

Vol. 16. No. 3. 1968

КФКИ

KÖZLEMÉNYEK

ДОБЩЕНИЯ ЦЕНТРАЛЬНОГО ИНСТИТУТА ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
REPORTS OF THE CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS

Szerkeszti: Ádám András
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. jun. 5.

Példányszám: 320
Rotaszám: 3726

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. 3. 1968.

TARTALOM

1. Németh Géza: Bessel-függvények Csebisev-sorfejtése III. . . 147
2. Németh Géza: Az $E_1(x)$ függvény Csebisev-sorfejtése . . . 161
3. Marton Katalin és Varga László: Bizonyos típusu többszörös integrálok kiszámítása Monte Carlo módszerrel . . . 167
4. Huszár Miklós: A Thomas-precesszió . . . 173
5. Jancsó Gábor és Gellai Borbála: Izotóp metilhalogénid molekulák redukált állapotösszehányadosai . . . 181
6. Királyhidi László: Kompenzációs módszer hatásosságáról az elektrolittankos térmérésnél . . . 191
7. Molnár Ferenc és Lebegyev N.A.: Neutronhiányos ritkaföld izotópok előállítása 680 MeV-es protonokkal besugárzott gadolinium és neodimium célananyagból . . . 197
8. Molnár Ferenc és Lebegyev N.A.: Cérium csoportu ritkaföld mátrixok összes ritkaföld szennyezőinek koncentrációja . . . 205

Р е з ю м е

1. Разложения в ряды по полиномам Чебышева бесселевых функций III

Г.Немет

В статье мы занимаемся определением коэффициентов, имеющих в разложении в ряды по полиномам Чебышева бесселевых функций. Для вычисления коэффициентов используются рекурсионные соотношения, приведенные в предыдущих статьях. Сущность метода заключается в том, что, исходя из соответствующих исходных величин, рекурсионные соотношения решаются при соответствующем нормировании обратно. Повторяя вычисление, получаем такой метод для вычисления коэффициентов разложений в ряды, с помощью которого даются сходящиеся последовательности.

После изложения метода и после аргументации сходимости в таблице приведены коэффициенты рядов в случае $\nu = 0,4/0,1/ - 0,1$ и $\nu = 0,1/0,1/ 0,4$ для функций $J_\nu(x)$, $N_\nu(x)$, $I_\nu(x)$ и $K_\nu(x)$ до точности 15 цифров.

2. Разложение в ряды по полиномам Чебышева функции $E_1(x)$

Г.Немет

В работе описывается разложение в ряды по полиномам Чебышева функции $E_1(x)$. С точки зрения на практике эти ряды являются целесообразнее опубликованных в литературе. В случае $0 \leq x \leq a$ коэффициенты чебышевских рядов уменьшаются сильнее — приблизительно на 4^{-n} по отношению к коэффициентам рядов Тейлора. В случае $x \geq a$ вместо известных (расходящихся) асимптотических рядов были определены сходящиеся ряды. Коэффициенты рядов даются в таблице до точности 15 цифров.

3. Вычисление некоторых многомерных интегралов методом Монте Карло

К.Мартон и Л.Варга

Излагается простой метод вычисления интегралов типа

$$I_g = \int_X g(f(x)) dx, \quad (g \in G)$$

где X — n -мерный параллелепипед, $f(x)$ — данная функция, определенная в X , $g(u)$ принадлежит некоторому классу G , состоящему из функций одного переменного. (Функция $f(x)$ и класс функций G должны удовлетворять некоторым условиям).

Метод сводится к тому, что мы преобразуем интегралы I_g в интегралы Стилтеса по одномерному множеству, а интегралы Стилтеса заменим конечными суммами:

$$I_g = \int_F g(u) d\phi(u) \approx \sum_{k=1}^M A_k g(f_k).$$

Коэффициенты A_k определяются методом Монте Карло. Приводится оценка для погрешности, происходящей от замены интегралов конечными суммами, а также для статистической погрешности, возникающей при определении чисел A_k методом Монте Карло.

4. Прецессия Томаса

М.Хусар

При помощи методов теории групп выводится выражение угловой скорости томасовской прецессии.

5. Отношения восстановленных сумм по состояниям молекул галогенидов с изотопами

Г.Янчо и Б.Геллаи

Были определены отношения восстановленных сумм по состояниям молекул / CH_3F , CH_3D , CH_3Br , CH_3I / с изотопами ^{13}C , ^{14}C , D и с изотопами галогенидов при различных температурах. Для расчета были использованы экспериментально определенные величины колебательных частот обычных и дейтеризованных молекул, опубликованные в литературе.

6. Об эффективности метода компенсации при измерении электрического поля в танке, наполненном электролитом

Л.Кирайгиди

В этой работе излагается эффективность метода компенсации, служащего для уменьшения рассеянных ёмкостей, возникающих при измерении электрического поля в танке, наполненном электролитом.

7. Получение нейтронодефицитных редкоземельных изотопов из гадолиниевых и неодимиевых мишеней, облученных протонами с энергией 680 Мэв

Ф.Мольнар и Н.А.Лебедев

Разработан анионообменный метод для группового отделения нейтронодефицитных редкоземельных изотопов из гадолиниевых и неодимиевых мишеней, облученных протонами высоких энергий. Основанием метода является анионообменная абсорбируемость редкоземельных элементов из водно-метанольных растворов нитратов. Редкоземельные изотопы разделяются друг от друга обычным катионообменным методом с использованием в качестве элюента альфа-гидроксиизобутирата.

8. О концентрировании всех редкоземельных примесей редкоземельных матриц цериевой подгруппы

Ф.Мольнар и Н.А.Лебедев

Изучена разделяемость всех редкоземельных примесей редкоземельных матриц цериевой подгруппы. Установлено, что анионообменная хроматография, проведенная из водно-метанольных растворов нитратов, является полезным методом для концентрирования всех редкоземельных примесей неодимиевых и гадолиниевых матриц. Концентрат примесей может быть дальше обработать в зависимости от аналитического метода их определения.

S u m m a r i e s

1. Chebyshev Expansion of Bessel Functions III.

Numerical Method

G. Németh

The coefficients for the expansion of Bessel functions in Chebyshev polynomials are evaluated using the recursion formulae determined in the earlier papers. The recursion formulae are solved in backward direction with suitable initial values and appropriate normalization. Repeating this procedure the method leads to convergent values of the expansion coefficients. The method is described and the convergence proved. The Chebyshev coefficients are listed for the expansion of the functions $J_\nu(x)$, $N_\nu(x)$, $I_\nu(x)$ and $K_\nu(x)$ in the cases $\nu = 0,4/0.1/-0.1$ and $\nu = 0.1/0.1/0.4$, as evaluated to 15 digit accuracy.

2. Chebyshev Expansion of $E_1(x)$ -type Functions

G. Németh

It is shown that for $E_1(x)$ -type functions the expansion in Chebyshev coefficients is more convenient in practice than any of the other usual approximations. The Chebyshev coefficients decrease in the interval $0 \leq x \leq a$ at a rate which is higher by a factor of about 4^{-n} as compared with the equivalent Taylor coefficients. For $x \geq a$ a convergent Chebyshev series is determined which is similar in form to the known /divergent/ asymptotic series. The Chebyshev coefficients evaluated to 15 digit accuracy are listed in tabulated form.

3. Evaluation of Multidimensional Integrals by Monte Carlo Method

K. Marton, I. Varga

A simple method is described for the evaluation of integrals of the form

$$I_g = \int_X g(f(x)) dx, \quad (g \in G)$$

where X is a finite, n -dimensional interval, f is a fixed function defined on X and $g(n)$ is any function of one variable belonging to class G . Function f and class G are both assumed to satisfy some given conditions.

Essentially, the method consists of the transformation of the n -dimensional integral into one-dimensional Stieltjes integral which can be approximated by a finite sum, as

$$I_g = \int_F g(u) d\phi(u) \approx \sum_{k=1}^M A_k g(f_k)$$

and the evaluation of the coefficients A_k by Monte Carlo method.

Estimations are made on the error due to both the approximation of the integrals by finite sums and the Monte Carlo calculation of the coefficients A_k .

4. The Thomas-precession

M. Huszár

The angular velocity of the Thomas precession is evaluated by the use of group theoretical methods.

5. Reduced Partition Function Ratios of Isotopic Methyl Halide Molecules

G. Jancsó and Barbara Gellai

The reduced partition function ratios have been evaluated for the methyl halide molecules CH_3F , CH_3Cl , CH_3I from the frequency shifts on isotopic substitution with ^{13}C , ^{14}C , D and various halogen isotopes as substituents. The calculations were performed for different temperatures using the reported data on the vibrational frequencies observed on methyl halides and their deuterated species.

6. A Method of Balancing Out the Effect of Stray Capacitance in Electrolyte Tanks

L. Királyhidi

An efficient method is described by which the effect of stray capacitance can be balanced out and the accuracy of field measurements in electrolyte tanks is substantially improved.

7. Production of Neutron Deficient Rare Earth Isotopes from Gadolinium and Neodymium Irradiated with 680 MeV Protons

F. Molnár, N.A. Lebedev

For the isolation of neutron deficient rare earth isotopes as a group from gadolinium and neodymium targets irradiated with high energy protons, an anion exchange method was developed. The method is based on the anion exchange adsorbability of the rare earth elements from aqueous methanol solution of nitrates. The separation of the rare earth isotopes from one another can be carried out by conventional cation exchange method using ammonium α -hydroxyisobutyrate as eluent.

8. Concentration of All Rare Earth Impurities in Rare Earth Matrices of the Cerium Subgroup

F. Molnár, N.A. Lebedev

The separability of all the rare earth impurities from cerium sub-group matrices was investigated. It was found that anion exchange chromatography, carried out with aqueous-methanol solutions of nitrates, provides a useful method for the concentration of all the rare earth impurities in neodymium and gadolinium matrices. The concentrate of the impurities can be processed further as required by the method chosen for their analytical determination.

BESSEL-FÜGGVÉNYEK CSEBISEV-SORFEJTÉSE III.

Numerikus módszer

Irtta: Németh Géza

Összefoglalás

A dolgozatban a Bessel-függvények Csebisev-polinomok szerinti sorfejtésében szereplő együtthatók meghatározásával foglalkozunk. Az együtthatók kiszámításánál az előző cikkeinkben levezetett rekurziós képleteket alkalmazzuk. A módszer lényege abban áll, hogy a rekurziós képleteket alkalmas kezdőértékekkel indulva csökkenő indexértékek irányában oldjuk meg, megfelelő normálás mellett. Egyre távolabbi kezdőértékekkel ismételve a számítást, a módszer a sorfejtési együtthatókhoz konvergáló értékeket szolgáltat.

A módszer ismertetése és konvergenciájának bizonyítása után a $J_\nu(x)$, $N_\nu(x)$, $I_\nu(x)$ és $K_\nu(x)$ függvényekre a sorfejtések együtthatóit táblázatosan adjuk meg 15 decimális jegyre $\nu = -0.4(0.1)-0.1$ és $\nu = 0.1(0.1)0.4$ esetére.

Bevezetés

Előző cikkünkben [11] a Bessel-függvények Csebisev-sorfejtési együtthatóira rekurziós képletet vezettünk le. Ebben a cikkben azzal foglalkozunk, hogy milyen módon lehet felhasználni ezeket a képleteket egy numerikus számításnál. A kifejtendő módszer /Miller-módszer [5] / lényege abban áll, hogy a rekurziós képletben a számítást csökkenő indexértékek mentén végezzük el. Be fogjuk bizonyítani, hogy alkalmas módon ismételve a számítást, a sorfejtési együtthatókhoz konvergáló sorozatokat nyerhetünk a módszer alkalmazásával. A számításokat a $0 \leq x \leq a$ intervallumra vonatkozó képleteinkkel kapcsolatban végezzük el.

Számításaink eredményét táblázatosan adjuk meg. Mivel nagytömegű táblázatról van szó, úgy tűnt célszerűnek, hogy a táblázatos anyag felét ebben a cikkben, a másik felét a következőben publikáljuk.

7. Miller módszere az együtthatók számítására

A [7] - [8] munkáinkban megmutattuk, hogy a

$$J_\nu(x) = \frac{(x/2)^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} \left\{ C_0^{(\nu)}(a) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n C_n^{(\nu)}(a) T_{2n}(x/a) \right\} \quad / 7.1 /$$

ill. az

$$I_\nu(x) = \frac{(x/2)^\nu}{\Gamma(\nu + 1)} \left\{ d_0^{(\nu)}(a) + \sum_{n=1}^{\infty} d_n^{(\nu)}(a) T_{2n}(x/a) \right\} \quad /7.2/$$

sorfejtésekben szereplő $C_n^{(\nu)}$ és $d_n^{(\nu)}$ számok kielégítik a

$$\frac{C_n - C_{n+2}}{n+1} + \frac{C_{n+1} - C_{n+3}}{n+2} = \frac{16}{a^2} \left[(n+1+\nu) C_{n+1} - (n+2-\nu) C_{n+2} \right] /7.3/$$

$$\frac{d_n - d_{n+2}}{n+1} - \frac{d_{n+1} - d_{n+3}}{n+2} = \frac{16}{a^2} \left[(n+1+\nu) d_{n+1} + (n+2-\nu) d_{n+2} \right] /7.4/$$

rekurziós képleteket.

E képletekből látható, hogy ha pl. ismernénk C_0, C_1, C_2 értéket, C_3 kiszámítható lenne. Tovább menve C_1, C_2, C_3 ismeretében C_4 számítható, stb. Ez volna a szokásos számítási módszer. Jelenleg ez nem használható több okból is. Először is nem tudunk meghatározni 3 kezdő értéket egyszerű módon. Másodsor, ha van is 3 kezdőérték, korlátozott pontosságuk miatt csak néhány lépésig használható a /7.3/ képlet /a jó jegyek száma lépésről lépésre csökken/. Ez utóbbi jelenség a szokásos módszer instabilitásából ered.

A /7.3/ képletet mégis fel lehet használni az együtthatók kiszámítására. A gondolatmenet a következő: mivel a C_n számok nagy n -re gyorsan csökkennek, a $C_{N+1}, C_{N+2} \dots$ stb. kicsiny C_N -hez képest. Így C_N és $C_{N+1} = C_{N+2} = \dots = 0$ ismeretében visszafelé ($n = N-1, N-2, \dots, 2, 1, 0$) alkalmazhatjuk a /7.1/ formulát. Sőt, ha C_N -t alkalmasan választjuk meg, pl. 1-nek /ezt általában meg is kell tenni, mivel nem ismerjük pontos értékét/, akkor az a szorzó, amivel az igazi értéktől C_N eltér, a rekurzió folyamán minden egyes tagban szerepelni fog. A nyert sorozatot tehát ezzel a számmal le kell osztani, normalizálni kell. Ezt a módszert először J.C.P. Miller [5] alkalmazta /egy egyszerűbb típusu egyenletre/, ezért röviden Miller-módszernek fogjuk hívni.

Az előzőkhöz hozzá kell tenni, hogy a Miller-módszer nem adja a pontos értéket, de ismételve a számítást $N_1 > N$ -el, a közelítő értékek pontossága növelhető. Ilyen értelemben lehet beszélni a Miller-módszer konvergenciájáról.

A Miller-módszer numerikus megvalósítása többféle lehet, a kezdőérték kiválasztása és a normalizáció szerint. A normalizációt leggyakrabban egy

azonosság segítségével hajtjuk végre. Így jelöljük $\gamma_n - l$ ($n=0,1,2 \dots N$) azt a sorozatot, amely a $\gamma_N=1, \gamma_{N+1}=\gamma_{N+2}=\dots=0$ kezdőértékekből indul ki. Legyen

$$C = \gamma_0 + 2 \sum_{k=1}^N \gamma_k \quad /7.5/$$

Ezzel a C -vel normáljuk a γ_n számokat. Az így nyert

$$\bar{c}_n = \frac{\gamma_n}{C} \quad n = 0,1,2, \dots, N \quad /7.6/$$

számokat tekintjük C_n közelítésének.

Megjegyezzük, hogy a pontos C_n számokra

$$C_0 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} C_k = 1 \quad /7.7/$$

azonosság áll fenn. Ez annak a következménye, hogy

$$\lim_{x \rightarrow 0} \Gamma(1+\nu) \left(\frac{2}{x}\right)^\nu J_\nu(x) = 1 \quad /7.8/$$

A /7.4/ egyenletnél

$$d_0 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k d_k = 1$$

egyenlőség áll fenn, ezért /7.4/ megoldásánál a normalizálásakor / a /7.6/-tal ellentétben/

$$C^x = \gamma_0^x + 2 \sum_{k=1}^N (-1)^k \gamma_k^x \quad /7.9/$$

kifejezéssel kell osztani.

Végezetül meg kell jegyeznünk, hogy az itt elmondottak nem bizonyító jellegűek. Természetesen, azt várni /mivel nincs bizonyítva/, hogy bármely típusú rekurziós képletre a Miller-módszer sikeresen alkalmazható, nem lehet.

Lényegében minden típusra külön be kell bizonyítani a Miller-módszer konvergenciáját. Ez ugyan nehéz matematikai analízisre vezet, de sok típusra elvégezhető /sőt, már el is van végezve, pl. [12], [13] ./

8. A Miller-módszer konvergenciája $0 \leq x \leq a$ esetére

A Miller-módszer konvergenciájának megállapításához meg kell vizsgálni az

$$A_0 y_n + A_1 y_{n+1} + A_2 y_{n+2} + A_3 y_{n+3} = 0$$

$$A_0 = \frac{1}{n+1}, \quad A_1 = \frac{1}{n+2} - \frac{16}{a^2} (n+1+v) \quad /8.1/$$

$$A_2 = -\frac{1}{n+1} + \frac{16}{a^2} (n+2-v), \quad A_3 = -\frac{1}{n+2}$$

differenciaegyenlet /rekurziós képlet/ megoldásait. /Látható, hogy /8.1/ a /7.3/ átírása a $c_n = y_n$ helyettesítéssel./ Mivel /8.1/ lineáris differenciaegyenlet, három páronként független megoldása segítségével az általános megoldása felépíthető.

A /8.1/ differenciaegyenlet egy megoldása /2.3/ sorbafejtésével adható meg

$$y_n^{(1)}(\lambda) = \frac{\Gamma(v+1)}{\Gamma(n+v+1)} \frac{(\lambda/4)^n}{n!} {}_1F_2 \left(n + \frac{1}{2}; n+v+1, 2n+1; -\lambda \right) \quad /8.2/$$

ahol $\lambda = \frac{a^2}{4}$ /és az egyszerűség kedvéért feltettük, hogy v nem zéró vagy egész szám/. A /8.2/ sorból látható, hogy $y_n^{(1)}(\lambda)$ kielégíti a

$$\left[(\delta-n)(\delta+v)(\delta+n) + \lambda \left(\delta + \frac{1}{2} \right) \right] y(\lambda) = 0 \quad /8.3/$$

$$\delta = \frac{d}{d\lambda}$$

differenciálegyenletet. Ennek az egyenletnek a megoldásai /konstans szorzótól eltekintve/ a /8.1/ egyenletnek is megoldásai. A /8.3/ egyenlet megoldásait Frobenius módszerével határoztuk meg /a részletes számítást elhagytuk/:

$$y_n^{(2)}(\lambda) = \frac{\Gamma(n+v)}{\Gamma(n+1-v)} \lambda^{-v} {}_1F_2 \left(-v + \frac{1}{2}; -v-n+1, -v+n+1; -\lambda \right) \quad /8.4/$$

$$y_n^{(3)}(\lambda) = -\frac{\Gamma(n-v)\Gamma(n)}{2\Gamma(-v)} \left(\frac{\lambda}{4} \right)^n \sum_{k=0}^{2n-1} (-1)^k \frac{\lambda^k}{k!} \frac{(-n + \frac{1}{2})_k}{(-2n+1)_k (-n+v+1)_k} +$$

$$+ \frac{\Gamma(v+1)}{\Gamma(n+v+1)} \frac{(\lambda/4)^n}{n!} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\lambda^k}{k!} \frac{(n + \frac{1}{2})_k}{(2n+1)_k (n+v+1)_k} L_k^{(n)} \quad /8.5/$$

Ahol a

$$L_k^{(n)} = \ln \lambda + \psi(k+n+\frac{1}{2}) - \psi(k+1) - \psi(k+2n+1) - \psi(k+n+v+1)$$

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \left\{ \ln \Gamma(x) \right\} .$$

A /8.1/ egyenlet általános megoldása /8.2/, /8.4/, /8.5/ segítségével a következő:

$$y_n = C_1 y_n^{(1)} + C_2 y_n^{(2)} + C_3 y_n^{(3)} \quad /8.6/$$

ahol C_1, C_2, C_3 n-től független konstansokat jelölnek. Esetünkben a Miller-módszer alkalmazásánál úgy járunk el, hogy azt az \bar{y}_n sorozatot határozzuk meg, amelyre

$$\bar{y}_N = 1, \quad \bar{y}_{N+1} = 0, \quad \bar{y}_{N+2} = 0 \quad /8.7/$$

majd ezt normalizáljuk:

$$C_n^{(N)} = \bar{y}_n / (\bar{y}_0 + 2 \sum_{k=1}^N \bar{y}_k) \quad /8.8/$$

Azt kell kimutatnunk, hogy

$$\lim_{N \rightarrow \infty} C_n^{(N)} = y_n^{(1)} \quad /8.9/$$

Ehhez először határozzuk meg \bar{y}_n -t. A /8.7/ kezdőfeltételt felhasználva C_1, C_2, C_3 -ra lineáris egyenletrendszer adódik

$$C_1 \bar{y}_N^{(1)} + C_2 \bar{y}_N^{(2)} + C_3 \bar{y}_N^{(3)} = 1$$

$$C_1 \bar{y}_{N+1}^{(1)} + C_2 \bar{y}_{N+1}^{(2)} + C_3 \bar{y}_{N+1}^{(3)} = 0 \quad /8.10/$$

$$C_1 \bar{y}_{N+2}^{(1)} + C_2 \bar{y}_{N+2}^{(2)} + C_3 \bar{y}_{N+2}^{(3)} = 0$$

