

Vol.13. No.1.1965

*Robinson B. et.*

*1965*

**КФИ**

**KÖZLEMÉNYEK**

**СООБЩЕНИЯ ЦЕНТРАЛЬНОГО ИНСТИТУТА ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

**REPORTS OF THE CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS**


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

A KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KIADÓI CSOPORTJA  
ИЗДАТЕЛЬСКАЯ ГРУППА ЦЕНТРАЛЬНОГО ИНСТИТУТА ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
PUBLISHING GROUP OF THE CENTRAL RESEARCH INSTITUTE FOR PHYSICS  
BUDAPEST, 114. POB 49.

Technikai szerkesztő: Nagy Imréné  
Megjelent: 1965. márc. 5.

Példányszám: 620  
Rotaszám: 2051

A kiadásért felelős: Jánossy Lajos





107

## ÖSSZESÍTETT TARTALOMJEGYZÉK AZ 1965. ÉVBEN MEGJELENT SZÁMOKHOZ

Oldal

Ádám András, Kozma Gyula és Quittner Pál: Gyorsneutronok közötti szögkorrelációk mérésénél fel- lépő zavaró effektus kiküszöbölése . . . . .	99
Bakos József, Csillag László, Kántor Károly és Varga Péter: Ezüsttükros nagyfrekvenciás gerjesztésű He-Ne laser . . . . .	195
Bencze István: Lásd Muzsnay László	
Bencze István: Lásd Muzsnay László	
Berei Klára: Néhány szerves foszfor- és arzénvegyület ré- tegekromatográfiás analizise . . . . .	49
Berei Klára: A $^{31}\text{P}/n, \gamma /^{32}\text{P}$ magreakció kémiai következmé- nyei trifenilfoszfinban és trifenilfosz- finoxidban . . . . .	291
Bollók Lajos: Lásd Szabados László	
Bollók Lajos: Lásd Szabados László	
Bollók Lajos: Lásd Muzsnay László	
Borbély Imre, Dolinszky Tamás, Erő János és Hrehuss Gyula: A $\text{C}^{12}/d, p/\text{C}^{13}$ magreakció szögeloszlá- sának energiafüggése . . . . .	89
Csada Imréné: Lásd Erdeyné Schneer Anna	
Csada Imréné és Rausch Henrik: Urán/VI/-oxid nyomszennye- zőinek meghatározása spektrofotometri- ás módszerrel. . . . .	55
Csillag László: Lásd Bakos József	
Csillag László és Salamon Tamás: Egyidejűleg gerjesztett laser-átmenetek vizsgálata nagyfrekven- ciás gerjesztésű ezüsttükros He-Ne gáz- laserben a gerjesztőáram, a keverékarány és a nyomás függvényében . . . . .	199

KFKI 2387

KÖZPONTI FIZIKAI KUTATÓ INTÉZET KÖNYVTÁRA

leltárba véve... 7.464... sz. alatt.

Budapest, 1966. év. júli. hó 14. én

70

Pappné

1988



Csillag László: Gáztöltő- és vákuumrendszer alacsony nyomású gázkeverékek gazdaságos előállítására és vizsgálatára . . . . .	209
Csőke Antal és Péter István: Aktivációs analízis technikai berendezései . . . . .	343
Csőke Antal, Feit Pál, Sipos Tamás, Szántó Borisz és Vizdos Géza: Melegkamra $J^{131}$ izotóp előállítására . . . . .	387
Csőke Antal: A KFKI-ban kifejlesztett gömbcsuklós manipulátor . . . . .	407
Dolinszky Tamás: Kísérlet direkt magreakciók csatornaanalízisbeli DW-elméletének felállítására . . . . .	3
Dolinszky Tamás: Egy új exakt diszperziós formula . . . . .	151
Dolinszky Tamás: Lásd Borbély Imre	
Erdeyné Schneer Anna és Csada Imréné: Reaktor primer vizkörének laboratóriumi vizsgálata . . . . .	241
Erő János, Klopfer Ervin, Kostka Pál, Kovács István Mérey Imre, Vályi László és Varga László: A KFKI elektrosztatikus iongyorsító berendezése . . . . .	73
Erő János: Lásd Borbély Imre	
Feit Pál: Lásd Csőke Antal	
Frankl László, Németh András és Tóth Mihály: Neutronfluxus mérések a VVR-Sz kísérleti atomreaktor aktiv zónájában . . . . .	109
Gombos Péter, Kakuk János, Roósz József és Vályi László: Pulzált rádiófrekvenciás ionforrás vizsgálata . . . . .	127
Graff György, Lajtai Albert és Nagy László: Az U-235 hasadásánál keletkezett gamma-sugarak szögeloszlása . . . . .	177
Gróz Péter, Kiss István, Révész András és Sipos Tamás: $XeF_2$ előállítása . . . . .	283
Háber Gyula: Lásd Muzsnay László	
Horváth Béla: Az EG-2 ioncsatorna gépészeti berendezései . . . . .	377
Hrehuss Gyula: Lásd Borbély Imre	
Huszár Miklós: A $\Lambda^0$ hyperon leptonikus bomlása módosított vektorbozon propagátorral . . . . .	213



Illy Józsefné: Lásd Jákli György	
Jancsó Gábor: Lásd Jákli György	
Jákli György, Jancsó Gábor és Illy Józsefné: Deutérium- alkoholátok előállítása . . . . .	235
Kakuk János: Lásd Gombos Péter	
Kántor Károly: Lásd Bakos József	
Kiss Elemér: Lásd Mészáros István	
Kiss Elemér: Mechanikus mozgatóberendezés Mössbauer ki- sérletekhez . . . . .	431
Kiss István: Lásd Gróz Péter	
Klopfer Ervin: Lásd Erő János	
Kostka Pál: Lásd Erő János	
Kovács Gyula: Lásd Mészáros István	
Kovács Gyula: Lásd Muzsnay László	
Kovács István: Lásd Erő János	
Kozma Gyula: Lásd Ádám András	
Kozma Gyula és Quittner Pál: Nanoszekundumos tartományban működő tranzisztoros idő-amplitudó kon- verter . . . . .	33
Kósa Somogyi István: Sugárkémiai folyamatok vizsgálata krioszkópikus módszerrel . . . . .	185
Kósa Somogyi István: Lásd Kules Inna	
Kules Inna, Opauszky István, Kósa Somogyi István és Schiller Róbert: A sugárzás fajtájának hatása a difenil- metán radiolízisére . . . . .	137
Lajtai Albert: Lásd Graff György	
Lőwy Ferenc: Lásd Szabados László	
Matus Lajos: Repülési idő tömegspektrométer . . . . .	251
Mérey Imre: Lásd Erő János	
Mészáros István, Kovács Gyula és Kiss Elemér: A levegő radioaktív aerosol tartalmának mérésére szolgáló készülékek . . . . .	399
Muzsnay László, Zobor Ervin, Bencze István, Bollók Lajos, Háber Gyula, Kovács Gyula, Próbald Vilmos és Szamosi György: A ZR-2 kriitikus rendszer . . . . .	363

Muzsnay László, Bencze István és Próbáld Vilmos: Urándioxid zsurgorító kemence . . . . .	413
Nagy László: Lásd Graff György	
Németh András: Lásd Frankl László	
Németh Géza: A $\psi(\alpha, \beta; x)$ függvény polinomapproxi- mációjáról . . . . .	163
Németh Géza: Az integrál sinus és integrál cosinus függvények Csebisev sorfejtése . . . . .	171
Németh Géza: A Gauss-féle hipergeometriai függvény Csebisev sorfejtése . . . . .	221
Németh Géza: Lásd Szabados László	
Opauszky István: Lásd Kules Inna	
Quittner Pál: Lásd Kozma Gyula	
Quittner Pál: Lásd Ádám András	
Pásztor Endre és Veress Imre: Az NG 200/1 neutron- generátor rekonstrukciój . . . . .	273
Péter István: Lásd Csőke Antal	
Péter István: Lásd Szalók Mihály	
Praveczi Endre: Ferromágneses anyagok elektromos ellenállása . . . . .	27
Próbáld Vilmos: Lásd Muzsnay László	
Próbáld Vilmos: Lásd Muzsnay László	
Rausch Henrik: Lásd Csada Imréné	
Révész András: Lásd Gróz Péter	
Roósz József: Lásd Gombos Péter	
Salamon Tamás: Lásd Csillag László	
Sipos Tamás: Lásd Gróz Péter	
Sipos Tamás: Lásd Csőke Antal	
Schiller Róbert: Lásd Kules Inna	
Szabados László: A difenil-difenilmetán eutektikus elegy hővezetési tényezőjének és viszkozitá- sának mérése a hőmérséklet függvényé- ben . . . . .	305
Szabados László, Bollók Lajos és Török Antal: A difenil- difenilmetán eutektikus elegy fajsu- lyának mérése a hőmérséklet függvényében . . .	315

