - \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E}) - \frac{1}{2c} \mathbf{m} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}). \quad |71|$$

Az utolsó energiát - mint ezt /4/ levezetésénél láttuk - a Thomas-precesszióból ered.

Használjuk fel, hogy a mágneses momentumot elforgatva a potenciális energia csökkenése egyenlő a külső erők forgatónyomatékának munkájával:

$$-\delta \mathcal{E} = n_m \delta \psi, \quad |72|$$

ahol n_m a külső erők forgató nyomatéka, $\delta \psi$ a forgás szögvektora. Helyettesítsük /71/-be a mágneses momentum megváltozását megadó

$$\delta m = \delta \psi \times m$$

összefüggést, ekkor /72/ figyelembevételével kapjuk:

$$\begin{aligned} -\delta \mathcal{E} &= (\delta \psi \times m) \left(B - \frac{1}{c} v \times E \right) + \frac{1}{2c} (\delta \psi \times m) (v \times E) = \\ &= \left[m \times \left(B - \frac{1}{c} v \times E \right) \right] \delta \psi + \frac{1}{2c} \left[m \times (v \times E) \right] \delta \psi, \end{aligned}$$

ahonnan

$$n_m = m \times \left(B - \frac{1}{c} v \times E \right) + \frac{1}{2c} m \times (v \times E) \quad |73|$$

egyenlet adódik /69/, illetve /70/-nel összhangban. A levezetésben jól végigkísérhető a Thomas-precesszió szerepe az $\frac{1}{2}$ faktor kialakulásában.

c/ Az elektromos polarizációvektorra ható

$$N_p = -2e \lambda \rho (T \times E) \quad |74|$$

forgatónyomaték-sűrűség értelmezéséhez írjuk a /71/ alatti kölcsönhatási energiát

$$\mathcal{E} = -mB - pE$$

alakba, akkor az elektromos polarizáció /71/ szerint

$$p = -\frac{1}{2c} m \times v$$

értékűnek adódik. Képezzük ennek időderiváltját:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{2c} \frac{dm}{dt} \times v - \frac{1}{2c} m \times \frac{dv}{dt} \quad |75|$$

Mint ez /47/, illetve /73/-ből leolvasható, az első tag v^2/c^2 -nél magasabbrendű, így elhanyagolható. Figyelembe véve továbbá, hogy v/c rendig

$$\frac{dv}{dt} \approx \frac{e}{m} E,$$

/75/ így írható:

$$\frac{dp}{dt} \equiv n_p = -\frac{e}{2mc} m \times E,$$

ami, figyelembe véve a $\lambda = \frac{e\hbar}{8\pi m^2 c^2}$ értéket, teljes összhangban áll N_p /74/ alatti alakjával.

Az /52/ impulzusmomentumra vonatkozó mozgásegyenlet forgatónyomaték tagjainak értelmezése az a/ pontban adott erőtagok interpretációjának mintájára történik. Az első szögletes zárójelben álló tag a Lorentz-erő nyomatéka, a második zárójel értelmezéséhez ismét a köráram-modellhez folyamodunk. A külső mágneses térnek a köráramra gyakorolt nyomatéka:

$$n = \frac{1}{c} \int r \times (j(r) \times B(r)) d\tau.$$

Ismét felhasználjuk az /56/ alatti sorfejtést:

$$n = \frac{1}{c} \int r \times (j \times B_0) d\tau + \frac{1}{c} \int r \times [j \times (R \nabla_0) B_0] d\tau. \quad |77|$$

A további lépések teljesen párhuzamosan haladnak az a/ pontban adott levezéssel, a lényeges különbség csupán abban áll, hogy míg /77/ első integráljának megfelelő erőtag zérust adott, a fenti forgatónyomaték

$$\frac{1}{c} \int r \times (j \times B_0) d\tau = m \times B_0$$

végeredményt szolgáltat, ami a forgatónyomatéknak a belső erő antiszimmetrikus részéből eredő tagja. /Lásd /46/, /51/, /52/ /. /77/ második integrálja éppen az f_μ mágneses erő nyomatéka, így

$$n = m \times B_0 + r_0 \times [(m \nabla_0) B_0 + m \times \text{rot}_0 B_0].$$

Analóg eredmény vezethető le az elektromos polarizációra is. Az időderiváltat tartalmazó /52/ alatti tag a /68/ erő nyomatéka. Így végül a forgatónyomatéknak mind a belső erőből, mind pedig a külső erő nyomatékából eredő részét értelmeztük.

Függelék

1. Megmutattuk, hogy amennyiben egy j_ν négykomponensű mennyiség

$$j_\nu = \frac{\partial k_{\nu\mu}}{\partial x_\mu} \quad (\nu = 0, 1, 2, 3) \quad |A|$$

alaku /az összeeső indexekre összegezés értendő 0-tól 3-ig/, ahol $k_{\nu\mu} = -k_{\mu\nu}$, akkor j_ν automatikusan kielégíti a

$$\frac{\partial j_\nu}{\partial x_\nu} = 0$$

kontinuitási egyenletet. Most belátjuk, hogy ennek fordítottja is igaz: ha egy j_ν négyesmennyiség eleget tesz a kontinuitási egyenletnek, akkor /hacsak az /E/ alatti integrál létezik/ /A/ alakban, azaz egy antiszimmetrikus mátrix

divergenciájaként állítható elő. Ez annyit jelent, hogy j_V'' -nek /14/ alatti előállítás a lehető legáltalánosabb.

Írjuk j_V -t Fourier-integrál alakba:

$$j_V(x) \equiv j_V(r, t) = \int j_V(k) e^{i(k_0 t - k r)} d k_0 d^3 k. \quad |B|$$

Ezt /A/-ba helyettesítve

$$k_\nu j_\nu(k) = 0 \quad |C|$$

feltételhez jutunk.

Tekintsük most a minden indexpárban antiszimmetrikus $\epsilon_{\kappa\lambda\mu\nu}$ tenzort, melyre $\epsilon_{0123} = 1$. Erre fennáll a következő azonosság:

$$\frac{1}{2} \epsilon_{\kappa\lambda\mu\nu} \epsilon_{\kappa\lambda\mu\nu'} = \delta_{\nu\mu'} - \delta_{\mu\nu'}$$

Szorozzuk meg ezen egyenlet mindkét oldalát a

$$\frac{k_\nu k_{\mu'}}{k^2} j_{\nu'}(k)$$

kifejezéssel ($k^2 \equiv k_0^2 - k^2$), ekkor a

$$j_\nu(k) = \frac{k_\mu j_\mu(k)}{k^2} k_\nu + \frac{1}{2} \epsilon_{\kappa\lambda\nu\mu} \epsilon_{\kappa\lambda\nu'\mu'} \frac{k_\mu k_{\nu'}}{k^2} j_{\mu'}(k) \quad |D|$$

azonosságot kapjuk, mely a j_μ vektornak egy k irányu és arra merőleges összetevőre való felbontását adja. /C/-t felhasználva és /D/-t /B/-be helyettesítve:

$$j_\nu(x) = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left[\epsilon_{\kappa\lambda\nu\mu} \int \frac{1}{2i} \epsilon_{\kappa\lambda\nu'\mu'} \frac{k_\mu k_{\nu'}}{k^2} j_{\mu'}(k) e^{i(k_0 t - k r)} d k_0 d k \right] \quad |E|$$

ami - ha az itt szereplő integrál létezik - az állítást igazolja, hiszen a szükséges zárójel antiszimmetrikus ν és μ -ben.

Végül megjegyezzük, hogy bár négyes írásmódot használtunk, ezt a rövid jelölés kedvéért tettük, nem pedig a relativisztikus kovariancia fel-tüntetésére. /Ezért is használtuk a tenzor kifejezés helyett a mátrixot./ Bár a fenti levezetés kovariáns négyes áramsűrűségekre is helytálló, azonban a jelen négyesáramsűrűség - mint a szereplő összes többi mennyiség - csak v^2/c^2 rendű nemrelativisztikus közelítésben helyes, így természetesen nem egzaktul kovariáns.

2. Az effektív töltés- illetve áramsűrűség úgy van értelmezve, hogy segítségével a kölcsönhatási Lagrange-sűrűség

$$L_i = \frac{1}{c} \mathbf{j}_{eff} \mathbf{A} - \rho_{eff} \phi \quad |A|$$

formában adható meg. Irjuk az L_i -ből képzett hatásintegrál potenciálok szerinti variációját

$$\delta S_1 = \int \left(\frac{1}{c} \mathbf{j}_{eff} \delta \mathbf{A} - \rho_{eff} \delta \phi \right) d^3 r dt$$

alakban, függetlenül attól, hogy \mathbf{j}_{eff} és ρ_{eff} tartalmazza-e magát \mathbf{A} -t és ϕ -t. Tekintsük a H Hamilton-operátor várható értéke időintegráljának a potenciálok szerinti variációját, a

$$\delta S_2 = \delta \int \psi^\dagger H \psi d^3 r dt$$

mennyiséget, ekkor megmutatható [lásd [7]], hogy fennáll a

$$\delta S_1 = -\delta S_2$$

egyenlőség, azaz

$$-\delta \int H d^3 r dt = \int \left(\frac{1}{c} \mathbf{j}_{eff} \delta \mathbf{A} - \rho_{eff} \delta \phi \right) d^3 r dt. \quad |B|$$

Felhasználva /9/-et :

$$\begin{aligned} -\delta \int H d^3 r dt = & -\delta \int \psi^\dagger \left\{ \frac{1}{2m} (-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 + e\phi - \mathcal{G} \mathbf{B} + \right. \\ & \left. + \lambda \mathcal{G} \left[(i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \times (i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \right\} \psi d^3 r dt. \quad |C| \end{aligned}$$

Irjuk be a /C/ alatti integrálba a térerősségek potenciálokkal kifejezett alakját:

$$\mathbf{E} = -\text{grad} \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}.$$

Feltételezzük, hogy az integrálás határain az \mathbf{A} és ϕ potenciál eltűnik. Sorozatos parciális integrálással szabadítsuk ki \mathbf{A} -t és ϕ -t a differenciál-operátorok alól, akkor a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} & -\delta \int H d^3 r dt = \\ & = \int d^3 r dt \frac{1}{c} \left\{ \frac{e\hbar}{2mi} (\psi^\dagger \nabla \psi - \nabla \psi^\dagger \psi) - \frac{e^2}{mc} \psi^\dagger \psi \mathbf{A} + c \mu \text{rot} (\psi^\dagger \mathcal{G} \psi) - 2e\lambda \psi^\dagger \mathcal{G} \psi \times \mathbf{E} + \right. \\ & \quad \left. + \lambda \frac{\partial}{\partial t} \psi^\dagger \left[(-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \times \mathcal{G} - \mathcal{G} \times (i\hbar \overline{\text{grad}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right] \psi \right\} \delta \mathbf{A} + \\ & \quad + \int d^3 r dt \left\{ e \psi^\dagger \psi - \lambda \text{div} \left[\psi^\dagger \left((-i\hbar \text{grad} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \times \mathcal{G} - \mathcal{G} \times (i\hbar \overline{\text{grad}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) \right) \psi \right] \right\} \delta \phi \end{aligned}$$

Ezt /B/-vel összehasonlítva valóban a /32/ és /33/ alatt megadott effektív töltés- illetve áramsűrűségekre jutunk.

Végezetül a szerzők köszönetüket fejezik ki Jánossy Lajos professzor urnak a téma felvetéséért és a munka során nyújtott segítségéért.

I r o d a l o m

- [1] Jánossy, L. and Ziegler-Náray, M.: The Hydrodynamical Model of Wave Mechanics I., Acta Phys. Hung. 16, 37 /1963/
- [2] Jánossy, L. and Ziegler-Náray, M.: The Hydrodynamical Model of Wave Mechanics II. ibid, 16, 345 /1964/
- [3] Jánossy, L. and Ziegler-Náray, M.: The Hydrodynamical Model of Wave Mechanics III. ibid. 20, 233 /1966/
- [4] Møller, C.: The Theory of Relativity, Oxford, 1952. p. 56.
- [5] Huszár, M.: Non-Relativistic Approximation of the Dirac Current, Acta. Phys. Hung. 23, 225 /1967/
- [6] Jánossy, L.: Remark on Some Aspects of Maxwell's Equations, Acta Phys. Hung. 20, 67 /1966/

Érkezett: 1967. nov. 1.

KFKI Közl. 16.évf. 2.szám, 1968.

ANALITIKUS ENERGIA-HATÓTÁVOLSÁG FORMULA BUBORÉKKAMRÁKBAN

Irta: Krasznovszky Sándor és Telbisz Ferenc

Összefoglalás

Meghatároztuk az $R=f/T/$ és $T=f/R/$ összefüggések analitikus alakját pionra, kaonra és protonra. A konstansokat megadtuk 1 és 2 m-es hidrogén, 1 m-es deutérium, 2 m-es propán és 0.5 m-es Xe-kamrákra.

Buborékkamrákban a részecskék energiájára /impulzusára/ vonatkozó információ egyik forrása a részecskék hatótávolsága. Azokban a kamrákban pedig, ahol nem használnak mágneses teret, /pl. Xe kamráknál/, az energiamérésnek ez a fő módszere. Éppen ezért fontos a méréstechnika szempontjából, hogy pontos és lehetőleg könnyen kezelhető formulák álljanak rendelkezésre. Az energia-hatótávolságra ismert, jó elméleti formuláink vannak [1-5], amelyek alapján több szerző tabellált formában közölt energia-hatótáv összefüggéseket különböző anyagokra [6]. Tekintettel arra, hogy a táblázatok kezelése nagy tömegű buborékkamrás mérés feldolgozásánál nehézkes, Sternheimer félempirikus analitikus formulát adott az összefüggés közelítésére [7]. Jelen cikkben a buborékkamráknál szóba jövő energiatartományban jól használható, a [7]-ben közölt formuláknál egyszerűbb és véleményünk szerint könnyebben kezelhető formulák alkalmazását javasoljuk. A képletek mind a könnyű, mind a nehéz folyadékos kamráknál jól használhatók.

Az energia-hatótávolság összefüggés számítása a Bethe-Bloch formulán alapul [8]:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} = \frac{2\pi n e^4 Z^2}{m v^2 \rho} \left[\ln \frac{2m v^2 W_{max}}{I^2 (1-\beta^2)} - \beta^2 - \delta - U \right] \quad |1|$$

ahol a következő jelöléseket alkalmaztuk:

m és e az elektron tömege és töltése, c a fénysebesség, n, ρ és I a kamrafolyadék 1 cm³-ben lévő elektronjainak a száma, sűrűsége és az átlagos ionizációs potenciálja, T, M, β és γ a bejövő részecske kinetikus energiája, nyugalmi tömege, sebessége/ c és $\gamma = (1-\beta^2)^{-\frac{1}{2}}$. $\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx}$ az ionizáció miatt fellépő energiavesztés MeV $\frac{cm^2}{g}$ -ben $E = T + Mc^2$

és

$$W_{max} = \frac{E^2 - M_c^2}{M_c \left[\frac{M}{2m} + \frac{m}{2M} + \frac{E}{M_c^2} \right]}$$

Itt δ és U korrekciókat jelent, mégpedig U a kis energiákon fel-
lépő héjkorrekció [9], δ pedig a nagy energiákon megjelenő sűrűseffek-
tus [10]. Számításainkban mindkét korrekciót elhanyagoltuk, ami Xe kamra
esetén igen jó közelítés, és a többi kamráknál sem okoz lényeges eltérést.

Az energia-hatótávolság összefüggést /1/ formulából az alábbi módon
kapjuk:

$$R(T) = \int_{T_0}^T \frac{dT'}{\frac{1}{P} \frac{dE}{dx}} \quad |2|$$

ahol T_0 -t az /1/ formula érvényességének alsó határa szabja meg. Számításaink-
ban $T_0 = 0,1 \text{ MeV}$ -t használtunk tekintettel arra, hogy $\int_{0,1}^2 \frac{dT'}{\frac{1}{P} \frac{dE}{dx}}$ jól vissza-
adja a kísérletileg megállapítható 2 MeV-nek megfelelő hatótávolságokat.

A /2/ formulát az alábbi alaku analitikus görbével közelítettük:

$$R'(T) = AT^{a_0 + a_1 T + a_2 T^2} = R'(A, a_0, a_1, a_2, T), \quad |3|$$

ill. az inverz összefüggést

$$T(B, b_0, b_1, b_2, R) = BR^{b_0 + b_1 R + b_2 R^2} \quad |4|$$

alakban vettük fel.

A /3/ és /4/ képletben szereplő együtthatókat 1/2 m-es xenon, 2 m-es
propán, 1 m-es deutérium, 1 és 2 m-es hidrogén buborékkamrákra határoztuk meg,
ugy, hogy $T_{min} \leq T \leq T_{max}$ intervallumban a formulák a /2/-ben megadott for-
mula jó közelítését adják. T_{min} a kamrában még észrevehető legrövidebb nyom-
nak (0,2 cm), T_{max} pedig a kamra hosszmeretének felel meg. A (T_{min}, T_{max})
intervallumban egyenletesen elosztva 35-40 pontot vettünk fel a /2/ formula
szerint, majd az így kapott pontokra illesztettük a /3/ és /4/ görbéket leg-
kisebb négyzetek módszerével, úgy, hogy

$$\sum_i \left[R(T_i) - R'(A, a_0, a_1, a_2, T) \right]^2 = \min$$

ill.

$$\sum_i \left[T_i - T(B, b_0, b_1, b_2, R(T_i)) \right]^2 = \min$$

legyen.

A feladatot a fent felsorolt buborékkamrákra, H , K és F részecskékre
oldottuk meg. A számolást elvégeztük $a_1 = a_2 = b_1 = b_2 = 0$, ill. $a_2 = b_2 = 0$ fel-

tételezéssel is. A bemenő adatokat az I. táblázatban, az eredményeket a II. és III. táblázatokban közöljük. A II-III. táblázatokból látható, hogy a_1 és b_1 szerepeltetése lényegesen javítja a közelítés jóságát, míg a_2 és b_2 nem minden esetben jelent további javítást. Egyes esetekben a_2 és b_2 szerepeltetése esetén azért kaptunk nagyobb eltérést az előző közelítéshez képest, mert a feladatot a legkisebb négyzetek módszerének alkalmazása előtt a paraméterekben linearizáltuk, míg a közelítés jóságát az eredeti /3/ és /4/ formulákkal ellenőriztük. A maximális eltérés minden vizsgált esetben az intervallum felső határánál lépett fel, ezért a közelítést nem ajánlatos azon az intervallumon kívül használni, ahol a paramétereket meghatároztuk.