Ebből az egyenletből

$$C_1 D = y_{N+1}^{(2)} y_{N+2}^{(3)} - y_{N+2}^{(2)} y_{N+1}^{(3)}$$

$$C_2 D = y_{N+1}^{(3)} y_{N+2}^{(1)} - y_{N+2}^{(3)} y_{N+1}^{(1)} \quad /8.11/$$

$$C_3 D = y_{N+1}^{(1)} y_{N+2}^{(2)} - y_{N+2}^{(1)} y_{N+1}^{(2)}$$

$$D = \begin{vmatrix} Y_N^{(1)} & Y_N^{(2)} & Y_N^{(3)} \\ Y_{N+1}^{(1)} & Y_{N+1}^{(2)} & Y_{N+1}^{(3)} \\ Y_{N+2}^{(1)} & Y_{N+2}^{(2)} & Y_{N+2}^{(3)} \end{vmatrix} \quad /8.12/$$

A továbbiakban nem lesz szükségünk C_1, C_2, C_3 pontos alakjára, elégséges lesz, az $N \rightarrow \infty$ aszimptotikus kifejezésük ismerete. Ezek meghatározásához fel kell használni $Y_N^{(i)}$ $i = 1, 2, 3$ aszimptotikáit. Azok /8.2/, /8.4/ és /8.5/ből közvetlenül adódnak:

$$Y_N^{(1)} \sim \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(N+\nu+1)} \frac{(\lambda/4)^N}{N!}$$

$$Y_N^{(2)} \sim \frac{\Gamma(N+\nu)}{\Gamma(N+1-\nu)} \quad N \rightarrow \infty \quad /8.13/$$

$$Y_N^{(3)} \sim - \frac{\Gamma(N-\nu) \Gamma(N)}{2\Gamma(-\nu)} (4/\lambda)^N$$

A /8.13/ aszimptotikákkal

$$D \sim - \frac{\Gamma(1+\nu)}{2\Gamma(-\nu)} \left(\frac{4}{\lambda}\right)^2 N \quad N \rightarrow \infty \quad /8.14/$$

azonban $D = D(N)$ N függvényeként a

$$D(N+1) = \frac{N+2}{N+1} D(N) \quad /8.15/$$

egyenlet megoldása, amelyből

$$D = D(N) = - \frac{\Gamma(1+\nu)}{2\Gamma(-\nu)} \left(\frac{4}{\lambda}\right)^2 (N+1) \quad /8.16/$$

Ebből következik, hogy /8.10/ rendszer mindig megoldható. A /8.13/ aszimptotikákkal C_1, C_2, C_3 az alábbi lesz

$$C_1(N) \sim A_1 \Gamma(N+1+\nu) \Gamma(N+1) (4/\lambda)^N$$

$$C_2(N) \sim A_2 N^{-(1+2\nu)} \quad N \rightarrow \infty \quad /8.17/$$

$$C_3(N) \sim A_3 \frac{(\lambda/4)^N}{\Gamma(N+3-\nu)\Gamma(N+3)} \quad / A_i, i=1,2,3 \text{ konstansok}/$$

Hogy felhasználhassuk ezeket az aszimptotikákat, előzőleg alakítsuk át /8.8/-at a következőképp:

$$C_n^{(N)} = (Y_n^{(1)} + \frac{C_2(N)}{C_1(N)} Y_n^{(2)} + \frac{C_3(N)}{C_1(N)} Y_n^{(3)}) / \Omega \quad /8.18/$$

ahol

$$\Omega = S_1^{(N)} + \frac{C_2(N)}{C_1(N)} S_2^{(N)} + \frac{C_3(N)}{C_1(N)} S_3^{(N)}$$

$$S_i^{(N)} = Y_0^{(i)} + 2 \sum_{k=1}^N Y_k^{(i)}, \quad i = 1, 2, 3 \quad /8.19/$$

A /8.17/ képletekből adódóan $N \rightarrow \infty$ -re C_2/C_1 és C_3/C_1 egyaránt zérushoz tartanak. A /8.18/ számlálójának a határértéke így $Y_n^{(1)}$. Vizsgáljuk most $S_2^{(N)}$ és $S_3^{(N)}$ viselkedését. A /8.13/ képletek alapján

$$S_2^{(N)} \sim \begin{cases} B_1 N^{2\nu} & \text{ha } \nu > 0 \\ B_2 & \text{ha } \nu < 0 \end{cases} \quad N \rightarrow \infty \quad /8.20/$$

$$S_3^{(N)} \sim B_3 \Gamma(N-\nu) \Gamma(N) (4/\lambda)^N \quad N \rightarrow \infty \quad /8.21/$$

Igy /8.20/ és /8.21/ alapján $C_2/C_1 S_2^{(N)}$ és $C_3/C_1 S_3^{(N)}$ szintén zéróhoz tartanak $N \rightarrow \infty$ esetén. Hátra van még kiszámítani a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_1^{(N)} = Y_0^{(1)} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} Y_k^{(1)} = S$$

határértéket.

Írjuk fel S -t /2.4/ segítségével

$$S = 2 \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu+\frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^1 (1-t^2)^{\nu-\frac{1}{2}} \left\{ J_0(at) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_{2k}(at) \right\} dt, \nu > -\frac{1}{2}$$

A kapcsos zárójelben álló rész azonosan 1 / [14] /, ezért

$$S = 2 \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu+\frac{1}{2})\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^1 (1-t^2)^{\nu-\frac{1}{2}} dt = 1$$

Ezzel bebizonyítottuk a kívánt /8.9/ relációt. Analóg módon lehet bebizonyítani a /7.4/ egyenlet esetén is a Miller-módszer konvergenciáját /sőt, ha nem a valós vagy a képzetes tengely mentén végezzük el a Csebisev-polinomok szerinti sorfejtést, hanem valamely más egyenesen, az annak megfelelő differenciaegyenletre is alkalmazhatjuk sikeresen a Miller-módszert/.

A bizonyítás lényeges vonása az volt, hogy a differenciaegyenletnek van 3 aszimptotikusan különböző viselkedésű megoldása. A Miller-módszer ezek közül azt szolgáltatta, amelyet a többiek dominálnak. Nyilvánvaló, hogy olyan esetben, amikor ez nem áll fenn, további megfontolások szükségesek, és a számítási sémát módosítani kell.

/ A cikkhez tartozó táblázatokat a következő oldalakon közöljük. /

I r o d a l o m

- [11] Németh G.: Bessel-függvények Csebisev-sorfejtése II.
KFKI Közl., 14, 299-309 /1966/
- [12] Gautschi, W.: Recursive Computation of Certain Integrals.
J.Assoc. Comput. Mach. 8, 21-40 /1961/
- [13] Olver, F.W.J.: Error Analysis of Miller's Recurrence Algorithm.
Math. of Comput. 18, /1964/
- [14] Erdélyi A.: Higher Transcendental Functions II., McGraw Hill,
New York, pp. 102 /1953/

Érkezett: 1968. márc. 27.

KFKI Közl., 16.évf. 3.szám, 1968.

$$J_{\nu}(x) = \frac{(x/2)^{\nu}}{\Gamma(1+\nu)} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k C_k^{(\nu)} T_{2k}(x/4) \quad 0 \leq x \leq 4$$

<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(0.1)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>.101657499593375</td></tr> <tr><td>1</td><td>646999948601520</td></tr> <tr><td>2</td><td>221116052896531</td></tr> <tr><td>3</td><td>28238955265430</td></tr> <tr><td>4</td><td>1905320461766</td></tr> <tr><td>5</td><td>79885757328</td></tr> <tr><td>6</td><td>2288935234</td></tr> <tr><td>7</td><td>47722194</td></tr> <tr><td>8</td><td>757075</td></tr> <tr><td>9</td><td>9450</td></tr> <tr><td>10</td><td>95</td></tr> <tr><td>11</td><td>1</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(0.1)}$	0	.101657499593375	1	646999948601520	2	221116052896531	3	28238955265430	4	1905320461766	5	79885757328	6	2288935234	7	47722194	8	757075	9	9450	10	95	11	1	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(-0.1)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>-.009236478907152</td></tr> <tr><td>1</td><td>683303145608290</td></tr> <tr><td>2</td><td>283296824214166</td></tr> <tr><td>3</td><td>39664581155924</td></tr> <tr><td>4</td><td>2843377622068</td></tr> <tr><td>5</td><td>124761538585</td></tr> <tr><td>6</td><td>3707747319</td></tr> <tr><td>7</td><td>79705774</td></tr> <tr><td>8</td><td>1298268</td></tr> <tr><td>9</td><td>16586</td></tr> <tr><td>10</td><td>171</td></tr> <tr><td>11</td><td>1</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(-0.1)}$	0	-.009236478907152	1	683303145608290	2	283296824214166	3	39664581155924	4	2843377622068	5	124761538585	6	3707747319	7	79705774	8	1298268	9	16586	10	171	11	1
k	$C_k^{(0.1)}$																																																				
0	.101657499593375																																																				
1	646999948601520																																																				
2	221116052896531																																																				
3	28238955265430																																																				
4	1905320461766																																																				
5	79885757328																																																				
6	2288935234																																																				
7	47722194																																																				
8	757075																																																				
9	9450																																																				
10	95																																																				
11	1																																																				
k	$C_k^{(-0.1)}$																																																				
0	-.009236478907152																																																				
1	683303145608290																																																				
2	283296824214166																																																				
3	39664581155924																																																				
4	2843377622068																																																				
5	124761538585																																																				
6	3707747319																																																				
7	79705774																																																				
8	1298268																																																				
9	16586																																																				
10	171																																																				
11	1																																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(0.2)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>.146990353739324</td></tr> <tr><td>1</td><td>629030845629948</td></tr> <tr><td>2</td><td>198078537520273</td></tr> <tr><td>3</td><td>24243891107803</td></tr> <tr><td>4</td><td>1589306975236</td></tr> <tr><td>5</td><td>65191678225</td></tr> <tr><td>6</td><td>1835059643</td></tr> <tr><td>7</td><td>37691914</td></tr> <tr><td>8</td><td>590276</td></tr> <tr><td>9</td><td>7285</td></tr> <tr><td>10</td><td>73</td></tr> <tr><td>11</td><td>1</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(0.2)}$	0	.146990353739324	1	629030845629948	2	198078537520273	3	24243891107803	4	1589306975236	5	65191678225	6	1835059643	7	37691914	8	590276	9	7285	10	73	11	1	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(-0.2)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>-.078790335221089</td></tr> <tr><td>1</td><td>700540759269131</td></tr> <tr><td>2</td><td>326474753758453</td></tr> <tr><td>3</td><td>48053612574452</td></tr> <tr><td>4</td><td>3556484219565</td></tr> <tr><td>5</td><td>159779347805</td></tr> <tr><td>6</td><td>4838624055</td></tr> <tr><td>7</td><td>105660484</td></tr> <tr><td>8</td><td>1744358</td></tr> <tr><td>9</td><td>22550</td></tr> <tr><td>10</td><td>235</td></tr> <tr><td>11</td><td>2</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(-0.2)}$	0	-.078790335221089	1	700540759269131	2	326474753758453	3	48053612574452	4	3556484219565	5	159779347805	6	4838624055	7	105660484	8	1744358	9	22550	10	235	11	2
k	$C_k^{(0.2)}$																																																				
0	.146990353739324																																																				
1	629030845629948																																																				
2	198078537520273																																																				
3	24243891107803																																																				
4	1589306975236																																																				
5	65191678225																																																				
6	1835059643																																																				
7	37691914																																																				
8	590276																																																				
9	7285																																																				
10	73																																																				
11	1																																																				
k	$C_k^{(-0.2)}$																																																				
0	-.078790335221089																																																				
1	700540759269131																																																				
2	326474753758453																																																				
3	48053612574452																																																				
4	3556484219565																																																				
5	159779347805																																																				
6	4838624055																																																				
7	105660484																																																				
8	1744358																																																				
9	22550																																																				
10	235																																																				
11	2																																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(0.3)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>.187305083275381</td></tr> <tr><td>1</td><td>611539133612881</td></tr> <tr><td>2</td><td>178751414879526</td></tr> <tr><td>3</td><td>21009700152252</td></tr> <tr><td>4</td><td>1339373634981</td></tr> <tr><td>5</td><td>53776266304</td></tr> <tr><td>6</td><td>1487598458</td></tr> <tr><td>7</td><td>30108930</td></tr> <tr><td>8</td><td>465549</td></tr> <tr><td>9</td><td>5681</td></tr> <tr><td>10</td><td>56</td></tr> <tr><td>11</td><td>0</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(0.3)}$	0	.187305083275381	1	611539133612881	2	178751414879526	3	21009700152252	4	1339373634981	5	53776266304	6	1487598458	7	30108930	8	465549	9	5681	10	56	11	0	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(-0.3)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>-.162098674671987</td></tr> <tr><td>1</td><td>715685582208357</td></tr> <tr><td>2</td><td>382312891660340</td></tr> <tr><td>3</td><td>59344586745595</td></tr> <tr><td>4</td><td>4540046168141</td></tr> <tr><td>5</td><td>208971308118</td></tr> <tr><td>6</td><td>6451019502</td></tr> <tr><td>7</td><td>143134740</td></tr> <tr><td>8</td><td>2395522</td></tr> <tr><td>9</td><td>31340</td></tr> <tr><td>10</td><td>329</td></tr> <tr><td>11</td><td>3</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(-0.3)}$	0	-.162098674671987	1	715685582208357	2	382312891660340	3	59344586745595	4	4540046168141	5	208971308118	6	6451019502	7	143134740	8	2395522	9	31340	10	329	11	3
k	$C_k^{(0.3)}$																																																				
0	.187305083275381																																																				
1	611539133612881																																																				
2	178751414879526																																																				
3	21009700152252																																																				
4	1339373634981																																																				
5	53776266304																																																				
6	1487598458																																																				
7	30108930																																																				
8	465549																																																				
9	5681																																																				
10	56																																																				
11	0																																																				
k	$C_k^{(-0.3)}$																																																				
0	-.162098674671987																																																				
1	715685582208357																																																				
2	382312891660340																																																				
3	59344586745595																																																				
4	4540046168141																																																				
5	208971308118																																																				
6	6451019502																																																				
7	143134740																																																				
8	2395522																																																				
9	31340																																																				
10	329																																																				
11	3																																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(0.4)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>.223479360647814</td></tr> <tr><td>1</td><td>594645862117875</td></tr> <tr><td>2</td><td>162334061013882</td></tr> <tr><td>3</td><td>18355763995740</td></tr> <tr><td>4</td><td>1138928063905</td></tr> <tr><td>5</td><td>44781707219</td></tr> <tr><td>6</td><td>1217784674</td></tr> <tr><td>7</td><td>24293439</td></tr> <tr><td>8</td><td>370932</td></tr> <tr><td>9</td><td>4476</td></tr> <tr><td>10</td><td>44</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(0.4)}$	0	.223479360647814	1	594645862117875	2	162334061013882	3	18355763995740	4	1138928063905	5	44781707219	6	1217784674	7	24293439	8	370932	9	4476	10	44	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$C_k^{(-0.4)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>-.264891161368625</td></tr> <tr><td>1</td><td>726427841201312</td></tr> <tr><td>2</td><td>457125573684471</td></tr> <tr><td>3</td><td>75101392601755</td></tr> <tr><td>4</td><td>5946697436248</td></tr> <tr><td>5</td><td>280619419092</td></tr> <tr><td>6</td><td>8834377594</td></tr> <tr><td>7</td><td>199222171</td></tr> <tr><td>8</td><td>3380735</td></tr> <tr><td>9</td><td>44768</td></tr> <tr><td>10</td><td>476</td></tr> <tr><td>11</td><td>4</td></tr> </tbody> </table>	k	$C_k^{(-0.4)}$	0	-.264891161368625	1	726427841201312	2	457125573684471	3	75101392601755	4	5946697436248	5	280619419092	6	8834377594	7	199222171	8	3380735	9	44768	10	476	11	4		
k	$C_k^{(0.4)}$																																																				
0	.223479360647814																																																				
1	594645862117875																																																				
2	162334061013882																																																				
3	18355763995740																																																				
4	1138928063905																																																				
5	44781707219																																																				
6	1217784674																																																				
7	24293439																																																				
8	370932																																																				
9	4476																																																				
10	44																																																				
k	$C_k^{(-0.4)}$																																																				
0	-.264891161368625																																																				
1	726427841201312																																																				
2	457125573684471																																																				
3	75101392601755																																																				
4	5946697436248																																																				
5	280619419092																																																				
6	8834377594																																																				
7	199222171																																																				
8	3380735																																																				
9	44768																																																				
10	476																																																				
11	4																																																				

$$P_{\nu}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k A_{2k}^{(\nu)} T_{2k}(4/x), \quad x \geq 4$$

$$Q_{\nu}(x) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k A_{2k+1}^{(\nu)} T_{2k+1}(4/x), \quad x \geq 4$$

k	$A_k^{(0.1)}$	k	$A_k^{(0.2)}$
0	0.998028314395654	0	0.998297128017559
1	29279564594540	1	25630756555533
2	1932719467653	2	1669454464660
3	226186321766	3	194460690268
4	36968478420	4	31708298274
5	7569008690	5	6482888858
6	1826166782	6	1562658217
7	499625661	7	427246995
8	151038058	8	129093305
9	49530355	9	42317464
10	17382341	10	14846380
1	6461335	1	5517335
2	2523656	2	2154451
3	1029116	3	878397
4	435900	4	372001
5	190967	5	162950
6	86229	6	73569
7	40011	7	34133
8	19031	8	16233
9	9258	9	7897
20	4598	20	3922
1	2328	1	1985
2	1199	2	1023
3	628	3	536
4	334	4	285
5	180	5	154
6	98	6	84
7	54	7	46
8	30	8	26
9	17	9	15
30	10	30	8
1	6	1	5
2	3	2	3
3	2	3	2
4	1	4	1
5	1	5	1

k	$A_k^{(0.3)}$	k	$A_k^{(0.4)}$
0	0.998730996073592	0	0.999308612162643
1	19542219731152	1	11003402116840
2	1244392797909	2	678200474040
3	143811055128	3	77509410902
4	23357211757	4	12519129993
5	4764255766	5	2545153332
6	1146602773	6	611197598
7	313144996	7	166662447
8	94538429	8	50256669
9	30970077	9	16448736
10	10859670	10	5763543
1	4033966	1	2139656
2	1574671	2	834800
3	641815	3	340107
4	271736	4	143943
5	119003	5	63017
6	53717	6	28437
7	24918	7	13188
8	11849	8	6269
9	5763	9	3049
20	2862	20	1514
1	1448	1	766
2	746	2	394
3	391	3	207
4	208	4	110
5	112	5	59
6	61	6	32
7	34	7	18
8	20	8	10
9	11	9	6
30	6	30	3
1	4	1	2
2	2	2	1
3	1	3	1
4	1		

$$I_{\nu}(x) = \frac{(x/2)^{\nu}}{\Gamma(1+\nu)} \sum_{k=i}^{\infty} d_k T_{2k}^{(\nu)}(x/4), \quad x \leq 4$$