Szabados László: A difenil-difenilmetán eutektikus elegy hővezetési tényezőjének és viszkozitásának mérése a hőmérséklet függvényében . . . . .	305
Szabados László: A difenil-difenilmetán eutektikus elegy gőznyomásának mérése a hőmérséklet függvényében . . . . .	297
Szabados László, Lőwy Ferenc, Török Antal és Németh Géza: A difenil-difenilmetán eutektikus elegy fajhőjének kísérleti meghatározása a hőaktivitási tényező mérésével . . . . .	323
Szabados László, Bollók Lajos és Török Antal: A difenil-difenilmetán eutektikus elegy fajsúlyának mérése a hőmérséklet függvényében . . . . .	315
Szabon János: Lásd Szabó Elek	
Szabó Elek és Szabon János: Alkil-foszfátok kölcsönhatásainak vizsgálata <sup>32</sup> P-vel jelzett vegülettel . . . . .	61
Szalók Mihály és Péter István: Mozgatható vákuumagregát . . . . .	355
Szamosi György: Lásd Muzsnay László	
Szántó Borisz: Lásd Csőke Antal	
Szentgyörgyi István: Kritikus felületi hőterhelés és forrásos hőátadás vizsgálata szerves hűtőközegek esetében . . . . .	259
Tóth Mihály: Lásd Frankl László	
Török Antal: Lásd Szabados László	
Török Antal: Lásd Szabados László	
Török Antal: Lásd Szabados László	
Varga László: Lásd Erő János	
Varga Péter: Lásd Bakos József	
Vályi László: Lásd Erő János	
Vályi László: Lásd Gombos Péter	
Várkonyi Lajos: A VVR-Sz reaktor aktív zónájának átrendezése . . . . .	41
Veress Imre: Lásd Pásztor Endre	
Vizdos Géza: Lásd Csőke Antal	
Zobor Ervin: Lásd Muzsnay László	





### T A R T A L O M

1. Dolinszky Tamás: Kísérlet direkt magreakciók csatornaanalízisbeli DW-elméletének felállítására . . . . . 3
2. Praveccki Endre: Ferromágneses anyagok elektromos ellenállása . . . . . 27
3. Kozma Gyula és Quittner Pál: Nanoszekundumos tartományban működő tranzisztoros idő-amplitudó konverter . . . . . 33
4. Várkonyi Lajos: A VVR-Sz reaktor aktiv zónájának átrendezése . . . . . 41
5. Berei Klára: Néhány szerves foszfor- és arzénvegyület rétegekromatográfiás analízise . . . . . 49
6. Csada Imréné és Rausch Henrik: Urán/VI/-oxid nyomszennyezőinek meghatározása spektrofotometriás módszerrel . . . . . 55
7. Szabó Elek és Szabon János: Alkil - foszfátok kölcsönhatásainak vizsgálata <sup>32</sup>P-vel jelzett vegyülettel . . . . . 61





## Резюме

### 1. Попытка для установления теории искаженных волн прямых ядерных реакций в теории Хумблета-Розенфельда

Т. Долински

Разработано приближение для матричного элемента рассеяния теории Хумблета-Розенфельда, вместо точного состояния реакции подставляются четыре разные волновые функции, две из которых описывают упругое рассеяние на входной и выходной стороне оптического потенциала, а остальные две являются состояниями реакции, образующимися из состояния входного канала через двучленный оптический потенциал. Переходной матричный элемент симметризован. Дано дифференциальное эффективное сечение в IM представлении.

### 2. Электрическое сопротивление ферромагнитных материалов

Э. Правецки

В предыдущих работах [3], [4] была ренормирована теория идеальных спиновых волн. В настоящей работе вычислено дополнительное сопротивление ферромагнитных материалов на основе ренормированной теории идеальных спиновых волн с помощью более обобщенных результатов Маннари [1]. Получим описание критического сопротивления.

### 3. Транзисторизованный конвертер времени в амплитуду, работающий в наносекундном диапазоне

Дь. Козма и П. Квиттнер

Для целей спектроскопии быстрых нейтронов был разработан транзисторизованный конвертер времени в амплитуду, построенный на принципе перекрытия. Преобразование времени в амплитуду является линейным в пределах 5 - 135 мксек с точностью до 2%. Для нейтронов 14,7 Мэв начиная с порога 100 Кэв временное разрешение полной измерительной системы равно  $\tau = 1,6$  мксек. Вклад конвертера в эту величину меньше 0,1 мксек. Отношение сингл./совп. 1:150.

4. Переустройство активной зоны реактора типа ВВР-С

Л. Варкони

В активной зоне реактора процессы выгорания и зашлаковывания пучков не происходят равномерно. Для максимального выгорания тепловыделяющих элементов при эксплуатации активную зону следует несколько раз перестроить. В данной работе дается метод для оптимального проведения обмена пучка тепловыделяющих элементов и переустройства активной зоны.

5. Анализ некоторых ароматических соединений фосфора и мышьяка методом тонкослойной хроматографии

К. Береи

При исследовании химических последствий ядерных процессов возникла потребность в разделении и определении некоторых ароматических соединений фосфора и мышьяка, а также дифенила. Для этого использовался метод тонкослойной хроматографии. С целью установления оптимальных условий разделения были определены величины  $R_F$  данных соединений при использовании различных систем растворителей и адсорбентов. Количественное определение меченых  $^{32}\text{P}$ - и  $^{76}\text{As}$ - соединений осуществлялось радиометрически с автоматической записью радиохроматографии. Для этого при хроматографировании - с закрепленным слоем адсорбента - вместо обычного размера использовались узкие (30x200 мм) стеклянные пластинки.

6. Определение следов примесей в окиси U/VI/спектрофотометрическим методом

И. Чада, Х. Рауш

Дается краткий отчет о спектрофотометрических методах, разработанных с целью определения следов примесей в окиси реакторной чистоты, произведенной в Институте. Для устранения мешающего действия урана используются методы осаждения, экстракции и дистилляции.

7. Исследование взаимодействий алкил-фосфатов соединением, меченным  $^{32}\text{P}$

Э. Сабо, Я. Сабон

Была определена степень димеризации диэтил-гексил-фосфорной кислоты в растворах бензола и четыреххлористого углерода, и было исследовано взаимодействие ди-этил-гексил-фосфорной кислоты и трибутил-фосфата в тех же растворителях при пренебрегаемых низких степенях димеризации. Опыты, обоснованные на измерение распределения, были проведены ди-этил-гексил-фосфорной кислотой, меченной  $^{32}\text{P}$ .





## S u m m a r i e s

### 1. Distorted Wave Approximation of the Humblet-Rosenfeld Scattering Matrix

T. Dolinszky

The scattering matrix element of the Humblet-Rosenfeld theory is approximated in view of its possible application in the theory of direct interactions. The new DWHR matrix element is analogous but not necessarily equivalent to the DWBA approximation. The exact reaction state is substituted for by four different wave functions, namely, two elastic scattering states and two distorted reaction states. The approximated reaction states are characteristic for the treatment, and correspond to the actual initial /or final/ state combined with the two-term optical potential of the final /or initial/ separation.