A paramétereket meghatározó program I/O adatainak rövid leírását az I. függelékben közöljük, a teljes Algol program a KFKI Felvételiértékelő Csoport programkönyvtárában található.

A II-III. táblázatokban szereplő együtthatókat olyan pontossággal közöljük, hogy az együtthatók pontatlanságából adódó relatív $\frac{\Delta R}{R}$ hiba, ill. $\frac{\Delta T}{T}$ értéke $4 \cdot 10^{-4}$ -nél kisebb legyen.

I. táblázat

Kamra-folyadék	Z rendszám	A atomsúly	I [eV] ionizációs pot.	ρ [g/cm ³] sűrűség
Xenon	54	131.3	540	2.2
Propán	26	44.094	68	0.44
Deutérium	1	2.015	10	0.13
Hidrogén	1	1.008	14.9	0.0586

II. táblázat

		A	a_0	a_1	a_2	Max. el- térés R/M [$\% \frac{m}{GeV/c^2}$]	Közepes négyze- tes el- térés	Max. re- latív el- térés $\frac{\Delta R}{R}$
Xenon	π	$1.3020 \cdot 10^{-1}$	1.60186			41.62	13.89	$2.5 \cdot 10^{-1}$
		$9.0489 \cdot 10^{-2}$	1.73643	$-4.661 \cdot 10^{-4}$		5.55	1.75	$1.5 \cdot 10^{-2}$
		$8.6815 \cdot 10^{-2}$	1.75684	$-6.808 \cdot 10^{-4}$	$3.639 \cdot 10^{-7}$	0.16	0.10	$9.8 \cdot 10^{-3}$
	K	$4.1661 \cdot 10^{-2}$	1.68880			5.35	1.68	$6.1 \cdot 10^{-2}$
		$3.3650 \cdot 10^{-2}$	1.75427	$-1.2965 \cdot 10^{-4}$		0.15	0.07	$1.8 \cdot 10^{-2}$
		$3.4533 \cdot 10^{-2}$	1.74451	$-7.489 \cdot 10^{-5}$	$-7.489 \cdot 10^{-7}$	0.39	0.11	$1.2 \cdot 10^{-2}$
	P	$2.4855 \cdot 10^{-2}$	1.70631			1.63	0.49	$2.8 \cdot 10^{-2}$
		$2.2825 \cdot 10^{-2}$	1.73097	$-3.729 \cdot 10^{-5}$		0.49	0.15	$2.7 \cdot 10^{-2}$
		$2.4469 \cdot 10^{-2}$	1.70633	$6.982 \cdot 10^{-5}$	$-2.170 \cdot 10^{-7}$	0.33	0.09	$1.6 \cdot 10^{-2}$
Propan	π	$2.8302 \cdot 10^{-1}$	1.63963			212.60	75.74	$3.7 \cdot 10^{-1}$
		$1.9393 \cdot 10^{-1}$	1.78718	$-4.7239 \cdot 10^{-4}$		38.34	12.05	$3.6 \cdot 10^{-2}$
		$1.8368 \cdot 10^{-1}$	1.81846	$-8.0258 \cdot 10^{-4}$	$1.1347 \cdot 10^{-6}$	6.43	1.92	$4.8 \cdot 10^{-3}$
	K	$8.5278 \cdot 10^{-2}$	1.73339			33.41	11.13	$1.5 \cdot 10^{-1}$
		$6.5960 \cdot 10^{-2}$	1.81629	$-1.5596 \cdot 10^{-4}$		2.09	0.59	$7.9 \cdot 10^{-2}$
		$6.5374 \cdot 10^{-2}$	1.82012	$-1.7858 \cdot 10^{-4}$	$5.13 \cdot 10^{-6}$	0.75	0.23	$8.3 \cdot 10^{-3}$
	P	$4.6483 \cdot 10^{-2}$	1.76473			11.39	3.78	$7.5 \cdot 10^{-2}$
		$3.8956 \cdot 10^{-2}$	1.81785	$-7.690 \cdot 10^{-5}$		0.17	0.10	$1.0 \cdot 10^{-2}$
		$3.9401 \cdot 10^{-2}$	1.81344	$-5.713 \cdot 10^{-5}$	$3.577 \cdot 10^{-6}$	0.61	0.18	$9.2 \cdot 10^{-3}$
Deutérium	π	$6.0357 \cdot 10^{-1}$	1.78489			37.84	12.42	$9.4 \cdot 10^{-2}$
		$5.3258 \cdot 10^{-1}$	1.85556	$-8.553 \cdot 10^{-4}$		2.70	0.77	$4.0 \cdot 10^{-3}$
		$5.2860 \cdot 10^{-1}$	1.86188	$-1.0859 \cdot 10^{-3}$	$2.734 \cdot 10^{-6}$	0.08	0.04	$1.3 \cdot 10^{-3}$
	K	$1.9409 \cdot 10^{-1}$	1.82630			5.25	1.61	$3.7 \cdot 10^{-2}$
		$1.7897 \cdot 10^{-1}$	1.86056	$-2.053 \cdot 10^{-4}$		0.09	0.04	$5.1 \cdot 10^{-3}$
		$1.7983 \cdot 10^{-1}$	1.85787	$-1.588 \cdot 10^{-4}$	$-3.12 \cdot 10^{-7}$	0.20	0.05	$3.3 \cdot 10^{-3}$
	P	$1.0958 \cdot 10^{-1}$	1.83757			1.98	0.63	$1.7 \cdot 10^{-2}$
		$1.0403 \cdot 10^{-1}$	1.85756	$-8.50 \cdot 10^{-5}$		0.20	0.06	$6.1 \cdot 10^{-3}$
		$1.0517 \cdot 10^{-1}$	1.85208	$-1.70 \cdot 10^{-5}$	$-3.348 \cdot 10^{-7}$	0.15	0.04	$2.8 \cdot 10^{-3}$
Hidrogén 1 m	π	$7.0140 \cdot 10^{-1}$	1.78476			36.28	11.96	$8.2 \cdot 10^{-2}$
		$6.2629 \cdot 10^{-1}$	1.85048	$-8.537 \cdot 10^{-4}$		2.20	0.63	$8.1 \cdot 10^{-3}$
		$6.2292 \cdot 10^{-1}$	1.85517	$-1.0368 \cdot 10^{-3}$	$2.309 \cdot 10^{-6}$	0.24	0.08	$1.5 \cdot 10^{-3}$
	K	$2.2798 \cdot 10^{-1}$	1.82385			4.42	1.35	$2.8 \cdot 10^{-2}$
		$2.1293 \cdot 10^{-1}$	1.85339	$-1.942 \cdot 10^{-4}$		0.19	0.06	$6.2 \cdot 10^{-3}$
		$2.1447 \cdot 10^{-1}$	1.84925	$-1.161 \cdot 10^{-4}$	$-5.72 \cdot 10^{-7}$	0.22	0.06	$3.6 \cdot 10^{-3}$
	P	$1.2953 \cdot 10^{-1}$	1.83424			1.32	0.39	$1.3 \cdot 10^{-2}$
		$1.2444 \cdot 10^{-1}$	1.84981	$-7.41 \cdot 10^{-5}$		0.21	0.06	$8.3 \cdot 10^{-3}$
		$1.2620 \cdot 10^{-1}$	1.84281	$2.06 \cdot 10^{-5}$	$-5.28 \cdot 10^{-7}$	0.14	0.04	$4.1 \cdot 10^{-3}$
Hidrogén 2 m	π	$7.5533 \cdot 10^{-1}$	1.75407			110.17	36.98	$1.5 \cdot 10^{-1}$
		$6.3235 \cdot 10^{-1}$	1.84406	$-7.551 \cdot 10^{-4}$		10.80	3.17	$7.8 \cdot 10^{-3}$
		$6.2331 \cdot 10^{-1}$	1.85495	$-1.0390 \cdot 10^{-3}$	$-2.392 \cdot 10^{-6}$	0.43	0.14	$1.7 \cdot 10^{-3}$
	K	$2.3932 \cdot 10^{-1}$	1.80810			15.12	4.71	$5.9 \cdot 10^{-2}$
		$2.1298 \cdot 10^{-1}$	1.85350	$-1.975 \cdot 10^{-4}$		0.11	0.06	$5.8 \cdot 10^{-3}$
		$2.1364 \cdot 10^{-1}$	1.85191	$-1.770 \cdot 10^{-4}$	$-1.027 \cdot 10^{-7}$	0.50	0.13	$4.6 \cdot 10^{-3}$
	P	$1.3381 \cdot 10^{-1}$	1.82439			5.25	1.66	$2.7 \cdot 10^{-2}$
		$1.2428 \cdot 10^{-1}$	1.85099	$-8.594 \cdot 10^{-5}$		0.39	0.13	$8.0 \cdot 10^{-3}$
		$1.2574 \cdot 10^{-1}$	1.84550	$-3.309 \cdot 10^{-5}$	$-2.015 \cdot 10^{-7}$	0.36	0.10	$4.0 \cdot 10^{-3}$

III. táblázat

		B	b ₀	b ₁	b ₂	Max. eltérés T [MeV]	Közepes négyzetes eltérés	Max. relatív eltérés $\Delta T/T$
Xenon	π	3.5937	.62294	$6.73 \cdot 10^{-5}$ $1.112 \cdot 10^{-4}$	$-7.45 \cdot 10^{-8}$	12.44	4.55	$1.2 \cdot 10^{-1}$
		3.9587	.58531			2.37	0.75	$1.8 \cdot 10^{-2}$
		4.0085	.57810			0.68	0.20	$3.8 \cdot 10^{-3}$
	K	6.5727	.59192	$2.65 \cdot 10^{-5}$ $3.25 \cdot 10^{-5}$	$-1.04 \cdot 10^{-8}$	7.97	2.76	$3.4 \cdot 10^{-2}$
		6.8663	.57618			0.75	0.23	$4.4 \cdot 10^{-3}$
		6.8828	.57501			0.19	0.07	$6.5 \cdot 10^{-3}$
	P	8.7193	.58601	$1.05 \cdot 10^{-5}$ $1.76 \cdot 10^{-6}$	$1.96 \cdot 10^{-8}$	5.71	1.89	$1.6 \cdot 10^{-2}$
		8.8687	.57972			0.72	0.35	$1.4 \cdot 10^{-2}$
		8.8297	.58197			1.08	0.37	$1.1 \cdot 10^{-2}$
Propán	π	2.1875	.60774	$2.05 \cdot 10^{-5}$ $3.68 \cdot 10^{-5}$	$-7.94 \cdot 10^{-9}$	20.77	8.10	$1.6 \cdot 10^{-1}$
		2.4816	.56773			4.86	1.67	$3.2 \cdot 10^{-2}$
		2.5271	.55893			1.71	0.59	$1.1 \cdot 10^{-2}$
	K	4.1498	.57643	$9.23 \cdot 10^{-6}$ $1.48 \cdot 10^{-5}$	$-2.61 \cdot 10^{-9}$	15.91	5.83	$7.5 \cdot 10^{-2}$
		4.4258	.55715			2.84	0.93	$9.7 \cdot 10^{-3}$
		4.4609	.55383			0.79	0.26	$2.4 \cdot 10^{-3}$
	P	5.6970	.56648	$5.87 \cdot 10^{-6}$ $8.30 \cdot 10^{-6}$	$-1.16 \cdot 10^{-9}$	12.98	4.73	$3.9 \cdot 10^{-2}$
		5.9241	.55465			1.71	0.57	$4.0 \cdot 10^{-3}$
		5.9441	.55323			0.20	0.09	$3.8 \cdot 10^{-3}$
Deutérium	π	1.3286	.56001	$1.45 \cdot 10^{-5}$ $2.45 \cdot 10^{-5}$	$-9.46 \cdot 10^{-9}$	1.93	0.70	$4.8 \cdot 10^{-2}$
		1.4016	.54484			0.37	0.12	$8.8 \cdot 10^{-3}$
		1.4016	.54164			0.12	0.04	$2.9 \cdot 10^{-3}$
	K	2.4545	.54751	$6.05 \cdot 10^{-6}$ $8.93 \cdot 10^{-6}$	$-2.60 \cdot 10^{-9}$	1.53	0.52	$1.9 \cdot 10^{-2}$
		2.5083	.54070			0.22	0.07	$2.0 \cdot 10^{-4}$
		2.5145	.53970			0.04	0.01	$7.2 \cdot 10^{-4}$
	P	3.3312	.54418	$3.43 \cdot 10^{-6}$ $4.02 \cdot 10^{-6}$	$-0.49 \cdot 10^{-9}$	1.40	0.49	$9.4 \cdot 10^{-3}$
		3.3727	.54020			0.11	0.04	$1.3 \cdot 10^{-3}$
		3.3744	.53999			0.03	0.02	$1.7 \cdot 10^{-3}$
Hidrogén 1 m	π	1.2212	.56009	$1.28 \cdot 10^{-5}$ $2.12 \cdot 10^{-5}$	$-7.62 \cdot 10^{-9}$	1.67	0.61	$4.2 \cdot 10^{-2}$
		1.2762	.54594			0.30	0.10	$7.1 \cdot 10^{-3}$
		1.2847	.54308			0.09	0.03	$2.8 \cdot 10^{-3}$
	K	2.2498	.54826	$5.23 \cdot 10^{-6}$ $7.15 \cdot 10^{-6}$	$-1.75 \cdot 10^{-9}$	1.20	0.41	$1.5 \cdot 10^{-2}$
		2.2932	.54234			0.14	0.04	$1.4 \cdot 10^{-3}$
		2.2971	.54166			0.01	0.01	$1.4 \cdot 10^{-3}$
	P	3.0475	.54518	$2.86 \cdot 10^{-6}$ $2.55 \cdot 10^{-6}$	$0.29 \cdot 10^{-9}$	0.91	0.30	$7.1 \cdot 10^{-3}$
		3.0783	.54204			0.02	0.01	$3.1 \cdot 10^{-3}$
		3.0775	.54215			0.06	0.02	$2.9 \cdot 10^{-3}$
Hidrogén 2 m	π	1.1769	.56961	$9.23 \cdot 10^{-6}$ $1.585 \cdot 10^{-5}$	$-3.08 \cdot 10^{-9}$	3.98	1.47	$7.2 \cdot 10^{-2}$
		1.2655	.54914			0.80	0.27	$1.4 \cdot 10^{-2}$
		1.2802	.54479			0.27	0.09	$4.6 \cdot 10^{-3}$
	K	2.2065	.55297	$4.02 \cdot 10^{-6}$ $6.13 \cdot 10^{-6}$	$-9.66 \cdot 10^{-10}$	3.06	1.06	$3.1 \cdot 10^{-2}$
		2.2844	.54360			0.48	0.15	$3.2 \cdot 10^{-3}$
		2.2944	.54210			0.12	0.03	$1.1 \cdot 10^{-3}$
	P	3.0122	.54809	$2.41 \cdot 10^{-6}$ $3.04 \cdot 10^{-6}$	$-2.87 \cdot 10^{-10}$	2.62	0.92	$1.5 \cdot 10^{-2}$
		3.0716	.54265			0.25	0.08	$2.0 \cdot 10^{-3}$
		3.0753	.54222			0.03	0.02	$2.2 \cdot 10^{-3}$

I. Függelék

Bemenő adatok

- 1/ rendszám: Z
- 2/ atomsúly: A_0
- 3/ átlagos ionizációs potenciál /MeV-ben/
- 4/ a kamrafolyadék sűrűsége: ρ [g/cm^3]
- 5/ részecske tömege $M = [MeV/c^2]$
- 6/ minimális és maximális kinetikus energia T_{min}, T_{max} [MeV]
- 7/ a lépésköz a kinetikus energiákban
ugy adandó meg, hogy $(T_{max} - T_{min}) / \Delta T \leq 50$ legyen.
- 8/ a /2/ formulában szereplő integrálást Romberg-módszerrel végeztük el. [11]
Az integrálás relatív pontossága: ϵ .
Számításainkban $\epsilon = 10^{-4}$.

Kimenő adatok

- 1/ bemenő adatok 1-6-ig
- 2/ 4-es kapcsoló felkapcsolása esetén: $P/M \left[\frac{1}{c} \right] - R/M \left[\frac{cm}{GeV/c^2} \right]$
táblázat
- 3/ az illesztett görbék paraméterei: ℓ /3/ - /4/ formula
- 4/ 3-as kapcsoló felkapcsolása esetén:
az eltérések az egyes pontokban a tényleges görbepontok és az approximáló görbe pontjai között /absz. és relatív eltérések/. Minden esetben kiírja a maximális és az átlagos eltérést.
- 5/ 3. és 4. pont alatt felsorolt adatok az invertált megoldás esetében.

I r o d a l o m

- [1] Rossi, B.: High Energy Particles, Prentice Hall /1950/
- [2] Bethe, H.A. and Ashkin, J.: Experimental Nuclear Physics,
ed. Segré, E. Vol. II., Part II. /1953/
- [3] Livingston, M.S. and Bethe, H.A.: Rev. Mod. Phys. 9, 285 /1937/
- [4] Ritson, D.M.: Techniques of High Energy Physics, New York /1961/
- [5] Bischel, H.: Passage of Charged Particles through Matter, Univ. So.
Calif., Report No 2 /1961/
- [6] Williamson, C. and Boujot, J.P.: CEA 2189
Barkas, W.H.: UCRL 10.292
Williamson, C. and Boujot, J.P., Piccard, J.: CEA 3042
Barkas, W.J., Berger, J.M.: NAS Report No 39
- [7] Sternheimer, P.R.: Phys. Rev. 118, 1045 /1960/
- [8] Yuan, L.C.L., Wu, C.S.: Nuclear Physics Acad. Press. N.Y. /1961/ p.14.
- [9] Walske, M.C.: Phys. Rev. 88, 1283 /1952/, 101, 940 /1956/
- [10] Sternheimer, P.R.: Phys. Rev. 88, 851 /1952/, 103, 511 /1956/
- [11] KFKI program-könyvtár

Érkezett: 1968. jan.9.