<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(0.1)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>4.697249647040393</td></tr> <tr><td>1</td><td>4.432934002736957</td></tr> <tr><td>2</td><td>806656589703016</td></tr> <tr><td>3</td><td>74998440874189</td></tr> <tr><td>4</td><td>4176197643287</td></tr> <tr><td>5</td><td>153934869734</td></tr> <tr><td>6</td><td>4021133576</td></tr> <tr><td>7</td><td>78200521</td></tr> <tr><td>8</td><td>1175035</td></tr> <tr><td>9</td><td>14043</td></tr> <tr><td>10</td><td>137</td></tr> <tr><td>1</td><td>1</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(0.1)}$	0	4.697249647040393	1	4.432934002736957	2	806656589703016	3	74998440874189	4	4176197643287	5	153934869734	6	4021133576	7	78200521	8	1175035	9	14043	10	137	1	1	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(-0.1)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>5.824238492544194</td></tr> <tr><td>1</td><td>5.852162216654842</td></tr> <tr><td>2</td><td>1.132533217444306</td></tr> <tr><td>3</td><td>110806184611480</td></tr> <tr><td>4</td><td>6436025698578</td></tr> <tr><td>5</td><td>245825233698</td></tr> <tr><td>6</td><td>6621057917</td></tr> <tr><td>7</td><td>132255395</td></tr> <tr><td>8</td><td>2035019</td></tr> <tr><td>9</td><td>24844</td></tr> <tr><td>10</td><td>246</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(-0.1)}$	0	5.824238492544194	1	5.852162216654842	2	1.132533217444306	3	110806184611480	4	6436025698578	5	245825233698	6	6621057917	7	132255395	8	2035019	9	24844	10	246	1	2
k	$d_k^{(0.1)}$																																																				
0	4.697249647040393																																																				
1	4.432934002736957																																																				
2	806656589703016																																																				
3	74998440874189																																																				
4	4176197643287																																																				
5	153934869734																																																				
6	4021133576																																																				
7	78200521																																																				
8	1175035																																																				
9	14043																																																				
10	137																																																				
1	1																																																				
k	$d_k^{(-0.1)}$																																																				
0	5.824238492544194																																																				
1	5.852162216654842																																																				
2	1.132533217444306																																																				
3	110806184611480																																																				
4	6436025698578																																																				
5	245825233698																																																				
6	6621057917																																																				
7	132255395																																																				
8	2035019																																																				
9	24844																																																				
10	246																																																				
1	2																																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(0.2)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>4.292394582119294</td></tr> <tr><td>1</td><td>3.926244247551461</td></tr> <tr><td>2</td><td>693436574040507</td></tr> <tr><td>3</td><td>62896927824632</td></tr> <tr><td>4</td><td>3431176844518</td></tr> <tr><td>5</td><td>124295755267</td></tr> <tr><td>6</td><td>3198619083</td></tr> <tr><td>7</td><td>61393144</td></tr> <tr><td>8</td><td>911782</td></tr> <tr><td>9</td><td>10783</td></tr> <tr><td>10</td><td>104</td></tr> <tr><td>1</td><td>1</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(0.2)}$	0	4.292394582119294	1	3.926244247551461	2	693436574040507	3	62896927824632	4	3431176844518	5	124295755267	6	3198619083	7	61393144	8	911782	9	10783	10	104	1	1	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(-0.2)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>6.632228615174909</td></tr> <tr><td>1</td><td>6.875623606489731</td></tr> <tr><td>2</td><td>1.373477242393583</td></tr> <tr><td>3</td><td>137961267492593</td></tr> <tr><td>4</td><td>8189010752117</td></tr> <tr><td>5</td><td>318535189915</td></tr> <tr><td>6</td><td>8714601769</td></tr> <tr><td>7</td><td>176464827</td></tr> <tr><td>8</td><td>2748270</td></tr> <tr><td>9</td><td>33917</td></tr> <tr><td>10</td><td>340</td></tr> <tr><td>1</td><td>3</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(-0.2)}$	0	6.632228615174909	1	6.875623606489731	2	1.373477242393583	3	137961267492593	4	8189010752117	5	318535189915	6	8714601769	7	176464827	8	2748270	9	33917	10	340	1	3
k	$d_k^{(0.2)}$																																																				
0	4.292394582119294																																																				
1	3.926244247551461																																																				
2	693436574040507																																																				
3	62896927824632																																																				
4	3431176844518																																																				
5	124295755267																																																				
6	3198619083																																																				
7	61393144																																																				
8	911782																																																				
9	10783																																																				
10	104																																																				
1	1																																																				
k	$d_k^{(-0.2)}$																																																				
0	6.632228615174909																																																				
1	6.875623606489731																																																				
2	1.373477242393583																																																				
3	137961267492593																																																				
4	8189010752117																																																				
5	318535189915																																																				
6	8714601769																																																				
7	176464827																																																				
8	2748270																																																				
9	33917																																																				
10	340																																																				
1	3																																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(0.3)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>3.958690583114123</td></tr> <tr><td>1</td><td>3.510223525590263</td></tr> <tr><td>2</td><td>602085343270943</td></tr> <tr><td>3</td><td>53303213331550</td></tr> <tr><td>4</td><td>2849771437941</td></tr> <tr><td>5</td><td>101484145532</td></tr> <tr><td>6</td><td>2573291140</td></tr> <tr><td>7</td><td>48754268</td></tr> <tr><td>8</td><td>715763</td></tr> <tr><td>9</td><td>8377</td></tr> <tr><td>10</td><td>80</td></tr> <tr><td>1</td><td>1</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(0.3)}$	0	3.958690583114123	1	3.510223525590263	2	602085343270943	3	53303213331550	4	2849771437941	5	101484145532	6	2573291140	7	48754268	8	715763	9	8377	10	80	1	1	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(-0.3)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>7.702900232717544</td></tr> <tr><td>1</td><td>8.237358218652153</td></tr> <tr><td>2</td><td>1.699591946978580</td></tr> <tr><td>3</td><td>175365643953620</td></tr> <tr><td>4</td><td>10641889662378</td></tr> <tr><td>5</td><td>421691090688</td></tr> <tr><td>6</td><td>11721240945</td></tr> <tr><td>7</td><td>240650098</td></tr> <tr><td>8</td><td>3793975</td></tr> <tr><td>9</td><td>47337</td></tr> <tr><td>10</td><td>479</td></tr> <tr><td>1</td><td>4</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(-0.3)}$	0	7.702900232717544	1	8.237358218652153	2	1.699591946978580	3	175365643953620	4	10641889662378	5	421691090688	6	11721240945	7	240650098	8	3793975	9	47337	10	479	1	4
k	$d_k^{(0.3)}$																																																				
0	3.958690583114123																																																				
1	3.510223525590263																																																				
2	602085343270943																																																				
3	53303213331550																																																				
4	2849771437941																																																				
5	101484145532																																																				
6	2573291140																																																				
7	48754268																																																				
8	715763																																																				
9	8377																																																				
10	80																																																				
1	1																																																				
k	$d_k^{(-0.3)}$																																																				
0	7.702900232717544																																																				
1	8.237358218652153																																																				
2	1.699591946978580																																																				
3	175365643953620																																																				
4	10641889662378																																																				
5	421691090688																																																				
6	11721240945																																																				
7	240650098																																																				
8	3793975																																																				
9	47337																																																				
10	479																																																				
1	4																																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(0.4)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>3.679768545728182</td></tr> <tr><td>1</td><td>3.163821945375482</td></tr> <tr><td>2</td><td>527334597030117</td></tr> <tr><td>3</td><td>45589114070716</td></tr> <tr><td>4</td><td>2389538441397</td></tr> <tr><td>5</td><td>83674203606</td></tr> <tr><td>6</td><td>2091001192</td></tr> <tr><td>7</td><td>39112258</td></tr> <tr><td>8</td><td>567689</td></tr> <tr><td>9</td><td>6576</td></tr> <tr><td>10</td><td>62</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(0.4)}$	0	3.679768545728182	1	3.163821945375482	2	527334597030117	3	45589114070716	4	2389538441397	5	83674203606	6	2091001192	7	39112258	8	567689	9	6576	10	62	<table border="1"> <thead> <tr> <th>k</th> <th>$d_k^{(-0.4)}$</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>0</td><td>9.175221694166486</td></tr> <tr><td>1</td><td>10.117567093197478</td></tr> <tr><td>2</td><td>2.157506444784543</td></tr> <tr><td>3</td><td>228804652903398</td></tr> <tr><td>4</td><td>14201178923890</td></tr> <tr><td>5</td><td>573437678324</td></tr> <tr><td>6</td><td>16197837310</td></tr> <tr><td>7</td><td>337248859</td></tr> <tr><td>8</td><td>5383055</td></tr> <tr><td>9</td><td>67911</td></tr> <tr><td>10</td><td>694</td></tr> <tr><td>1</td><td>6</td></tr> </tbody> </table>	k	$d_k^{(-0.4)}$	0	9.175221694166486	1	10.117567093197478	2	2.157506444784543	3	228804652903398	4	14201178923890	5	573437678324	6	16197837310	7	337248859	8	5383055	9	67911	10	694	1	6		
k	$d_k^{(0.4)}$																																																				
0	3.679768545728182																																																				
1	3.163821945375482																																																				
2	527334597030117																																																				
3	45589114070716																																																				
4	2389538441397																																																				
5	83674203606																																																				
6	2091001192																																																				
7	39112258																																																				
8	567689																																																				
9	6576																																																				
10	62																																																				
k	$d_k^{(-0.4)}$																																																				
0	9.175221694166486																																																				
1	10.117567093197478																																																				
2	2.157506444784543																																																				
3	228804652903398																																																				
4	14201178923890																																																				
5	573437678324																																																				
6	16197837310																																																				
7	337248859																																																				
8	5383055																																																				
9	67911																																																				
10	694																																																				
1	6																																																				

$$I_{\nu}(x) = \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k A_k^{(\nu)} T_k^{\pi} (4/x), \quad x \geq 4$$

k	$A_k^{(0.1)}$	k	$A_k^{(-0.1)}$	k	$A_k^{(0.2)}$	k	$A_k^{(-0.2)}$
0	1.017133304912793	0	1.017171457166213	0	1.014943607754327	0	1.015016411839077
1	17966070934600	1	18034916017916	1	15644682140983	1	15776059273597
2	917863456458	2	968081890908	2	763758164002	2	859598180336
3	92780494090	3	121693205528	3	64327677568	3	119515926157
4	5640416487	4	18051846279	4	1690123935	4	22008664332
5	-	5	-	5	-	5	-
6	-	6	-	6	-	6	-
7	-	7	-	7	-	7	-
8	-	8	-	8	-	8	-
9	-	9	-	9	-	9	-
10	-	10	-	10	-	10	-
1	-	1	-	1	-	1	-
2	-	2	-	2	-	2	-
3	-	3	-	3	-	3	-
4	-	4	-	4	-	4	-
5	-	5	-	5	-	5	-
6	-	6	-	6	-	6	-
7	-	7	-	7	-	7	-
8	-	8	-	8	-	8	-
9	-	9	-	9	-	9	-
20	-	20	-	20	-	20	-
1	-	1	-	1	-	1	-
2	-	2	-	2	-	2	-
3	-	3	-	3	-	3	-
4	-	4	-	4	-	4	-
5	-	5	-	5	-	5	-
6	-	6	-	6	-	6	-
7	-	7	-	7	-	7	-
8	-	8	-	8	-	8	-
9	-	9	-	9	-	9	-
30	-	30	-	30	-	30	-
1	-	2	-	1	-	1	-
				2	-	1	-

$$I_\nu(x) = \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k A_k^{(\nu)} T_k^x(4/x), \quad x \geq 4$$

k	$A_k^{(0.3)}$	k	$A_k^{(-0.3)}$	k	$A_k^{(0.4)}$	k	$A_k^{(-0.4)}$
0	1.011327156938392	0	1.011427902572240	0	1.006312178419008	0	1.006431505207962
1	11828278323229	1	12010084683316	1	6557286388691	1	6772637479192
2	5351735111650	2	667820541599	2	246579251195	2	403731744582
3	29440824156	3	105845608321	3	-	3	81482498720
4	-	4	23895746707	4	-	4	23477769385
5	-	5	3429805889	5	-	5	4786035922
6	-	6	-	6	-	6	-
7	-	7	-	7	-	7	-
8	-	8	-	8	-	8	-
9	-	9	-	9	-	9	-
10	-	10	-	10	-	10	-
1	-	1	-	1	-	1	-
2	-	2	-	2	-	2	-
3	-	3	-	3	-	3	-
4	-	4	-	4	-	4	-
5	-	5	-	5	-	5	-
6	-	6	-	6	-	6	-
7	-	7	-	7	-	7	-
8	-	8	-	8	-	8	-
9	-	9	-	9	-	9	-
20	-	20	-	20	-	20	-
1	-	1	-	1	-	1	-
2	-	2	-	2	-	2	-
3	-	3	-	3	-	3	-
4	-	4	-	4	-	4	-
5	-	5	-	5	-	5	-
6	-	6	-	6	-	6	-
7	-	7	-	7	-	7	-
8	-	8	-	8	-	8	-
9	-	9	-	9	-	9	-
30	-	30	-	30	-	30	-
1	-	1	-	1	-	1	-
2	-	2	-	2	-	2	-

$$K_{\nu}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k C_k^{(\nu)} T_k \left(\frac{1}{x}\right), \quad x \geq 1 \quad \nu = 0.1 \text{ (0.1) } 0.4 .$$

k	$C_k^{(0.1)}$	k	$C_k^{(0.2)}$	k	$C_k^{(0.3)}$	k	$C_k^{(0.4)}$
0	0.954844022419347	0	0.960343943239466	0	0.969601085473156	0	0.982753685114005
1	41318950313153	1	36331738769976	1	27908573009235	1	15879499610178
2	3331121196409	2	2888198399593	2	2166361240767	2	1191096242979
3	420910216097	3	363041481025	3	269931756658	3	146585859835
4	68239776196	4	58695272729	4	43440286563	4	23437239297
5	13046037655	5	11201901893	5	8266564633	5	4441966731
6	2811631600	6	2411301078	6	1775893234	6	951589994
7	664623178	7	569488489	7	418803749	7	223947757
8	169215211	8	144894807	8	106435060	8	56823634
9	45813583	9	39207695	9	28774585	9	15342678
10	13066183	10	11177176	10	8196848	10	4366028
1	3897479	1	3332768	1	2442585	1	1299903
2	1209080	2	1033566	2	757100	2	402617
3	388332	3	331869	3	242987	3	129135
4	128655	4	109923	4	80451	4	42732
5	43833	5	37443	5	27394	5	14543
6	15318	6	13083	6	9569	6	5078
7	5479	7	4679	7	3421	7	1815
8	2002	8	1709	8	1249	8	663
9	746	9	637	9	465	9	247
20	283	20	242	20	177	20	94
1	109	1	93	1	68	1	36
2	43	2	37	2	27	2	14
3	17	3	15	3	11	3	6
4	7	4	6	4	4	4	2
5	3	5	2	5	2	5	1
6	1	6	1	6	1		

AZ $E_1(x)$ FÜGGVÉNY CSEBISEV-SORFEJTÉSE

Írta: Németh Géza

Összefoglalás

A dolgozatban az $E_1(x)$ függvény Csebisev-sorfejtéseivel foglalkozunk. Ezek a sorfejtések praktikus szempontból célszerűbbek az irodalomban használatosaknál. A $0 \leq x \leq a$ intervallumra vonatkozó Csebisev-sor együtthatói kb. 4^{-n} -el gyorsabban csökkennek a megfelelő Taylor-sor együtthatóinál. Az $x \geq a$ esetre az ismert /divergens/ aszimptotikus sorhoz hasonló alaku /de konvergens/ Csebisev-sorfejtést határozzuk meg. A sorok együtthatóit 15 jegy pontosságig táblázatban adjuk meg.

1. Bevezetés

Jelen dolgozatban az

$$E_1(x) = \int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt \quad x > 0 \quad /1/$$

függvény Csebisev-sorfejtésével foglalkozunk. Ismeretes [1], hogy e sorfejtés részletösszegei a függvényt legjobban megközelítő polinomokhoz igen közel esnek, és így a függvény értékeinek generálására akár kézi számítás-hoz, akár elektronikus számológépen programkészítéshez, kiválóan alkalmasak.

Az $E_1(x)$ függvény kiszámításához nagy pontosságú táblázatok készültek [2], [3], [4], de a számológépben való függvénygenerálásra ezek nem alkalmasak, nagy terjedelmük miatt.

Először a függvény $0 \leq x \leq a$ intervallumra vonatkozó Csebisev-sorfejtését határozzuk meg. Látni fogjuk, hogy a sor együtthatója kb. 4^{-n} -nel gyorsabban csökken a megfelelő Taylor-sor együtthatójánál.

Az $x \geq a$ intervallumra az $E_1(x)$ függvény aszimptotikáját követő Csebisev-sorfejtést határozzuk meg. E sor az ismert divergens aszimptotikus sorral ellentétben konvergens.

A sorok együtthatóit $a = 8$ esetén táblázatosan adjuk meg.

2. Sorfejtés $0 \leq x \leq a$ esetére

Kis x értékek esetén az $E_1(x)$ függvényt az

$$E_1(x) = c + \ln x + x + \frac{x^2}{2!2} + \frac{x^3}{3!3} + \dots \quad /2.1/$$

sorral számolják / C az Euler-állandót jelöli/.

A /2.1/-ben szereplő sor integrállal is kifejezhető:

$$x + \frac{x^2}{2!2} + \frac{x^3}{3!3} + \dots = \int_0^x \frac{e^t - 1}{t} dt = x \int_0^1 \int_0^1 e^{xut} du dt \quad /2.2/$$

A /2.2/ kifejezésbe beírjuk az exponenciális függvény Csebisev-sorát. Ekkor $E_1(x)$ -re az alábbi sorfejtés adódik:

$$E_1(x) = c + \ln x + x \left\{ A_0(a) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} A_n(a) T_n^*(x/a) \right\} \quad /2.3/$$

A /2.3/ képletben $T_n^*(x)$ a /0,1/ intervallumra vonatkozó Csebisev-polinomot jelöli, továbbá

$$A_n(a) = \int_0^1 \int_0^1 e^{a/2 ut} I_n\left(\frac{a}{2} ut\right) du dt \quad /2.4/$$

amelyben $I_n(x)$ a képzetes argumentumu reguláris Bessel-függvény.

Az $A_n(a)$ számokat numerikusan a

$$\begin{aligned} A_n + 2A_{n+1} + A_{n+2} &= \frac{1}{n+1} [C_n - C_{n+2}] \\ C_n + 2C_{n+1} + C_{n+2} &= \frac{4}{a} e^{a/2} I_{n+1}(a/2) \end{aligned} \quad n=0,1,2,\dots \quad /2.5/$$

rekurziós képletek segítségével lehet kiszámítani. A /2.5/ képletben szereplő

$$C_n = \int_0^1 e^{a/2 u} I_n\left(\frac{a}{2} u\right) du \quad /2.6/$$

számokat /és A_n -t is/ nem integráljukkal, hanem csökkenő "n"-ek irányába haladó rekurzióval számítjuk ki, alkalmasan választott kezdőértékekkel indulva, és a nyert értékeket a

$$A_0(a) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n A_n(a) = 1 \quad /2.7/$$

azonosság segítségével normalizálva .

A /2.5/ képletek /2.4/-ből parciális integrálással és a Bessel-függvények rekurziós képletének alkalmazásával nyerhetők.

A /2.1/ képletből láthatjuk, hogy $E_1(x)$ /2.1/ alatti sora $0 < x \leq a$ esetén

$$\frac{a^n}{(n+2)!} \left\{ 1 + o\left(\frac{1}{n}\right) \right\} \quad /2.8/$$

rendben konvergál, viszont a /2.3/ sor /2.4/ alapján

$$2e^{a/2} \frac{(a/4)^n}{(n+2)!} \left\{ 1 + o\left(\frac{1}{n}\right) \right\} \quad /2.9/$$

rendben konvergál, amiből látható, hogy kb. 4^{-n} -nel gyorsabban tart zéróhoz az utóbbi kifejezés. Ez a megjegyzés mutatja a Csebisev-sorfejtés gazdaságosságát.

3. Sorfejtés $x \geq a$ esetére

Az $E_1(x)$ függvényt $x \geq a$ esetére az aszimptotikus kifejezésével szokás számolni

$$E_1(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^x}{x} \left\{ 1 + \frac{1!}{x} + \frac{2!}{x^2} + \frac{3!}{x^3} + \dots \right\} \quad /3.1/$$

Ez a sor nyilvánvalóan divergens.

Mi most az $E_1(x)$ függvény /3.1/ típusu Csebisev-sorfejtését fogjuk megvizsgálni.

$$E_1(x) = \frac{e^x}{x} \left\{ B_0(a) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n B_n(a) T_n^*(a/x) \right\}, \quad x \geq a \quad /3.2/$$

A /3.3/ sorra a következőképp jutunk. Tekintsük $E_1(x)$ alábbi integrálaló-állítását [5] :

$$E_1(x) = \frac{e^x}{x} \left\{ \frac{1}{2i} \int_0^{\infty} \left[\frac{e^{it}}{1 + \frac{it}{x}} - \frac{e^{-it}}{1 - \frac{it}{x}} \right] dt \right\} \quad /3.3/$$

Az integrálban elvégezve a $t = a.u$ helyettesítést, alkalmazzuk az

$$\frac{1}{1+it \frac{a}{x}}, \quad \frac{1}{1-it \frac{a}{x}}$$

függvények Csebisev-sorfejtését, így a /3.2/ sort kapjuk. A sorfejtés $B_n(a)$ együtthatói a következők:

$$B_n(a) = \frac{a}{2i} \int_0^{\infty} \left[\frac{e^{iat} (it)^n}{\sqrt{1+it} (1+\sqrt{1+it})^{2n}} - \frac{e^{-iat} (-it)^n}{\sqrt{1-it} (1+\sqrt{1-it})^{2n}} \right] dt \quad /3.4/$$

A B_n számok numerikus számolás céljára igen kényelmetlen alakban /erősen oszcilláló komplex improprius integrál formájában/ adódtak. A következőkben egyszerűbb alakra hozzuk őket.

A B_0 és B_1 integrálra rövid számolás után azt kapjuk, hogy

$$B_0(a) = 2a^{1/2} \int_0^{a^{1/2}} e^{-a+u^2} du \quad /3.5/$$

$$B_1(a) = B_0(a) - 2a \left[\ln 4a - \psi(1) \right] + 2a \int_0^a e^{-u} \int_0^1 e^{vu} v^{-1/2} dv du \quad /3.6/$$

Továbbá parciális integrálásokkal be lehet látni, hogy a $B_n(a)$ számok kielégítik az alábbi rekurziós képleteket:

$$\Delta^2 B_0 = B_0 - 2B_1 + B_2 = 4a \left[B_0 + B_1 - 1 \right] \quad /3.7/$$

$$\Delta \left\{ (n+1) \Delta^2 B_n \right\} = -4a \left[B_{n+1} + B_{n+2} \right], \quad n=0, 1, 2, \dots \quad /3.8/$$

Néha célszerű a B_n számok "a" hatványai szerint haladó kifejezéseivel dolgozni. Ezek közvetlenül nyerhetők a /3.5/ és /3.6/-ből $n=0$ és $n=1$ esetre.

$$B_0(a) = 2a {}_1F_1(1; 3/2; -a) = 2a \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-a)^k}{(3/2)_k} \quad /3.9/$$

$$B_1(a) = -2a \left[\ln a - 1 - \psi(1/2) \right] + \frac{4}{3} a^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k+2}{k+1} \frac{(-a)^k}{(5/2)_k} \quad /3.10/$$

A /3.9/ és /3.10/ képletek segítségével /3.7/ és /3.8/ alapján a további B_n számok is sorbafejthetők:

$$B_n(a) = -2na \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n+1)_k (-n+1)_k}{(3/2)_k (1)_k} \frac{(-a)^k}{k!} S_k + \frac{2^{2n+1} a^{n+1}}{(2n+1)n!} {}_3F_3(2n+1, 1, 1; \frac{3}{2}+n, n+1, n+1; -a).$$

$$S_k = \ln a + \psi(n+k+1) - \psi(n-k) - \psi(k+3/2) - 2\psi(k+1). \quad /3.11/$$

A következőkben a /3.2/ sorfejtés konvergenciáját fogjuk bebizonyítani. Egy ilyen bizonyításhoz elégséges $B_n(a)_{n \rightarrow \infty}$ viselkedését megvizsgálni.

A $B_n(a)$ /3.4/ integrálkifejezését tekintve rögtön láthatjuk, hogy az integrandus első tagja a komplex síkon lévő, és az

$$ia + \frac{n}{t_0 \sqrt{1+it_0}} = 0 \quad /3.12/$$

egyenletnek eleget tevő t_0 pontban éles maximummal rendelkezik. Nyilván

$$t_0 \sim e^{i\pi/6} (n/a)^{2/3}, \quad n \rightarrow \infty \quad /3.13/$$

Most deformálni fogjuk a /3.4/ integrál integrációs útját, hogy átmenjen a t_0 ponton.

$$B_n(a) = \frac{a}{2i} \left\{ \int_0^{\infty} e^{i\pi/6} \frac{e^{iat} (it)^n}{\sqrt{1+it} (1+\sqrt{1+it})^{2n}} dt - \int_0^{\infty} e^{-i\pi/6} \frac{e^{-iat} (-it)^n}{\sqrt{1-it} (1+\sqrt{1-it})^{2n}} dt \right\} /3.14/$$

A /3.4/ integrál átirása /3.14/ alakba megtehető a reziduúmtétel szerint, mert az első, /ill. második/ integrandusnak nincs szingularitása a

$0 < \arg t \leq \pi/6$, ill. a $0 > \arg t \geq -\pi/6$ sávban. Így a /3.14/ integrálra alkalmazva a Laplace-módszert, az alábbi eredményt nyertük:

$$B_n(a) = 2 \sqrt{\frac{\pi}{3}} a^{1/2} e^{-a/3} e^{-\frac{3}{2} a^{1/3} n^{2/3}} \left[\sin \left(\frac{3^{3/2}}{2} a^{1/3} n^{2/3} \right) + o(n^{-1/3}) \right] /3.15/$$

A /3.15/ becslés biztosítja a /3.2/ sor abszolút és a/x -ben/ egyenletes konvergenciáját.