### 2. Additional Electrical Resistance of Ferromagnets

E. Praveczi

Using the renormalized version of the ideal spin wave theory presented by author in [3, 4], the additional electrical resistance of ferromagnets is evaluated starting with Mannari's [1] more general formula. An expression describing the critical resistance is obtained.

### 3. Transistorized Nanosecond Time-to-Pulse Height Converter

Gy. Kozma, P. Quittner

A transistorized time-to-pulse height converter, working on the overlap principle was built for fast neutron spectroscopy. The time-to-pulse height conversion between 5-135 nsec is linear within 2%. For 14.7 MeV neutrons above 100 KeV bias the time

resolution of the whole measuring assembly is  $\tau = 1,6 \text{ m}/\text{usec}$ , to which the contribution of the converter is less, than  $0,1 \text{ m}/\text{usec}$ . The single to coincidence ratio is 1:150.

4. Rearrangement of the Core in the VVRS-Reactor

L. Várkonyi

Since the burnup and scorification rate varies with the positions of the individual fuel element assemblies within the reactor core, some rearrangements have to be made in the core from time to time in order to ensure maximum utilization of fuel elements. A method is described by which the replacement of fuel element assemblies and rearrangement of the core can be performed under optimum conditions.

5. Analysis of Some Organic Compounds of Phosphorus and Arsenic by Thin-Layer Chromatography

Klára Berei

Study of chemical effects of nuclear transformations made it necessary to analyse some aromatic compounds of phosphorus and arsenic as well as diphenyl. Separation and determination were performed by thin-layer chromatography. In order to establish the optimum experimental conditions, the  $R_F$  values of the compounds in question were determined for various solvents and adsorbents. Compounds labelled with  $^{32}\text{P}$  or  $^{76}\text{As}$  were quantitatively analysed by radiometry. Chromatography was then carried out on glass strips coated with adsorbent, instead of using the conventional chromatoplates. The chromatograms were scanned by automatic recorder.

6. Spectrophotometric Determination of Trace Contaminants in Uranium/VI/-Oxide

Gabriella Csada and H. Rausch

The spectrophotometric methods developed for the determination of trace contaminants in the reactor grade uranium/VI/-oxide produced at the Institute are briefly described. To eliminate the interference of uranium with the measurements, precipitation, extraction and distillation techniques are used.



7. Study of Chemical Interactions in Alkyl Phosphates with the Use of  $^{32}\text{P}$  Labelled Compound

E. Szabó and J. Szabon

The dimerization constants of di-/2-ethyl/-hexyl phosphoric acid /D2EHPA/ in benzene and carbon tetrachloride were determined and the association between D2EHPA and tri-n-butyl-phosphate was studied in the case of negligible dimerization. The distribution coefficients were measured using  $^{32}\text{P}$  labelled D2EHPA.



# KISÉRLET DIREKT MAGREAKCIÓK CSATORNAANALIZISBELI DW-ELMÉLETÉNEK FELÁLLÍTÁSÁRA

Irta: Dolinszky Tamás

## Összefoglalás

Kidolgozzuk a direkt reakciók egy lehetséges új disztortált hullámu elméletét. A szokásos "distorted wave" elméletek a formális szórás-elmélet-adta tranzit-mátrixelem disztortált hullámu Born-közelítései. Az exakt szóráselméleti szórási mátrixelemnek a csatornaanalízis-adta exakt ütközési mátrixelemmel egy más helyen kimutatott azonossága nyomán támadt az a gondolat, hogy a Wigner-féle csatorna-módszer is kiindulásul szolgálhat egy disztortált hullámu közelítéshez. A Rosenfeld által kidolgozott eljárással analóg módon állítjuk elő az exakt mátrixelemet soktest-probléma esetére. A DWRA módszer disztortált hullámfüggvényei maguk is reakciót irnak le. A DWRA-elmélet döntő mozzanata éppen az egyik szeparáció optikai potenciálján való "szórás" útján a másik szeparáció csatorna-állapotából kifejlődő reakció-állapotok kiszámítása. Rugalmas szórás esetére a DWRA visszaadja a DWBA közelítést. Reakció esetére az exakt mátrixelemek különböző strukturája folytán a két közelítés különbözik. Részletesen összehasonlítjuk a DWRA és a DWBA elmélet alapfeltevéseit.

## 1/ Bevezetés

A magreakciók elméletének tárgyalására két lehetőség kínálkozik. Az egyik a Wigner-féle módszeren alapszik; a hullámfüggvény aszimptotikus viselkedéséből olvassa le a hatáskeresztmetszet szög- és energiafüggését; ezt az eljárást a következőkben "csatornaanalízis"-nek nevezzük. Így dolgoznak elméletükben Kapur és Peierls [1] /1938/, Wigner és Eisenbud [2] /1947/ és az újabban Humblet és Rosenfeld [3] /1961/. - A másik út, a formális szóráselmélet módszere sokkal kevésbé járt rezonanciaelmélet felállítására szempontjából. Történt próbálkozás itt is: az egyik azonban matematikailag messzemenően nem korrekt [6], a másik [4] pedig csak egy-test-problémára szorítkozik. - Annál meglepőbb, hogy a magreakciók direkt járulékanak eddigi elméletei viszont kivétel nélkül a formális szóráselmélet törvényein alapulnak; a kétoldali DWBA-módszer a szóráselméleti tranzit-mátrixelem olyan közelítését jelenti, amely a be- és kimenőoldali köl-

csönhatási operátort meghatározott módon a két optikai potenciállal helyettesíti.

Felmerül a kérdés: a Wigner-féle módszer nem alkalmas-e egy "distorted wave" elmélet megfogalmazására. E dolgozatban a direkt reakciók egy disztortált hullámu elméletét alakítjuk ki a csatornaanalízis módszerével.

## 2/ A csatornaanalízis- és a formális szóráselmélet kapcsolata

Az első elvi kérdés a módszerrel kapcsolatban: ekvivalens-e egymással a csatornaanalízis és a formális szóráselmélet. Alapos okunk van a kételkedésre: a két módszer fogalomrendszere alapvetően különbözik. A csatornaanalízis a beeső hullám és a szórt hullám kapcsolatát állítja középpontba: ennek segítségével számítja ki a hatás keresztmetszetet. A formális szóráselmélet a kezdőállapotot köti össze a végállapottal; ez utóbbi pedig általános esetben nincs egyszerű kapcsolatban a szórt hullámmal. Mindkét elmélet definiál egy-egy mátrixelemet: a csatornaanalízis az ütközési mátrixot:  $U_{ba}$  /collision matrix/ - a formális szóráselmélet a szórási mátrixot  $S_{ba}$  /scattering matrix/. A differenciális hatás keresztmetszetet mindkét elmélet arányosnak mondja az impulzus-reprezentációban megadott mátrixelemmel képzett  $|U_{ba}|^2$  ill.  $|S_{ba}|^2$ -tel. A mátrixelemek ezen fizikai értelmezésének alapja az a feltételezés, hogy a szórt hullámban a relativ mozgás parciális hullámai tisztán kifutó jellegűek. Kimutatható egyrészt, hogy ez a feltételezés végtelen hatótávolságu kölcsönhatás esetén általában nem teljesül. Ebben az esetben a szóráselméleti  $|S_{ba}|^2$  kifejezés nem arányos a hatás keresztmetszettel; csatornaanalízis  $U_{ba}$  mátrixeleme pedig eleve is csak véges csatornasugárra van értelmezve. Másrészt kimutatható, hogy véges hatótávolság esetén a szórt hullám valóban mindig tisztán kifutó-jellegű; ekkor az  $S_{ba}$  és az  $U_{ba}$  mátrixelemek egymással is megegyeznek és abszolútértékük négyzete impulzus-reprezentációban valóban arányos  $d\sigma/d\Omega$ -val. Sőt, a két mátrixelem ilyenkor egymásba analitikusan közvetlenül is átalakítható; rugalmas szórás esetére ennek igazolását lásd [5]. Jelen dolgozat alapötlete éppen az  $S_l$  és  $U_l$  mátrixelemek azonosságának bizonyítása során támadt. -

Erről a problémáról összefoglalva azt mondhatjuk, hogy a csatornaanalízis módszer, definíciója értelmében, lényegében korlátozott ugyan véges hatótávolsága kölcsönhatások tárgyalására, még sincs hátrányban e tekintetben a formális szóráselmélettel szemben. Véges hatótávolság esetén ugyanis a szóráselmélet ekvivalens vele; végtelen hatótávolsá-



ság esetén pedig a szóráselméleti  $S_{ba}$  mátrixelem sincs egyszerű kapcsolatban a hatás keresztmetszettel; - jóval bonyolultabb operátor viszi át a kezdőállapotot /beeső hullámot/ a szórt hullámba, mint a végállapotba.