KFKI Közl. 16.évf.2.szám, 1968.

AZ $\text{UO}_3\text{-H}_2\text{O}$ RENDSZER VIZSGÁLATA MMR MÓDSZERREL

Irtta: Grüner György, Tompa Kálmán, Tóth Ferenc és Pokó Zoltán

Összefoglalás

Az $\text{UO}_3\text{-H}_2\text{O}$ rendszer proton mágneses rezonancia spektrumát vizsgáltuk szobahőmérsékletén és 77 K° -on. Az MMR spektrum alapján az $\text{UO}_3\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ képlettel leírható α - és β -módosulat H_2O és $-\text{OH}$ csoportokat, az $\text{UO}_3\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ -ból termikus megbontással előállított $\text{UO}_3\cdot 0,66\text{H}_2\text{O}$ összetételű minta pedig csak $-\text{OH}$ csoportokat tartalmaz. Az $-\text{OH}$ csoportok mozgásállapota a vizsgált hőmérséklettartományban nem változik - feltehetően sem diffúziós, sem rotációs mozgást nem végeznek, szemben a H_2O molekulákkal, amelyek mozgása erősen hőmérsékletfüggő.

1. Bevezetés

Az $\text{UO}_3\text{-H}_2\text{O}$ rendszeren végzett fizikai és kémiai vizsgálatok alapján több, a rendszer szerkezetére, a hidroxil csoportok és vízmolekulák arányára vonatkozó, egymásnak ellentmondó feltételezés alakult ki. Az irodalmi eredmények összefoglalása, és a rendszerek feltételezett szerkezeti képlete [1] -ben található. A közelmúltban végzett differenciál-termogravimetriás /DTG/ és infravörös mérések szerint [1] az $\text{UO}_3\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ termikus bomlása három lépcsőben történik, és ez nem monomer, hanem trimer vegyület, vagy annak egész számú többszöröse. A szerkezetben kétfajta módon kötött víz és hidroxil csoport van jelen.

A széles jelű /broad-line/ proton mágneses rezonancia vizsgálatok alapján felvilágosítást nyerhetünk a hidrogén atomok mikroörnyezetéről. Vizsgálataink célja a H_2O , ill. $-\text{OH}$ csoportokhoz tartozó hidrogén atomok relatív számának a meghatározása a kiinduló és a termikus kezeléssel előállított anyagokon. A feladat első része A.L. Porte, H.S. Gutowsky és J.E. Boggs [3] célkitűzéseivel azonos, és az általuk végzett egyes mérések ellenőrzése a felmerült újabb értelmezés tükrében, a második rész a termikusan kezelt anyagminták vizsgálata, ezen anyagok megismerésén túlmenően a kiinduló anyagra vonatkozó feltételezések megerősítésére szolgál.

2. Elméleti áttekintés

A mag mágneses rezonancia /továbbiakban MMR/ spektrum a rezonáns mag környezetében elhelyezkedő mágneses momentummal rendelkező szomszédok /jelen esetben ^1H magok/ elhelyezkedésétől függ. A H_2O és $\text{H} \dots \text{OH}$ rendszerekre jellemző, hogy az ^1H magok párokban rendeződnek, a páron belüli H - H távolság jóval kisebb, mint a párok közötti távolság. Az ilyen, ún. "kétszínrendszerek" esetén az MMR spektrum alakját főleg a két szomszéd elhelyezkedése, azok egymástól való távolsága határozza meg, és a távolabbi ^1H magok járuléka csak kis korrekciót ad. A szomszéd hatására a rezonáns atommag az alkalmazott külső mágneses térén kívül egy $H_{\text{lok}} = \frac{3}{2} \mu r^{-3} (3 \cos^2 \theta - 1)$ nagyságu teret érez [2], ahol μ a szomszéd atommag mágneses momentuma, r a szomszédok közötti távolság, θ pedig az alkalmazott H_0 mágneses tér és a két szomszédot összekötő vektor által bezárt szög. A +, ill. - előjel - amely a spektrum két vonalra való felhasadását eredményezi - a szomszéd atommag mágneses momentumának a külső mágneses térrel való párhuzamos, ill. antiparallel beállítását jelzi. Porminták esetén az összes lehetséges θ szögre átlagolni kell, és az átlagolás az 1. ábrán szaggatott vonallal jelzett alakhoz vezet. A távolabbi szomszédok hatására a spektrum kiszélesedik, és az 1. ábrán kihuzott vonallal jelölt alakot kapjuk. Ugyanott tüntettük fel a kísérletileg detektálható első deriváltat H_2O és $\text{H} \dots \text{OH}$ rendszerek esetén, ahol a párok közötti távolság $\sim 1,6 \text{ \AA}$, ill. $\sim 2,6 \text{ \AA}$ ^{x/}. Feltételezve, hogy a távolabbi szomszédok hatása az egyes vonalak Gauss-görbe jellegű kiszélesedéséhez vezet, a spektrum analitikus alakban is megadható [2] :

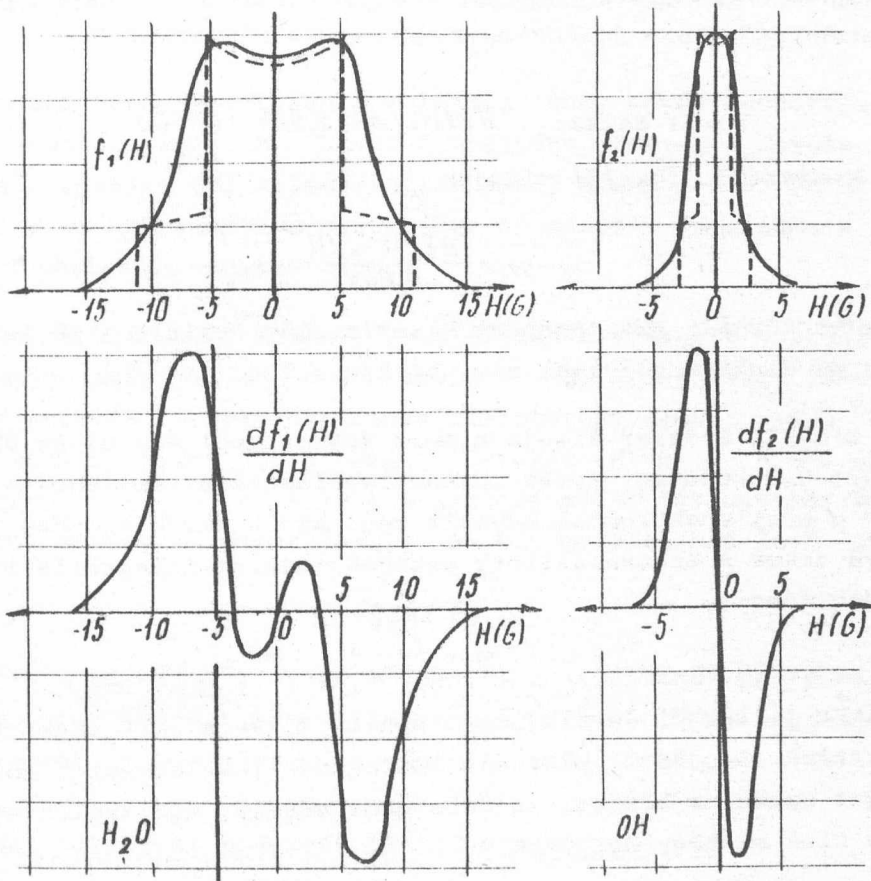
$$f_{1,2}(H) = (2\pi)^{-1/2} \beta_{1,2}^{-1} \int_{h=3\mu/r_{1,2}^3}^{h=3\mu/r_{1,2}^3} g_{1,2}(h) \exp\left[-\frac{(H-h)^2}{2\beta_{1,2}^2}\right] dh \quad |1|$$

ahol $g(h)$ a távolabbi szomszédok hatásának figyelembe vétele nélkül, pormintára átlagolt jelalak /1. ábra szaggatott görbe, β távolabbi ^1H magok elhelyezkedésére jellemző paraméter, az indexek a H_2O , ill. $\text{H} \dots \text{OH}$ rendszerre vonatkoznak. Ha a vizsgált anyagmintában H_2O és $-\text{OH}$ csoportok is vannak jelen, úgy az MMR spektrum a két komponens spektrumából képezhető

$$F(H) = w_1 f_1(H) + (1-w_1) f_2(H) \quad |2|$$

ahol w_1 a H_2O -ban lévő ^1H magok előfordulása. A kísérleti spektrumokat különböző w , r és β paraméterekre számolt jelalakkal összevetve, ezek a paraméterek rendre meghatározhatók. A kémiai szempontból legfontosabb paraméter,

^{x/} Mivel a lokális tér kifejezésében r^{-3} faktor szerepel, a párok közötti távolság különböző volta a H_2O és $\text{H} \dots \text{OH}$ rendszerre jellemző spektrum lényeges különbségéhez vezet.



1. ábra

w_1 , azonban meghatározható a mért spektrum teljes analizise nélkül is, egyes jól definiált jellemzőinek segítségével:

a/ Az első, [3] -ban ismerttetett módszer alapja az, hogy az -OH rendszerre jellemző spektrum nem ad járulékot a $H > 6,5$ gauss tartományban, így itt a rezonanciajel csak a H_2O molekulától ered. A normált $dF(H)/dH$ görbe érzékenyen függ a r és β paraméterektől, de ha $w_1 = 1$, vagyis az 1H magok vízmolekulában vannak, úgy minden feltételezhető r és β paraméter esetén^{x/} az a

$$H = 11 \text{ gauss} \quad dF(H)/dH = 0,0041 \pm 0,0003 \quad |3a|$$

ponton megy keresztül. Így [2] alapján

$$w_1 = \frac{dF_k(H)/dH}{0,0041} \quad |3b|$$

ahol $dF_k(H)/dH$ a normált MMR spektrum kísérletileg észlelt első deriváltja. [3a] alapján w_1 meghatározásának elvi hibája 7,5 %.

b/ A másik módszer alapja a mért spektrumból egy olyan paraméterekkel jellemzett H_2O rendszer spektrumának leválasztása, amelynek a $H > 6,5$ G tartományban a mért spektrummal egyezik meg. Az 1H magok H_2O -ban való előfordulási aránya ekkor a szétválasztott rezonanciajelek integrális intenzitásából egyszerűen adódik,

$$w_1 = \frac{J_{H_2O}}{J_N} \quad |4|$$

ahol J_{H_2O} a vízre jellemző, leválasztott spektrum, J_N a mért spektrum integrális intenzitása. A módszer hibája a grafikusán leválasztott, feltételezett és a tényleges spektrum közötti különbségből adódik; két szélső esetet tételezve fel, a hiba mintegy 4%.

c/ További információt nyújt a rezonanciajel második momentuma, amely pormintákban, 1H magokon detektált rezonancia esetén [4]

$$M_2 = 358 \frac{1}{N} \sum_{j,k} r_{j,k}^{-6} \quad [\text{gauss}^2], \quad |5|$$

ahol N a rezonanciában résztvevő atommagok száma, $r_{j,k}$ a j -edik és k -adik 1H mag közötti távolság Å egységekben mérve. Csak kristályvizet tartalmazó mintákra $M_2 \sim 28 \text{ G}^2$ [2], míg ha az anyagmintában csak H ... OH csoportok vannak jelen, $M_2 \sim 3 \text{ G}^2$ [5]. Ha a vizsgált anyag mindkét konfigurációt tartalmazza, úgy a második momentum az

^{x/} r_1 értéke csak az $1,53 \text{ Å} \leq r_1 \leq 1,65 \text{ Å}$ határok között mozoghat, míg $\beta \sim \frac{3}{2} \mu/x^3$ ahol x -párok közötti távolság és a $2,2 \text{ Å} \leq x \leq 2,7 \text{ Å}$ becslés adható meg.

$$M_2 = W_1 M_2^{H_2O} + (1 - W_1) M_2^{-OH} \quad |6|$$

alakban írható fel.

A leválasztott H₂O molekulára jellemző rezonanciajel második momentumát is felhasználhatjuk W₁ meghatározására. Feltételezve, hogy $M_2^{-OH} = 3 \text{ G}^2$, úgy /6/ alapján

$$W_1 = \frac{M_2 - 3}{M_2 - 3} \quad |7|$$

ahol M₂ a mért rezonanciajel, M₂^{H₂O} pedig a leválasztott spektrum második momentuma. A módszer hibája egyrészt az integrális intenzitás hibájából, másrészt az $M_2^{-OH} = 3 \text{ G}^2$ feltételezés bizonytalanságából ered, összesen mintegy 6%.

Magasabb hőmérsékleteken a molekula vagy egyes csoportjai termikusan aktivált mozgást végeznek. Ekkor a rezonáns atommag a mozgás típusától függő fluktuáló lokális tér átlagát érzi; amely kisebb, mint annak pillanatnyi értéke. Így az MMR spektrum szélessége és második momentuma a mozgástípusra jellemző mértékben csökken [4].

Az MMR spektrum integrális intenzitása a vizsgált anyagmintában lévő ¹H magok számával arányos, $J = C_1 n v_0$ ahol c_1 egyarányossági faktor, J az integrális intenzitás, n az anyagminta térfogategységében lévő ¹H magok száma, v₀ pedig a mérőtekerecs által bezárt térfogat. Mivel $n = NM$, ahol N az egy molekulában levő ¹H magok, M pedig a molekulák száma térfogategységenként, valamint $\rho = c_2 M m$, ahol m a molekulasúly, az egy molekulában lévő ¹H magok száma

$$N_0 = C \frac{J m}{\rho v_0} \quad |8|$$

ahol $c = c_1 / c_2$. Mivel ρ , v₀ és m ismert, a c állandó pedig minden anyag-
r ugyanaz az érték, a mért integrális intenzitásokból /8/ segítségével az egy molekulára eső ¹H magok számának aránya határozható meg.

3. Anyagminták, kísérleti módszer, mérési eredmények

a/ Anyagminták

Az UO₃ = 2H₂O képlettel leírható α-módosulatu dihidrátot β- és amorf UO₃-ból, míg a γ módosulatu dihidrátot γ UO₃-ból [1] állítottuk elő. A módosulatok izbitási súlyveszteségét minden esetben meghatároztuk, és felvettük a derivatogramját, valamint infravörös szinképét. A minták összetételét az izbitációs súlyveszteség alapján állapítottuk meg, és az összetételre vonatkozó adatokat az I. táblázat 3. oszlopában adtuk meg. Az 1. és 4. jelzésű mintákat vízmentes acetonnal mostuk, majd szobahőmérsékleten széndioxidmentes levegőáramban, valamint vákuumban szárítottuk. Az anyagok az UO₃·2H₂O összetételnél több vizet tartalmaztak, ezért a többletviz eltávolítása céljából a 2., 3. és az 5. jelzésű mintákat alacsony hőmérsékleten, 40-50 C^o-on addig hőkezeltük, míg a minták az adott összetételt el nem érték.

I. táblázat

Sor- szám	Anyagminta megnevezése	Összetétel H ₂ O/mol	H ₂ /G ² / 77° K	H ₂ /G ² / 300° K	W ₁ /3b/	W ₁ /4/	W ₁ /7/	Átlag W ₁	No/2	Megjegy- zés
1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.	11
1.	α UO ₃ ·2H ₂ O	2,11	24,2±1	2,25±0,2	83±3	79±4	76±4	79	1,84	
2.	α UO ₃ ·2H ₂ O	1,99	20,2±0,3 21,8±0,4 ⁺	2,59±0,2	76±7	71±3	75±5	74	1,98	
3.	α UO ₃ ·2H ₂ O	2,00	20,7±0,5	2,39±0,2	76±4	74±2	76±6	75	2,26	
4.	β UO ₃ ·2H ₂ O	2,03	24,5±1	2,63±0,2	83±3	77±2	77±4	79	1,90	
5.	β UO ₃ ·2H ₂ O	2,03	22,9±0,9	3,05±0,3	82±4	78±3	73±4	78	2,02	
6.	UO ₃ ·0,66H ₂ O/T/ ¹	0,68	2,03±0,2	2,05±0,2	0	0	0	0	0,70	
7.	UO ₃ ·0,66H ₂ O/T/ ²	0,68	2,00±0,1	2,00±0,2	0	0	0	0	0,62	

⁺4,2° K-on végzett mérés

1 α-UO₃·2H₂O-ból termikus megbontás után kapott termék

2 β-UO₃·2H₂O-ból termikus megbontás útján kapott termék

A termikus megbontás útján kapott $\text{UO}_3, 0,66 \text{ H}_2\text{O}$ /+/ jelzésű 6. és 7.sz. mintát a derivatográf mintatartójában állítottuk elő, figyelembe véve a derivatográfiás vizsgálatok eredményeit [1], a kérdéses terméket a harmadik bomláslépcsőnek megfelelő hőmérsékletig, kb. 200 C° -ig hevítettük.

b/ Kísérleti módszer

A méréseket a [6] és [7] -ben leirt széles jelű MMR spektrométerrel végeztük, szobahőmérsékleten, ill. 77 K° -on, egy esetben pedig $4,2 \text{ K}^\circ$ hőmérsékleten. Néhány mérés történt közbülső hőmérsékleteken is, az anyagminták hőmérsékletét a [8] -ban leirt gázáramlásos hőmérsékletszabályozó rendszerrel változtattuk. A modulációs tér amplitudója $0,3 \text{ G} \leq H_m \leq 0,84 \text{ G}$ a vizsgált anyagok jelszélességétől függően változott. Az integrális intenzitást szobahőmérsékleten határoztuk meg, referenciamintaként a mérőfejben lévő "teflon" rezonanciajelét használva. Egy-egy mérés 16 spektrum felvételéből állt.