4. Táblázatok

Az $E_1(x)$ függvény kiszámítására alkalmas /2.3/ és /3.2/ sorfejtések együtthatóit a "kis" és "nagy" argumentumot elhatároló "a" paraméter $a=8$ -as választása mellett számítottuk ki. Az A_n számokat a /2.5/-nél vázolt módszerrel határoztuk meg. A B_n számokat ugyancsak visszafelé haladó rekurzió segítségével határoztuk meg. Az A_n és B_n számokat az I. és II. táblázatban adjuk meg. A táblázati értékekben az utolsó jegy 1 egységgel hibás lehet.

Táblázatok

I.

II.

n	$\epsilon_n A_n(a) (a=8)$	$\epsilon_n B_n(a) (a=8)$
	$\epsilon_0=1, \epsilon_n=2 \quad n \geq 1$	$\epsilon_0=1, \epsilon_n=2 \quad n \geq 1$
0	14.414567799447827	1.081585183253608
1	21.398409228405606	- .089675166174404
2	11.589333644720272	9325711793980
3	4.919821458026377	- 1341474999410
4	1.716616588930048	44487508106
5	.508513021187223	94412060877
6	.130906657463018	- 35536508652
7	29803287323352	- 1376401560
8	6083200670124	4703553094
9	1125388687968	- 478019500
10	190392201734	- 645719093
1	29675534907	103103516
2	4288247020	106610083
3	577605483	- 13853456
4	72858342	- 20426935
5	8641645	399461
6	1967268	4073797
7	102499	614592
8	10312	- 733329
9	988	- 298349
	90	88133
	8	92197
	1	6840
		- 19820
		- 8394
		1913
		2849
		635
		- 485
		- 377
		- 37
		87
		52
		1
		- 14
		- 8
		0
		2
		1

I r o d a l o m

- [1] Natanzon, I.P.: Konstruktiv függvénytan, Akadémiai Kiadó, Bp. 145 old. /1952/
- [2] National Bureau of Standards Vol.1. /1940/ Washington
- [3] Tables of Exponential Integrals. Akademia Nauk SSSR /1954/ Moscow
- [4] Hariss, F.E. Math. Tables Aids Comput. 11, 9-16 pp.
- [5] Luke, Y.L.: Integrals of Bessel-Functions. McGraw Hill, New York /1962/ 186

Érkezett: 1968 feb. 19.

KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.

BIZONYOS TIPUSU TÖBBSZÖRÖS INTEGRÁLOK KISZÁMITÁSA MONTE CARLO MÓDSZERREL

Irta: Marton Katalin és Varga László

Összefoglalás

Egyszerű numerikus módszert ismertetünk az

$$I_g = \int_X g(f(x)) dx, \quad (g \in G)$$

tipusu integrálok kiszámítására, ahol X egy n dimenziós véges intervallum, $f(x)$ rögzített függvény X -en, $g(u)$ pedig egyváltozós függvények egy G osztályához tartozik. /Az $f(x)$ függvényre és a G függvényosztályra bizonyos feltételeket teszünk./

A módszer azon alapul, hogy az I_g integrálokat - egydimenziós halmazra történő - Stieltjes-integrálakká alakítjuk át, majd a Stieltjes-integrálokat véges összeggel közelítjük:

$$I_g = \int_F g(u) d\phi(u) \approx \sum_{k=1}^M A_k g(f_k).$$

Az A_k együtthatókat Monte Carlo módszerrel határozzuk meg. Foglalkozunk a diszkretizálási hiba és - az együtthatók Monte Carlo számítása folytán fellépő - statisztikus hiba becslésével.

1. §.

Dolgozatunkban a következő típusu többszörös integrálok numerikus meghatározásával foglalkozunk:

$$I_g = \int_X g(f(x)) dx, \quad /1.1/$$

ahol X egy tetszőleges véges intervallum az n dimenziós térben, és $f(x)$ az X -en mérhető, rögzített függvény. Feladatul tűzzük ki az /1.1/ integrál értékének kiszámítását adott függvények G halmazának tetszőleges $g(u)$ elemére. /Az $f(x)$ függvény és a G függvényosztály pontos meghatározását a 3. pontban adjuk meg./

Ilyen jellegű feladattal találkozunk például bizonyos típusu regressziós feladatoknál. Ilyenkor az (y_1, z_1) , (y_2, z_2) , ..., (y_k, z_k) összetartozó mérési értékek közötti függvénykapcsolatot a

$$z_1 \approx \int_X g(f(x); y_1, a) dx$$

integrálkifejezés írja le, ahol $a = (a_1, a_2, \dots, a_m)$ a meghatározandó paramétereket jelöli. A G függvényhalmazt az adott $g(f(x); y_1, a)$ paraméteres függvénysereg alkotja, az y_1 és az a paraméterek szóbjövő értékei mellett.

2. §.

Jelölje az $f(x)$ függvény értékkészletét F . Legyen $X(u)$ az X halmaznak az a részhalmaza, amelyn $f \leq u$. Jelölje $\phi(u)$ az $f(x)$ függvény "eloszlásfüggvényét", azaz legyen

$$\phi(u) = \int_{X(u)} dx \quad \text{*/} \quad /2.1/$$

Akkor a Lebesgue-és Stieltjes-integrálok közötti összefüggés alapján írhatjuk, hogy

$$I_g = \int_F g(u) d\phi(u). \quad /2.2/$$

A felvetett probléma tehát különböző $g(u)$ függvények adott $\phi(u)$ függvényre vonatkozó Stieltjes-integráljának meghatározását jelenti. Ezzel a feladatot egyszeres integrál kiszámítására vezettük vissza. A probléma csupán az, hogy a $\phi(u)$ függvény legtöbbször csak numerikusan határozható meg, ami azonban pl. Monte Carlo módszer felhasználásával elvégezhető. Így az egyszer meghatározott $\phi(u)$ birtokában már a különböző $g(u)$ függvényekhez tartozó /1.1/ típusu integrálok kiszámítása csak egyszeres integrálást jelent. Amikor az /1.1/ típusu integrált sok $g(u)$ függvény esetében kívánjuk kiszámítani, gazdaságos lehet a /2.2/ formula használata.

Az alábbiakban egy, a /2.2/ formulán alapuló numerikus módszert írunk le.

3. §.

Tegyük fel, hogy teljesülnek a következő feltételek:

- a/ Az F halmaz - az $f(x)$ függvény értékkészlete - véges intervallum.
- b/ Minden $g \in G$ -re a $g(u)$ függvény kétszer differenciálható, továbbá

* $\phi(u)$ valójában csak konstans faktortól eltekintve eloszlásfüggvény.

$$B^2 = \sup_{g \in G} \int_F g^2(u) d\phi(u) = \sup_{g \in G} \int_X g^2(f(x)) dx < \infty$$

$$C = \sup_{g \in G} \int_F |g'(u)| d\phi(u) = \sup_{g \in G} \int_X |g'(f(x))| dx < \infty$$

$$D = \sup_{g \in G} \sup_{u \in F} |g''(u)| < \infty$$

Osszuk fel az F intervallumot M egyenlő részintervallumra - jelölje ezeket F_1, F_2, \dots, F_M ; és keressük I_G numerikus közelítését a következő alakban:

$$I_G \approx \sum_{k=1}^M g(f_k) A_k, \quad /3.1/$$

ahol f_k az F_k intervallum egy pontja, az A_k számok pedig alkalmasan választott konstansok.

Hogyan történjék az A_k együtthatók megválasztása?

Számos gyakorlati esetben a G függvényosztályba tartozó mindegyik $g(u)$ függvény lényegesen lassabban változó függvénye argumentumának, mint a $\phi(u)$ függvény. Ilyenkor elég jó eredményt kapunk azzal a közelítéssel, amelybe /3.1/ átmegy, ha együtthatókként az

$$A_k = \int_{F_k} d\phi(u) \quad /k=1, 2, \dots, M/$$

számokat - illetve a gyakorlatban ezek közelítő értékeit - választjuk.

Ezeket a közelítő értékeket - jelölés: \hat{A}_k - meghatározhatjuk Monte Carlo módszerrel. Részletesebben: felvesszünk N független, egyenletes eloszlású véletlen ξ_j pontot / $j=1, 2, \dots, N$ / az X intervallumban; jelölje ν_k e pontok közül azoknak a számát, amelyekre $f(\xi_j)$ az F_k halmazba esik, és legyen

$$\hat{A}_k = \hat{A}_k^{(N)} = \frac{\nu_k}{N} |X| \quad /k = 1, 2, \dots, M/; /3.2/$$

A nagy számok erős törvénye folytán $\hat{A}_k^{(N)} \rightarrow A_k$ 1 valószínűséggel, tehát ha N nagy, akkor \hat{A}_k -t valóban A_k közelítő értékének tekinthetjük.

*/ Ha Y egy Lebesgue-mérhető halmaz az r dimenziós euklideszi térben, akkor $|Y|$ jelölje Y Lebesgue-mértékét.

A következő pontban azt vizsgáljuk meg, hogy milyen értelemben és milyen mértékben jó az

$$I_g \approx \sum_{k=1}^M g(f_k) \hat{A}_k \quad /3.3/$$

közelítés a 3. §. elején tett feltételek teljesülése esetén.

4. § .

A /3.3/ képlet hibájának megbecsléséhez vezessük be a következő jelöléseket:

$$B^{*2} = B_M^{*2} = \sup_{g \in G} \sum_{k=1}^M g^2(f_k) A_k ,$$

$$C^* = C_M^* = \sup_{g \in G} \sum_{k=1}^M |g'(f_k)| A_k ,$$

$$h = \frac{|F|}{M} , \quad p_k = \frac{A_k}{|X|} .$$

/Nagy M -re $B^{*2} \approx B^2$ és $C^* \approx C$, tehát feltételeinkből következik, hogy B^{*2} és C^* is véges./

A /3.3/ képlet hibáját, Δ -t most a következőképpen becsülhetjük:

$$\begin{aligned} \Delta = & \left| I_g - \sum_{k=1}^M g(f_k) \hat{A}_k \right| \leq \int_F |g(u) - g^*(u)| d\phi(u) + \\ & + \sum_{k=1}^M |g(f_k)| |A_k - \hat{A}_k| = \Delta_1 + \Delta_2 , \end{aligned} \quad /4.1/$$

ahol a Δ_1 -ben szereplő $g^*(u)$ függvényre: $g^*(u) = g(f_k)$ ha $u \in F_k$.

Ha $u \in F_k$ rögzített szám, akkor a $g(u)$ függvény véges Taylor-sorfejtése alapján:

$$|g(u) - g^*(u)| \leq h |g'(f_k)| + \frac{h^2}{2} D ,$$

és így

$$\Delta_1 \leq h C^* + \frac{h^2}{2} D \cdot |X| \quad /4.2/$$

Másrészt a Cauchy-Schwarz-egyenlőtlenség folytán

$$\Delta_2 \leq \left\{ \sum_{k=1}^M g^2(f_k) A_k \right\}^{1/2} \cdot \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{(A_k - \hat{A}_k)^2}{A_k} \right\}^{1/2} \leq$$

$$B^* \left\{ \frac{|X|}{N} \sum_{k=1}^M \frac{(v_k - Np_k)^2}{Np_k} \right\}^{1/2}$$

Ismeretes, hogy a Δ_2 becslésében szereplő

$$\chi_M^{2(N)} = \sum_{k=1}^M \frac{(v_k - Np_k)^2}{Np_k}$$

valószínűségi változó eloszlásfüggvénye - rögzített M esetén - $M-1$ szabadságfokú χ^2 -eloszláshoz tart. Tehát ha $Y_{M, \alpha}$ jelöli az $M-1$ szabadságfokú χ^2 -eloszlás α -kvantilisét, akkor nagy N -re α valószínűséggel fennáll a

$$\chi_M^{2(N)} \leq Y_{M, \alpha}$$

egyenlőtlenség, amiből

$$\Delta_2 \leq \frac{1}{\sqrt{N}} B^* \sqrt{|X|} \sqrt{Y_{M, \alpha}} \quad /4.3/$$

Végül /4.1/, /4.2/ és /4.3/ egybevetésével kapjuk, hogy nagy N -re α valószínűséggel fennáll a

$$\Delta \leq h \cdot c^* + \frac{h^2}{2} D |\bar{x}| + \frac{1}{\sqrt{N}} B^* \sqrt{|X|} \sqrt{Y_{M, \alpha}} \quad /4.4/$$

becslés.

A /4.4/ jobboldalán szereplő első két tag M növelésével tetszőlegesen kicsinnyé tehető. Ha választottunk egy M -et, amely az első két tagot a kívánt mértékben kicsivé teszi, akkor N megfelelő választásával tetszőlegesen kicsivé tudjuk tenni a - rögzített α esetén M -től függő - harmadik tagot is.

A /4.4/ képletből látható, hogy a módszer konvergenciájának gyorsasága leginkább a 3. §. elején definiált B^2 és C értékektől függ.

5. § .

Röviden vázoljuk a számítás menetét.

Ez függ attól, hogy a 3. §. elején definiált B^2 és C értékekre

ismerünk-e /nem túl durva/ felső korlátot a számítás megkezdése előtt.*/

Ha ismerünk ilyen felső korlátokat - 1. eset -, akkor a számítás menete a következő:

- a/ Megválasztjuk M -et és N -et úgy, hogy a /4.4/ hibakorlát - amelyben B^x és C^x helyett ezuttal a B -re, ill. C -re ismert felső korlátot írjuk, - elég kicsi legyen.
- b/ Felveszünk N darab független, egyenletes eloszlású véletlen pontot X -ben, és meghatározzuk a /3.2/ képlettel definiált \hat{A}_k számokat / $k=1,2,\dots,M$ /.
- c/ Az \hat{A}_k együtthatók birtokában tetszőleges $g \in G$ -re az /1.1/ integrál a /3.3/ közelítő formulával számítható.

Ha B^2 -re vagy C -re a számítás megkezdése előtt nem ismerünk használható felső korlátot - 2. eset -, akkor a számítás a következő:

- α / Választunk egy M -et és egy N -et.
- β / Ugyanaz, mint az 1. eset b/ pontja.
- γ / Meghatározzuk a 4. §. elején definiált B^x -ot és C^x -ot, majd a /4.4/ hibakorlátot.
- δ / Ha a hibakorlát elég kicsi, akkor az együtthatókat felhasználjuk az I_g integrálok kiszámítására, ellenkező esetben pedig B^x és C^x értékének megfelelően új M -et és N -et választunk, és a β / ponttal folytatjuk a számítást.

Megjegyezzük azonban, hogy a 2. esetben többnyire úgy is eljárhatunk, hogy a γ / lépés elvégzése után az 1. eset a/, b/ és c/ lépéseit hajtjuk végre. A nagyobb M -re és N -re való áttérés ugyanis B^x és C^x értékét csak kevéssé változtatja meg, és minthogy B^x -ot és C^x -ot csak a hibabecslésben használjuk, értéküket nem kell nagyon pontosan ismernünk.

Érkezett: 1968. febr. 29.

KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.

*/ Minthogy D -től a /4.4/ hibakorlát értéke lényegesen kevésbé függ, mint B^x -től és C^x -től - amelyek közel egyenlők B -vel, ill. C -vel - D -nek elég durva felső korlátja is megfelel, és feltesszük, hogy ez rendelkezésünkre áll.

A THOMAS-PRECESSZIÓ

Irta: Huszár Miklós

Összefoglalás

Csoportelméleti módszerek felhasználásával levezetjük a Thomas-precesszió frekvenciáját.

1. Tekintsünk egy erőterben mozgó részecskét, melyen valamilyen irány van kitüntetve, mely lehet például a részecske spinje. Jelöljük a részecskének az S laborrendszerhez viszonyított sebességét a t és $t+\delta t$ pillanatban \vec{v} és $\vec{v}+\delta\vec{v}$ -vel. Hajtsunk végre ezen időpontokban \vec{v} illetve $\vec{v}+\delta\vec{v}$ sebességgel jellemzett, forgást nem tartalmazó Lorentz-transzformációt, ekkor az S_1 , illetve S_2 rendszereket nyerjük, melyekben a t , illetve a $t+\delta t$ pillanatban a részecske nyugszik. Ha a spinre forgatónyomaték nem hat, az S_1 és S_2 rendszerben e vektor azonos komponensekkel rendelkezik. Annak ellenére, hogy az $S \rightarrow S_1$ és az $S \rightarrow S_2$ transzformációk forgást nem tartalmaznak, az S_1 -ből S_2 -be vezető transzformáció /ha \vec{v} és $\vec{v} + \delta\vec{v}$ nem egyirányúak/ elforgatást is magában foglal. Ez a tény úgy is megfogalmazható, hogy ha az S_1 rendszerből kiindulva forgás nélküli Lorentz-transzformációkkal állítunk elő nyugalmi rendszert a részecske számára, a gyorsulás során a spin e nyugalmi rendszer tengelyeihez képest elfordul. Ezt a forgó mozgást nevezzük Thomas-precessziónak. Mivel ez az effektus a homogén Lorentz-transzformációk csoporttulajdonságán alapszik, várható, hogy a precesszió szögsebességét csupán a Lorentz-csoport struktúra-állandói meghatározzák /v.ö. [4] /.

2. A homogén Lorentz-csoport alapábrázolásának 6 infinitezimális generátora a következő mátrixokkal reprezentálható [2] :

$$I_1 = \epsilon_{23} - \epsilon_{32}, \quad I_2 = \epsilon_{31} - \epsilon_{13}, \quad I_3 = \epsilon_{12} - \epsilon_{21},$$

$$J_1 = -\epsilon_{01} - \epsilon_{10}, \quad J_2 = -\epsilon_{02} - \epsilon_{20}, \quad J_3 = -\epsilon_{03} - \epsilon_{30},$$

ahol $\epsilon_{\mu\nu}$ 4x4-es mátrix melynek μ, ν eleme 1, a többi zérus^{x/}. A fenti generátorok a következő csererelációknak tesznek eleget:

$$[I_i, I_k] = -\epsilon_{ikl} I_l, \quad [I_i, J_k] = -\epsilon_{ikl} J_l \quad /1/$$

$$[J_i, J_k] = \epsilon_{ikl} I_l,$$

ahol ϵ_{ikl} mindhárom indexben antiszimmetrikus és $\epsilon_{123} = 1$. Bevezetve az $X_{1,2,3} = I_{1,2,3}$, $X_{4,5,6} = J_{1,2,3}$ jelölést, az /1/ alatti csererelációk

$$[X_P, X_Q] = C_{PQ}^R X_R \quad /2/$$

alakban foglalhatók össze, ahol a C_{PQ}^R strukturaállandók értékei /1/-ből olvashatók le.

Írjuk a csoport egy $g = g(\vec{\phi}, \vec{u})$ eleméhez rendelt mátrixábrázolást

$$T_g(\vec{\phi}, \vec{u}) = e^{\vec{\phi} \cdot \vec{I}} e^{\vec{u} \cdot \vec{J}} \quad /3/$$

alakban. /A fenti paraméterekre fogjuk használni a $(\vec{\phi}, \vec{u}) \equiv \alpha$ jelölést is, ahol $\phi_{1,2,3} = \alpha_{1,2,3}$ és $u_{1,2,3} = \alpha_{4,5,6}$. / Az ábrázolási mátrixok ilyen felírása egy paraméterezést definiál. Fizikai jelentésének megállapítása céljából tekintsük a

$$T(\vec{\phi}, 0) = e^{\vec{\phi} \cdot \vec{I}} \quad /4/$$

mátrixot. Észrevéve, hogy a $\vec{\phi} \cdot \vec{I}$ mátrix hatványai nem függetlenek egymástól, hanem köztük a

$$(\vec{\phi} \cdot \vec{I})^{2n+2} = (-\phi^2)^n (\vec{\phi} \cdot \vec{I})^2, \quad (\vec{\phi} \cdot \vec{I})^{2n+1} = (-\phi^2)^n (\vec{\phi} \cdot \vec{I}) \quad /n=0,1,2,\dots \text{ és } \phi^2 = \vec{\phi} \cdot \vec{\phi}/$$

kapcsolat áll fenn, az exponenciálist kifejtethetjük, és a közvetlen geometriai megfontolással nyerhető forgásmátrixszal összevetve leolvashatjuk, hogy $\vec{\phi}$ éppen a koordinátarendszer elforgásának szögvektora. Pontosabban, ha a koordinátarendszert a $\vec{\phi}$ irány körül ϕ szöggel elforgatjuk, akkor egy rögzített pont új koordinátái a régiakkal

$$x'_\mu = T(\vec{\phi}, 0)_\mu^\nu x_\nu$$

alakban fejezhetők ki.

Az \vec{u} paraméterek jelentésének tisztázása céljából tekintsük a forgást nem tartalmazó

^{x/} A továbbiakban az i, k, l kis latin indexek $1, 2, 3$ a μ, ν kis görög indexek $0, 1, 2, 3$ és végül a P, Q, R nagy latin indexek $1, 2, 3, 4, 5, 6$ értéket vesznek fel. Összeeső indexekre összegezés értendő. A kövér betűvel jelölt vektorok háromdimenziósak, skalárszorzatuk: $ab = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$

$$T(0, \vec{u}) = e^{\vec{u}\vec{J}} \quad /5/$$

transzformációkat. Az $\vec{u}\vec{J}$ mátrix hatványai most az

$$(\vec{u}\vec{J})^{2n+2} = u^{2n} (\vec{u}\vec{J})^2, \quad (\vec{u}\vec{J})^{2n+1} = u^{2n} (\vec{u}\vec{J}), \quad (n=0, 1, 2, \dots \text{ és } u^2 \equiv \vec{u}^2)$$

kapcsolatban állanak. Ennek figyelembevételével /5/ a hatványsora segítségével kiszámítható, majd a közvetlenül felírt $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ sebességkomponensekkel kifejezett Lorentz-transzformáció mátrixszal /ld [3] / összevethető. Így azt kapjuk, hogy az /5/ alatti \vec{u} és a koordinátarendszer mozgássebességét megadó \vec{v} sebesség közt a

$$v_i = c \frac{\text{th} u}{u} u_i, \quad \text{illetve} \quad u_i = (\text{Arch} \gamma) \frac{v_i}{v} = \frac{1}{2v} \ln \left(\frac{c+v}{c-v} \right) v_i \quad /6/$$

$$\left(\gamma \equiv \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \right)$$

összefüggés áll fenn, azaz ha az S' rendszer S -hez képest \vec{v} sebességgel mozog, akkor ugyanannak az eseménynek a vesszős és vesszőtlen koordinátái közt

$$x'_\mu = T(0, \vec{u})_\mu^\nu x_\nu$$

kapcsolat áll fenn.