A másik elvi kérdés: véges hatótávolságra korlátozódva az exakt alakjukban ekvivalens  $S_{ba}$  és  $U_{ba}$  mátrixelemek disztortált hullámu közelítésre áttérve vajon egyenlőek maradnak-e. Ez a kérdés indokolt, mert a mátrixelem egészen más jellegű funkcionálja a hullámfüggvénynek a két esetben; a kölcsönhatási operátor ugyanis explicite szerepel  $S_{ba}$ -ban, de nem szerepel  $U_{ba}$ -ben; itt u.i. a hullámfüggvény segítségével kiküszöbölődött. - Várható ezek után, hogy az eredetileg ekvivalens két módszer distorted-wave közelítésben már más- és más modelljét jelentik az eredeti problémának. Ez azonban egyáltalában nem baj: sőt érdekes és még nyitott kérdés: melyik distorted wave-módszer milyen körülmények között lesz jobb közelítése az exakt tárgyalásnak. -

A következőkben rátérünk a csatornaanalízis alapján egy distorted-wave elmélet kidolgozására: először levezetjük az ütközési mátrixelem kifejezését csatornareprezentációban, egészen általános kölcsönhatás esetére és exaktul; ezután általánosságban bevezetjük az új disztortált hullámu közelítést; ezt követően felírjuk a differenciális hatás keresztmetszetet a csatornareprezentációbeli mátrixelem segítségével. Végül összehasonlítjuk a DWBA és DWRA közelítések alap gondolatát.

### 3/ A tranzit-mátrixelem a csatornaanalízisben

Kényelmesebb lesz dolgoznunk a szokásos  $S_{ba}$  ill.  $U_{ba}$  mátrixelemek helyett a tőlük csak egy  $\delta_{ba}$ -tagban különböző  $T_{ba}$  tranzit-mátrixelemmel.

Állapodjunk meg a definíciókban és jelölésekben. Így "csatorna-állapot"-on értsük a kétfelé szeparált rendszer Hamilton-operátorának, a relativ mozgás pályamomentumának és vetületének, valamint a csatornaspin és spinvetület szimultán sajátfüggvényét. -

$$\begin{aligned}
 |\gamma c\rangle &= |l_c \lambda_c s_c \sigma_c C' C''\rangle = \\
 &= \frac{1}{r_r} \cdot w_{l_c}^{(0)}(r_r, k_l) Y_{\lambda_c}^{l_c}(\hat{r}_r) \chi_{\sigma_c}^{s_c} C' C''(\xi_r) \quad //
 \end{aligned}$$

Itt  $w_{l_c}^{(0)}$  semleges részek reakciói esetén a Bessel-függvény, töltött-rész-reakciók esetén szórás Coulomb-sajátfüggvény:

$$\left[ \frac{d^2}{dr_\gamma^2} + k_c^2 - \frac{Z_\gamma' Z_\gamma'' \beta^2}{r_\gamma} - \frac{l_c(l_c+1)}{r_\gamma^2} \right] w_{l_c}(r_\gamma, k_c) = 0 \quad /2a/$$

$$w_{l_c}^{(0)}(r_\gamma=0, k_c) \equiv 0 \quad \text{minden } k_c \text{ -ra;} \quad /2b/$$

és a belső hullámfüggvény

$$\chi_{\sigma_c}^{s_c C' C''}(\xi_\gamma) \equiv \chi_{\sigma_c}^{s_c C}(\xi_\gamma) = \left[ \chi_{\nu_c'}^{I_c' C'}(\xi_\gamma'); \chi_{\nu_c''}^{I_c'' C''} \right]_{\sigma_c}^{s_c}, \quad /3/$$

ahol

$$C \equiv \{C', C''\}, \quad /4/$$

a részrendszerek spin-energia-sajátállapotainak vektorcsatolt eredője. Itt  $\{l_c, \lambda_c\}$  a relativ mozgás pályamomentumának,  $\{s_c, \sigma_c\}$  a csatornaspinnek két-két kvantumszáma;  $I_c', \nu_c'; I_c'', \nu_c''$  magspinek;  $C'$  és  $C''$  a  $\gamma$  szeparációbeli részrendszerek egy-egy diszkrét kvantált energiasajátállapotának összes kvantumszámai. A spin- és térkoordináták összesége  $\mathbf{r}$ ; a relativ mozgás koordinátái a  $\gamma$ -szeparációban  $\mathbf{r}_\gamma \equiv \{r_\gamma, \hat{r}_\gamma\}$ , a belső mozgáséi  $\xi_\gamma \equiv \{\xi_\gamma', \xi_\gamma''\}$ . A szeparációt mindig görög betűvel  $|\gamma|$ , a szeparációhoz tartozó csatornákat a megfelelő latin betűkkel:  $c, c(\gamma)$  jelöljük. A  $\chi_{\nu_c'}^{I_c'}$ ,  $\chi_{\nu_c''}^{I_c''}$  belső hullámfüggvények, ha egyetlen nukleonból áll a  $C'$  ill.  $C''$  részrendszer, a nukleon spin-függvényévé redukálódnak; ilyenkor  $\xi_\gamma'$  ill.  $\xi_\gamma''$  a spinváltozót /spinetületet/ jelenti.

A kezdő- és végállapotbeli jelöléseket az

$$\begin{aligned} A' + A'' &\rightarrow B' + B'' \\ \alpha &\rightarrow \beta \\ |a\rangle &\rightarrow |b\rangle \end{aligned} \quad /5/$$

séma értelmében definiáljuk. A bemenő ill. kimenő csatorna:

$$|a\rangle \equiv |l_a \lambda_a s_a \sigma_a A\rangle \equiv |l_a \lambda_a s_a \sigma_a A' A''\rangle \quad /6a/$$

$$|b\rangle \equiv |l_b \lambda_b s_b \sigma_b B\rangle \equiv |l_b \lambda_b s_b \sigma_b B' B''\rangle \quad /6b/$$

A tranzit-mátrixelem definíciója céljából fejezzük ki a Schrödinger-egyenlet linearitásának azt a következményét, hogy bármely  $a(\alpha)$  csatornában fellépő  $C_a^0$  amplitudóju beeső hullám járulékaként a szórt hullám minden  $b(\beta)$  csatornájában a beeső amplitudóval arányos,  $C_a^0 T_a^b$  amplitudóju, a relativ mozgást tekintve tiszta kifutójellegű hullám lép fel; ennek megfelelően a reakcióhullámfüggvény az egész külső térben igen jó közelítéssel így írható:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}, E) = \sum_a C_a^0 \left\{ \sum_{\beta} \sum_{b(\beta)} \left[ \delta_{ba} w_{\ell_b}^{(0)}(r_{\beta}, k_b) + T_a^b(E) w_{\ell_b}^{(+)}(r_{\beta}, k_b) \right] \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{r_{\beta}} Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_{\beta}) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_{\beta}) \right\} \quad \text{a külső térben;}$$

Itt

$$T_a^b(E) = T_{\ell_a \lambda_a s_a \sigma_a}^{\ell_b \lambda_b s_b \sigma_b B A}(E) \quad /8/$$

Az ilymódon definiált  $T_a^b$ -nak a szóráselméleti tranzit-mátrixelemmel való azonossága éppen a két elmélet ekvivalenciájából következik.