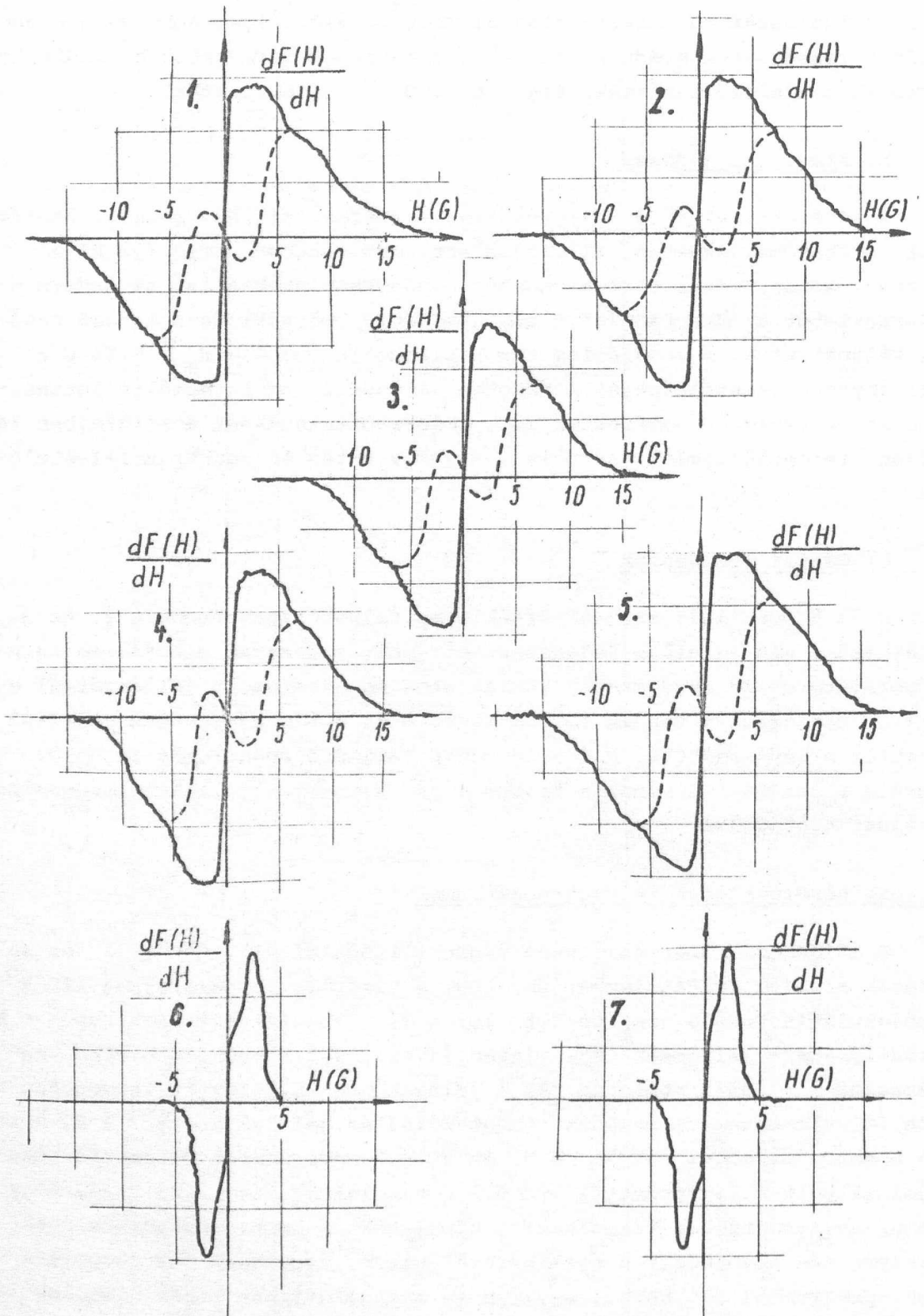
c/ Mérési eredmények

A 77 K° -on, ill. szobahőmérsékleten felvett spektrumok a 2. és 3. ábrán láthatók, míg az előző fejezetben tárgyalt módszerek alapján meghatározott paraméterek az anyagminták kémiai uton meghatározott jellemzőivel együtt az 1. táblázatban vannak feltüntetve. A 2. ábrán szaggatott vonallal feltüntettük a leválasztott, H_2O molekulára jellemző spektrumot is, a 3. ábrán pedig a szaggatott vonal a "mozgékony" ^1H magokra jellemző rezonanciajel leválasztását jelzi.

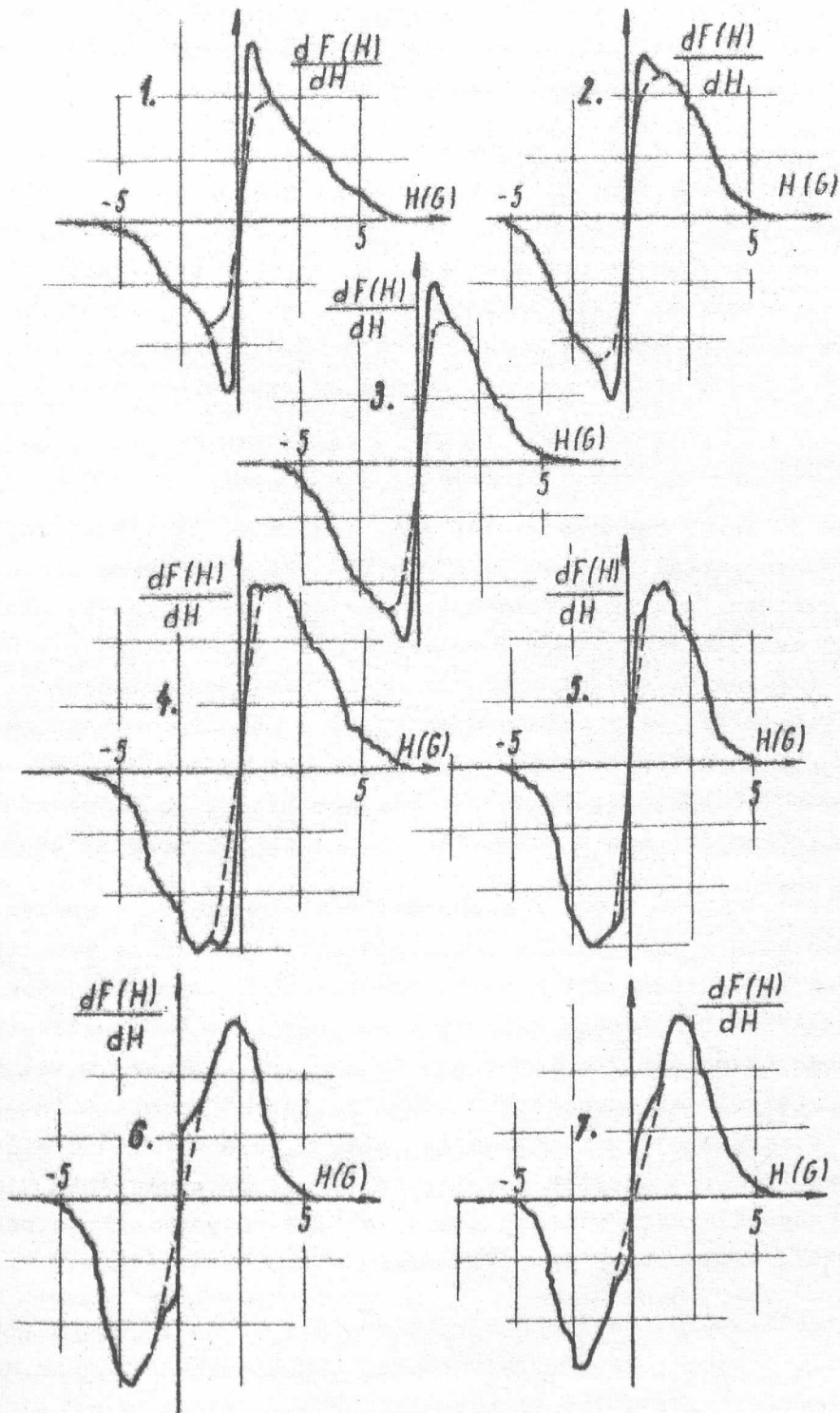
I. Alacsony hőmérsékleten felvett spektrumok

A különböző hőmérsékleteken végzett irodalmi [3], [5], [9] és saját mérések alapján feltételezhetjük, hogy a vizsgált rendszerekben 120 K° alatt molekuláris mozgás nem lép fel, így a 77 K° -on felvett spektrumok a merev kristályrácsra jellemzők. Egy mintán /2.sz./ $4,2 \text{ K}^\circ$ hőmérsékleten végzett méréskor a második momentum és a jelalak nem különbözött lényegesen a 77 K° -on felvett spektrum második momentumától és jelalakjától.*/ A 2. ábrán látható spektrumok közül kettőn, a 6. és 7. sz. anyagmintán detektált rezonanciajel eltűnik a középponttól $H > 6,5 \text{ G}$ távolságra, ami arra utal, hogy ezekben az anyagmintákban vízmolekulák nincsenek. A többi anyagminta spektruma lényegesen különbözik a csak kristályvizre, vagy csak -OH csoportra jellemző spektrumtól /1. ábra/, ezekben az anyagmintákban tehát vízmolekulák és -OH csoportok is vannak jelen, a rezonanciajel összetett.

*/ A második momentum $1,6 \text{ G}^2$ -tel kisebb 77 K° -on, mint $4,2 \text{ K}^\circ$ hőmérsékleten. A különbség valószínűleg a rács hőtágulásától ered.



2. ábra



3. ábra

Hasonló következtetések vonhatók le a mért második momentum-értékekből is, amelyek a H_m modulációs tértől függő korrekció elvégzése után az I. táblázat 4. oszlopában vannak feltüntetve. M_2 a 6. sz. és 7.sz. anyagminták esetén az -OH csoportra jellemző érték, míg a többi anyagmintánál az -OH csoportra és vízmolekulára jellemző értékek között mozog.

A H_2O csoportban lévő 1H magok arányát a 2. fejezetben vázolt három módszer szerint határoztuk meg; az I. táblázat 6. oszlopában a spektrum egy jól definiált pontja, a 7. oszlopban az integrális intenzitás, a 8. oszlopban a második momentum alapján meghatározott w_i értékek találhatók. A megadott hibák nem tartalmazzák a kiértékelési módszerek 2. fejezetben megadott hibáját. A három módszer, amely a spektrum különböző paramétereit használja fel, a hibahatáron belül minden esetben azonos w_i értékekhez vezet.

II. Szobahőmérsékleten felvett spektrumok

A 2. és 3. ábrát összevetve látható, hogy a 6. és 7. sz. anyagminta kivételével a szobahőmérsékleten és $77 K^0$ -on felvett spektrumok lényegesen különböznek. A rezonanciajelek keskenyedése, és az I. táblázat 5. oszlopában feltüntetett második momentumok a molekula vagy egyes csoportjainak mozgására utalnak. A 6. és 7. sz. anyagminták spektrumai nem különböznek a $77 K^0$ -on felvett spektrumoktól, és a hibahatáron belül a második momentumok is egyeznek, ezekben az anyagokban tehát molekuláris mozgás nem lép fel, a kristályrács még szobahőmérsékleten is merev, bár nem kizárt az a lehetőség, hogy mindkét vizsgált hőmérsékleten a molekulák azonos típusu mozgást végeznek.

A 3. ábrán látható, hogy a szobahőmérsékleten felvett spektrumok összetettek. Különböző H_m modulációs amplitudó mellett felvett spektrumok alapján a közepén levő szaggatott vonallal leválasztott keskeny jelek alakját főleg a modulációs tér értéke határozza meg, azok az ábrán láthatónál jóval keskenyebbek. Ezek öndiffúziót végző 1H magokra utalnak, mivel ebben az esetben a jelszélességet meghatározó lokális tér teljesen kiátlagolódik. Valószínű, hogy a keskeny jelek, melyek integrális intenzitásának aránya a széles jelhez képest durva becslés szerint az 1. sz. anyagmintában mintegy 6-8 %, a 4. sz. anyagmintában mintegy 3-4 %, a többi anyagmintában pedig 1-2 % körüli érték, a mintákban lévő "többlet" vízből származnak.

Az I. táblázat 10. oszlopában található a 7. összefüggés alapján meghatározott $No/2$ értékek, az $UO_3 \cdot 2H_2O$ típusu vegyületek átlagának $No/2 = 2$ értéket véve. A mérési hiba főleg az intenzitásmérés előtt végrehajtott sűrűségmeghatározás pontatlanságából ered.

III. Következtetések

Foglalkozunk először a 2., 3., 4. és 5. sz. anyagmintákkal, amelyek együttes víz és hidroxil tartalma közel van a dihidrátnek megfelelő $UO_3 \cdot 2H_2O$ képlethez. Az α -módosulatra kapott $H_2O : OH$ arány közelítőleg 0,75 : 0,25, ami Porte [3] és munkatársai által kapott értékek felel meg, és eltér a differenciál-termogravimetriás, valamint az infravörös spektroszkópiai módszerrel kapott értékektől [1]. A szobahőmérsékleten felvett spektrumokon jól látható többletvíz természetesen a H_2O arányt növeli az $-OH$ arány rovására, ez a növekedés azonban a mérések statisztikus hibájával azonos nagyságrendű, és kisebb, mint a szisztematikus hiba. Hasonló kijelentéseket tehetünk a β -módosulatra vonatkozóan is. A nagyobb w_1 arány oka a többletvíz, bár nem kizárt, hogy a két módosulat közötti eltérést molekula- és kristályszerkezetben lévő különbségek okozzák. A többletvíz w_1 -re gyakorolt hatása legszembeszökőbben az 1. sz. mintán látszik. Az I. táblázat 2. oszlopában található képletnek megfelelő magasabb víztartalom a H_2O és $-OH$ csoportok arányában jól észrevehető változást okoz.

A $77 K^0$ -on és szobahőmérsékleten felvett spektrumok lényeges különbségének oka a H_2O molekulák mozgása, amely erősen hőmérsékletfüggő. A mozgás típusának meghatározásához azonban az egész hőmérséklettartomány részletes vizsgálata elengedhetetlenül szükséges.

A 6. és 7. sz. termikus megbontás útján kapott minták csak $-OH$ csoportokat tartalmaznak, egyezésben a differenciál-termogravimetriás, valamint infravörös spektroszkópiai vizsgálatokkal. A szobahőmérsékleten és $77 K^0$ -on felvett spektrumok mindkét esetben megegyeznek. A csoportok mozgásállapota a vizsgált hőmérséklettartományban állandó - feltehetően sem diffúziós, sem rotációs mozgást nem végeznek.

Az MMR spektrumok integrális intenzitásának méréséből meghatározott együttes H_2O és $-OH$ tartalom nagy szórásának oka feltehetően a porminták nem kielégítő sűrűségmeghatározásában keresendő. A minták egymáshoz viszonyított, egy molekulára jutó 1H magok arányából ezek alapján perdöntő kijelentéseket nem tehetünk.

A H_2O és $-OH$ összetételre vonatkozó eredmények bizonytalanságának oka az anyagok szerkezetére vonatkozó hiányos ismeretünk. A felmerült probléma MMR módszerrel történő eldöntéséhez a spektrumokat leginkább meghatározó paraméter, a H-H kötéstávolság pontos ismerete elengedhetetlenül szükséges.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetünket fejezzük ki Szabó Elek mb. főosztályvezetőnek és Fodor Miklós kandidátusnak a közös munka elindításának gondolatáért, illetve az értékes megbeszélésekért. A mérési adatok összegyűjtéséért Bánki Péter technikusok illeti köszönet.

I r o d a l o m

- [1] Fodor M., Pokó Z., Mink J.: Mikrochimica Acta 865 /1966/
Fodor M., Mink J., Pokó Z.: KFKI Közl. 15, 133 /1967/
Pokó Z., Fodor M., Szabó E.: Acta Chimica /megjelenés alatt/.
- [2] Pake, G.E.: J. Chem. Phys. 16, 327 /1948/
Gutowsky, H.S., Pake, G.E.: J. Chem. Phys. 18, 162 /1950/
- [3] Porte, A.L., Gutowsky, S.H., Boggs, J.E.: J. Chem. Phys. 36, 1695 /1962/
- [4] Van Vleck, J.H. : Phys. Rev. 74, 1168 /1948/
Grüner Gy., Tompa K.: Kémiai Közl. /megjelenés alatt/
- [5] Porte, A.L., Gutowsky, H.S., Boggs, J.E.: J. Chem. Phys. 36, 1700 /1962/
Porte, A.L., Gutowsky, H.S., Harris, G.M.: J. Chem. Phys. 34, 66 /1961/
- [6] Tompa K., Tóth F.: Magy. Fiz. Folyóirat 11, 177 /1963/
- [7] Tompa K., Tóth F.: KFKI Közl. 11, 215 /1963/
- [8] Balla J., Tompa K., Tóth F.: Mérés és Automatika 14, 302 /1966/
- [9] Porte, A.L., Gutowsky, H.S., Boggs, J.E.: J. Chem. Phys. 37, 2318 /1962/

Érkezett: 1968. jan. 18.

KFKI Közl. 16.évf. 2.szám, 1968.

EGY MÁTRIXELMÉLETI HIPERDIAGONALIZÁLÓ MÓDSZERRŐL

Irta: Gellai Borbála

Összefoglalás

Egy speciális hiperdiagonalizáló módszert ismertetünk rezgésproblémák mátrixainak redukálására. A redukciót létrehozó transzformáló mátrixot - a feladat mátrixának szerkezeti tulajdonságait felhasználva - tisztán mátrixelméleti alapon szerkesztjük meg, majd a redukció lehetséges mértékének megállapítására reprezentációelméleti megfontolásokat alkalmazunk.