3. Az 1. pontban szereplő S_1 rendszerből S_2 -be vivő Lorentz-transzformáció paraméterei legyenek $\delta\vec{\phi}$ és $\delta\vec{w}$. Ugyanez a transzformáció megvalósítható az $S_1 \rightarrow S \rightarrow S_2$ uton is, fennáll tehát a

$$T(0, \vec{u} + \delta\vec{u}) T^{-1}(0, \vec{u}) = T(\delta\vec{\phi}, \delta\vec{w}) \quad /7/$$

egyenlőség. Feladatunk az S_1 -ből S_2 -be vivő transzformáció szögelfordulás paraméterének, $\delta\vec{\phi}$ -nek megállapítása. A fenti egyenletet jobbról $T(0, \vec{u})$ -val szorozva és első rendig sorfejtve kapjuk:

$$\frac{\partial T(0, \vec{u})}{\partial \vec{u}} \delta\vec{u} = (\vec{I} \delta\vec{\phi} + \vec{J} \delta\vec{w}) T(0, \vec{u}) \quad /8/$$

A /7/ egyenlet matematikai tartalmának megvilágítása céljából tekintsük a Lorentz-csoport ábrázolásának az egységelemhez $T_e \equiv T(0)$ és egy tetszőleges g elemhez rendelt $T_g \equiv T(\alpha)$ mátrixát. A csoport homogén tér, amin azt értjük, hogy az egységelem környezetének tulajdonságai /például jobboldali/eltolással bármely elem környezetébe átvihetők. Irjuk az egységelem infinitezimális környezetében fekvő e' csoportelem ábrázolását

$T_{e'} \equiv T_e + T_{\delta e}$ alakban, akkor egy tetszőleges g elem környezetében fekvő g' elem $T_{g'} \equiv T_g + T_{\delta g}$ ábrázolási mátrixát jobboldali eltolással értelmezzük

$$T_{g'} = T_{e'} T_g$$

azaz

$$(T_e + T_{\delta e}) T_g = T_g + T_{\delta g}$$

ahonnan

$$T_{\delta g} = T_{\delta e} T_g \quad /9/$$

A fenti összefüggés adja az ábrázolásnak azt a - g elem környezetében létrejött - megváltozását, melyet a jobboldali eltolás az egységelem megváltozásából indukál. $T_{\delta g}$ és $T_{\delta e}$ viszonya kölcsönös, mert ha $T_{\delta g}$ -t tekintjük adottnak, ebből jobbeltolás segítségével az egységelem környezetében éppen a fenti $T_{\delta e}$ megváltozás származik. Legyen az e' illetve a g' elem paramétere rendre ϵ^P és $\alpha^P + \eta^P$ /ahol ϵ^P és η^P infinitezimálisan kicsinyek/, akkor a /9/ egyenletnek a paraméterekkel felírt alakja

$$\frac{\partial T(\alpha)}{\partial \alpha^P} \eta^P = \epsilon^Q X_Q T(\alpha) \quad /10/$$

ahol az $X_P = \frac{\partial T(\beta)}{\partial \beta^P} \Big|_{\beta=0}$ mennyiségek az infinitezimális generátorok. Az ϵ^P és η^P paraméterek között a Lie-féle differenciálegyenletek teremtenek kapcsolatot:

$$\frac{\partial T(\alpha)}{\partial \alpha^P} = S(\alpha)_P^Q X_Q T(\alpha), \quad /11/$$

ahol az $S(\alpha)_P^Q$ együtthatók a csoportelemek szorzásszabálya által meghatározott állandók. /Ld. [2] 152. old./

/11/-et η^P -vel szorozva:

$$\frac{\partial T(\alpha)}{\partial \alpha^P} \eta^P = \eta^P S(\alpha)_P^Q X_Q T(\alpha)$$

Ahonnán /10/ miatt az

$$\epsilon^Q = \eta^P S(\alpha)_P^Q$$

egyenletre jutunk.* / Látjuk, hogy /11/ alatt éppen a Thomas-precesszió során létrejött szögelfordulás meghatározására szolgáló /8/egyenletet kaptuk,

*/ A generátorok lineárisan függetlenek.

tehát matematikai szempontból a feladatunk, hogy az $\alpha^P \equiv (0, \vec{u})$ csoportelem környezetében adott $\eta^P \equiv (0, \delta \vec{u})$ elmozdulásból jobboldali eltolás által az egységelem környezetében létrejött elmozdulás $\epsilon^P = (\delta \vec{\phi}, \delta \vec{w})$ paramétereit meghatározzuk. Ehhez /12/ szerint az $S(\alpha)_P^Q$ együtthatókat kell megállapítani.

4. Számítsuk ki a $\frac{\partial T(\alpha)}{\partial \alpha^P} T^{-1}(\alpha)$ mennyiséget, ahol most $\alpha^P \equiv (0, \vec{u})$. /3/ felhasználásával kapjuk

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(\alpha)}{\partial \alpha^P} T^{-1}(\alpha) &= \frac{\partial}{\partial \alpha^P} (e^{\vec{\phi} \vec{I}} e^{\vec{u} \vec{J}}) e^{-\vec{u} \vec{J}} e^{-\vec{\phi} \vec{I}} \Big|_{\vec{\phi}=0} = \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial \alpha^P} e^{\alpha Q_{XQ}} \right) e^{-\alpha Q_{XQ}} \end{aligned} \quad /13/$$

Ennek kiértékeléséhez tekintsük a λ paraméter következő függvényét:

$$f(\lambda) = \frac{\partial}{\partial \alpha^P} (e^{\lambda \alpha Q_{XQ}}) e^{-\lambda \alpha Q_{XQ}} \quad /14/$$

Fejtsük $f(\lambda)$ -t λ szerint haladó Taylor-sorba:

$$f(\lambda) = \lambda \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial \alpha^P} + \frac{\lambda^2}{2!} \left[\hat{\alpha}, \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial \alpha^P} \right] + \frac{\lambda^3}{3!} \left[\hat{\alpha}, \left[\hat{\alpha}, \frac{\partial \hat{\alpha}}{\partial \alpha^P} \right] \right] + \dots, \quad /15/$$

ahol az $\hat{\alpha} = \alpha Q_{XQ}$ rövid jelölést vezettük be. Felhasználva a /2/ alatti cserelációkat, /15/ zárt alakban felírható.

A végeredményt a $\lambda=1$ helyen véve kapjuk:

$$f(1) = \left(\frac{e^{D(\alpha)} - 1}{D(\alpha)} \right)_P Q_{XQ}, \quad /16/$$

ahol $D(\alpha)_P^Q = \alpha^R C_{RP}^Q$.

Igy végül /13/, /14/ és /15/ felhasználásával:

$$\frac{\partial T(\alpha)}{\partial \alpha^P} = \left(\frac{e^{D(\alpha)} - 1}{D(\alpha)} \right)_P Q_{XQ} T(\alpha)$$

Ezt /11/-gyel összevetve:

$$S(\alpha)_P^Q = \left(\frac{e^{D(\alpha)} - 1}{D(\alpha)} \right)_P^Q$$

Figyelembe véve a strukturaállandók /1/ alatti kifejezését valamint azt, hogy $\alpha \equiv (0, \vec{u})$, a $D(\alpha) \equiv D(\vec{u})$ mátrixot a következő alakban kapjuk:

$$D(\alpha)_P^Q = D(\vec{u})_P^Q = \begin{pmatrix} 0 & -\Lambda \\ \Lambda & 0 \end{pmatrix}, \quad /17/$$

ahol 0 a 3x3-as zérómátrix és

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 0 & u^3 & -u^2 \\ -u^3 & 0 & u^1 \\ u^2 & -u^1 & 0 \end{pmatrix}. \quad /18/$$

A D mátrix hatványai nem függetlenek egymástól, hanem fennállnak a

$$D^{2n+1} = u^{2n} D, \quad D^{2n+2} = u^{2n} D^2 \quad /n=0,1,2,\dots/$$

egyenletek. Ennek segítségével:

$$S_P^Q \equiv S(\vec{u})_P^Q = \frac{shu}{u} \delta_P^Q + \frac{chu-1}{u^2} D(u)_P^Q.$$

Ezt /17/ és /18/ felhasználásával /12/-be helyettesítve kapjuk az egység-elem környezetében létrejött ϵ^Q elmozdulás 6 paraméterét. Ennek első három komponense adja a szögelfordulást:

$$\delta\phi_i = \frac{chu-1}{u^2} \epsilon_{ikl} u_k \delta u_l.$$

Ezt /6/ figyelembevételével az \vec{u} paraméter helyett a \vec{v} sebességgel így fejezhetjük ki:

$$\delta\vec{\phi} = \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) \frac{1}{v^2} \vec{v}_x \delta\vec{v} = \frac{1}{c^2} \frac{\gamma^2}{\gamma+1} \vec{v}_x \delta\vec{v}, \quad /19/$$

ahol

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}}.$$

Szögelfordulásról szögsebességre áttérve kapjuk a Thomas-precesszió frekvenciáját:

$$\vec{\omega}_T = \frac{1}{c^2} \frac{\gamma^2}{\gamma+1} \vec{v}_x \frac{d\vec{v}}{dt}.$$

5. Tekintsünk egy részecskének kétféle külső térrel való K_1 és K_2 kölcsönhatását. Tegyük fel, hogy K_1 csak gyorsítja a részecskét, de nem hat a hozzá rögzített iránytűre, K_2 pedig nem okoz gyorsulást, csak az iránytűre gyakorol forgatónyomatékot. Ha K_1 és K_2 is működik, az iránytű elfordulása két okból jön létre, egyrészt mert K_2 révén rá forgatónyomaték hat, másrészt mert K_1 a részecske gyorsítása által Thomas-precessziót eredményez, annak ellenére, hogy közvetlenül a mágnesre nem gyakorol forgatónyomatékot. Nemrelativisztikus közelítésben a fenti K_1 és K_2 kölcsönhatás teljesen szeparálódik, relativisztikusan azonban a Thomas-precesszió keresztül összefonódik.

A valóságban ugyanaz a kölcsönhatás, mely a részecskét gyorsítja, forgatónyomatékot gyakorol a spinre, illetve a mágneses momentumra. Ez a helyzet például az elektromágneses térben mozgó mágneses momentummal rendelkező részecske esetén is, ahol az elektromágneses tér két okból is hoz létre szögelfordulást: a mágneses momentumra közvetlenül forgatónyomaték hat, melynek következtében Larmor-precesszió jön létre, ugyanakkor az elektromágneses tér a részecskét gyorsítja is, így Thomas-precessziót is létrehoz. E kétféle szögelfordulás spintől és mágneses momentumtól függően egymást erősítheti, vagy gyöngítheti.

I r o d a l o m

- [1] Thomas, L.W.: Phil. Mag. 3, 1 /1927/
- [2] Ljubarski, G.J.: Anwendungen der Gruppentheorie in der Physik, Berlin 1962, 248. old.
- [3] Møller, C.: The Theory of Relativity, Oxford 1952, 47. old.
Jackson: Classical Electrodynamics, New York - London, 1962.
- [4] Зайцев, Г.А.: О связи теории относительности с теорией групп.
lásd. Мари-Антуанетт Тоннела: Основы электромагнетизма и теории относительности (Москва, 1962) с. könyv függelékében.

Érkezett: 1968. feb. 19.

KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.

IZOTÓP METILHALOGENID MOLEKULÁK REDUKÁLT ÁLLAPOTÖSSZEG-HÁNYADOSAI

Irta: Jancsó Gábor és Gellai Borbála

Összefoglalás

Meghatároztuk a ^{13}C , ^{14}C , D, valamint a különböző halogén izotópokkal helyettesített metilhalogenid molekulák CH_2F , CH_2Cl , CH_2Br , CH_2J redukált állapotösszeg-hányadosait néhány hőmérsékleten. A számításokhoz a közönséges és deuterizált molekulák irodalomban közölt, kísérletileg meghatározott rezgési frekvenciaértékeit használtuk fel.

Bevezetés

Az izotóprendszerek termodinamikai sajátságainak kiszámításához mindenekelőtt a különböző izotópmolekulák rezgési frekvenciáinak ismerete szükséges. A rezgési frekvenciák a Wilson-féle \underline{GF} mátrix karakterisztikus gyökeiként állíthatók elő, (\underline{G} a molekula kinetikus energia mátrixának inverze, \underline{F} a potenciális energia mátrixa [1]). Az izotópmolekulák rezgési frekvenciáinak meghatározása úgy történik, hogy a közönséges molekula - és esetleg egy izotópváltozata - kísérletileg meghatározott rezgési frekvenciáiból, és némely esetben rendelkezésre álló egyéb paraméterekből /vibrációs-rotációs kölcsönhatási állandók, átlagos rezgési amplitudók, stb./ először meghatározzuk a molekula \underline{F} erőállandó-mátrixát. Mivel az erőállandóértékek a molekula elektronszerkezetétől függenek, így jó közeli-tésben /Born-Oppenheimer-közelítés, lásd pl. [2] / függetlennek tekinthetők a molekulát alkotó atomok tömegétől, azaz a molekula erőtere nem változik meg az izotóphelyettesítés hatására. Ennek következtében a fentiek szerint számított erőállandó-mátrixszal meghatározhatók az izotópmolekulák rezgési frekvenciái. Meg kell jegyeznünk azonban, hogy a legtöbb esetben a rendelkezésre álló összes adat felhasználása sem elégséges a molekula legáltalánosabb harmonikus erőterbeni erőállandóinak egyértelmű meghatározásához. Jelen esetben azonban elegendő egy olyan erőállandó-mátrix meghatározása, amely kielégítő pontossággal visszaadja a kísérletileg észlelt rezgési frekvenciákat, ugyanis ennek segítségével már kiszámíthatók a rezgési frekvenciák izotópeltolódásainak pontos értékei.

Az izotópmolekulák rezgési frekvenciáinak ismeretében, a redukált állapotösszeg-hányadosok kiszámításán keresztül, lehetővé válik ideális gázok izotópcseré egyensúlyi állandóinak kiszámítása, valamint az izotóp molekulapárok termodinamikai függvényei közti különbségek meghatározása [3, 4]

Meghatároztuk a különböző metilhalogenid molekulák legáltalánosabb harmonikus erőterbeni erőállandóit a közönséges és a deuterizált molekulák kísérletileg észlelt rezgési frekvenciáinak ismeretében, továbbá az izotóphelyettesítés / ^{13}C , ^{14}C , D, halogénizotópok/ által előidézett rezgési frekvenciaeltolódásokat, valamint a különböző izotóp molekulapárok redukált állapotösszeg-hányadosait néhány hőmérsékleten.

Az erőállandó-mátrix számításának módszere

Az általunk alkalmazott erőállandó meghatározási módszert H. Johansen írta le [5, 6]. Egy alkalmasan megválasztott \underline{F}_0 kiindulási mátrix segítségével meghatározzuk a \underline{GF}_0 mátrix sajátértékeit és sajátvektorait a közönséges és deuterizált molekulára nézve:

$$\underline{L}_0^{-1} \underline{G} \underline{F}_0 \underline{L}_0 = \underline{\Lambda} \quad \underline{L}_0^{*-1} \underline{G}^* \underline{F}_0 \underline{L}_0^* = \underline{\Lambda}^*$$

/ $\underline{\Lambda}_0$ egy diagonálmátrix, amely a \underline{GF}_0 mátrix sajátértékeit tartalmazza; \underline{L}_0 a sajátvektormátrix; a * -gal jelölt mennyiségek a deuterizált molekulára vonatkoznak/.

Fentiekből következnek az alábbi összefüggések:

$$\underline{F}_0 = \underline{G}^{-1} \underline{L}_0 \underline{\Lambda}_0 \underline{L}_0^{-1} \quad \underline{F}_0^* = \underline{G}^{*-1} \underline{L}_0^* \underline{\Lambda}_0^* \underline{L}_0^{*-1}$$

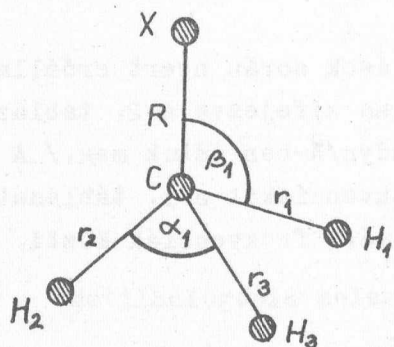
A $\underline{\Lambda}_0$, $\underline{\Lambda}_0^*$ diagonálmátrixokat a kísérletileg észlelt rezgési frekvenciáknak megfelelő $\underline{\Lambda}$, ill. $\underline{\Lambda}^*$ diagonálmátrixokkal helyettesítve két, egymástól különböző \underline{F}_1 , ill. \underline{F}_1^* mátrixot kapunk, amelyek a $\underline{\Lambda}$ ill. $\underline{\Lambda}^*$ mátrixot reprodukálják:

$$\underline{F}_1 = \underline{G}^{-1} \underline{L}_0 \underline{\Lambda} \underline{L}_0^{-1}$$

$$\underline{F}_1^* = \underline{G}^{*-1} \underline{L}_0^* \underline{\Lambda}^* \underline{L}_0^{*-1}$$

Az $\underline{F} = \frac{\underline{F}_1 + \underline{F}_1^*}{2}$ mátrixszal mint új kiinduló mátrixszal megismételjük az algoritmust. Egy bizonyos számú iterációs lépés után egy olyan \underline{F} mátrixot kapunk, amellyel a kísérletileg észlelt rezgési frekvenciák közelítőleg reprodukálhatók.

Felhasznált adatok és számítási eredmények



1. ábra

A metilhalogenidek különböző erőter-
modellekre vonatkozó erőállandóit már számos
szerző meghatározta, lásd pl. [7 - 10]. A
molekuláknak hat rezgési frekvenciája van,
három A_1 speciesű és három E speciesű,
ennek megfelelően 12 erőállandója a legál-
talánosabb harmonikus erőterben.

A metilhalogenid molekulák belső
koordinátái, amelyek az egyensúlyi helyzet-
ből való elmozdulást jelölik, a következők:

R, r_i / $i = 1, 2, 3$ / kötéstávolságváltozások és az α_i, β_i / $i = 1, 2, 3$ / vegyér-
tékszög-változások /lásd 1. ábra; X a halogénatomot jelöli/. A számítások
során használt molekulageometriai adatokat, valamint atomtömegeket az 1.
táblázatban állítottuk össze [7, 9, 10]. A \underline{G} és \underline{F} mátrixokat az alábbi
szimmetriakoordinátákban írtuk fel [9]:

A_1 osztály:

$$\begin{aligned}
 S_1 &= (1/\sqrt{3})(r_1 + r_2 + r_3) \\
 S_{2a} &= (r_1/\sqrt{6})(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 - \beta_1 - \beta_2 - \beta_3) \\
 S_{2b} &= (r_1/\sqrt{6})(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \beta_1 + \beta_2 + \beta_3) \\
 S_3 &= R \\
 S_2 &= PS_{2a} - QS_{2b}, \quad P = (1 + K)/(2 + 2K^2)^{1/2} \\
 &\quad Q = (1 - K)/(2 + 2K^2)^{1/2} \\
 &\quad K = -3 \sin\beta \cos\beta/\sin\alpha
 \end{aligned}$$

E osztály:

$$\begin{aligned}
 S_{4x} &= (1/\sqrt{6})(2r_1 - r_2 - r_3) \\
 S_{4y} &= (1/\sqrt{2})(r_2 - r_3) \\
 S_{5x} &= (r_1/\sqrt{6})(2\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3) \\
 S_{5y} &= (r_1/\sqrt{2})(\alpha_2 - \alpha_3) \\
 S_{6x} &= (r_1/\sqrt{6})(2\beta_1 - \beta_2 - \beta_3) \\
 S_{6y} &= (r_1/\sqrt{2})(\beta_2 - \beta_3)
 \end{aligned}$$

Az \underline{F}_0 kiindulási mátrixot a J. Aldous és I.M. Mills által meg-
határozott erőállandó-mátrixok [7, 10] alapján választottuk meg. A számi-
tásokhoz felhasználtuk mind a közönséges, mind a deuterizált molekulák ki-

sérletileg meghatározott és anharmonicitásra korrigált rezgési frekvenciáit [7 , 9] . /Lásd 3. táblázat./

A metilhalogenid molekuláknak a számítások során nyert erőállandóit a fentebb definiált szimetriakoordinátákban kifejezve a 2. táblázatban foglaltuk össze. /Az erőállandó-értékeket $m\text{dyn}/\text{Å}$ -ben adtuk meg./ A számított és a kísérletileg észlelt rezgési frekvenciákat a 3. táblázatban tüntettük fel. Mint látható, a számított és mért frekvenciák közti legnagyobb átlagos eltérés 0,23 %.

Az izotópmolekulák redukált állapotösszeg-hányadosai

Valamely molekula két, izotóppal helyettesített változatának redukált állapotösszeg-hányadosa - a harmonikus oszcillátor, merev rotátor közelítésben - meghatározható egyedül csak a molekulák rezgési frekvenciáinak ismeretében /lásd pl. [11] / :

$$\frac{\sigma^*}{\sigma} f = \prod_{i=1}^{3n-6} \frac{u_i^*}{u_i} \frac{\sinh(u_i/2)}{\sinh(u_i^*/2)}$$

ahol a * vonatkozik a nehezebb izotópot tartalmazó molekulára; σ a molekula szimmetriaszáma; $u_i = \frac{hc\omega_i}{kT}$, ω_i a molekula i -edik normálrezgésének frekvenciája $\cdot\text{cm}^{-1}$ /; n a molekula atomjainak, $3n-6$ a molekula normálrezgéseinek száma.