Feladatunk most egyetlen  $T_a^b$  mátrixelem kihámozása a /7/ egyenletből. /7/-ben még valamennyi  $\beta$  szeparáció minden egyes  $b(\beta)$  csatornájához tartozó  $T_a^b$  mátrixelem fellép. Egyetlen végszeparációhoz tartozó  $T_a^b$  mátrixelemek fellépésére redukálódik az analízis, ha a fenti egyenlet érvényét korlátozzuk a  $\beta$ -szeparáció csatornatartományára:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}, E) = \sum_a C_a^{(0)} \left\{ \sum_{b(\beta)} \left[ \delta_{ba} w_{\ell_b}^{(0)}(r_{\beta}, k_b) + T_a^b(E) w_{\ell_b}^{(+)}(r_{\beta}, k_b) \right] \times \right. \\ \left. \times \frac{1}{r_{\beta}} Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_{\beta}) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_{\beta}) \right\} \quad /9/$$

Az érvényességi tartomány leszűkítése árán a /9/ analízis - a csak az overlap elhanyagolása esetén érvényes /7/ kifejezéssel szemben, - exaktul érvényes. Tovább csökkenthetjük a szereplő mátrixelemek számát, ha tekintetbe vesszük, hogy egyetlen  $\beta$  szeparációhoz tartozó  $|\ell_b \lambda_b s_b \sigma_b B\rangle$   $r_{\beta}$ -független redukált csatornaállapotok, mint egyetlen, a  $-V_{\beta}$  kölcsönhatásmentes Hamilton-operátornak, továbbá az  $\{\ell_{\beta}^2, \lambda_{\beta}\}$  és az  $\{s_{\beta}^2, \sigma_{\beta}\}$  impulzusmomentumoknak szimultán sajátfüggvényei az  $\{r_{\beta}, \xi_{\beta}\}$  térben teljes rendszerek alkotnak. Ellentétben a /7/ kifejtés "bázisával", a-

melynek elemei a konfigurációs tér egészében nem függetlenek egymástól, - a rögzített szeperációval definiált csatornaállapotok már függetlenek. Ez teszi lehetővé, hogy a  $\psi^{(+)}(\mathbf{r}, E)$  reakcióállapotot a csatornatartományban valahol rögzített  $r_\beta = r_\beta^i$  felületen, az  $\{\hat{r}_\beta, \xi_\beta\}$  altérben a  $\beta$ -szeperációbeli csatornaállapotok szerint kifejtjük és az egyes kifejtési együtthatókat a  $T_a^b(E)$  mátrixelemeket tartalmazó radiális faktorokkal azonosítsuk:

$$\begin{aligned} & \left\langle Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \mid \psi^{(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta} = \\ & = \sum_a c_a^0 \frac{1}{r_\beta} \left[ \delta_{ba} w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) + T_a^b(E) w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right] \quad /10/ \end{aligned}$$

$$r_\beta \geq \rho_\beta$$

A  $\langle \mid \rangle_{\hat{r}, \xi}$  zárójel az  $\{\hat{r}, \xi\}$  altérbeli skalárszorzat jele és  $\rho_\beta =$  csatornasugár.

Végül egyetlen  $T_a^b(E)$ -t tartalmazó egyenletet úgy kapunk, hogy a beeső hullámot egyetlen  $|a\rangle$  csatornára korlátozzuk; a belőle kifejlődő reakcióhullámfüggvényt  $\psi_a^{(+)}(\mathbf{r}, E)$ -val jelölve, kapjuk:

$$\begin{aligned} & \left\langle Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \mid \psi_a^{(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta, E) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta} = \\ & = c_a^0 \frac{1}{r_\beta} \left[ \delta_{ba} w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) + T_a^b(E) w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right], \quad /11/ \end{aligned}$$

$$r_\beta \geq \rho_\beta$$

Ez az egyenlet már alkalmas arra, hogy egyetlen  $T_a^b(E)$ -nak a  $\psi_a^{(+)}(\mathbf{r}, E)$  hullámfüggvénnyel való összefüggését tisztázzuk. A helyzetet csak az bonyolítja kissé, hogy - egyrészt,  $T_a^b$ -n kívül még egy független paraméter, a  $c_a^0$  amplitúdó is, szerepel az egyenletben -, másrészt eddig a szereplő hullámfüggvények normálásáról nem esett szó. E kettős normálási probléma megoldása céljából tekintsük a /11/-ből származó következő két egyenletpárt. Az első pár a  $\beta$ -csatornabejáraton a  $\psi_a^{(+)}$  hullám mellett deriváltját is egyezteteti a  $\psi_a^{(+)}$ -ra végigjárt módszer szerint:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left\langle Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \mid r_\beta \psi_a^{(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta} \right\}_{r_\beta = \rho_\beta} = \\ & = \left\{ c_a^0 \delta_{ba} w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) + c_a^0 T_a^b(E) w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right\}_{r_\beta = \rho_\beta}; \quad /12/ \end{aligned}$$



és

$$\left\{ \left\langle Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \left| \frac{\partial [r_\beta \psi_a^{(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta)]}{\partial r_\beta} \right. \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta} \right\}_{r_\beta = \rho_\beta} = \quad /13/$$

$$= \left\{ c_a^0 \sigma_{ba} \frac{\partial w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b)}{\partial r_\beta} + c_a^0 T_a^b(E) \frac{\partial w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b)}{\partial r_\beta} \right\}_{r_\beta = \rho_\beta}$$

Most ugyanez az egyenletpár a beeső csatornában, azaz  $b = a$  mellett:

$$\left\{ \left\langle Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \left| r_\alpha \psi_a^{(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha) \right. \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha} \right\}_{r_\alpha = \rho_\alpha} = \quad /14/$$

$$= \left\{ c_a^0 w_{\ell_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a) + c_a^0 T_a^a(E) w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \right\}_{r_\alpha = \rho_\alpha};$$

$$\left\{ \left\langle Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \left| \frac{\partial [r_\alpha \psi_a^{(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha)]}{\partial r_\alpha} \right. \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha} \right\}_{r_\alpha = \rho_\alpha} = \quad /15/$$

$$= \left\{ c_a^0 \frac{\partial w_{\ell_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a)}{\partial r_\alpha} + c_a^0 T_a^a(E) \frac{\partial w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a)}{\partial r_\alpha} \right\}_{r_\alpha = \rho_\alpha}$$

A /12/, /13/ első egyenletpárban  $c_a^0$  és  $c_a^0 T_a^b$ -t, a /14/, /15/ második egyenletpárban  $c_a^0$ -t és  $c_a^0 T_a^a$ -t tekintjük ismeretlennek. Az első párból a  $c_a^0 T_a^b$ -t, a másodikból a  $c_a^0$ -t számítjuk ki csupán. Így /12/, /13/-ból

$$c_a^0 T_a^b(E) = \quad /16/$$

$$= \frac{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \left| \psi_a^{(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta) \right. \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta}; w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) \right\}}{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ w_{\ell_a}^{(0)}(r_\beta, k_a); w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) \right\}}$$

és /14/, /15/-ből

$$c_a^0 = \frac{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \left\langle Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \left| \psi_a^{(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha) \right. \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha}; w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \right\}}{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ w_{\ell_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a); w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \right\}} \quad /17/$$

ahol  $W_{r_j}$  a Wronski-determináns az  $r_j$ -változóban. Innen a keresett  $T_a^b(E)$  mátrixelem:

$$T_a^b(E) = \frac{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \langle Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \cdot \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) | \psi_a^{(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta, E) \rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta}; w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) \right\}}{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \langle Y_{\lambda_a}^{l_a}(\hat{r}_\alpha) \cdot \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) | \psi_a^{(+)}(r_\alpha, \hat{r}_\alpha, \xi_\alpha, E) \rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha}; w_{l_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \right\}} \times \frac{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ w_{l_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a); w_{l_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a) \right\}}{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b); w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) \right\}} \quad /18/$$