Bevezetés

A modern kémia területén felmerülő problémák matematikai megfogalmazásánál igen széleskörű a mátrixok alkalmazása. Gondolunk itt konkrétan a molekularezgések elméletére, ahol adott molekula rezgésproblémájának megoldása az irodalomból jól ismert

$$|\underline{G}\underline{F} - \lambda \underline{E} - 0|$$

un. " $\underline{G}\underline{F}$ mátrixprobléma" megoldásához vezet [1]. Itt \underline{G} a kinetikus energia mátrixának inverze, amelynek elemei a molekula geometriai adataitól és tömegértékeitől függenek, \underline{F} a potenciális energia mátrixa, elemei az erőállandók.

A probléma élénk érdeklődésre tart számot úgy is mint sajátértékfeladat: a $\underline{G}\underline{F}$ mátrix sajátértékei a molekula rezgési frekvencia értékei, de jelentős abban az esetben is, amikor a \underline{G} mátrix és a sajátértékek ismeretében az \underline{F} mátrix elemeit, az erőállandókat keressük. Ekkor, bizonyos értelemben, "inverz sajátértékfeladatról" van szó. Megjegyezzük - bár ezzel itt nem kívánunk foglalkozni - hogy ezen utóbbi feladat esetében a megoldás nem egyértelmű.

Többatomos molekulák esetében mindkét típusu probléma megoldását jelentős mértékben nehezíti, hogy az atomok számával arányosan nő a szereplő mátrixok rendje. Ezért jelentősek azok a módszerek, amelyek segítségével egy adott feladatot egyszerűbb részfeladatokra bonthatunk.

E módszerek közös vonása, hogy valamilyen módon kihasználják a feladat szimmetriáját, nevezetesen azt, hogy a molekula szimmetriája speciális

strukturájú mátrixokat eredményez, amelyekben a független elemek száma erősen lecsökken. Természetesen a legnagyobb redukciót akkor érjük el, ha felhasználjuk a molekula valamennyi szimmetriatulajdonságát. Ez a magyarázata annak, hogy a modern kémia problémáinak megoldásánál olyan nagy szerepet kapott a reprezentációelmélet, a csoportelmélet egyik területe.

A reprezentációelmélet alkalmazásának lényege a következő: valamely Γ csoportot leképezzük egy adott L lineáris tér valamilyen operátorhalmazára - pl. egy adott fizikai test szimmetria-transzformációinak halmazára - olyan módon, hogy ha tetszés szerinti $\gamma_1, \gamma_2 \in \Gamma$ csoportelemekhez a $D(\gamma_1), D(\gamma_2)$ operátorokat rendeljük, akkor

$$D(\gamma_1) D(\gamma_2) = D(\gamma_1 \gamma_2), \quad D(E) = E$$

teljesüljön. A fenti összefüggésben E a Γ csoport egységeleme, E az identikus transzformáció. Az L lineáris tér $D(\gamma)$ ($\gamma \in \Gamma$) operátorai ilyen módon a Γ csoportnak egy reprezentációját állítják elő az L térben.

A Γ csoport $D(\gamma)$ reprezentációja reducibilis az L térben, ha létezik a térnek legalább egy nem triviális L_1 altere, amely a reprezentáció minden $D(\gamma)$ ($\gamma \in \Gamma$) operátorára vonatkozólag invariáns /a transzformáció nem vezet ki az L_1 térből/. Ellenkező esetben, ha egyetlen nem triviális invariáns altér sem létezik, a $D(\gamma)$ reprezentáció irreducibilis.

Ismeretes, hogy minden operátort, így valamely test szimmetria-transzformációjának operátorát is, a tér adott bázisválasztásánál egyértelműen reprezentál valamely mátrix. Ha a tér bázisaként az irreducibilis invariáns alterek bázisvektorainak összességét választjuk, akkor a szimmetria-operátorokat reprezentáló mátrixok azonos típusu, hiperdiagonál, vagy kvázidiagonál alakúak lesznek. Az alkalmazásoknál éppen az irreducibilis invariáns alterek bázisvektorainak meghatározása játszik fontos szerepet. Ugyanis, ha egy rendszer adott fizikai problémájának operátora /pl. valamely molekula rezgésfeladatának operátora/ a rendszer szimmetria-transzformációinak mindegyikével felcserélhető, akkor az irreducibilis invariáns alterek bázisvektorainak ismeretében megszerkeszthető olyan transzformáció, amelyik ezen operátort reprezentáló mátrixot hiperdiagonál alakra bontja, s ezáltal az adott fizikai probléma alacsonyabb rendű részfeladatok megoldására redukálódik.

A reprezentációelmélet alapján végzett redukció azonban meglehetősen nagy matematikai apparátust igényel. Ezzel szemben a maximálisan elérhető redukció mértéke már kevesebb munkával megállapítható.

Egyszerű felépítésű, "szép szimmetriájú" molekulák esetében a rezgésprobléma mátrixa néha olyan speciális szerkezetű, hogy tisztán mátrixelméleti megfontolások alapján hiperdiagonál alakra transzformálható. Az elér-

hető maximális redukció mértékét csoportelméleti uton meghatározva ellenőrizhetjük, hogy az így kapott hiperdiagonál mátrix tovább redukálható-e.

Dolgozatunkban a metilhalogén molekulák rezgésproblémájának redukálásánál ilyen kombinált módszert alkalmazunk. EGERVÁRY egy tételének felhasználásával [2] olyan hasonlósági transzformációt kapunk, amelyik az adott feladat tizedrendű mátrixát két harmadrendű és egy negyedrendű diagonálblokkra bontja. A molekula szimmetriatulajdonságait figyelembe véve aztán megállapítható, hogy ezzel már elértük-e a szimmetriatulajdonságok adta maximális redukciót.

A dolgozat az alábbi főbb pontokra tagolódik:

Az 1.§-ban megfogalmazzuk egy egyszerű hiperdiagonalizáló módszert, EGERVÁRY fentemlített tételének alkalmazásával.

A 2.§-ban a metilhalogén molekulák rezgésproblémáját reprezentáló mátrixot az 1.§-ban ismerttetett módszerrel hiperdiagonál alakra transzformáljuk.

A 3.§-ban egyszerű csoportelméleti megfontolás alkalmazásával meggyőződünk, hogy elértük-e a maximális redukciót.

1.§. Speciális szerkezetű mátrixok hiperdiagonál alakra transzformálása
EGERVÁRY tétele alapján

Mindenekelőtt összefoglaljuk azokat a jelöléseket, amelyeket a későbbiekben használni fogunk:

- $[A_{ij}]$ az A_{ij} kvadratikus blokkokból álló hiper mátrix
- $\langle a_1, a_2, \dots, a_n \rangle$ az a_k skalárelemekből álló diagonálmátrix
- $\langle \underline{A} \rangle_1^n = \langle \underline{A}_1, \underline{A}_2, \dots, \underline{A}_n \rangle$ az \underline{A} kvadratikus mátrixokból álló n -edrendű hiperdiagonál mátrix
- \underline{A}^* az \underline{A} mátrix transzponáltja
- \underline{E} egység mátrix
- $\underline{A} \cdot \underline{B} = [\underline{A} b_{ij}]$ az \underline{A} és \underline{B} mátrix direkt szorzata
- $\underline{u} \cdot \underline{v} = \begin{bmatrix} u v_1 \\ u v_2 \\ \vdots \\ u v_n \end{bmatrix}$ az \underline{u} és \underline{v} vektor direkt szorzata

1. Legyen a $[A_{ij}]$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$) olyan hipermátrix, amelynek blokkjai a következők: $A_{ij} = f_{ij}(A)$, ahol A m -edrendű szimmetrikus mátrix, $f_{ij}(x)$ pedig valós változós polinom, amely kielégíti az $f_{ij}(x) = f_{ji}(x)$ feltevést ($i, j = 1, 2, \dots, n$). Legyen az A mátrix spektrálfelbontása:

$$A = W \langle \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m \rangle W^*,$$

akkor a A_{ij} blokkra az

$$A_{ij} = f_{ij}(A) = W \langle f_{ij}(\lambda_1), f_{ij}(\lambda_2), \dots, f_{ij}(\lambda_m) \rangle W^*,$$

felbontás érvényes. Így az A mátrix a következőképpen faktorizálható:

$$A = \underbrace{\langle \underbrace{W}_1, \underbrace{W}_2, \dots, \underbrace{W}_m \rangle}_1 \cdot \underbrace{\langle \tilde{A}^{(1)}, \tilde{A}^{(2)}, \dots, \tilde{A}^{(m)} \rangle}_2 \cdot \underbrace{P^* \langle \underbrace{W^*}_1, \underbrace{W^*}_2, \dots, \underbrace{W^*}_m \rangle}_3,$$

amely a

$$\langle W \rangle_1^n = \langle W, W, \dots, W \rangle, \langle \tilde{A}^{(k)} \rangle_2^m = \langle \tilde{A}^{(1)}, \tilde{A}^{(2)}, \dots, \tilde{A}^{(m)} \rangle$$

tömörebb jelölést alkalmazva az alábbi egyszerű formába írható:

$$A = \langle W \rangle_1^n \cdot P \cdot \langle \tilde{A}^{(k)} \rangle_2^m \cdot P^* \langle W^* \rangle_3^m, \quad (1)$$

ahol $\tilde{A}^{(k)} [f_{ij}(\lambda_k)]$ és P azt a permutáló mátrixot jelöli, amelyik az $(11)(12), \dots, (1n); (21)(22), \dots, (2n); \dots; (m1)(m2), \dots, (mn)$ számpárorsorozatot az $(11)(21), \dots, (m1); (12)(22), \dots, (m2); \dots; (1n)(2n), \dots, (mn)$ sorozatba transzformálja [2].

Az (1) azonosságot az alábbi formába is átírhatjuk:

$$P^* \langle W^* \rangle_3^m \cdot A \cdot \langle W \rangle_1^n \cdot P = \langle \tilde{A}^{(k)} \rangle_2^m. \quad (2)$$

A fenti összefüggésben szereplő $\langle W \rangle_1^n \cdot P$ transzformáló mátrix a

$$T = [t_{k\ell}] = [w_k \cdot x_{\ell}] \quad (k = 1, 2, \dots, m; \ell = 1, 2, \dots, n),$$

alakban írható, ahol w_k a W mátrix k -adik oszlopvektora, azaz a A mátrix λ_k sajátértékéhez tartozó sajátvektor, x_{ℓ} pedig az l -edik n -edrendű egységvektor. Ha egy rögzített k értékre ℓ végigfut az $1, 2, \dots, n$ értékeken, a fenti direkt szorzat a T mátrix k -adik blokkoszlopát adja.

Ha az A mátrix egy sorral és egy oszloppal "szegélyezve" van az alábbi módon:

$$\begin{bmatrix} c & w_p^* \cdot x \cdot y^* \\ w_p \cdot x u & A \end{bmatrix}$$

ahol $c = \text{konstans}$, w_p az A mátrix λ_p sajátértékéhez tartozó sajátvektora, v^* ill. u n -edrendű sor- ill. oszlopvektor és a I transzformáló mátrixot egy egységvektorral "szegélyezzük", akkor a transzformáció a következő:

$$\left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & [w_k^* \cdot x e_\ell^*] \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} c & w_p^* \cdot x v^* \\ \hline w_p \cdot x u & A \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & [w_k \cdot x e_\ell] \end{array} \right] =$$

|4|

$$= \left[\begin{array}{c|c} c & (w_p^* \cdot x v^*) [w_k \cdot x e_\ell] \\ \hline [w_k^* \cdot x e_\ell^*] (w_p \cdot x u) & [w_k^* \cdot x e_\ell^*] A [w_k \cdot x e_\ell] \end{array} \right] \quad \left(\begin{array}{l} k = 1, 2, \dots, m \\ \ell = 1, 2, \dots, n \end{array} \right)$$

A bal alsó blokkra a műveletek elvégzésével

$$[w_k^* \cdot x e_\ell^*] (w_p \cdot x u) \left[\begin{array}{cccccccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} w_p u_1 \\ w_p u_2 \\ \vdots \\ w_p u_n \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{array} \right]$$

$(w_k^* \cdot w_p) (e_\ell^* \cdot u) \delta_{kp} u_\ell$

|5|

adódik, tehát a I^* mátrixnak a $(w_p \cdot x u)$ vektorral való szorzásakor zérustól különböző eredményt csak $k = p$ esetén kapunk, ami a I^* mátrix k -edik blokk sorának a $(w_p \cdot x u)$ vektorral való szorzását jelenti. Ha ℓ befutja az $1, 2, \dots, n$ értékeket, akkor itt az u vektort kapjuk / p -nek k -tól különböző értékeire (5) jobboldalán az A mátrix két különböző sajátértékéhez tartozó sajátvektorának szorzata áll, amely zérussal egyenlő/. A (4) alatti hiperdiagonál mátrix oszlopszegélye tehát olyan $(1 \times n)$ -es blokkokból álló m -edrendű oszlopvektor lesz, amelynek egyetlen blokkja különbözik zérustól, a p -edik, és ez éppen az u vektor, tehát a szegélyező oszlopvektor $(u \cdot x e_p)$ alakban írható. Hasonlóképpen a sorszegélyezést képező jobboldali felső sorvektor egyetlen zérustól különböző blokkja szintén a p -edik, s ez a v^* vektor; tehát a szegélyező sorvektor $(e_p^* \cdot x v^*)$ alakú. A (4) alatti mátrix tehát

$$\left[\begin{array}{c|c} c & \underline{e}_\rho^* \cdot x \underline{v}^* \\ \hline \underline{u} \cdot x \underline{e}_\rho & \langle \underline{\tilde{A}} \rangle \end{array} \right]$$

alakban adódik, ahol $\langle \underline{\tilde{A}} \rangle$ a (2) alatti hiperdiagonál mátrix.

Az általánosság megszorítása nélkül feltehető, hogy a [3] alatti mátrix sor- és oszlopszegélyezésében $\rho = 1$.

Ez a sajátértékek alkalmas számozásával mindig elérhető. Ebben az esetben a fenti mátrix a

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c|c} c & \underline{v}^* & \underline{0} & \dots & \underline{0} \\ \hline \underline{u} & \underline{\tilde{A}}^{(1)} & & & \\ \hline \underline{0} & & \underline{\tilde{A}}^{(2)} & & \\ \hline \vdots & & & \ddots & \\ \hline \underline{0} & & & & \underline{\tilde{A}}^{(m)} \end{array} \right]$$

hiperdiagonál alakot ölti.

2. A gyakorlatban többször előfordul, hogy az \underline{A} hipermátrix \underline{A}_{ij} blokkjai un. ciklikus mátrixok, azaz olyan mátrixok, amelynek a_{ij} elemeire a következő összefüggés érvényes:

$$a_{ij} = \begin{cases} a_{j-i} & \text{ha } j \geq i \\ a_{n+j-i} & \text{ha } j < i \end{cases}$$

Ezeket a mátrixokat tehát első soruk egyértelműen meghatározza:

$$\underline{A}(a_0 a_1 a_2 \dots a_{n-1})$$

Ismeretes, hogy bármely n -edrendű ciklikus mátrix előállítható az

$$\underline{\Omega} = \underline{A}(010 \dots 0)$$

n -edrendű un. primitív ciklikus mátrix legfeljebb $(n-1)$ -edfoku polinomjaként [5]. Az $\underline{\Omega}$ sajátértékei az n -edik egységgyökök, sajátvektorainak elemeit pedig ezen egységgyökök hatványai adják. Speciálisan, ha az

$$\underline{A}(abb) \tag{6}$$

harmadrendű ciklikus mátrix szimmetrikus, spektrálfelbontása:

$$A(a, b, b) = W \langle \lambda_0, \lambda_1, \lambda_2 \rangle W^*$$

ahol $\lambda_0 = a + 2b$, $\lambda_1 = \lambda_2 = a - b$ és

$$W = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \quad |7|$$

Adott rezgésproblémánál - mint látni fogjuk - gyakran előfordul, hogy a feladat mátrixa (6) szerkezetű blokkokból áll, s ez esetben alkalmazható az előzőekben ismertetett mátrixelméleti módszer a feladatot redukáló transzformáció megszerkesztésénél.

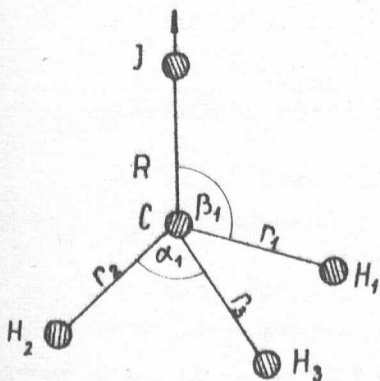
A következő paragrafusban a metilhalogén molekulák rezgésproblémájának tárgyalásánál mutatjuk be a módszer alkalmazását.

2.§. A metilhalogén molekulák rezgésproblémájának redukálása EGERVÁRY módszerével

Adott molekula rezgésproblémáját a belső koordináták által meghatározott koordinátarendszerben célszerű felírni. Erre a kötéstávolság- és vegyértékszögváltozások a legalkalmasabbak, mivel ezek jellemzik legjobban az egyensúlyi helyzettől való eltérést.

A fentiek alapján a metilhalogén molekulák belső koordinátái:

R_i, r_i ($i = 1, 2, 3$) kötéstávolságváltozások és az α_i, β_i ($i = 1, 2, 3$) vegyértékszögváltozások /lásd az 1. ábrán a CH_3I metiljodid molekulát/.