A 4-7. táblázatokban megadjuk a különböző izotóp metilhalogenid molekulák redukált állapotösszeg-hányados értékeit néhány hőmérsékleten.

A számítások eredményei is igazolják a következő, elméletileg levezethető összefüggések érvényességét [11, 12] :

$$\frac{\sigma^*}{\sigma} f\left(\frac{{}^{12}\text{CH}_3\text{X}^*}{{}^{12}\text{CH}_3\text{X}}\right) = \frac{\sigma^*}{\sigma} f\left(\frac{{}^{12}\text{CD}_3\text{X}^*}{{}^{12}\text{CD}_3\text{X}}\right) \quad \text{/lásd 5., 6. táblázat/}$$

valamint

$$\frac{\sigma^*}{\sigma} f\left(\frac{{}^{14}\text{CH}_3\text{X}}{{}^{12}\text{CH}_3\text{X}}\right) - 1 \cong 2 \left[\frac{\sigma^*}{\sigma} f\left(\frac{{}^{13}\text{CH}_3\text{X}}{{}^{12}\text{CH}_3\text{X}}\right) - 1 \right] \quad \text{/lásd 4., 7. táblázat/}$$

Köszönettel tartozunk Kiss Istvánnak a probléma felvetéséért és a munka támogatásáért.

1. táblázat

Metilhalogenid molekulák geometriai adatai és a számítások során használt atomtömegek

	$r_i/\text{CH}/\text{Å}$	$R/\text{CX}/\text{Å}$	HCH $\angle / \alpha /$	HCX $\angle / \beta /$
CH_3F	1,095	1,386	$110^\circ 20'$	$108^\circ 36'$
CH_3Cl	1,095	1,780	$110^\circ 50'$	$107^\circ 21'$
CH_3Br	1,095	1,938	$111^\circ 20'$	$107^\circ 4'$
CH_3I	1,095	2,139	$111^\circ 40'$	$106^\circ 40'$
Atom	$\text{m}^{-1}/\text{a.t.e.}/^{-1}$	Atom	$\text{m}^{-1}/\text{a.t.e.}/^{-1}$	
H	0,991921	^{19}F	0,052619	
D	0,496341	^{35}Cl	0,028588	
^{12}C	0,083307	^{37}Cl	0,027043	
^{13}C	0,076879	^{79}Br	0,012667	
^{14}C	0,071389	^{81}Br	0,012354	
		^{127}I	0,007877	

2. táblázat

Metilhalogenid molekulák számított erőállandói a legáltalánosabb harmonikus erőterben /mdyn/Å/

	Fluoridok	Kloridok	Bromidok	Jodidok
F ₁₁	5,415	5,408	5,448	5,472
F ₁₂	-0,0096	-0,088	-0,0099	-0,047
F ₁₃	0,404	-0,154	0,023	-0,026
F ₂₂	0,620	0,571	0,510	0,486
F ₂₃	-0,593	-0,462	-0,373	-0,323
F ₃₃	5,708	3,439	2,886	2,330
F ₄₄	5,406	5,463	5,480	5,598
F ₄₅	-0,136	-0,226	-0,233	-0,066
F ₄₆	0,169	-0,185	-0,183	0,185
F ₅₅	0,494	0,466	0,444	0,444
F ₅₆	-0,061	0,028	0,065	0,048
F ₆₆	0,757	0,657	0,606	0,511

3. táblázat

Metilhalogenid molekulák kísérletileg észlelt és számított rezgési frekvenciái

	CH ₃ F		CD ₃ F		CH ₃ ³⁵ Cl		CD ₃ ³⁵ Cl	
	ω_e^x	ω_{sz}^x	ω_e	ω_{sz}	ω_e	ω_{sz}	ω_e	ω_{sz}
ω_1	3055	3052,2	2185	2186,9	3062	3064,9	2207	2205,1
ω_2	1500	1499,5	1160	1159,8	1398	1399,4	1054	1053,8
ω_3	1067	1066,9	1005	1005,1	733	733,5	698	697,6
ω_4	3165	3167,1	2350	2348,2	3209	3206,4	2380	2382,0
ω_5	1510	1505,6	1095	1096,9	1510	1511,9	1093	1091,8
ω_6	1212	1208,4	920	923,8	1049	1050,4	790	789,0
	^{xx} $\Delta = 0,13 \%$		$\Delta = 0,12 \%$		$\Delta = 0,10 \%$		$\Delta = 0,08 \%$	
	CH ₃ ⁷⁹ Br		CD ₃ ⁷⁹ Br		CH ₃ J		CD ₃ J	
ω_1	3061	3063,4	2196	2194,4	3060	3072,1	2210	2201,5
ω_2	1332	1326,4	1002	1007,3	1288	1286,1	975	975,0
ω_3	614	617,4	580	576,9	533	536,9	502	499,8
ω_4	3213	3210,2	2381	2382,8	3229	3231,6	2400	2398,0
ω_5	1506	1506,2	1084	1084,5	1504	1504,3	1083	1082,5
ω_6	975	974,6	730	729,9	906	906,1	676	675,8
	$\Delta = 0,20 \%$		$\Delta = 0,21 \%$		$\Delta = 0,23 \%$		$\Delta = 0,16 \%$	

$x \omega_e, \omega_{sz}$ az észlelt, ill. számított rezgési frekvenciák cm^{-1} -ben

^{xx} Δ a számított és mért frekvenciák közti átlagos eltérés.

4. táblázat

Izotóp metilfluorid molekulák redukált állapotösszeg-hányadosai

$^{\circ}\text{K}$	$\frac{^{13}\text{CH}_3\text{F}}{^{12}\text{CH}_3\text{F}}$	$\frac{^{14}\text{CH}_3\text{F}}{^{12}\text{CH}_3\text{F}}$	$\frac{^{12}\text{CD}_3\text{F}}{^{12}\text{CH}_3\text{F}}$	$\frac{^{13}\text{CD}_3\text{F}}{^{13}\text{CH}_3\text{F}}$	$\frac{^{13}\text{CD}_3\text{F}}{^{12}\text{CH}_3\text{F}}$
250	1,183	1,367	20791,212	21262,930	1,210
300	1,141	1,279	2705,784	2751,697	1,161
350	1,113	1,221	639,627	647,986	1,128
400	1,093	1,179	219,955	222,217	1,104
450	1,078	1,149	97,156	97,955	1,087
500	1,066	1,126	51,128	51,486	1,073

5. táblázat

Izotóp metilklorid molekulák redukált állapotösszeg-hányadosai

$^{\circ}\text{K}$	$\frac{^{12}\text{CD}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}{^{12}\text{CH}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}$	$\frac{^{13}\text{CH}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}{^{12}\text{CH}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}$	$\frac{^{12}\text{CH}_3\text{ }^{37}\text{Cl}}{^{12}\text{CH}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}$	$\frac{^{12}\text{CD}_3\text{ }^{37}\text{Cl}}{^{12}\text{CD}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}$	$\frac{^{13}\text{CD}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}{^{12}\text{CH}_3\text{ }^{35}\text{Cl}}$
250	17736,755	1,159	1,012	1,012	18155,174
300	2371,487	1,123	1,009	1,009	2413,811
350	573,048	1,099	1,007	1,007	581,008
400	200,632	1,081	1,005	1,005	202,846
450	89,933	1,068	1,004	1,004	90,733
500	47,899	1,058	1,003	1,004	48,246

6. táblázat

Izotóp metilbromid molekulák redukált állapotösszeg-hányadosai

$^{\circ}\text{K}$	$\frac{^{12}\text{CD}_3^{79}\text{Br}}{^{12}\text{CH}_3^{79}\text{Br}}$	$\frac{^{13}\text{CH}_3^{79}\text{Br}}{^{12}\text{CH}_3^{79}\text{Br}}$	$\frac{^{12}\text{CH}_3^{81}\text{Br}}{^{12}\text{CH}_3^{79}\text{Br}}$	$\frac{^{12}\text{CD}_3^{81}\text{Br}}{^{12}\text{CD}_3^{79}\text{Br}}$	$\frac{^{13}\text{CD}_3^{79}\text{Br}}{^{13}\text{CH}_3^{79}\text{Br}}$
250	15698,616	1,148	1,002	1,002	16056,337
300	2148,920	1,114	1,002	1,002	2186,016
350	528,651	1,092	1,001	1,001	535,763
400	187,679	1,075	1,001	1,001	189,686
450	85,050	1,063	1,001	1,001	85,784
500	45,692	1,054	1,001	1,001	46,014

7. táblázat

Izotóp metiljodid molekulák redukált állapotösszeg-hányadosai

$^{\circ}\text{K}$	$\frac{^{13}\text{CH}_3\text{J}}{^{12}\text{CH}_3\text{J}}$	$\frac{^{14}\text{CH}_3\text{J}}{^{12}\text{CH}_3\text{J}}$	$\frac{^{12}\text{CD}_3\text{J}}{^{12}\text{CH}_3\text{J}}$	$\frac{^{13}\text{CD}_3\text{J}}{^{13}\text{CH}_3\text{J}}$	$\frac{^{13}\text{CD}_3\text{J}}{^{12}\text{CD}_3\text{J}}$
250	1,140	1,276	14515,622	14846,496	1,166
300	1,108	1,211	2021,882	2056,864	1,128
350	1,087	1,167	503,921	510,727	1,102
400	1,072	1,137	180,677	182,620	1,083
450	1,060	1,115	82,501	83,217	1,069
500	1,051	1,098	44,584	44,899	1,059

I r o d a l o m

- [1] Wilson, E.B. jr., Decius, J.C., Cross, P.C.: Molecular Vibrations, McGraw-Hill Book Co. New York 1955
- [2] Infrared Spectroscopy and Molecular Structure Ed. Mansel Davies Elsevier Publ. Co. Amsterdam-London-New York 1963
- [3] Urey, H.C.: J. Chem. Soc. 1947, 562
- [4] Bigeleisen, J., Goeppert-Mayer, M.: J. Chem. Phys. 15, 261 /1947/
- [5] Johansen, H.: Z. Phys. Chem. 227, 305 /1964/
- [6] Johansen, H.: Z. Phys. Chem. 230, 240 /1965/
- [7] King, W.T., Mills, I.M., Crawford, B.: J. Chem. Phys. 27, 455 /1957/
- [8] King, W.T., Crawford, B.: J. Mol. Spectrosc. 5, 421 /1960/
- [9] Aldous, J., Mills, I.M.: Spectrochim. Acta 18, 1073 /1962/
- [10] Aldous, J., Mills, I.M.: Spectrochim. Acta 19, 1567 /1963/
- [11] Vojta, G.: Lehrbuch der Kernphysik /G. Hertz/ III. kötet Teubner, B.G., Leipzig 1962, 88-116
- [12] Bigeleisen, J.: Proc. Int. Symp. on Isotope Separation, Amsterdam 1957, 121

Érkezett: 1968. ápr. 18.

KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.

KOMPENZÁCIÓS MÓDSZER HATÁSOSÁGÁRÓL AZ ELEKTROLITTANKOS TÉRMÉRÉSNEÉL

Írta: Királyhidi László

Összefoglalás

A cikkben az elektrolittankos térmérésnél fellépő szórt kapacitásokat kompenzálással csökkentő módszer hatásossága kerül bemutatásra, amely lehetővé teszi a mérés pontosságának növelését.

A Gyorsító Laboratóriumban szükségessé vált a gyorsított ionnyaláb pályájának számítása céljából, hogy a gyorsítócsőben lévő téreloszlást ki-mérjük. A villamos erőtér mérési módszerei közül az elektrolittankban történő térmérést alkalmaztuk. Az elektrolittankban kialakuló téreloszlás ugyanis megegyezik a valóságban fellépő téreloszlással.

Az elektrolittankban az áramsűrűség minden pontban

$$\vec{i} = \lambda \vec{E}, \text{ ahol } \vec{i} \text{ az áramsűrűség vektora,}$$
$$\vec{E} \text{ a térerősség vektora,}$$
$$\lambda \text{ az elektrolit fajlagos vezetőképessége.}$$

Az elektrolitban kialakuló tér forrásmentes, tehát

$$\operatorname{div} \vec{i} = 0$$

Mivel $E = -\operatorname{grad} U$, behelyettesítve

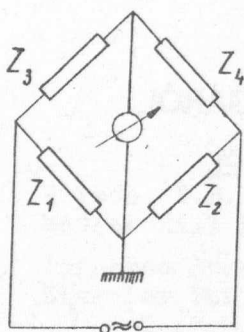
$$\operatorname{div} \lambda \vec{E} = \lambda \operatorname{div} \vec{E} = -\lambda \operatorname{div} \operatorname{grad} U = -\lambda \Delta U = 0$$

Az elektrolit fajlagos vezetőképessége $\lambda \neq 0$, tehát $\Delta U = 0$, azaz kielégíti a Laplace-egyenletet.

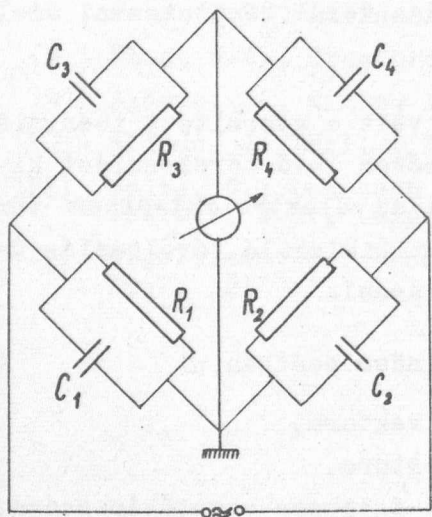
A méréseket egy 475x575 mm méretű ohmos osztóval felszerelt mély elektrolittankban végeztük. A mérés kapcsolása tulajdonképpen egy változó áramu hidkapcsolás /1. ábra/, amely kiegyenlítésének feltétele:

$$Z_1 \cdot Z_4 = Z_2 \cdot Z_3$$

A Z_1 és Z_2 impedancia az induktívitasmentesen tekercselt ohmos dekádellenállást, a Z_3 és Z_4 pedig az elektrolit ellenállását jelenti. Az egyes ágakban az ohmos tagok mellett reaktáns tagok is vannak, amelyek 3-



1. ábra



2. ábra

leg a kapacitásokból származnak. Ha a hidat csak ohmosan egyenlítjük ki, a reaktáns részekből mindig marad egy kis zavaró jel, amely csökkenti a mérés pontosságát.

Az irodalomban több módszer ismeretes a reaktáns rész kikompenzálására. Az elektród felületénél az elektrolitban fellépő ún. polarizációs impedancia, valamint a szórt kapacitások kihangolását Einstein [1] az elektrolitágba, McDonald [2] pedig az osztóágba beiktatott kondenzátorral végzi. Más szerzők [3], [4] csak a szórt kapacitások kihangolását végzik a váltakozóáramu hidkapcsolásoknál szokásos Wagner-földeléssel.

A cikkben mind a polarizációs impedanciát, mind pedig a szórt kapacitásokból származó reaktáns tagokat kompenzációval csökkentő módszer hatásossága kerül bemutatásra.

Az impedanciákat felbontva a kapcsolási rajz a következőképpen alakul /2. ábra/.

A kiegyenlítés feltétele:

$$\frac{R_1 \times X_{C_1}}{R_2 \times X_{C_2}} = \frac{R_3 \times X_{C_3}}{R_4 \times X_{C_4}}$$

A kiegyenlítési egyenletet részletesebben kiírva kapjuk:

$$\frac{R_1}{R_2} \cdot \frac{1 + j\omega C_2 R_2}{1 + j\omega C_1 R_1} = \frac{R_3}{R_4} \cdot \frac{1 + j\omega R_4 C_4}{1 + j\omega R_3 C_3}$$

Ebből az egyenletből csak a képzetes tagokat tartalmazó törteket vizsgáljuk meg. A valós részből a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{R_3}{R_4} C_2 \cdot C_3 = \frac{R_1}{R_2} \cdot C_1 C_4$$

Mivel $\frac{R_3}{R_4} = \frac{R_1}{R_2}$ az ohmos kiegyenlítés feltétele,

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{C_4}{C_3} \quad \text{kell hogy legyen.}$$

A reaktáns rész képzetes tagját vizsgálva kapjuk:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{C_2}{C_1}$$

Az előbb kapott egyenlőségek felhasználásával írhatjuk:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{C_2}{C_1} = \frac{R_3}{R_4} = \frac{C_4}{C_3}$$

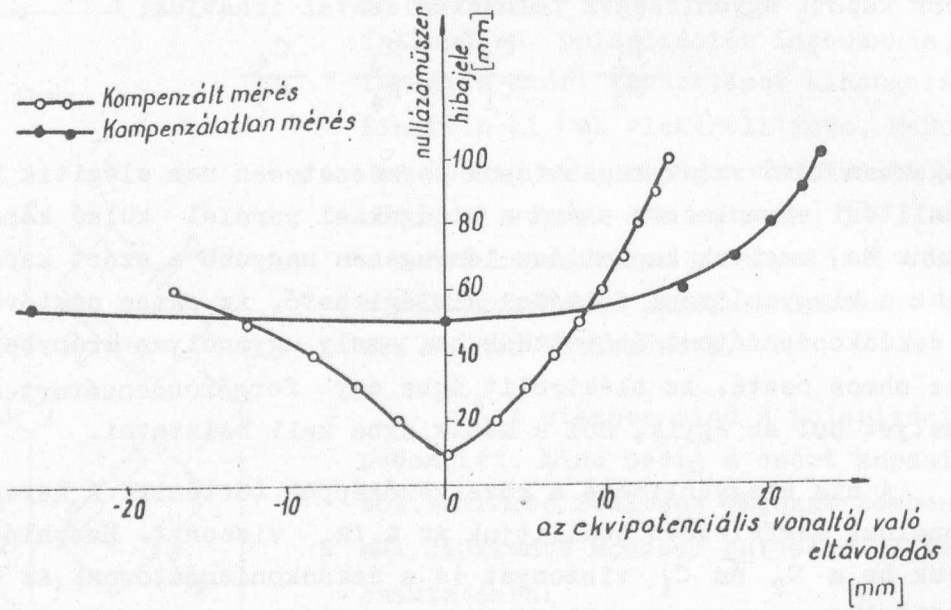
A hidágakban lévő szórt kapacitások természetesen nem elégitik ki a fenti kiegyenlítési egyenletet, ezért a hidágakkal paralel külső kapacitásokat iktattunk be, amelyek kapacitása lényegesen nagyobb a szórt kapacitásoknál, és velük a kiegyenlítési feltétel kielégíthető. Az ohmos osztóval párhuzamosan dekádkondenzátort építettünk be, amely ugyanolyan arányban osztható, mint az ohmos osztó. Az elektrolit ágba egy forgókondenzátort kapcsolunk be, amelyet hol az egyik, hol a másik ágba kell beiktatni.

A hid kiegyenlitése a következőképpen történik. A keresett potenciálvonalnak megfelelően beállítjuk az R_1/R_2 viszonyt. Hasonló arányban állítjuk be a C_2 és C_1 viszonyát is a dekádkondenzátoron. Az elektrolitba merülő tűt mozgatva a nullázó műszeren minimumot keresünk, ekkor R_3/R_4 viszony is durván egyenlő lesz az $R_1/R_2 = C_2/C_1$ aránypárral. A minimum elég nagy tartományban jelentkezik, melynek oka az R_3-R_4 hidágakban lévő reaktáns tagok jelenléte. Ezeket a tagokat az ide beépített forgókondenzátorral tudjuk kompenzálni. A forgókondenzátor és a tű ismételt állításával két-három lépés után megnyugtatóan beállítható a jelminimum, illetve az $R_3/R_4 = C_4/C_3$ egyenlőség.

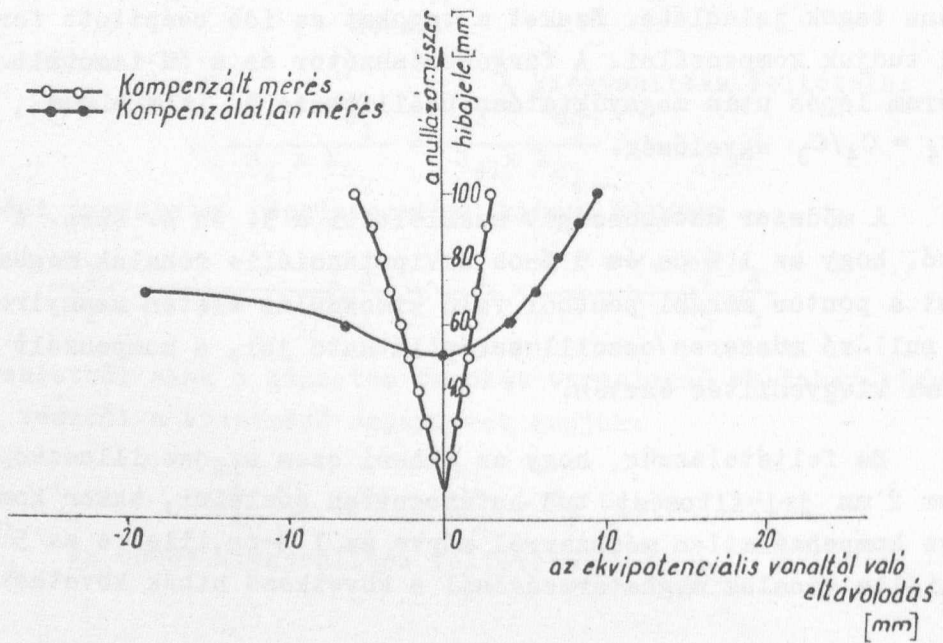
A módszer hatásosságát szemlélteti a 3. és 4. ábra. A diagrammon látható, hogy az 1 %-os és 5 %-os ekvipotenciális vonalak meghatározásánál a tűvel a pontos mérési pontból való kimozdulás esetén mennyire növekszik meg a nullázó műszeren/oszcilloszkóp/látható jel, a kompenzált és kompenzálatlan kiegyenlítés esetén.

Ha feltételezzük, hogy az emberi szem az oszcilloszkóp ernyőjén minimum 2 mm jelváltozást tud határozottan észlelni, akkor kompenzált, illetve kompenzálatlan módszerrel mérve az 1 %-os, illetve az 5 %-os ekvipotenciális vonalak meghatározásánál a következő hibák követhetők el:

Kompenzált	Kompenzátlan
1 % $\pm 0,8$ mm	+ 7 mm - 14
5 % $\pm 0,1$ mm	± 1 mm



3. ábra



4. ábra

Látszik, hogy a kompenzálatlan esetben a lapos minimum miatt az 1 %-os vonal praktikusan meghatározhatatlan.