Ha a reguláris  $w_l^{(0)}$  Coulomb-hullámfüggvényt szétbontjuk be- és kifutó jellegűre, azt kapjuk, hogy

$$\begin{vmatrix} w_l^{(0)}(r, k), w_l^{(+)}(r, k) \\ w_l^{(0)}(r, k), w_l^{(+)*}(r, k) \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} w_l^{(-)}(r, k) & w_l^{(+)}(r, k) \\ w_l^{(-)}(r, k) & w_l^{(+)}(r, k) \end{vmatrix} = -2ik \quad /19/$$

$$= W_r \left\{ w_l^{(+)}(r, k); w_l^{(-)}(r, k) \right\} = -2ik,$$

amennyiben  $w_l^{(\pm)}$  normálása  $w_l^{(\pm)}(r, k) \sim e^{\pm ikr} (r \rightarrow \infty)$ . Most  $l = l_a$  ill.  $l = l_b$  helyettesítéssel kapjuk végre a tranzitmátrix-elem csatorna-analizisbeli egyik kifejezését:

$$T_{l_a}^{l_b} \frac{\lambda_b s_b \sigma_b B}{\lambda_a s_a \sigma_a A}(E) = T_a^b(E) = \frac{k_a}{k_b} \frac{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \langle Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) | \psi_a^{(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta, E) \rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta}; w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) \right\}}{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \langle Y_{\lambda_a}^{l_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) | \psi_a^{(+)}(r_\alpha, \hat{r}_\alpha, \xi_\alpha, E) \rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha}; w_{l_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \right\}} \quad /20a/$$

A tranzit-mátrixelem egész fenti levezetését végigvihetnénk az  $|l_s J M C\rangle$  reprezentációban is. A gondolatmenet a fenti; itt csak a végeredményt adjuk meg:

$$T_{l_a s_a l_b s_b}^{l_a s_a l_b s_b}(\epsilon, \pi) = \frac{k_a}{k_b} \frac{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \langle [Y_{\lambda_\beta}^{l_b}(\hat{r}_\beta); \chi_{\sigma_\beta}^{s_b B}(\xi_\beta)]_M | \psi_a^{(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta, E) \rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta; w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b)} \right\}}{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \langle [Y_{\lambda_\alpha}^{l_a}(\hat{r}_\alpha); \chi_{\sigma_\alpha}^{s_a A}(\xi_\alpha)]_M | \psi_a^{(+)}(r_\alpha, \hat{r}_\alpha, \xi_\alpha, E) \rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha; w_{l_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a)} \right\}}$$

/20b/

A tranzit-mátrixelem /20/ kifejezése a Rosenfeld-formula [3]. Itt megadott levezetésének gondolatmenete a formális különbségek ellenére is rokon Rosenfeld eredeti levezetésével. A fenti két reprezentációban megadott mátrixelemben szereplő  $\psi_a^{(+)}(\mathbf{r}, E)$  állapot az  $|a\rangle$  csatornaállapotból, mint kezdőállapotból /belső hullámból/ kifejlődő reakcióhullámfüggvény. A  $\chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha)$  és  $\chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta)$  belső hullámfüggvények a be- és kimenőoldali részrendszerek belső hullámfüggvényeinek vektorcsatolt eredői.

4/ A tranzitmátrixelem időtükrözött alakja

A /20/ Rosenfeld-formulában a be- és kimenőoldal adatai erősen aszimmetrikus módon lépnek fel. Formális szimmetria elérése céljából a reciprocitás elvének felhasználásával előállítjuk a Rosenfeld-formula alternatív alakját, amely az eredetivel kombinálva, a be- és kimenőoldali adatait szimmetrikusan tartalmazó kifejezésre vezet. A szimmetriára később, a disztortálás során lesz szükségünk.

A  $\hat{\Theta}(H)$  időtükröző operátort azzal a követelménnyel definiáljuk [7], hogy a

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv e^{-i c H} \phi(\mathbf{r}) \tag{21}$$

azonosságból minden  $\phi(\mathbf{r})$ -re és minden valós  $c$ -re a

$$\hat{\Theta} \phi(\mathbf{r}) \equiv e^{-i c H} \hat{\Theta} \psi(\mathbf{r}) \tag{22}$$

azonosság következnek. Az ilymódon értelmezett  $\hat{\Theta} = \hat{\Theta}(H)$  operátor időtükrözésinvariáns  $H$  probléma esetén, azaz a

$$\begin{aligned} \hat{\Theta} H \hat{\Theta}^+ &= H & \hat{\Theta} \mathbf{p} \hat{\Theta}^+ &= -\mathbf{p} \\ \hat{\Theta} \mathbf{r} \hat{\Theta}^+ &= \mathbf{r} & \hat{\Theta} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \hat{\Theta}^+ &= -(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \\ & & \hat{\Theta} \hat{\mathbf{G}} \hat{\Theta}^+ &= -\hat{\mathbf{G}} \end{aligned} \tag{23}$$

operátoregyenletek teljesülése mellett, a következő módon transzformálja a  $H, \mathbf{r}, \mathbf{p}, (\mathbf{r} \times \mathbf{p})^2$  ill.  $\hat{\sigma}_z$  operátorok sajátfüggvényeit:

$$\begin{aligned} \hat{\omega} |\ell_n\rangle &= \text{konst.} |\ell_n\rangle & \hat{\omega} |\mathbf{p}\rangle &= |-\mathbf{p}\rangle \\ \hat{\omega} |\mathbf{r}\rangle &= |\mathbf{r}\rangle & \hat{\omega} |\ell m\rangle &= (-1)^{\ell-\lambda} |\ell-\lambda\rangle & /24/ \\ \hat{\omega} |s\sigma\rangle &= (-1)^{s-\sigma} |s-\sigma\rangle \end{aligned}$$

Az időtükrözés operátora ugyanezen dinamikai változók szimultán sajátfüggvényeit, ha azok kötött állapotok, akkor a

$$\begin{aligned} \hat{\omega} |\ell \lambda s \sigma C\rangle &= (-1)^{\ell-\lambda+s-\sigma} |\ell-\lambda s-\sigma C\rangle \\ \hat{\omega} |\ell s J M C\rangle &= (-1)^{J-M} |\ell s J -MC\rangle, & /25/ \\ \hat{\omega} |\mathbf{k} s \sigma C\rangle &= (-1)^{s-\sigma} |-\mathbf{k} s-\sigma C\rangle \end{aligned}$$

szerint, ha pedig reakcióhullámfüggvények, akkor a

$$\begin{aligned} \psi_C^{(\pm)}(\mathbf{r}, E) &\equiv |c(\pm)\rangle \\ \hat{\omega} |c\rangle &\equiv |-c\rangle & /26/ \end{aligned}$$

jelölés bevezetésével a

$$\begin{aligned} \hat{\omega} |\ell \lambda s \sigma C(\pm)\rangle &= (-1)^{\ell-\lambda+s-\sigma} |\ell-\lambda s-\sigma C(\mp)\rangle, \\ \hat{\omega} |\ell s J M C(\pm)\rangle &= (-1)^{J-M} |\ell s J -MC(\mp)\rangle, & /27/ \\ \hat{\omega} |s \sigma C(\pm)\rangle &= (-1)^{s-\sigma} |s-\sigma C(\mp)\rangle \end{aligned}$$

értelemben transzformálja.