1. ábra

Mint már említettük, az adott rezgésprobléma a

$$|\underline{G}\underline{F} - \lambda\underline{E}| = 0$$

sajátértékfeladat megoldásával ekvivalens. A most bevezetett koordinátarendszerben csak az \underline{F} potenciális energia-mátrixot írjuk fel, a \underline{G} kinetikus energia-mátrix ugyanolyan szerkezetű. A potenciális energia operátorát a fenti koordináták által meghatározott rezgési térben az alábbi \underline{F} mátrix ábrázolja [4] :

$$\underline{F} = [\underline{F}_{ij}] =$$

f_R	f_{rR}	f_{rR}	f_{rR}	f_{Ra}	f_{Ra}	f_{Ra}	$f_{R\beta}$	$f_{R\beta}$	$f_{R\beta}$
	f_r	f_{rr}	f_{rr}	f'_{ra}	f_{ra}	f_{ra}	$f'_{r\beta}$	$f'_{r\beta}$	$f'_{r\beta}$
	f_{rr}	f_r	f_{rr}	f_{ra}	f'_{ra}	f_{ra}	$f'_{r\beta}$	$f_{r\beta}$	$f'_{r\beta}$
	f_{rr}	f_{rr}	f_r	f_{ra}	f_{ra}	f'_{ra}	$f'_{r\beta}$	$f'_{r\beta}$	$f_{r\beta}$
				f_{α}	$f_{\alpha\alpha}$	$f_{\alpha\alpha}$	$f'_{\alpha\beta}$	$f_{\alpha\beta}$	$f_{\alpha\beta}$
				$f_{\alpha\alpha}$	f_{α}	$f_{\alpha\alpha}$	$f_{\alpha\beta}$	$f'_{\alpha\beta}$	$f_{\alpha\beta}$
				$f_{\alpha\alpha}$	$f_{\alpha\alpha}$	f_{α}	$f_{\alpha\beta}$	$f_{\alpha\beta}$	$f'_{\alpha\beta}$
							f_{β}	$f'_{\beta\beta}$	$f'_{\beta\beta}$
							$f'_{\beta\beta}$	f_{β}	$f'_{\beta\beta}$
							$f'_{\beta\beta}$	$f'_{\beta\beta}$	f_{β}

$$i, j = 1, 2, 3, 4 \text{ és } \underline{F}_{ij} = \underline{F}_{ji}$$

Anélkül, hogy bármit tudnánk a fenti mátrix eredetéről, láthatjuk, hogy mátrixelméletileg jól kihasználható szimmetria tulajdonságai vannak: harmadrendű szimmetrikus ciklikus blokkokból áll, speciális

lis sor- és oszlopszegélyezéssel. Esetünkben tehát éppen az 1. paragrafusban ismertetett (3) alakú mátrixszal van dolgunk az ott tárgyalt speciális blokkokkal és szegélyezéssel. Az \underline{F}_{ij} ($i, j = 2, 3, 4$) szimmetrikus, ciklikus blokkok az $\underline{\Omega} = \underline{A} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ harmadrendű primitív ciklikus mátrix segítségével az

$$\underline{F}_{ij} = P_{ij}(\underline{\Omega}) = f_{ij}^{(0)} \underline{E} + f_{ij}^{(1)} (\underline{\Omega} + \underline{\Omega}^2)$$

polinom alakban írhatók.

Az oszlop- ill. sorszegélyezést képező direktszorzatok tényezői jelen esetben:

$$\underline{w}_p = \underline{w}_0 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix},$$

- azaz a (7) alatti \underline{w} mátrix első oszlopvektora- és

$$\underline{u} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} f_{rR} \\ \sqrt{3} f_{R\alpha} \\ \sqrt{3} f_{R\beta} \end{bmatrix},$$

illetőleg ezen vektorok transzponáltjai. EGERVÁRY előző paragrafusban ismertetett módszerét alkalmazva a fenti \underline{F} mátrixot a

$$\underline{T} = [w_k \cdot x e_l] = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c|c|c|c} 1 & & & \\ \hline & \underline{W} & & \\ \hline & & \underline{W} & \\ \hline & & & \underline{W} \end{array} \right] \end{array} \quad \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \end{array}$$

transzformáló mátrixszal végzett ortogonális transzformáció az alábbi hiperdiagonál alakra bontja:

$$\underline{\tilde{F}} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c|c|c|c} f_R \sqrt{3} f_{rR} \sqrt{3} f_{r\alpha} \sqrt{3} f_{r\beta} & & & \\ \hline \sqrt{3} f_{rR} & \underline{\tilde{F}}^{(0)} & & \\ \hline \sqrt{3} f_{r\alpha} & & \underline{\tilde{F}}^{(1)} & \\ \hline \sqrt{3} f_{r\beta} & & & \underline{\tilde{F}}^{(2)} \end{array} \right] \end{array} \quad |8|$$

ahol

$$\underline{\tilde{F}}^{(k)} = [P_{ij}(\omega_k)] = [(f_{ij}^{(0)} + 2f_{ij}^{(1)} \cos \frac{2k\pi}{3})] \quad (k=0,1,2; i,j=2,3,4)$$

és ω_k a harmadik egységgyököket jelöli.

Az adott tizedrendű rezgésprobléma ezzel egy negyedrendű és két azonosan egyenlő harmadrendű problémára redukálódott.

A fenti módon végzett redukció annak alapján történt, hogy az operátort reprezentáló mátrixot vizsgálva, e mátrix szerkezeti tulajdonságai miatt önként adódott a fenti hiperdiagonalizáló módszer. Kérdés azonban, hogy ennek során kihasználtuk-e a molekula szimmetriájából adódó összes lehetőséget. A kérdésre a következő paragrafusban reprezentációelméleti megfontolások alapján válaszolunk.

3.§. A maximálisan elérhető redukció mértékének megállapítása reprezentáció-elméleti módszerekkel

A metilhalogén molekulák a C_{3v} szimmetriacsoportoz tartoznak, amelynek hat eleme van: a C_3, C_3^2 - azaz $\frac{2\pi}{3}$ -al, ill. $\frac{4\pi}{3}$ -al történő forogás-, a $G_i (i=1,2,3)$ három, egymással $\frac{2\pi}{3}$ szöget bezáró síkra vonatkozó tükrözés-, valamint az E egységelem - azaz az identikus transzformáció. Ezek un. szimmetria-transzformációk, amelyek a molekulát önmagával fedésbe hozzák [3].

Amint az 1. ábráról is látható, a belső koordinátáknál választott $r_i, \alpha_i, \beta_i (i=1,2,3)$ koordinátacsoportok olyan tulajdonságúak, hogy egy adott csoporton belül a koordinátákat a szimmetria-transzformációk egymás között permutálják, tehát az r_i, α_i és $\beta_i (i=1,2,3)$ koordináták a tizdimenziós rezgéstér egy-egy háromdimenziós invariáns alterének bázisára vonatkozó koordinátái. E miatt a molekula szimmetria-transzformációit a rezgéstér előbbi módon választott bázisában hiperdiagonál alakú mátrixok reprezentálják, amelyek három harmadrendű és egy elsőrendű diagonálblokkból állanak, azaz a C_{3v} csoport adott tizdimenziós reprezentációja a választott koordináta-rendszerben eleve felbomlik három háromdimenziós és egy egydimenziós reprezentációra.

Valamely Γ csoport lehetséges irreducibilis reprezentációira vonatkozólag ismeretes az alábbi összefüggés:

$$n_1^2 + n_2^2 + \dots + n_k^2 = N \quad |9|$$

ahol N a Γ csoport rendje, $n_i (i=1,2,\dots,k)$ az irreducibilis reprezentációk dimenziói, k a csoport konjugált osztályainak száma [3]. A C_{3v} csoportnál $N=6$ és $k=3$, így [9] alapján az

$$1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$$

egyértelmű felbontás adódik, amiből következik, hogy a C_{3v} csoportnak két egy- és egy kétdimenziós inekvivalens irreducibilis reprezentációja van. Látjuk tehát, hogy a tizdimenziós rezgéstér előbb említett háromdimenziós invariáns alterei még reducibilisek. Ha D jelöli a Γ csoport valamely reducibilis reprezentációját, $D_j (j=1,2,\dots,k)$ pedig ugyanezen csoport irreducibilis reprezentációját, akkor az

$$m_j = \frac{1}{N} \chi(D) \chi(D_j)$$

összefüggés megmutatja, hogy a j -edik irreducibilis reprezentáció milyen multiplicitással szerepel a csoport D reprezentációjában. A fenti összefüggésben $\chi(D)$ ill. $\chi(D_j)$ a D ill. D_j reprezentációk karakterei.*

* Egy N -esrendű Γ csoport valamely D reprezentációjának karaktere olyan N -dimenziós vektor, amelynek koordinátái a reprezentáció egyes mátrixainak spurjai.

Karaktertáblázat /pl. [3] / segítségével tehát az irreducibilis reprezentációk multiplicitásai egyszerű számolással adódnak. Könnyen ellenőrizhető, hogy esetünkben $m_1 = 4$, $m_2 = 0$, $m_3 = 3$, azaz a C_{3v} szimmetriacsoportnak tízdimenziós reprezentációja maximális redukció után négy egydimenziós és három kétdimenziós irreducibilis reprezentációra bomlik.

Ha valamely rendszer fizikai problémájának operátorát reprezentáló mátrix e rendszer szimmetriacsoportja valamely reprezentációjának minden mátrixával felcserélhető, akkor maximálisan redukált alakjában az egyes diagonálblokkok dimenziója egyenlő az irreducibilis reprezentációk multiplicitásával m_j -vel ($j = 1, 2, \dots, k$), a diagonálblokkok multiplicitása pedig az irreducibilis reprezentációk dimenziójával, n_i -vel ($i = 1, 2, \dots, k$) [4].

Minthogy az F potenciális energia-mátrixra az előbb említett felcserélhetőségi reláció érvényes [4], maximálisan redukált alakja egy negyedrendű és két azonosan egyenlő harmadrendű blokkot tartalmaz.

Az [8] alatti mátrix tehát, amelyet mátrixelméleti módszerekkel kaptunk, valóban a maximálisan redukált mátrixalak.

Megjegyzés

Az itt tárgyalt rezgésprobléma "szép szimmetriájú" volt, a szimmetria-tulajdonságok a feladat mátrixában könnyen felismerhető speciális strukturájú blokkokat eredményeztek. A bonyolultabb, kevesebb szimmetriát mutató rezgésfeladatok mátrixaiban is előfordulhatnak azonban a jelenlegihez hasonló speciális blokkok, amelyekre alkalmazható módszerünk, amelynek előnyét összefoglalva a következőket mondhatjuk:

A redukált alak előállításához szükséges transzformáció konstruálásánál nem volt szükségünk az irreducibilis reprezentációk konkrét felírására, mivel a mátrix szerkezeti tulajdonságait felhasználva tisztán mátrixelméleti alapon írtuk fel azt. A redukció mértékének reprezentációelméleti meghatározása pedig - mint láttuk - egyszerű volt és kevés számolást igényelt.

I r o d a l o m

- [1] Wilson, E.B., Decius, J.C. and Cross, P.: Molecular Vibrations, McGraw Hill, New York /1955/
- [2] Egerváry J.: Páronként felcserélhető blokkokból álló hiper-mátrixokról és azok alkalmazásáról a rácsdinamikában. Mat. Kut. Int. Közl. 3, 31-47 /1954/

- [3] Morton Hamermesh, Group Theory and its Applications to Physical Problems. Addison-Wesley Publishing Company Inc. London, England 1962.
- [4] Маянц, Л.С.: Теория и расчет колебаний молекул. Издательство Академии Наук СССР, Москва, 1960.
- [5] Aitken, A.C.: Determinants and Matrices. Oliver and Boyd Edinburgh and London, New York: Interscience Publishers, Inc.

Érkezett: 1967. dec. 20.

KFKI Közl. 16.évf. 2.szám, 1968.

ÁTLAGOS NEUTRONENERGIÁK U-235 TERMIKUS ÉS Cf-252 SPONTÁN HASADÁSA ESETÉN

Irta: Kluge Gyula és Lajtai Albert

Összefoglalás

Statisztikus modell feltételezése alapján kiszámoltuk az egyes hasadási fragmentek kezdeti maghőmérsékletét. Ezekből az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok átlagos energiáját Le Couteur és Lang neutronkaszkádkra vonatkozó eredményei alapján számoltuk. Eredményeinket Cf-252 esetén Bowman et al. [1], illetve U-235 termikus neutronokkal történő hasadása esetén Milton és Fraser [2] méréseivel hasonlíthattuk össze. A tapasztalt jó egyezés alapot ad arra, hogy a számolást olyan hasadási reakciók esetére is alkalmazhassuk, ahol ilyen mérési adatok még nem állnak rendelkezésre.

Bevezetés

A maghasadásnál keletkező neutronok vizsgálata igen hasznos információkat nyújthat a hasadási folyamat mechanizmusáról. Pontosabban a neutronok kibocsátási időpontjának és energia- és szögeloszlásának ismerete döntő szerepet játszhat az egyes feltételezett hasadási modellek közötti választásban. Ugyanakkor a hasadásnál keletkező erősen gerjesztett és deformált magok egyéb módon nem, vagy csak nagyon nehezen elérhető magállapotokat jelentenek, és így a belőlük kibocsátott neutronok igen értékes magfizikai adatokat szolgáltathatnak. Másrészt a maghasadási vizsgálatoknál éppen az ilyen "különleges" magok sokasága teszi nehezzé az alapfolyamatok kiértékelését.

Már az első mérések [3] is azt mutatták; hogy a hasadási neutronkibocsátás elég jól leírható mozgó fragmentekből történő kipárolgás feltételezésével. Azonban a neutronemissziós folyamatokat meghatározó maghőmérsékletek ismeretének hiányában az eddigi számolások és méréskiértékelések [1-7] közvetlen magfizikai jelentéssel nem rendelkező, a hasadási fragmentek nagy csoportjaira együttesen vonatkozó, és így meglehetősen formális paraméterek segítségével történtek. Így természetes módon felmerül az a fizikailag reálisabb igény, hogy a teljes hasadási neutronspektrumot az egyes fragmentmagokból történő neutronemissziókból építsük fel. A következőkben ennek lehetőségeit vizsgáljuk meg.

Hasadási neutronspektrum

Abból a feltevésből indulunk ki, hogy a fragmentek rendszerében az egyes neutronemissziókat kompaund magból való neutronkipárolgással írjuk le.

Az A tömegszámú fragmentből az ϵ energiájú neutronkibocsátás valószínűsége [8]

$$\psi_A(\epsilon) d\epsilon = konst \cdot \epsilon \cdot \sigma_{An}(\epsilon) \frac{\omega_B(E^* - \lambda - \epsilon)}{\omega_A(E^*)} d\epsilon$$

ahol ω_A , illetve ω_B a kezdeti, illetve a neutronemisszió utáni mag nívósűrűsége a kezdeti, illetve maradék gerjesztési energiánál. λ a kirepült neutron kötési energiája. $\sigma_{An}(\epsilon)$ a megfordított folyamat hatáskeresztmetszete.

Az állapotsűrűség, entrópia, hőmérséklet statisztikus definícióinak felhasználásával, $E^* \gg \epsilon$ feltételezéssel, sorbafejtés után [7, 8]

$$\psi_A(\epsilon) d\epsilon \sim \sigma_{An}(\epsilon) \cdot \epsilon \cdot e^{-\frac{\epsilon}{T}} d\epsilon \quad -t \text{ kapjuk,}$$

ahol T a maghőmérséklet. A neutronspektrum döntő részében jó közelítésnek tekinthető a $\sigma_{An}(\epsilon) \approx konstans$ közelítés, és így jutunk az ún. párolgási spektrumhoz, ahol a konstans értékére a nomálási feltételből $1/T$ adódik.

Ha a maradék mag további neutronkibocsátásra képes, a fenti leírást használhatjuk újra, kisebb gerjesztési energia és kisebb hőmérséklet mellett.

Lang és Le Couteur [9] kimutatták, hogy az ilyen neutronkaskád jó közelítésben a következő neutron-energiaeloszlással írható le

$$\bar{\psi}(\epsilon) d\epsilon \sim \sigma(\epsilon) \frac{\epsilon^{m-1}}{Q^m} e^{-\frac{\epsilon}{Q}} d\epsilon$$

ahol $m \approx \frac{16}{11}$, $Q \approx \frac{11}{12} T(E_i^*)$ és $T(E_i^*)$ a kezdeti gerjesztéshez tartozó maghőmérséklet.

A konstans $\sigma(\epsilon)$ feltételezés a

$$\bar{\psi}(\epsilon) d\epsilon \approx \frac{\epsilon^{1/2}}{T^{3/2}} e^{-\frac{\epsilon}{T}} d\epsilon$$

alakú Maxwell-spektrumhoz vezet. A maghasadásnál a különböző fragmentekből kibocsátott neutronok megfelelő súllyal összetett, laboratóriumi rendszerbe áttanszformált össz-spektrumát mérjük [10]:

$$N(E, \vartheta) = \sum_A \bar{\phi}_A(E, \vartheta) \cdot \rho(A) \nu(A),$$

ahol $\bar{\phi}(E, \vartheta)$ a kezdeti A tömegszámú fragmentekből kibocsátott $\bar{\psi}(\epsilon)$ neutroneloszlás laborrendszerbe áttanszformált alakja, $\rho(A)$ a kérdéses fragment előfordulási gyakorisága, $\nu(A)$ pedig a belőle kibocsátott neutronok száma.

Látható, hogy azzal a közelítő feltevással, hogy a fragmentek saját rendszerükben izotróp párolgási, illetve Maxwell-eloszlásnak megfelelő való-

szinüséggel bocsátják ki a neutronokat - a transzformációkat meghatározó repülési sebességeken kívül - a T maghőmérsékletek ismerete szükséges a neutron szög- és energiaeloszlás leírására. Igen lényeges számolási egyszerűsödést jelent az, hogy a neutronkaszád leírására kapott Maxwell-spektrum paramétere a kezdeti gerjesztési energiáknak megfelelő maghőmérséklet.

Ezeket a maghőmérsékleteket általános statisztikus jellegű megfontolásokból kiindulva kiszámolhatjuk, illetve ezek felhasználásával az átlagos neutronenergiákat kaphatjuk meg.

Átlagos neutronenergia

Tételezzük fel, hogy a két fragment szétszakadása előtt közvetlenül statisztikus egyensúlyi folyamatok játszódnak le, a két fragment két termikus egyensúlyban levő kompaund magot valósít meg [11]. Feltételezésünk következménye az, hogy a fragmentpár kezdeti "hőmérséklete" azonos, ez az előzőek alapján azt jelenti, hogy az összetartozó fragmentekből kompaund mechanizmussal kibocsátott neutronok átlagos energiája megegyezik. A rendelkezésre álló mérések [1-2] ezt jól igazolják.