Ismeretes, hogy az elektródokhoz közeleső ekvipotenciális vonalak pontos meghatározása nagyon kényes feladat. Ezen vonalak meghatározásánál az elektrolit felületi feszültsége, az elektródok és a tü anyaga, az elektrolittartály faleffektusa, a tü merülési mélysége stb. erősen befolyásolják a mérés pontosságát. A cikkben ismertetett módszer ezeket a hibákat nem szünteti meg, csak a hid kiegyenlítésénél a szórt kapacitások zavaró hatását kompenzálja, és ezáltal a hid nullázott állapotának megállapítását teszi pontosabbá.

Befejezésül szeretnék köszönetet mondani Varga László kartársnak, aki a módszer kifejlesztésénél látott el sok értékes tanáccsal, és a Távközlési Kutató Intézetnek, amely rendelkezésünkre bocsájtotta az elektrolittankot.

I r o d a l o m

- [1] Einstein, P.A.: Brit. J. Appl. Phys. 2, 49 /1951/
- [2] McDonald: Proc. I.E.E.E.100-II, 145 /1953/
- [3] Einstein, P.A., J.Sci. Instr. 27, 27 /1950/
- [4] Koltay, E.: M.Fiz.F. 4, 213 /1956/

Érkezett: 1968. jan. 24.

KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.

NEUTRONHIÁNYOS RITKAFÖLD IZOTÓPOK ELŐÁLLÍTÁSA 680 MeV-es PROTONOKKAL BESUGÁRZOTT GADOLINIUM ÉS NEODIMIUM CÉLANYAGBÓL

Irta: Molnár Ferenc és Lebegyev N. A.

Összefoglalás

Neutronhiányos ritkaföld izotópoknak nagyenergiájú protonokkal besugárzott gadolinium és neodimium célanyagától történő csoportos elválasztására anioncserés módszert dolgoztunk ki. A módszer a ritkaföldeknek nitrátok vizes-metilalkoholos oldataiból végbemenő anioncserés adszorpcióján alapszik. A ritkaföld izotópok egymástól történő elválasztására a szokásos, α -hidroxi-izobutirátos elución alapuló kationcserés módszert alkalmaztuk.

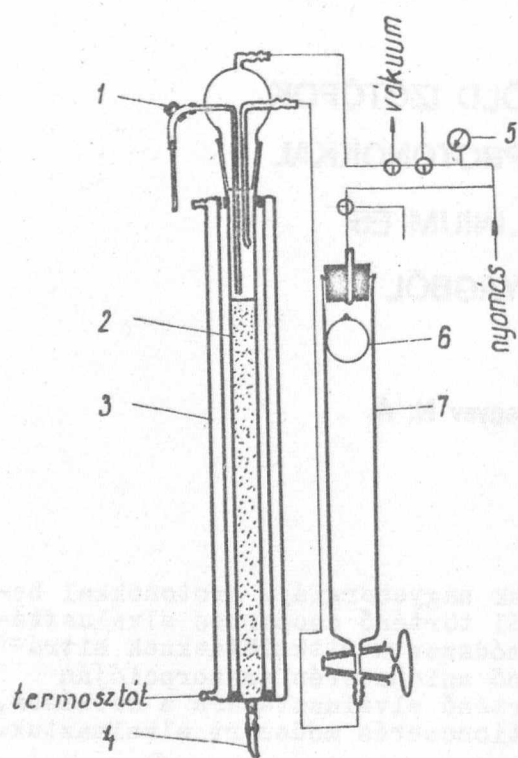
Hordozómentes ritkaföld izotópoknak nagyenergiájú protonokkal besugárzott ritkaföld célanyagától történő elválasztása egyike a legkritikusabb kromatográfiás műveleteknek. Erre a célra a szokásos kationcserés és extrakciós-kromatográfiás módszerek nem elég hatásosak. Ezért a feladat megoldására anioncserés módszert fejlesztettünk ki, amely a ritkaföldeknek nitrátok vizes-metilalkoholos oldataiból végbemenő anioncserés adszorpcióján alapszik [1-5]. A módszert sikeresen alkalmaztuk cérium csoportú ritkaföld minták /célanyagok/ tisztítására és analízisére is [6 - 8].

A hordozómentes ritkaföld izotópok előállításának /preparálásának/ második lépése, a célanyagától elkülönített termékek egymástól való elválasztása, már lényegesen egyszerűbb feladat. Erre a célra szokásos kationcserés módszert alkalmazhatunk [9 - 10].

Kísérleti rész

Munkánk során Dowex 1X8 /200-400 mesh, nitrát forma/ anioncserélőt, Dowex 50X8 /-400 mesh, ammónium forma/ kationcserélőt, analitikai tisztaságu vegyszereket és tisztított ritkaföld-oxidokat [6] használtunk.

Az anioncserés oszlop rajzát az 1. ábra mutatja. Az oszlop 350 mm hosszúságu üvegcső, melynek alsó részéhez műanyag kifolyó cső, felső, csi-



1. ábra

Kromatográfiás oszlop

1 - elektromágneses szelep, 2- oszlop, 3-fűtőköpeny, 4- műanyag cső, 5- manometer, 6- uszó, 7- oldattartály

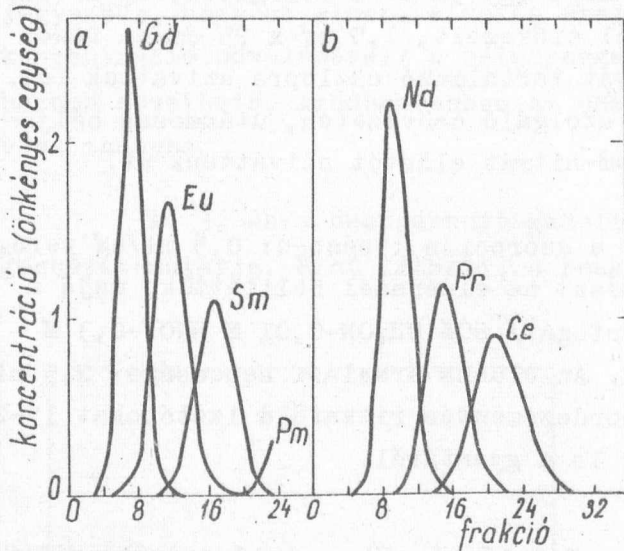
Az eluens, megfelelő méretű tartályból, nyomás alatt lép az oszlopba. A tartályban gömb alakú uszót helyeztünk el, az oldatban időegység alatt oldódó gáz mennyiségének csökkentése céljából. Ugyanis, ha az eluens az alkalmazott túlnyomás alatt gázzal telítődik, az oszlop alján - ahol a nyomás már alig valamivel több, mint egy atmoszféra - az eluens a gázra nézve teltelítetté válik, és gázképződés indul meg. Az oldatból kiváló gáz a gyantaágyat feltöri. Különösen gyakori a gázkiválás jelensége abban az esetben, ha az oszlopot szobahőmérsékletnél magasabb hőmérsékleten üzemeltetjük. Ilyenkor kizárólag kiforralt oldatokat célszerű alkalmazni.

Az oszlopokat 0,5-1 atm nyomás alatt üzemeltettük. A megfelelő nyomás biztosítása nitrogén-palack útján történt, melyhez redukciós szelepen keresztül - utántöltés céljából - egy másik, nagynyomású nitrogén-palack csatlakozott. A szükséges vákuumot vizlégszivattyúval /esetenként egy gumi-körte segítségével/ állítottuk elő.

szolatos részéhez pedig a bevezető csöveket magában foglaló csiszolatos dugó csatlakozik. Az oszlop vastagsága a kezelendő anyag mennyiségétől függ. /Munkánk során három, különböző vastagságú oszlopot használtunk; 6 mm átmérőjűt 60 mg, 14 mm átmérőjűt 300 mg és 33 mm átmérőjűt 2000 mg R_2O_3 ioncseréjére./ Az oszlop fűtése, kettősfalú köpenyen keresztül, termosztát vizével történik. A kettős fal rendeltetése az, hogy esetleges oszloptörés esetén a nagy aktivitású radioaktív anyagok a termosztátot ne szennyezhessek el. Az oszlop és a köpeny közötti tér rész, a jobb hőátadás biztosítása miatt, desztillált vízzel van kitöltve. A csiszolatos dugón három bemenet található: egy a szorpciós oldat bevezetésére, valamint az oszlop gyantával ki nem töltött felső részének öblítésekor az öblítő oldat kivezetésére, egy az eluens bevezetésére, egy pedig a szükséges nyomás biztosítására.

A termékek egymástól való elválasztására az irodalomból is ismeretes kationcserés mikrooszlop-típust [10] alkalmaztunk.

Az anioncserés elválasztás optimális körülményeinek kiválasztását, valamint az oszlop kalibrálását már korábbi munkánkban [6] ismertett kísérleti technikával végeztük. A 2. ábrán látható kalibrációs görbék alapján



2. ábra

Az anioncserés oszlop kalibrációs görbéi.

Oszlop: 14 m X 250 mm Döwex 1X8 /200-400 mesh, nitrát forma/.
Eluens áramlási sebessége: 2,5 ml/cm²perc. Hőmérséklet: 50°C. a - 300 mg Gd₂O₃, mikromennyiségű Eu, Sm és Pm. Eluens: 80% CH₃OH-0,01 M HNO₃-0,3 M NH₄NO₃. b - 300 mg Nd₂O₃, mikromennyiségű Pr és Ce. Eluens: 70% CH₃OH-0,01 M HNO₃-0,4 M NH₄NO₃.

meghatároztuk a célanyag eluciójához szükséges eluens mennyiségét és a szomszédos termékek elválasztási hozamát.

A célanyag előkészítése és besugárzása

A megfelelő tisztaságú oxidból, nagynyomású /10⁴ kg/cm²/ prés segítségével, 6x12,5x0,5 mm-es /kb. 300 mg/ lapocskákat préseltünk. A lapocskák gyöngyházfényű sima felülettel és megfelelő mechanikai szilárdsággal rendelkeztek.

Fém besugárzásához előzőleg a fémből 0,5 mm vastagságú lemezt készítettünk. A fém lapítására változtatható tengelytávolságú két hengerből álló prést használtunk. A kész lemezből 6x12,5 mm-es /kb. 260 mg/ darabkákat vágtunk le.

A célanyagot réz vagy tantál szalagok segítségével erősítettük a ciklotron targettartójához.

A célanyagok besugárzását 680 MeV-es protonokkal, a ciklotron belső sugárnyalábjában végeztük. Itt az ionáram erőssége kb. 3 μ A. A besugárzás időtartama 10 perc és 10 óra között változott, a kinyerendő izotópok felezési idejétől függően. Leggyakrabban 30 perces besugárzást alkalmaztunk.

Gadolinium célananyag feldolgozása

A feldolgozást távmanipulátorokkal ellátott forrókamrában végeztük, az alábbiak szerint.

300 mg besugárzott gadolinium-oxidot /vagy 260 mg fémet/ 1,5 ml forró 5 M-os salétromsavban oldottunk. Oldódás után 3 ml 4 M-os metanolos litium-nitrát oldatot adtunk hozzá, majd egy 50°C-ra melegített és az eluens 3-4 ágytérfogatnyi mennyiségével előkezelt, 1,5 cm² x 25 cm-es Dowex LX8 /200-400 mesh, nitrát forma/ ágyat tartalmazó oszlopra szivattuk fel. A célananyag oldatának felszivatására szolgáló csövezeten, utánmosás céljából, még 1 ml 4 M-os metanolos litium-nitrát oldatot szivattunk át.

Az oldat áramlási sebessége a szorpciós lépésben: 0,5 ml/cm² perc. Szorpció után az ágy feletti oszloprészt az eluenssel öblítettük, majd a gadoliniumot 150 ml /10 szabad ágytérfogat/ 80% CH₃OH-0,01 M HNO₃-0,3 M NH₄NO₃ összetételű oldattal eluáltuk. Az eluens áramlási sebessége: 2,5 ml/cm² perc. A gadolinium eluciója után a hordozómentes ritkaföld izotópokat 15-20 ml 0,02 M-os salétromsavval oldottuk le a gyantáról.

A salétromsavas eluátumot megfelelő méretű centrifugacsőbe vittük át, majd sósavval kb. pH=1-ig megsavanyítottuk. 25-30 µl Dowex 50X8 /-400 mesh, ammónium forma/ kationcserélőt adtunk hozzá, és a rendszert két percig levegő átbuborékolatásával kevertük. Eközben a ritkaföldek 90-95 %-a adszorbeálódott. A gyantát centrifugáltuk, majd 5 ml 0,1 M-os ammónium-kloriddal és 5 ml desztillált vízzel mostuk.

A mosott gyantát egy 2 mm x 100 mm-es Dowex 50X8 /-400 mesh, ammónium forma/ ágyat tartalmazó mikrooszlopra vittük át, és a ritkaföld izotópokat ammónium- α -hidroxi-izobutiráttal /pH=4,75/ eluáltuk. Az izobutirát koncentrációját, elució közben, egymásfeletti két keverőkamrából és egy tartályból álló exponenciális keverőrendszerrel változtattuk. Az effluent 15 mm átmérőjű teflonkorongokon, cseppenként fogtuk fel. A cseppek radioaktivitását γ -érzékeny szcintillációs detektorral ellátott sugármérő berendezéssel mértük.

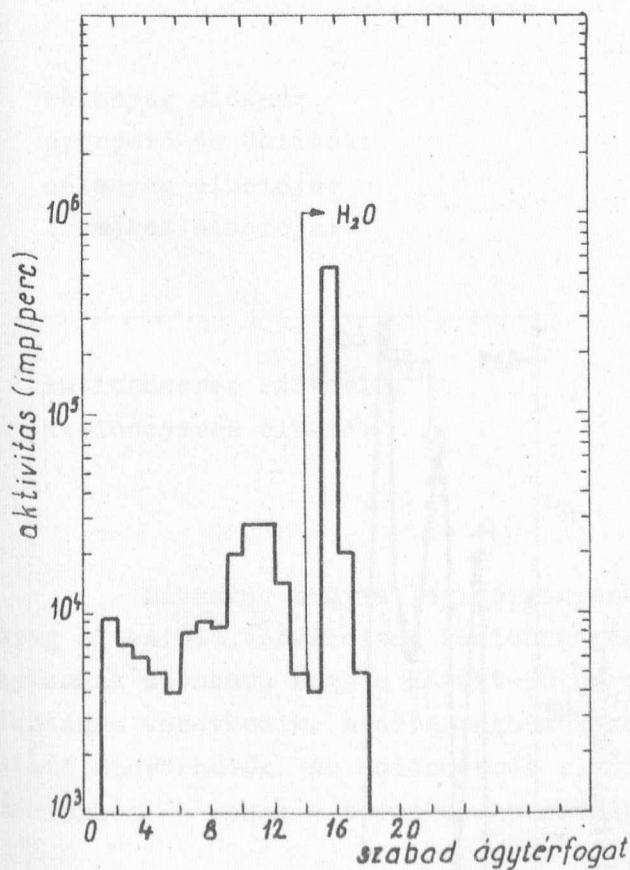
Neodimium célananyag feldolgozása

A neodimium célananyagok feldolgozása hasonló módon történt, azzal az eltéréssel, hogy az anioncserés elválasztáshoz 175 ml, 70 % CH₃OH-0,01 M HNO₃-0,4 M NH₄NO₃ összetételű eluent alkalmaztunk, a termékek mikrokromatográfiás szétválasztását pedig a lépcsős elució módszerével végeztük.

Eredmények és tárgyalásuk

A 2. ábra alapján megállapítottuk, hogy a gadoliniumot 150 ml, a neodimiumot 175 ml eluenssel eluálva, a gadoliniumtól az európium 9 %-a, a szamárium 85 %-a az ezeknél könnyebb termékek 100 %-a, a neodimiumtól a prazeodimium 15 %-a, a cérium 95 %-a, a lantán 100 %-a választható el. Megjegyezzük, hogy az eluens eluciós erejének csökkentésével /pl. a nitrát-koncentráció növelésével/ a célannyal szomszédos termékek elválasztási hozama növelhető. Azonban ebben az esetben az elválasztás hosszabb időt vesz igénybe.

A 3. ábra besugárzott gadolinium célannyal anioncserés eluciós görbét mutatja. Mint látható, a reakciótermékek már az első szabad ágy-

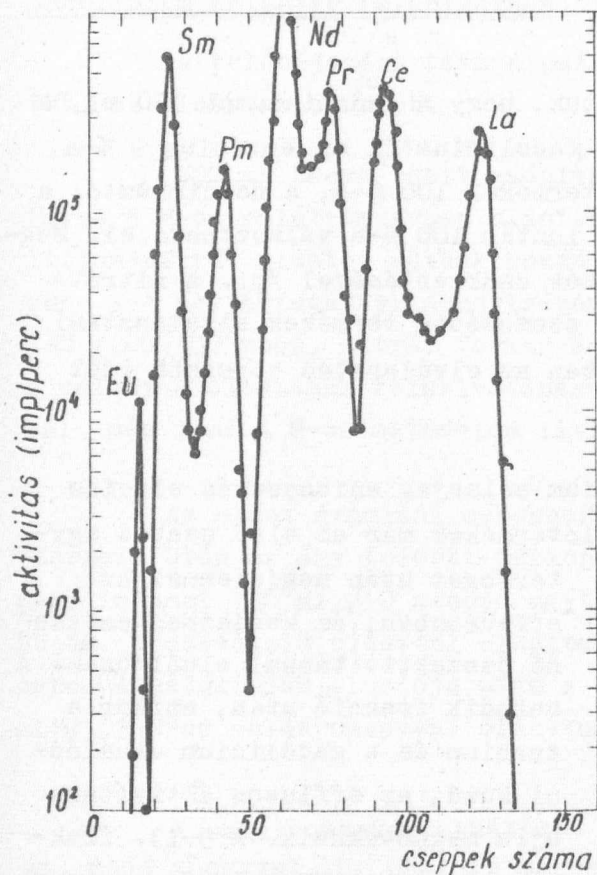


3. ábra

Besugárzott gadolinium minta /260 mg fém/ eluciós görbéje. Eluens: 80 % CH₃OH-0,01 M HNO₃-0,6 M NH₄NO₃. Eluens áramlási sebessége: 2,6 ml/cm² perc. Hőmérséklet: 50°C.

térfogot után megjelennek az effluensben, és kezdetben csökkenő összaktivitással eluálódnak. A hatodik frakció után, amikor a terbium és a gadolinium eluálódni kezd, az effluens aktivitása újra megnövekszik. A 9-13. frakció közötti viszonylagos maximum főleg gadolinium- és európium-izotópoknak tulajdonítható. A vizes eluátum pedig az európium és a szamárium egy részét, valamint az ezeknél könnyebb ritkaföld termékek teljes egészét tartalmazza.

A termékek kationcserés kromatogramját a 4. és az 5. ábrán látjuk. A kromatográfiás csúcsok kisebb-nagyobb mértékű átfedését a leányelem-aktivitások okozzák. A kromatogramokon sem a célannyal nyomai, sem a nagyenergiájú reakciók nem kívánatos termékei nem látszanak. Ez arra mutat, hogy az anioncserés elválasztás határfoka igen jó, és a besugárzott célannyalok feldolgozásának közölt módszerre szelektív a ritkaföldekre nézve.

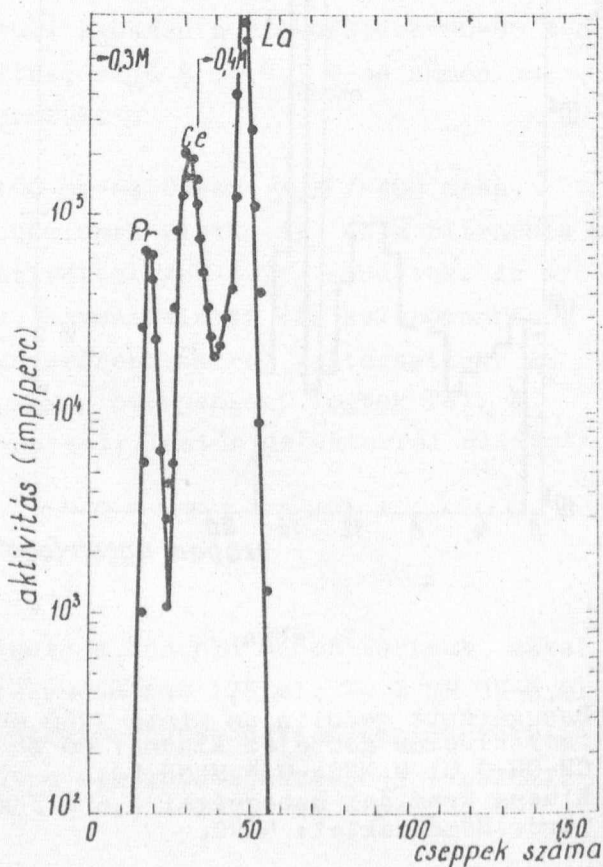


5. ábra

Hordozómentes ritkaföld termékek kationcserés kromatogramja. Oszlop: 2 mm x 110 mm Dowex 50X8 /-400 mesh, ammónium forma/. Eluens: ammónium- α -hidroxi-izobutirát, pH=4,75. Lépcsős elució. Hőmérséklet: 20°C.

4. ábra

Hordozómentes ritkaföld termékek kationcserés kromatogramja. Oszlop: 2 mm x 110 mm Dowex 50X8 /-400 mesh, ammónium forma/. Eluens: ammónium- α -hidroxi-izobutirát, pH=4,75. Fokozatos elució. /Eluens-koncentráció az alsó keverőkamrában: 0,18 M, a felsőben: 0,40 M, az oldattartályban: 1,75 M. A keverőkamrák térfogata: 6,9 ml és 7,4 ml./ Hőmérséklet: 20°C.



A képződési hatáskeresztmetszetek eloszlásfüggvényéből arra lehet következtetni, hogy a nagyenergiájú reakciók nemkívánatos termékei a $Z=20 - Z=56$ tartományba esnek. Az ezeknek megfelelő kémiai elemek közül a Rb, Cs, Ca, Sr, Ba, Sc, Y, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Ag, Zn, Cd, Ga és az In kationjai az anioncserés elválasztás során - a szokásos kísérleti körülmények között - a célanyag előtt eluálódnak. A többi elem eluációs viselkedése nem ismeretes. Számos kísérlet tapasztalatai azt mutatják azonban, hogy ezek sem zavarják; a főterméket nem szennyezik, és sem az anioncserélőn, sem a kationcserélőn nem halmozódnak fel számottevő mértékben.