Mivel pedig időtükrözésvariancia esetén fennáll a

$$T_a^b(E) = T_{\hat{\omega}_a}^{\hat{\omega}_b}(E) \equiv T_{-b}^{-a} & /28/$$

reciprocitási tétel, a /20/ formula ekvivalens változata a

$$T_{\ell_a \lambda_a s_a \sigma_a A}^{\ell_b \lambda_b s_b \sigma_b B}(E) = T_{\ell_b -\lambda_b s_b -\sigma_b B}^{\ell_a -\lambda_a s_a -\sigma_a A}(E) & /29/$$



alapján a

$$T_{l_a \lambda_a s_a \sigma_a}^{l_b \lambda_b s_b \sigma_b} (E) = \frac{k_b}{k_a} \times \rho_{l_b \lambda_b s_b \sigma_b}^{l_a \lambda_a s_a \sigma_a} \times$$

$$\times \frac{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ \left\langle Y_{-\lambda_a}^{l_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{-\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \middle| r_\alpha \psi_{-b}^{(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha E) \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha; w_{l_a}^{(0)}(k_a, r_\alpha)} \right\}}{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ \left\langle Y_{-\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{-\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \middle| r_\beta \psi_{-b}^{(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta E) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta; w_{l_b}^{(+)}(k_b, r_\beta)} \right\}} \quad /30/$$

ahol

$$\rho_{l_b \lambda_b s_b \sigma_b}^{l_a \lambda_a s_a \sigma_a} = (-1)^{l_a - \lambda_a + s_a - \sigma_a + l_b - \lambda_b + s_b - \sigma_b}$$

Az  $|\ell \lambda s \sigma C\rangle$  reprezentáció előnye, hogy a csatornaállapot szeparálható az  $\{r, \hat{r}, \xi\}$  változóiban; hátránya viszont, hogy a segítségével felírt tranzitmátrix nem szimmetrikus. Ezzel szemben a nem faktorizálható  $|\ell s J M C\rangle$  reprezentációban - forgásinvariáns Hamilton-operátor esetén - a tranzitmátrixelem már szimmetrikus:

$$T_{l_a s_a J A}^{l_b s_b J B} (E, \pi) = T \begin{matrix} \langle l_a s_a J A \rangle \\ \langle l_b s_b J B \rangle \end{matrix} (E, \pi) \quad /31/$$

$$= T_{l_b s_b J B}^{l_a s_a J A}$$

A két ekvivalens tárgyalás közül a faktorizálható csatorna definíció esetén részletezzük, és a hatáskeresztmetszet kifejezését a tranzitmátrixelemekkel ilyen értelemben keressük. A végeredményünket azonban meg fogjuk adni az  $|\ell s J M C\rangle$  reprezentációban is, amikor az exakt mátrixelem időtükrözött ekvivalens alakja /31/ alapján:

$$T_{l_a s_a J A}^{l_b s_b J B} (E, \pi) = T_a^b (E, \pi) = \frac{k_b}{k_a} \times$$

$$\times \frac{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \left\langle [Y_{\lambda_a}^{l_a}(\hat{r}_\alpha); \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha)]_M; \psi_b^{(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha E) \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha; w_{l_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a)} \right\}}{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle [Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta); \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta)]_M; \psi_b^{(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta E) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta; w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b)} \right\}} \quad /32/$$

5/ A differenciális hatáskeresztmetszet  $|\ell \lambda s \sigma C\rangle$  reprezentációban

Az  $|\ell \lambda s \sigma C\rangle$  reprezentációból a  $|k s \sigma C\rangle$  reprezentációba semleges részek reakciója esetén a következő transzformációt vezet át:

$$T_{k_a s_a \sigma_a}^{k_b s_b \sigma_b} (E) = \left\langle e^{i k_b r_\beta} \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \middle| T \middle| e^{i k_a z_\alpha} \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \right\rangle =$$

$$= (4\pi)^{3/2} \sum_{l_a=0}^{\infty} \sum_{l_b=0}^{\infty} \sum_{\lambda_b=-l_b}^{l_b} i^{l_a - l_b} (2l_a + 1)^{1/2} Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{k}_b)^*$$

$$\left\langle j_{l_b}(k_b r_\beta) Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) | T | j_{l_a}(k_a r_\alpha) Y_{\lambda_a}^{l_a}(r_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \right\rangle \quad /33/$$

$$T_{k_a s_a \sigma_a}^{k_b s_b \sigma_b} A(E) =$$

$$= (4\pi)^{3/2} \sum_{l_a=0}^{\infty} \sum_{l_b=0}^{\infty} \sum_{\lambda_b=-l_b}^{+l_b} i^{l_a-l_b} (2l_a+1)^{1/2} T_{l_a \lambda_a 0 s_a \sigma_a}^{l_b \lambda_b s_b \sigma_b} A(E) Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{k}_b)^* \quad /34/$$

alaku. Segítségével a differenciális hatáskeresztmetszet semleges részreakciója esetére a  $\sigma_a$  és  $\sigma_b$  csatornaspin-vetületekre, továbbá az  $s_a$  és  $s_b$  csatornaspinekre való bemenőoldali átlagolás és kimenőoldali összegezés után:

$$\frac{d\sigma(k_b B; k_a A)}{d\Omega_\beta} = \frac{\mu_\alpha \mu_\beta}{(2\pi \hbar^2)} \frac{k_b}{k_a} \times$$

$$\times \sum_{s_a=|l_a'-l_a|}^{l_a'+l_a} \sum_{s_b=|l_b'-l_b|}^{l_b'+l_b} \sum_{\sigma_a=-s_a}^{s_a} \sum_{\sigma_b=-s_b}^{s_b} \frac{1}{(2l_a'+1)(2l_a''+1)} \quad /35/$$

$$\left| \sum_{l_a=0}^{\infty} \sum_{l_b=0}^{\infty} \sum_{\lambda_b=-l_b}^{+l_b} (2l_a+1)^{1/2} i^{l_a-l_b} T_{l_a \lambda_a 0 s_a \sigma_a}^{l_b \lambda_b s_b \sigma_b} A(E) Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{k}_b)^* \right|^2$$

## 6/ A hullámfüggvények disztortálása

Célszerűnek látszik bizonyos fokig függetlenül definiálni a "distorted wave" közelítést általában és a "direkt" reakció fogalmát.

Mindkét fogalmat a Hamilton-operátor bizonyos egyszerűsített felvételével jellemezzük. A teljes Hamilton-operátor a bemenő és kimenő oldal  $T_\alpha + H_\alpha, T_\beta + H_\beta$  kölcsönhatásmentes Hamilton-operátorokkal és a két szeparáció  $V_\alpha, V_\beta$  kölcsönhatási operátorokkal kifejezve

$$H(r) = T_\alpha(r_\alpha) + V_\alpha(r_\alpha \xi_\alpha) + H_\alpha(\xi_\alpha) =$$

$$= T_\beta(r_\beta) + V_\beta(r_\beta \xi_\beta) + H_\beta(\xi_\beta) \quad /36/$$

A disztortált hullámu tárgyalás az exakt Hamilton-operátorban a  $H_\alpha(\xi_\alpha)$  és  $H_\beta(\xi_\beta)$  exakt alakjukban való megtartása mellett a  $V_\alpha(r_\alpha \xi_\alpha)$  és  $V_\beta(r_\beta \xi_\beta)$  exakt soktest-kölcsönhatásokat helyettesíti a

szeparációnak megfelelő  $V_{\alpha k_{\alpha} A}^{opt}$  ill.  $V_{\beta k_{\beta} A}^{opt}$  komplex optikai kéttest potenciálokkal. A  $\psi_{\alpha}^{(+)}$  és  $\psi_{\beta}^{(+)}$  hullámfüggvények disztortált közelítése az optikai potenciál segítségével történik.

A direkt tárgyalásmód a DW-közelítésen túlmenően azt jelenti, hogy a  $H_{\alpha}(\xi_{\alpha})$  és  $H_{\beta}(\xi_{\beta})$  belső Hamilton-operátorok definiálta négy atommagot jellegüktől függően /targetmag-, végmag, ill. bombázó/ egy-, két-, vagy néhány részecskéből álló rendszernek tekintjük.