A magok nivósűrűségének leírására a [12]

$$W(E) \sim \frac{\exp(2\sqrt{aU})}{a^{1/4} U^{5/4}} \quad \text{kifejezést és maghőmérsék-}$$

letre a

$$\frac{1}{T} = \frac{d}{dU} \log \omega(U)$$

definíciót használjuk. Itt $U = E - P(Z) - P(N)$ a párenergiák levonása utáni gerjesztési energia, a adott paraméter. Ezekből a maghőmérsékletre a

$$\frac{1}{T} = \sqrt{\frac{a}{U}} - \frac{5}{4U} \quad \text{összefüggést kapjuk.}$$

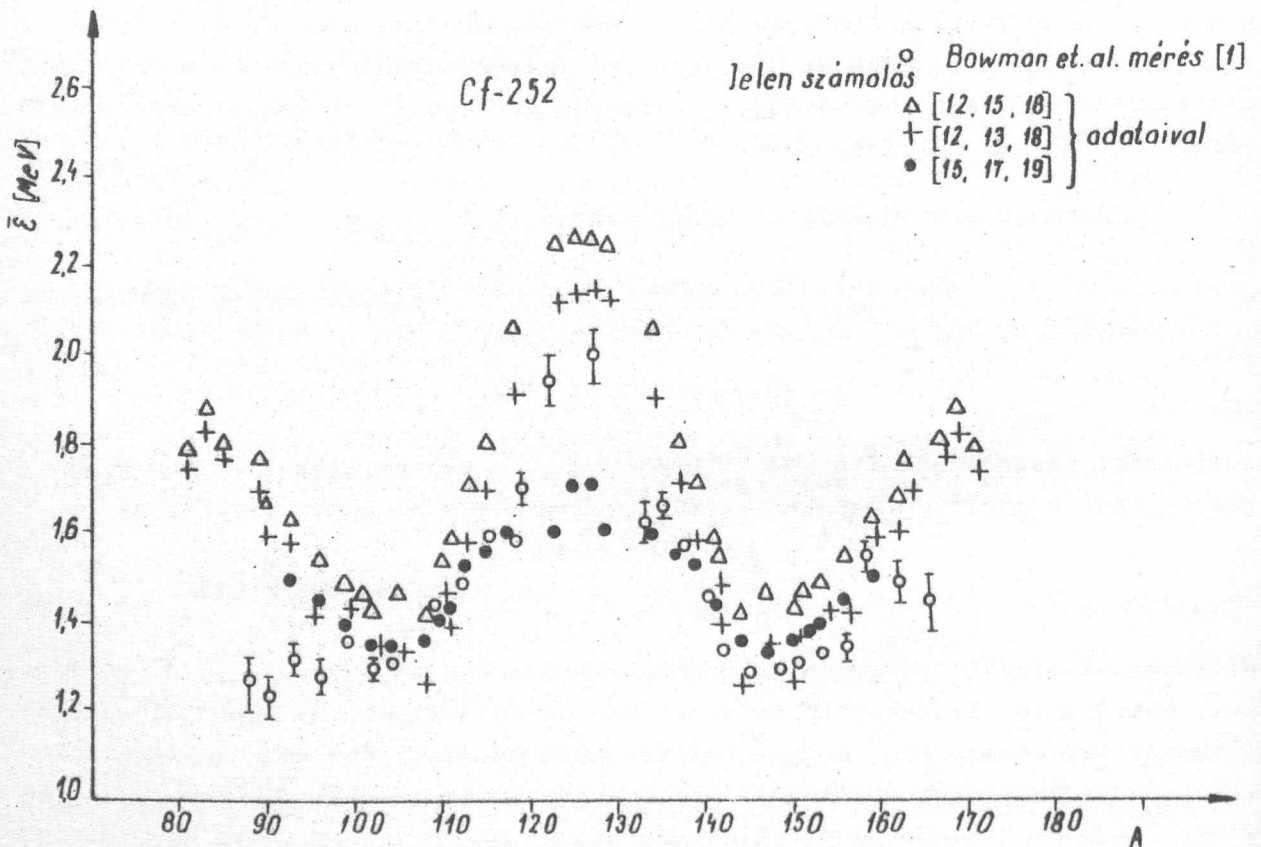
Feltevésünk alapján az egyes fragmentpárokra a rendelkezésre álló E gerjesztési energia /a felszabaduló és a fragmentek össz kinetikus energiájának különbsége/ úgy oszlik meg, hogy a két fragment hőmérséklete azonos legyen. A felszabaduló energiát a félempirikus tömegformulák alapján a kompaund mag és a két fragment össztömegének különbségéből kaphatjuk. A $T_1 = T_2$ egyenlőség alapján meghatározhatjuk az egyes fragmentpárokra az energiamegoszlást, és így a megfelelő maghőmérsékleteket. Ezt követően Maxwell-spektrum feltételezéssel az átlagos neutronenergiák számolhatók.

Eredmények

A fent leirt számolásokat Cf-252 spontán hasadása és U-235 termikus hasadása esetére több szerző [12-19] által megadott némileg eltérő felszaba-

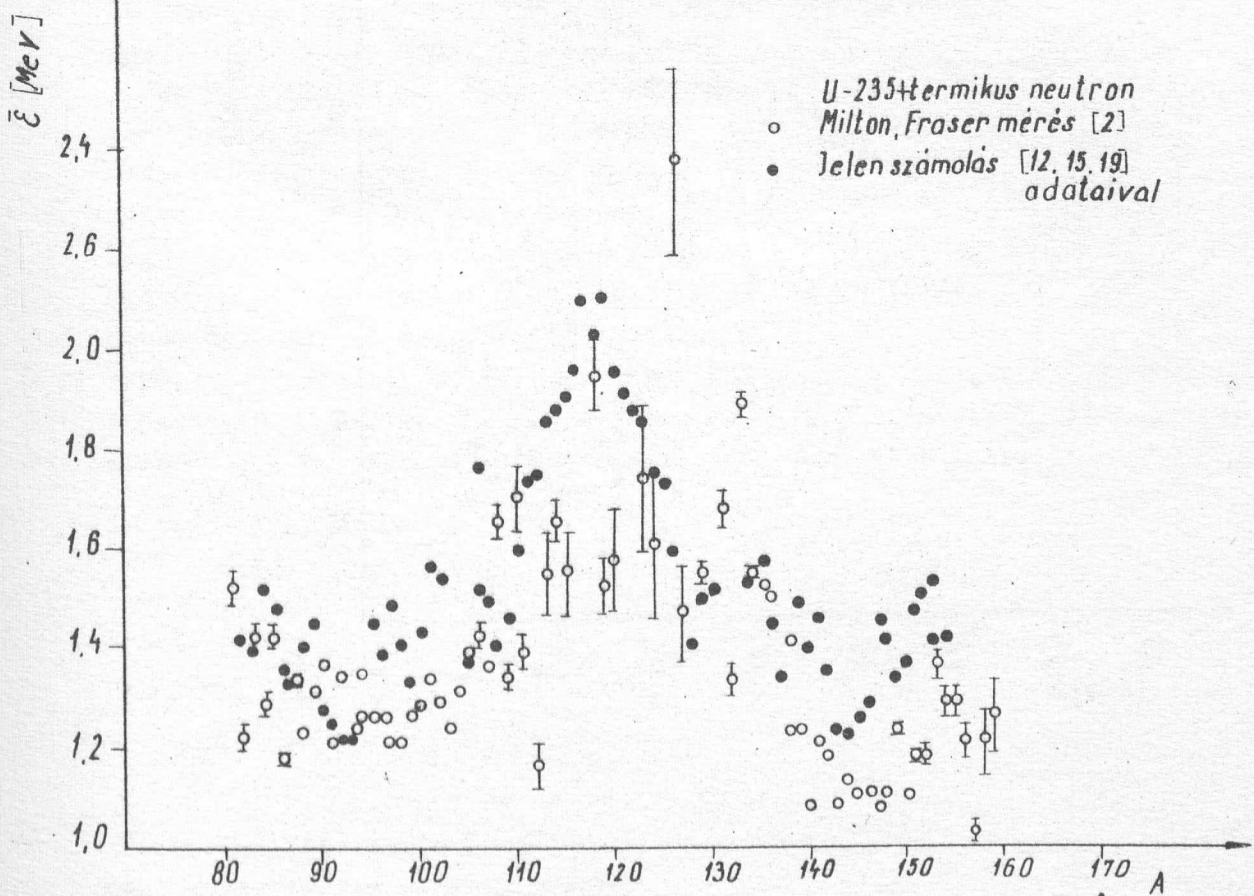
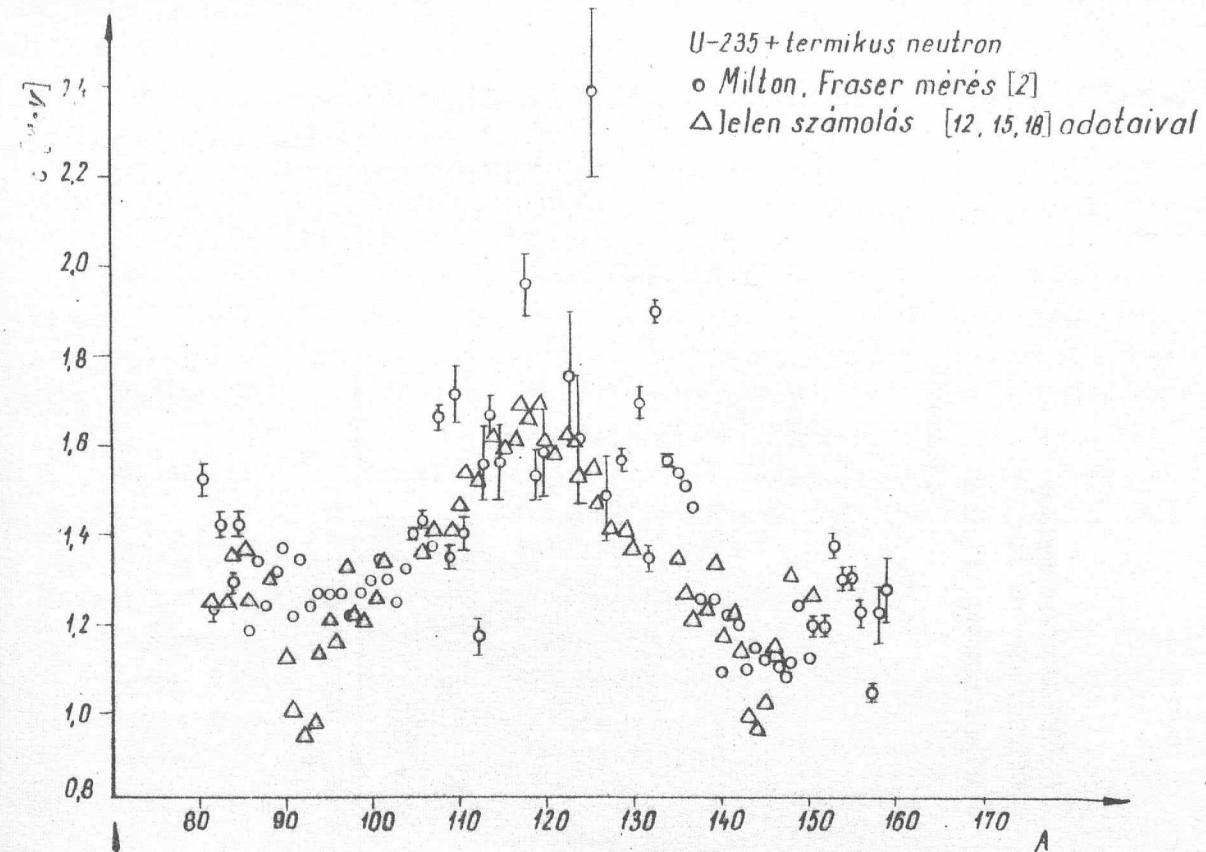
duló energia, illetve nívósűrűség paraméterek mellett végeztük el. Bowman et al. Cf-252 spontán hasadásának, [1] Milton és Fraser U-235 [2] termikus neutronokra történő hasadásának esetére kapott eredményeit használhatjuk fel számolásaink ellenőrzésére.

Eredményeinket az 1-2. ábrákon tüntettük fel. Ezek alapján azt a következtetést vonhatjuk le, hogy figyelembe véve a rendelkezésre álló nívósűrűség-és energia-adatok különbözőségét, a két fragment közötti statisztikus egyensúly feltételezésével kapott átlag neutronenergiák jól egyeznek a kísérleti adatokkal. Ez az egyezés annál is inkább érdekes, mivel a felszabaduló energiák ~ 200 MeV, a szóba jövő gerjesztési energiák 10-20 MeV-es tartományba esnek, és a számolt átlagos neutronenergiák tized MeV pontosságúak.



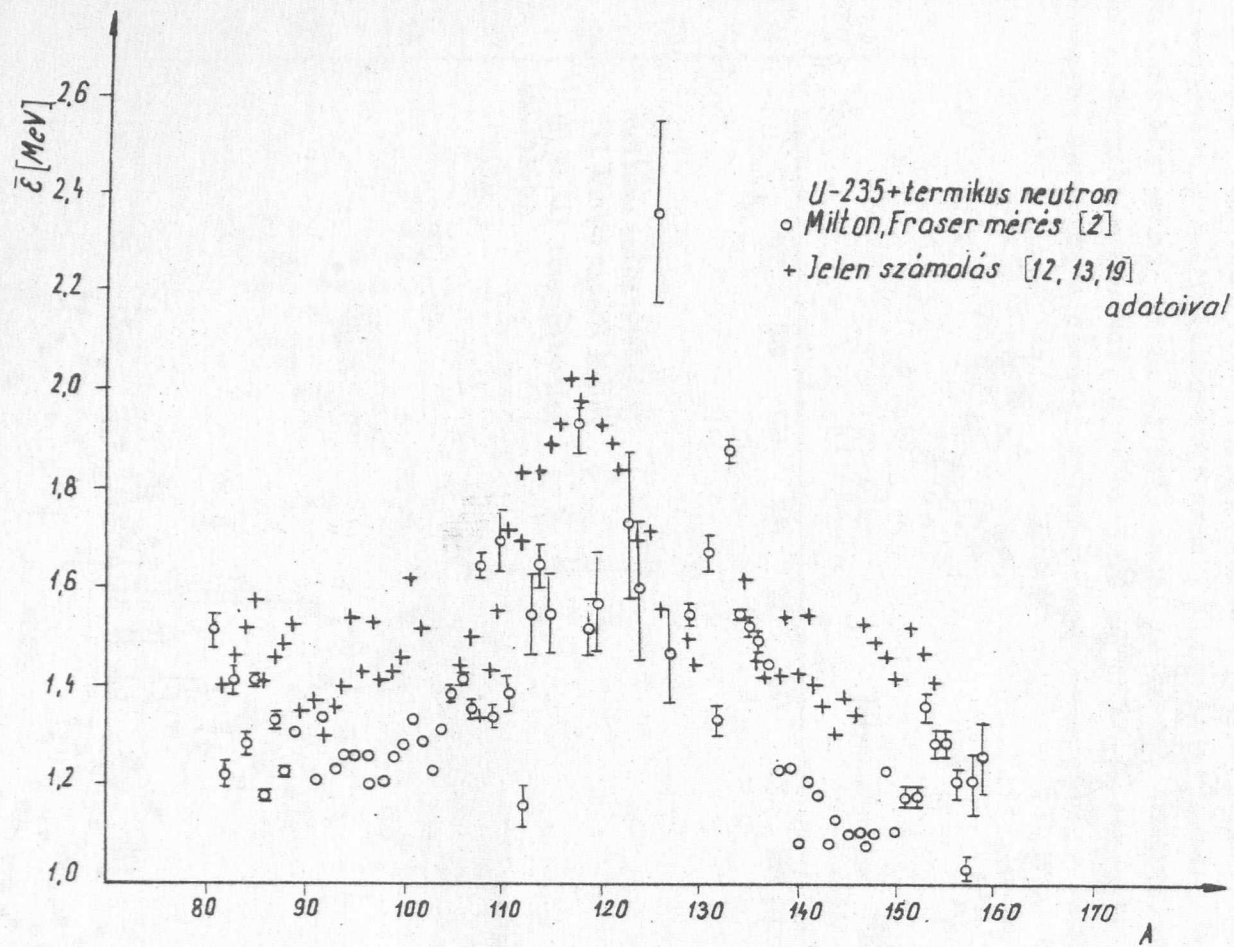
1. ábra

Cf-252 spontán hasadása esetén az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok átlagos energiája



2/a, 2/b ábra

U-235 termikus hasadásánál az egyes fragmentekből kibocsátott neutronok átlagos energiája



2/c ábra

Köszönetünket fejezzük ki Vasáros Lászlónénak a számítási munkákban nyújtott segítségéért.

I r o d a l o m

- [1] Bowman, H.R., Milton, J.C.D., Thompson, S.G., Swiatecki, W.J.: Phys. Rev. 126, 2120 /1962/
- [2] Milton, J.C.D., Fraser, J.S.: Proc. of Symp. on Phys. and Chem. of Fission, Salzburg, 1965. Vol.II.
- [3] Wilson, R.R.: Phys. Rev. 72, 189 /1947/
- [4] Skarsvag, K., Bergheim, K.: Nucl.Phys. 45, 72 /1963/
- [5] Kapoor, S.S., Ramanna, R., Rama Rao, P.N.: Phys. Rev. 131, 283 /1964/
- [6] Sargent, C.P., Bertozzi, W., Demos, P.T., Matthews, J.L., Turchinetz, T.D.: Phys. Rev. 137B, 89 /1965/
- [7] Terrel, J.: Phys. Rev. 113, 527 /1959/
- [8] Blatt, J.M., Weisskopf, V.F.: Theoretical Nuclear Physics 365, /Wiley, New York, 1952/
- [9] Le Conteur, K.J., Lang, D.W.: Nucl. Phys. 13, 32 /1959/
Lang, D.W.: Nucl. Phys. 53, 113 /1964/
- [10] Kluge Gy., Lajtai A., Nagy L.: KFKI Közl. 14, 359 /1966/
- [11] Ramanna, R., Ramamurtly, V.S.: Phys. Lett. 21, 437 /1966/
- [12] Gilbert, A., Cameron, A.G.W.: Can. J. of Phys. 43, 1446 /1965/
- [13] Milton, J.C.D.: UCRL - 9883 - Rev. /1962/
- [14] Wing, J., Varley, J.: ANL 6886 /1964/
- [15] Myers, U.D., Swiatecki, W.J.: Nucl. Phys. 81, 1 /1966/
- [16] Kluge Gy., Lajtai A.: /megjelenés alatt/
- [17] Erba, E., Facchini, U., Saetta - Menichella, E.: Nucl.Phys. 84, 595 /1966/
- [18] Schmitt, H.W., Neiler, J.H., Walter, F.J.: Phys. Rev. 141, 1146 /1966/
- [19] Milton, J.C.D., Fraser, J.S.: Can.J. Phys. 40, 1626 /1962/

Érkezett: 1968. jan. 31.