A feldolgozás részfolyamatainak időigénye az alábbiak szerint alakul:

	Gadolinium célanyag	Neodimium célanyag
célanyag oldása:	5 perc	5 perc
szorpció és öblítés:	4 perc	4 perc
célanyag eluciója:	40 perc	47 perc
termékek eluciója:	6 perc	6 perc
	<hr/>	<hr/>
	55 perc	62 perc
kationcserés szorpció:	15 perc	15 perc
kationcserés elució:	90 perc	40 perc
	<hr/>	<hr/>
	105 perc	55 perc

Látható, hogy a legidőigényesebb részfolyamat a gadolinium célanyag ritkaföld termékeinek kationcserés szétválasztása. Meg kell itt jelezni azonban, hogy a közölt 90 perc a legkésőbb eluáló tagra, a lantanra vonatkozik. A célanyaghoz közelebb eső tagok már rövidebb idő alatt kinyerhetők. Az anioncserés elválasztás időigényét - számottevő mértékben - csak a termékek hozamának rovására lehet csökkenteni.

I r o d a l o m

- [1] Korkisch, J., Tera F.: Anal. Chem., 33, 1265 /1961/
- [2] Faris J.P., Warton J.W.: Anal. Chem., 34, 1077 /1962/
- [3] Edge R.A.: Anal. Chim. Acta, 29, 321 /1963/

- [4] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A., Volkov V.A.: JINR Preprint, E-1921, Dubna, 1964; *Radiochimia*, 8, 183 /1966/
- [5] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A.: JINR Preprint, 2669, Dubna, 1966; *J. Chromatog.*, 26, 215 /1967/
- [6] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A.: JINR Preprint, 2670, Dubna, 1966; *J. Chromatog.*, 26, 225 /1967/
- [7] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A.: Szovjet szabadalom, No 191505, 1967.
- [8] Molnár F., Lebegyev N.A.: *J. Radioanal. Chem.*, /Közlés alatt./
- [9] Choppin G.R., Harvey, B.G. Thompson S.G.: *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 2, 66 /1956/
- [10] Vobecký H., Maštálka A.: *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 28, 709 /1963/

Érkezett: 1968. febr. 9.
KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.

CÉRIUM CSOPORTU RITKAFÖLD MATRIXOK ÖSSZES RITKAFÖLD SZENNYEZŐINEK KONCENTRÁLÁSA

Irta: Molnár Ferenc és Lebegyev N. A.

Összefoglalás

A cérium csoportu ritkaföld matrixok összes ritkaföld szennyezőinek a matrixtól való elválaszthatóságát tanulmányoztuk. Megállapítottuk, hogy a nitrátok vizes-metilalkoholos oldataiból kivitelezett anioncserés kromatográfia hasznos módszert szolgáltat a neodimium és gadolinium matrixok összes ritkaföld szennyezőinek koncentrálására. A szennyezők koncentrártuma analitikai meghatározási módszerüktől függően kezelhető tovább.

Ritkaföld matrixok ritkaföld szennyezőinek teljes analizise - különösen a tisztább termékek esetén - a szennyezők előzetes koncentrártását kívánja meg. Ez az előzetes koncentrártás a ritkaföld analisis legkritikusabb lépése; a koncentrártum komponensei már viszonylag könnyen, szokásos módszerekkel határozhatók meg.

Korábbi munkáinkban megmutattuk, hogy a nitrátok vizes-metilalkoholos oldataiból történő anioncserélés módszere igen hatásosan alkalmazható mikromennyiségű ritkaföldeknek makromennyiségű cérium csoportu ritkaföldtől való elválasztására [1 - 3]. Ezt a lehetőséget felhasználtuk gadolinium matrix könnyű ritkaföld szennyezőinek koncentrártására és analisisére [2, 3]. Az esetek többségében azonban tudni akarjuk a ritkaföld-termékek valamennyi ritkaföld szennyezőjének mennyiségét.

Faris és Warton megállapították, hogy a gadolinium-lutécium tartományon belül az elválasztási tényezők közel egységnyiek [4]. Ezért az ittrium csoportu matrixoktól várhatóan csak a cérium csoportu szennyezők választhatók el, esetleg - a matrix rendszámától függően - még a terbium és a diszprózium. Cérium csoportu matrixok esetében azonban az ittrium csoportu szennyezők elválasztásának, koncentrártásának is megvan a lehetősége. Jelen munkában ennek a lehetőségnek a vizsgálatával kívánunk foglalkozni.

*/
Egyesített Atomkutató Intézet, Dubna.

Kísérleti rész

Anyagok

A kísérletek során felhasznált metanol és ammónium-nitrát analitikai tisztaságu volt. A neodimium-oxid és a gadolinium-oxid átlagosan 1-10 μ g szennyező elem/ g terméknek megfelelő ritkaföld szennyezőket tartalmazott. A gyakorlati makro-mikro elválasztások tényleges kísérleti feltételeinek jobb megközelítése érdekében ezeket az oxidokat felhasználásuk előtt nem tisztítottuk meg.

A ritkaföldek hordozómentes radioaktív izotópjait 680 MeV-es protonokkal besugárzott tantál célsanyagból izoláltuk, és egy 2 mmx100 mm-es Dowex 50X8 / -400 mesh, ammónium forma/ gyanta-ágyon választottuk szét és tisztítottuk, ammónium- α -hidroxiizobutirátos elucióval.

Az anioncserés kísérletekhez az erősen bázikus Dowex 1X8 /200-400 mesh, nitrát forma/ anioncserélő gyantát alkalmaztuk.

Az alkoholos eluenseket minden esetben közvetlenül felhasználásuk előtt készítettük, és salétromsavval 0,01 M savkoncentrációig megsavanyítottuk.

Az oszlop mosására kizárólag kiforralt eluenseket és oldatokat alkalmaztunk, a buborékképződés elkerülése végett.

Eluciók kísérletek

Az eluciók kísérleteket egy 6 mm X 250 mm-es gyanta-ágyon végeztük. A makroelemnek megfelelő 60 mg oxidot, melegítés közben, a makroelem, vagy a vizsgálandó bármelyik mikroelem radioaktív izotópját tartalmazó 0,3 ml 5 M-os salétromsavban oldottuk. Az oldatot 0,7 ml 4 M-os metanolos litium-nitrát oldattal elegyítettük.

A gyanta-ágyat desztillált vizes visszamosással fellazítottuk, majd a megfelelő eluens 4-5 ágytérfogatnyi mennyiségével kezeltük. Közben az oszlopot 50°C-ra felfűtöttük. Miután az oszlop felvette a kívánt hőmérsékletet, a ritkaföldet /földeket/ tartalmazó litium-nitrátos-salétromsavas oldatot az oszlopra vittük. Szorpció után az oszlopnak a gyanta feletti részét az eluenssel öblítettük, és a ritkaföldet /földeket/ eluáltuk. Az oldat áramlási sebessége a szorpció lépésben 0,5 ml/cm² perc, az elució lépésben 1,5 ml/cm² perc volt. Az áramlási sebességet megfelelő nyomás alkalmazásával szabályoztuk. Az eluátumot a szabad ágytérfogatnak megfelelő

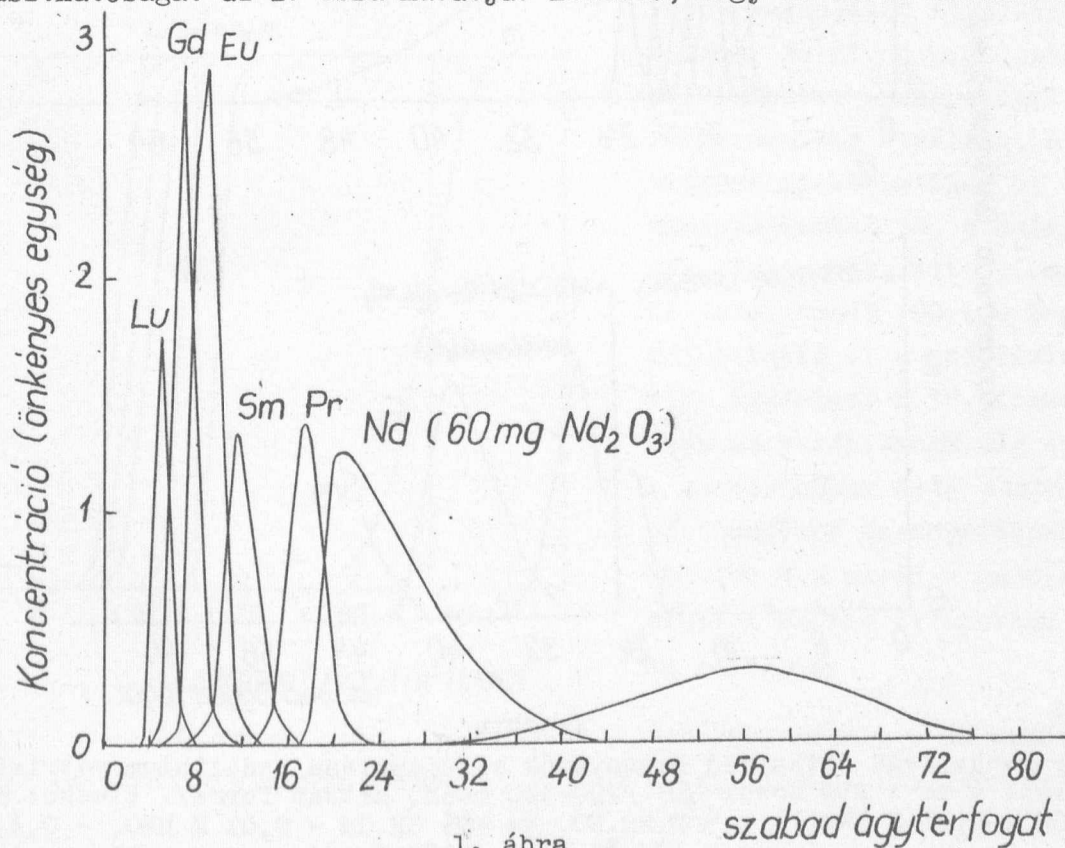
részletekben /2,6 ml/, egy LKB gyártmányu frakciószedő^{1/} segítségével fogtuk fel. A frakciók radioaktivitását egy "kút-típusu" NaI /Tl/ kristállyal ellátott szcintillációs mérőberendezéssel mértük.

Használat után az oszlopot 3-4 ágytérfogatnyi 0,02 M-os salétromsavval, majd ugyanennyi desztillált vízzel mostuk.

A fentebbi kísérletet többször megismételtük, azzal az eltéréssel, hogy mindig más és más ritkaföld radioaktív izotópját /vagy egyidejűleg több ritkaföld radioaktív izotópját/ alkalmaztuk. Mivel a kísérletek eredményei /az elució gorbék/ igen jól reprodukálhatók, az egyes elució gorbéket összerajzolva pontos képet kapunk egyrészt a makromennyiségű, másrészt a makromennyiségű ritkaföld mellett jelenlévő mikromennyiségű ritkaföldek elució sajátosságairól.

Eredmények és tárgyalásuk

Mikromennyiségű ritkaföldeknek makromennyiségű neodimiumtól való elválaszthatóságát az 1. ábra mutatja. Látható, hogy az adott kísérleti



1. ábra

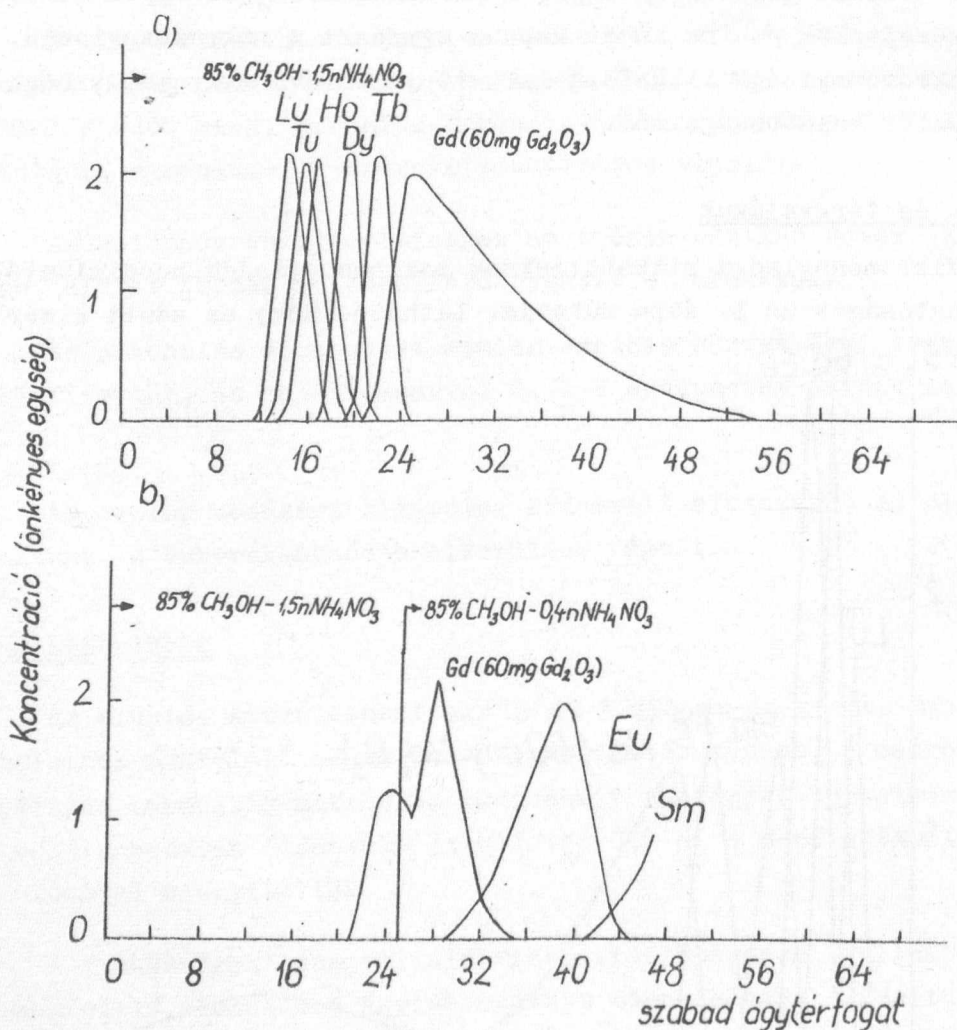
Mikromennyiségű ritkaföld szennyezők elválasztása neodimium matrixtól
Oszlop: 6 mm x 250 mm Dowex LX8 /200-400 mesh, nitrát forma/. Eluens:
80% CH₃OH - 0,01 M HNO₃ - 0,3, M NH₄NO₃. t = 50°C.

1/

LBK-Produkter AB, P.O.Box 12220, Stockholm, Sweden.

körülmények között a prazeodimium nagy részben /80 %/, az összes többi szennyező pedig teljesen elkülöníthető a mátrixtól. A neodimiumnál nehezebb szennyezők a 2. és a 16. frakció között eluálódnak, a könnyebbeket pedig - a neodimium eluciója után - 3 ml 0,02 M-os salétromsavval eluálhatjuk. A szennyezők koncentrációját a kiválasztott meghatározási módszertől függően kezelhetjük tovább.

Gadolinium mátrix esetében a helyzet kedvezőtlenebb. Mint a 2a. ábrán láthatjuk, a terbium egyáltalán nem, a diszprózium pedig csak részben választható el a gadoliniumtól. Mivel ez elsősorban az elválasztási



2. ábra

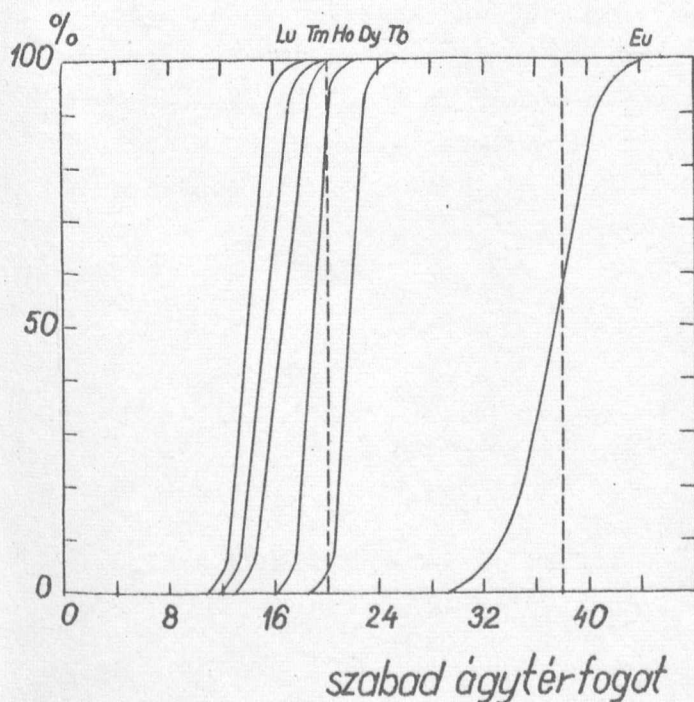
Mikromennyiségű ritkaföld szennyezők elválasztása gadolinium mátrixtól
 Oszlop: 6 mm x 250 Dowex 1X8 /200-400 mesh, nitrát forma/. Eluens: 85%
 CH₃OH - 0,01 M HNO₃ - 1,5 M NH₄NO₃ és 85% CH₃OH - 0,01 M HNO₃ - 0,4 M
 NH₄NO₃. t = 50°C.

tényezők számértékeinek tulajdonítható, nagyobb mértékű elválaszthatóság csak hosszabb oszlopon érhető el.

A 2a ábra szerint a gadolinium eluciója az 56. frakció körül fejeződik be. A gadolinium eluciójának elhuzódása a koncentráálás műveletét hosszadalmassá teszi. Célszerű ezért - mint a 2b. ábra mutatja - a gadolinium eluciójának kezdete után nagyobb eluciós erejű eluensre áttérni. Ily módon mintegy 35 %-os időmegtakarítás érhető el anélkül, hogy a gadoliniumnál könnyebb szennyezők elválaszthatósága csökkenne. /Hasonló megfontolásokat neodimium matrix szennyezőinek koncentrálása esetében is alkalmazhatunk./

A gadoliniumnál nehezebb szennyezők koncentrátumát a 10. és a 20. frakció között, kb. 30 ml-nyi, az első eluensnek megfelelő összetételű oldatban, a gadoliniumnál könnyebb szennyezők koncentrátumát pedig a 37. frakció után, 3 ml-nyi 0,02 M-os salétromsavas oldatban nyerjük.

A 2a és 2b ábrának megfelelő integrális eluciós görbék, melyeket az egyes frakciókban mért aktivitás-értékek összegezése útján szerkesztettünk meg, a 3. ábra mutatja. A görbék alapján könnyen leolvasható az



szabad ágytér-fogat

3. ábra

Integrális eluciós görbék

egyedülálló elválasztási hozama. Ha pl. a gadoliniumnál nehezebb szennyezőket a 20. frakcióig eluáljuk, a terbiumnak gyakorlatilag 0, a diszpróziumnak 90, a holmiumnak, tuliumnak, itterbiumnak és lutéciumnak 100-100 %-a választható el a gadoliniumtól. Ugyanigy, a 38. frakció után az európiumnak még 45 %-a, a samáriumnak és a samáriumnál könnyebb szennyezőknek 100-100 %-a marad - gadoliniumtól mentes állapotban - az oszlopon.

Felvetődik - különösen a gadoliniumhoz közeledő nehezebb ritkaföld szennyezők ese-

tében - az elválasztási hozamok reprodukálhatóságának kérdése. Feltételezve, hogy az eluciós csúcsok helyzete ± 1 ágytér-fogatnak megfelelő tartományon belül változik, a terbium elválasztási hozama 0-28, a diszpróziomé 55-99, a holmiumé 95-100, az európiomé pedig 40-70 %-on belül változhat.

Pontosan kalibrált oszlop és gondos kivitelezés esetén ezek a hibahatárok inkább pesszimista számítás eredményei. Azonban sorozatanaliziseknél ilyen hibahatárokkal feltétlenül számolnunk kell. Ezek csak az egyes szennyezők nyomjelzésével küszöbölhető ki; ugyanis a radioaktív indikátorok alkalmazása lehetővé teszi a kémiai hozamok pontos meghatározását. Amennyiben a nyomjelzés valamilyen okból kifolyólag nem lehetséges, az említett bizonytalanságok hosszabb oszlop alkalmazásával csökkenthető.

Bár a hordozómentes radioaktív izotópok és mikromennyiségű szennyezők gyakorlatilag teljesen eluálhatóak néhány ml hig savval, makromennyiségű ritkaföldek ioncseréje esetén kevés, de aktiválásos módszerrel még jól kimutatható anyagmennyiség maradhat az oszlopon. Ez csak hosszadalmasabb, hig savas kezeléssel távolítható el. Kívánatos ezért minden egyes matrix-elemre külön-külön oszlopot alkalmazni.

A matrixnál nehezebb szennyezők elválaszthatósága szempontjából a neodimium és a gadolinium a két szélső esetet képviseli. A neodimiumnál - mint láttuk - a prométium közvetlen szomszédsága következtében kivételesen kedvező a helyzet. /Hasonló ok miatt a szamáriumnál könnyebb szomszédos szennyező is teljesen elválasztható a szamárium matrixtól./ A gadolinium esetében a nehézséget az ittrium csoport tagjainak csaknem egyforma adszorpcióképessége okozza. Azonban ez a nehézség a kisebb rendszámú matrixok felé haladva fokozatosan csökken.

I r o d a l o m

- [1] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A., Volkov V.A.: JINR Preprint, E-1921, Dubna, 1964; Radiokhimiya, 8, /1966/ 183.
- [2] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A.: JINR Preprint, 2670, Dubna, 1964; J. Chromatog., 26, 215 /1967/
- [3] Molnár F., Horváth A., Khalkin V.A., Szovjetszabadalom, No. 191505, 1966.
- [4] Faris J.P., Warton, J.W.: Anal. Chem., 34, 1077 /1962/

Érkezett: 1968. febr. 9.

KFKI Közl. 16.évf. 3.szám, 1968.