KFKI Közl. 16.évf. 2.szám, 1968.

A PORTARTALOM HATÁSÁNAK VIZSGÁLATA AZ ÁTÜTÉSI SZILÁRDSÁGRA

Irta: Berecz György

Összefoglalás

Megvizsgáltuk a poros elektród hatását az átütési szilárdságra. Különböző porokat vittünk fel elektrosztatikus uton Rogowsky-elektrodra, és méréseket végeztünk 1-10 ata nyomástartományban mindkét polaritásban. Vizsgálatainkat kiterjesztettük a por nedvességtartalmának hatására is.

Bevezetés

A nyomás alatt működő szalaggenerátorok feszültségbirásának felső határát a geometriai viszonyokon túl a szigetelőgáz nyomása, összetétele és nem utolsósorban nedvesség- és portartalma határozza meg. Az utóbbi tényező befolyását vizsgáltuk meg különböző porfajták esetében.

A portartalom befolyását a szikrakisülésre szabad levegőn a szerzők egy sora beható vizsgálat tárgyává tette [1, 2, 3], nyomás alatt azonban kevésbé ismert a portartalom hatása, különösen kvantitatíve nem, ezért méréseinket a szalaggenerátor üzeme szempontjából jelentős 10 ata nyomásig terjesztettük ki. A [2, 3] szerzők a portartalom hatását elsősorban az átütési ténnyel kapcsolatban lebegő por szempontjából vizsgálták, bár folytak vizsgálatok [3, 4] az elektródra felvitt por hatására vonatkozóan is, de ezeket a vizsgálatokat a por nedvességtartalmára, nyomás és polaritásfüggésre nem terjesztették ki. A hosszú ideig zárt térben működő szalaggenerátor feszültségbirását nagy mértékben befolyásolja az elektródokra lerakódó por, ezért ez alkalommal az elektródokra felvitt por hatását vizsgáltuk meg különböző porfajta, a por nedvességtartalma és a poros elektród különböző polaritása esetében.

Mérési elrendezés

Méréseinknél a port Rogowsky-elektrodra vittük fel. A Rogowsky-elektrodát átmerője 60 mm volt, és a vele szemben levő ϕ 180 mm-es sikelektrodától 14 mm távolságban helyeztük el.

A Rogowsky-elektrodra előzőleg egy másik szikraközben elektrosztatikus módszerrel vittük fel a vizsgált port, ezzel is megközelítve az elektrosztatikus generátorban kialakuló viszonyokat. Vizsgálatainkat az alábbi táblázatban szereplő porfajtákra terjesztettük ki. A porfajták kiválasztásánál az a szempont vezetett, hogy vizsgálatainkat különböző fajlagos ellenállású és különböző módon nedvesszívó porokra terjesszük ki. Így esett a választásunk a jól szigetelő szilíciumkarbidra és a kis fajlagos ellenállású grafitra, továbbá az erősen nedvszívó cukorporra. A kereskedelemben kapható szilíciumkarbid csiszolópor-fajták alkalmazása lehetőséget biztosított a különböző szemcse nagyságú porok vizsgálatára is. Tapasztalataink szerint a grafitpor a generátort leginkább szennyező porféleségnek bizonyul, ami külön is indokoltá teszi annak vizsgálatát, továbbá a grafitpor és a cukorpor alkalmazásával csatlakozni lehet a [2, 3, 4] szerzők mérési eredményeire. Az I. táblázatban feltüntettük a porszemcsék mért fajlagos ellenállását, valamint azok méreteit.

I. táblázat

Porfajta	Fajlagos ellenállás	Szemcse nagyság ϕ mm
"600"-as csiszolópor /SiC/	$8 \cdot 10^{12} \Omega \text{ cm}$	0,03
"300"-as " "	$8 \cdot 10^{12}$	0,07
Cukorpor	$2 \cdot 10^{11}$	0,1 0,02
Grafitpor	$7 \cdot 10^3$	0,01

Az elektródra felvitt porréteg sűrűségét /darab/mm²/ és a szemcse nagyságot mikroszkóp segítségével határoztuk meg.

Az elektródra felvitt por nedvességtartalmának hatását az átütési feszültségre három állapot mellett vizsgáltuk. "Szárz"-nak tekintettük azt a porréteget, amelyet - miután a fenti módon felvittük az elektródra - az elektróddal együtt 100°C felett kifűtöttünk, és kifűtés után azonnal helyeztünk a szikraközbe a mérések elvégzésére. "Légnedves" por vizsgálata esetében az elektródra felvitt port $\psi = 40$ % relatív nedvességtartalmu, 20°C hőfoku szobalevegőn néhány órán át állva hagytuk a mérések megkezdése előtt. "Nedves" por azt az állapotot jelzi, amikor a poros elektródot a mérések megkezdése előtt $\psi = 100$ % relatív nedvességtartalmu edénybe helyeztük. A poros elektródot a $\psi = 100$ % relatív nedvességtartalmu edényben - porfajtatól függően - 10-20 percig tartottuk addig, amíg a lecsapódó pára nem kezdte el a felvitt port lemosni.

A mérési eredmények kiértékelése során tekintettel kellett lenni arra a körülményre, hogy az egyes átütések után a porsűrűség csökken, és ezzel átütésenként az átütési feszültség növekszik. A feszültségmérés és a mikroszkópikus megfigyelés azonban azt mutatta, hogy ez az effektus az első három átütés után még nem vehető észre, így az átütési feszültség meghatározásánál csak az első három átütésnél nyert értékeket vettük figyelembe.

Az ismertetett módszer szerinti porfelvitel természetesen nem adott homogén eloszlású porréteget. A rétegeket a legsűrűbb koncentrációjú hely porsűrűségével jellemeztük, minthogy az átütés nagy valószínűséggel ezen a helyen következett be. Az így meghatározott porsűrűség - mint jelzőszám - alkalmazásának objektív voltát igazolja az, hogy az ilyen módon jellemzett mérések reprodukálhatóak voltak.

Mérési eredmények

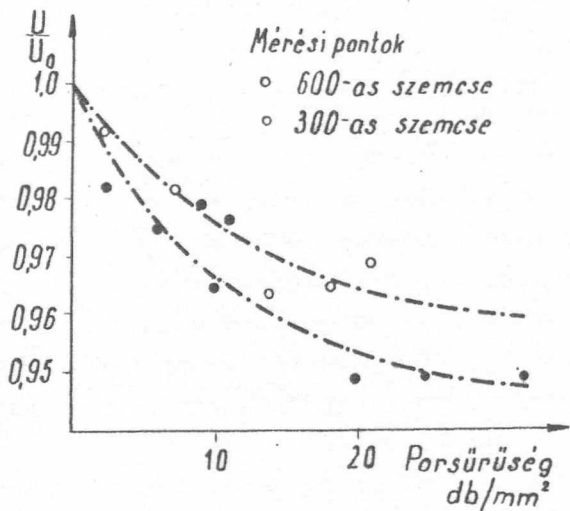
a/ Szemcsenagyság hatásának vizsgálata

A szemcsenagyság hatását az átütési szilárdságra "300"-as és "600"-as jól szigetelő szilíciumkarbid por alkalmazásával vizsgáltuk. A mérési eredményeket az 1. ábra tartalmazza. Az ábrán a porsűrűség függvényében az U/U_0 viszonyt ábrázoltuk, ahol U_0 a pormentes állapothoz, U pedig az elektród poros állapotához tartozó átütési feszültség. A mérési eredményekből megállapítható, hogy kétszeres szemcsenagyság esetében az átütési feszültség mintegy 1 %-kal kisebb. Az elektródra felvitt por hatására a porsűrűség függvényében az átütési feszültség csökken és $\sim 30 \text{ db/mm}^2$ porsűrűség felett már tovább nem változik.

Ennél és a további mérési sorozatoknál megvizsgáltuk az átütési szilárdságot az elektród teljes porfedése esetén is, és valóban ugyanazt az átütési értékeket kaptuk, mint $\sim 30 \text{ db/mm}^2$ értéknél. Méréseink során a port negatív töltésű elektródra vittük fel, és az utóbbi eredmény jó egyezést mutat S. Frank [3], továbbá H.H. Martinussen [2] megállapításaival. Martinussen felhívja a figyelmet a katód gondos tisztításának jelentőségére, S. Frank pedig rámutat arra, hogy ilyen polaritás esetében az elektródra teljes fedésben felvitt porréteg vastagságától gyakorlatilag nem függ az átütési szilárdság. Méréseink alapján kiegészíthetjük S. Frank fenti megállapítását azzal, hogy ez az állapot a teljes fedés előtt, a már említett porsűrűségnél beáll.

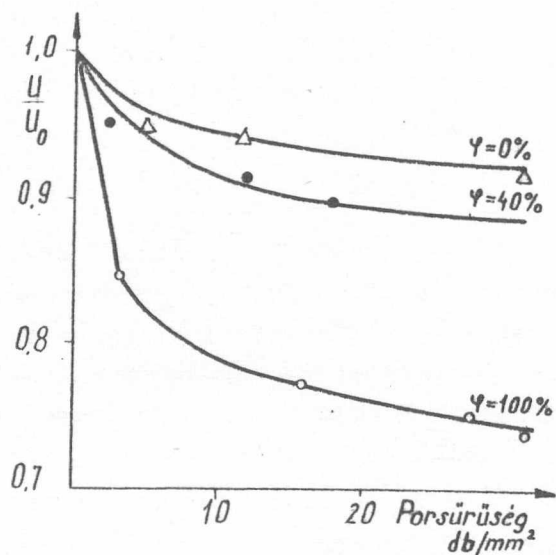
b/ Különböző nedvességtartalmu porok vizsgálata

Az elektródra felvitt por által adszorbeált nedvességtartalom hatását porcukor és grafitpor esetében vizsgáltuk meg. A mérési e-



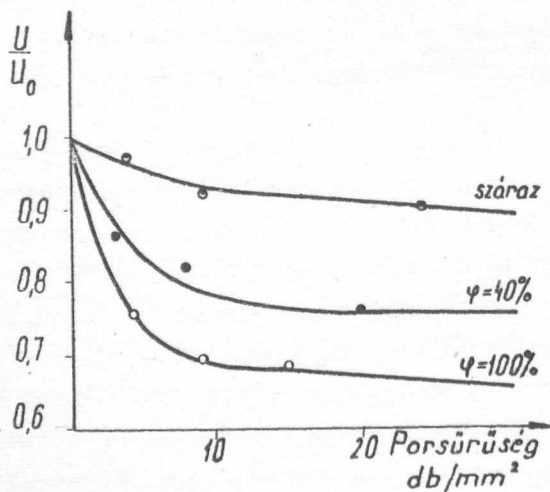
1. ábra

Szilíciumkarbidpor hatása az átütési szilárdságra szabadtéren



2. ábra

Különböző nedvességtartalmu cukorpor hatása az átütési szilárdságra $p=1$ ata levegőben



3. ábra

Különböző nedvességtartalmu grafitpor hatása az átütési szilárdságra

eredményeket a 2. és 3. ábra tartalmazza. A mérési adatokból kitűnik, hogy a nedves por jelenléte nagymértékben - esetenként 35 %-kal is - csökkentheti az átütési feszültséget, míg a száraz por hatására csak max. 10 %-kal csökkent az átütési feszültség.

A mérési eredmények rámutatnak a porszemcsék fajlagos ellenállásának hatására. Amíg a por jó szigetelő - mint SiC esetében - addig az átütési szilárdságra csak max. 5 %-kon belül van hatása. Ha azonban a por vezetőképessége nő - mint cukorpor esetében, aminek fajlagos ellenállása ugyan nagy, de erősen nedvszívó, és emiatt vezetővé válik vagy egyenesen vezetőképes |grafit| - a porszemek mint csucskok hatnak, amelyek helyi tértöltésre vezetnek, és az átütés már kisebb feszültségértéknél is fellép [1]. Ez a feszültségcsökkenés már "száraz" grafitpor esetében is eléri a 10 %-ot.

c/ Mérések különböző polaritású poros elektród esetén

A fentiekben közölt mérési eredmények negatív polaritású poros elektródra vonatkoznak. Méréseinket megismételtük teljes fedésbe vitt grafitporos elektróddal - amikor is a szemcsesűrűség nagyobb volt, mint 50 db/mm^2 - különböző polaritás és nedvességtartalom mellett. A mért U/U_0 értékeket a II. táblázat tartalmazza.

II. táblázat

	U/U_0	
	a poros elektród polaritása pozitív	negatív
"Légnedves" por	0,76	0,75
"Nedves" por	0,70	0,65

A mérési adatok szerint a polaritásváltás hatása elsősorban a nedves porok esetében mutatkozik meg, de ott sem nagyobb az eltérése 5 %-nál. Jól megfigyelhető, hogy míg negatív töltésű poros elektród esetében csak az átütésekkel felkavart por egy része rakódik le a másik elektródra, addig a pozitív töltésű poros elektródnál már a térerősség hatására átütés előtt nagy mennyiségű por szivódik a negatív töltésű elektródra, ami a mérések kiértékelését megnehezíti.

d/ A nyomásfüggés vizsgálata

Méréseinket megismételtük teljes fedésbe felvitt grafitporral, nyomás alatt, mindkét polarításban. Különböző nedvességtartalmu N_2 gázközegben vizsgáltuk meg az átütést $p = 1-10$ ata nyomástartományban. A mérések adatai szerint az U/U_0 viszony a nyomástól független, kizárólag a gáz nedvességtartalmától függ. Az U/U_0 értékeit a nedvességtartalom függvényében a III. táblázat tartalmazza.

III. táblázat

P ata	ψ %	U kV	A poros elektród polaritása			
			pozitív		negatív	
			U, kV	U/U_0	U kV	U/U_0
1	5	4,7	4,3	0,915	4,3	0,915
	30	4,1	3,1	0,755	3,1	0,755
	100	3,8	2,7	0,710	2,4	0,632
6	5	26,6	24,4	0,92	24,2	0,91
	30	22,6	17,2	0,76	16,7	0,74
	100	20,6	14,2	0,69	13,4	0,65
10	5	37,8	34,4	0,91	34,8	0,92
	30	31,8	24,2	0,76	23,8	0,75
	100	28,9	20,5	0,71	18,5	0,64

Az eredmények teljes egyezést mutatnak a "száraz", "légnedves" és "nedves" állapottal jellemzett porokkal 1 ata levegőben végzett mérési eredményekkel, amiből arra következtetünk, hogy 0-10 ata tartományban nem lép fel másfajta mechanizmus az átütés kialakulásában.

Összefoglalás

A mérések során nyert eredményeket összevetve a pormentes elektródok felületi egyenetlenségéből eredő átütési feszültség-csökkenéssel [5], azt tapasztaljuk, hogy míg $h_q = 0,8/u$ alatti felületi egyenetlenségnek semmi szerepe sincs az átütési feszültség romlásában, és csak $h_q = 4/u$ felett tapasztalunk észrevehető feszültségromlást, addig - pl. nedves grafit esetében - 5 db/mm^2 szemcsesűrűség mellett, ami $\sim h_q = 1,5/u$ felületi egyenetlenségnek felel meg, már 25 %-os feszültségcsökkenést észlelünk, és $\sim 30 \text{ db/mm}^2$ szemcsesűrűség növelése után, ami $\sim h_q = 2,5/u$ felületi egyenetlenséget jelent, már nem csökken észrevehetően az átütési feszültség.

Figyelemreméltó a mérésnek az az eredménye, hogy a nyomás növelésével a portartalom hatása az átütési feszültség százalékos romlására nincs befolyással. A mérések tanúsága alapján nyomatékosan rá kell mutatni arra, hogy a porminőség és a nedvességtartalom hatása nem független egymástól; a nedvszívó porfajták a nedvességtartalom növekedésével különösen erőteljesen rontják az átütési szilárdságot.

A mérési eredmények alapján a nyomás alatt működő szalaggenerátor üzemeltetése szempontjából az a következtetés vonható le, hogy törekedni kell egyrészt olymértékű pormentességre, hogy az elektródokra lerakódó por sűrűsége ne haladja meg az $1-2 \text{ db/mm}^2$ értéket; másrészt - ez a jelentősebb és technikai szempontból könnyebben megvalósítható - a gáz szárításával meg kell gátolni a nedves por káros befolyását; az átütési feszültség romlása 5 % relatív nedvességtartalomnál szárazabb gázállapottal lényeges mértékben csökkenthető.

I r o d a l o m

- [1] Gänger, B.: Der elektrische Durchschlag von Gasen 294 /1953/
- [2] Martinussen, H.H., Bozzoli, G.R.: Trans. of the South African Instr. El. Eng. 55, /1964/ April 133.
- [3] Frank, S.: Funkenentladungen in Luft-Staubgemischen. Z. für Physik 87, 323 /1934/
- [4] Frank, S.: Staubeinfluss bei Funkenstrecken. Archiv für Elektrotechnik 28, 485 /1934/
- [5] Vajda, Gy.: The Influence of the Material Properties of Electrodes upon the Breakdown Potential. Acta Technica Hung. XXI. /1958/ 141.

Érkezett: 1968. jan. 9.

KFKI Közl. 16.évf. 2.szám, 1968.