Másrészt, mivel a hullámfüggvények és kölcsönhatások nem függetlenek egymástól, a tranzit-mátrixelemnek exakt formájában több ekvivalens alakja van. Így a /20/, a /30/ csatornaanalízisbeli mátrixelemek és a

$$T_{\alpha}^b(E) = \langle \Phi_b | V_{\beta} | \psi_{\alpha}^{(+)} \rangle = \quad /37a/$$

$$= \langle \psi_{\beta}^{(-)} | V_{\alpha} | \Phi_{\alpha} \rangle \quad /37b/$$

szóráselméleti mátrixelemek mind csak formailag különböző reprezentációi ugyanannak a mennyiségnek. Az ekvivalencia csak az exakt mátrixelemekre áll fenn. Ez belátható, ha tekintetbe vesszük, hogy az optikai potenciálok szokásos módon való bevezetése nem jelenti azt, hogy konzekvens modellel helyettesítjük az eredeti problémát. Modellen itt modell-Hamilton-operátor létezését értjük. Ilyet azonban a "distorted wave" tárgyalás nem biztosít, hiszen a be- és kimenő oldali optikai potenciálok közt nincs logikai kapcsolat, és

$$\begin{aligned} T_{\alpha}(\mathbf{r}_{\alpha}) + V_{\alpha k_{\alpha} A}^{opt}(\mathbf{r}_{\alpha}) + H_{\alpha}(\xi_{\alpha}) &\neq \\ &\neq T_{\beta}(\mathbf{r}_{\beta}) + V_{\beta k_{\beta} B}^{opt}(\mathbf{r}_{\beta}) + H_{\beta}(\xi_{\beta}) \end{aligned} \quad /38/$$

Ennek az a következménye, hogy a két szóráselméleti és a két csatornaanalízisbeli mátrixelem disztortált hullámu közelítése mind más és más disztortált amplitudóra vezet.

A két szóráselméleti disztortált mátrixelem elnevezése M. Born-ról a DWBA-prior-, ill. DWBA-post-alakja. A csatornaanalízisbeli disztortált mátrixelemeket nevezzük el L. Rosenfeldről DWRA-nek;  ${}^{\beta} T^{DWRA}$  post- és  ${}^{\alpha} T^{DWRA}$  prior-alakja az exakt mátrixelem /20/, ill. /30/-alatti alakjából ered. Mivel általában

$$\left\{ \beta T_a^b \right\}^{DWRA} \neq \left\{ \alpha T_a^b \right\}^{DWRA}, \quad /39/$$

a ki- és bemenőoldali szimmetriát a

$$\left\{ T_a^b(E) \right\}^{DWRA} \equiv \frac{1}{2} \left\{ \beta T_a^b(E) \right\}^{DWRA} + \frac{1}{2} \left\{ \alpha T_a^b(E) \right\}^{DWRA} \quad /40/$$

definícióval állítjuk helyre.

A  $\psi_a^{(+)}$  és  $\psi_b^{(+)}$  hullámfüggvények közelítése a szokásos DWBA elméletben rugalmas szórások hullámfüggvényeivel való helyettesítés útján történik; a szóráselmélet mátrixeleme az egész konfigurációs térre kiterjedő integrál és a DWBA közelítés az exakt kölcsönhatást

az egész konfigurációs térben a  $V_{\alpha k_a A}^{opt}$ ,  $V_{\beta k_b B}^{opt}$  optikai potenciálok helyettesíti.

A DWRA közelítés során a disztortált hullámfüggvények egy része maga is reakciót ír le; az  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$  kezdeti feltételek és a

$V_{\alpha k_a A}^{opt}$ ,  $V_{\beta k_b B}^{opt}$  optikai potenciálok párosítása részletesebb fizikai megfontolás útján történik. A kétféle határfeltételnek és a két optikai potenciálnak két keresett párosítását aszerint jelöljük ki, hogy a konfigurációs térnek melyik résztartományában akarjuk kiszámítani a disztortált hullámfüggvényeket. Definícióként fogadjuk el, hogy az  $\alpha$ , ill.  $\beta$  -szeparáció csatornabejáratán kiszámítandó  $\phi_{-b}^{(+)}$  ill.  $\phi_a^{(+)}$  disztortált hullámfüggvényeket a gerjesztési

állapottól és a relativ mozgás energiájától függő  $V_{\alpha k_a A}^{opt}(\mathbf{r}_\alpha)$  ill. a

$V_{\beta k_b B}^{opt}(\mathbf{r}_\beta)$  optikai potenciálok határozzuk meg. Ennek a választásnak fizikai indokolása az a tény, hogy pl. a  $\beta$  -csatornabejárat környezetében a  $B \equiv \{B', B''\}$  állapotú,  $\mathbf{k}_b$  relativ impulzussal szétváló részrendszerek közt ható exakt  $V_\beta(\mathbf{r}_\beta, \xi_\beta)$  kölcsönhatás igen

jól közelíthető a  $V_{\beta k_b B}^{opt}(\mathbf{r}_\beta)$  optikai potenciállal. Az ellenező párosítás egyébként fizikailag semmivel sem indokolható és formálisan is triviális ellentmondásra vezet. A fentvázolt párosítás egyébként a legjellegzetesebb vonása a DWRA elméletnek: az  $|a\rangle$  csatornában beeső hullámból a  $V_{\beta k_b B}^{opt}(\mathbf{r}_\beta)$  optikai potenciál hatására



kifejlődő  $\phi_a^{b(+)}$  disztortált hullámot megkeresi az  $r_\beta = \rho_\beta$  felületen és megfordítva. Ez azt jelenti, hogy az  $\alpha$ -szeparáció szerint faktorizált kezdőfeltételekből a  $\beta$ -szeparáció szerint szeparált  $T_\beta(\mathbf{r}_\beta) +$

$+V_\beta^{\text{opt}}(r_\beta) + H_\beta(\xi_\beta)$  Hamilton-operátor képviselte kölcsönhatás révén kifejlő-

dő disztortált hullámot kell kiszámítani /és megfordítva/. A DWBA köze-  
litéssel ellentétben a DWRA négy disztortált hullámfüggvénye közül ket-  
tő nem szórási, hanem reakcióhullámfüggvény. Pontosabban, ez utóbbi e-  
setben az adott szeparációbeli beeső hullámból az exakt kölcsönhatás  
nyomán kifejlődő reakcióhullámfüggvényt helyettesítjük az ugyanezen be-  
eső hullámból a másik szeparációbeli optikai potenciál hatására kiala-  
kuló reakcióhullámfüggvénnyel. Ezzel szemben a DWBA-közelítés az exakt  
reakcióállapotot mindenütt rugalmas szórási hullámfüggvénnyel pótolja.

A két szeparáció egyébként különös módon kombinálódik akár a  $\alpha$ -DWRA  
akár a  $\beta$ -DWRA mátrixelemben.

Most felírjuk a disztortált hullámfüggvényeinket definiáló e-  
gyenleteket a fent részletezett elvnek megfelelően. A Hamilton-operátor  
közelítése a csatornabejáratokon:

$$\text{ha } r_\alpha \sim \rho_\alpha, \text{ úgy } H(\mathbf{r}) \sim T_\alpha(\mathbf{r}_\alpha) + V_{\alpha k_\alpha A}^{\text{opt}}(r_\alpha) + H_\alpha(\xi_\alpha) \quad /41a/$$

$$\text{ha } r_\beta \sim \rho_\beta, \text{ úgy } H(\mathbf{r}) \sim T_\beta(\mathbf{r}_\beta) + V_{\beta k_\beta B}^{\text{opt}}(r_\beta) + H_\beta(\xi_\beta) \quad /41b/$$

A reakcióhullámfüggvényeket fizikai szempontból egyértelműen  
definiálja a beeső hullám és a kölcsönhatási operátor. Matematikai  
szempontból ezen adatokhoz járul még a szórt hullám tisztán kifutó jel-  
legének előírása. Adott beeső hullám és potenciál esetén a reakcióhul-  
lámfüggvényt a Møller-operátor segítségével lehet exaktul generálni.  
Igy pl. a  $\phi_a^b$  optikai reakcióállapotot az egész konfigurációs térben  
exaktul megadja a következő bonyolult operátorelőállítás:

$$\phi_a^{b(+)} \equiv \Omega_\alpha^{b(+)\text{opt}}(E) \phi_a = \quad /42/$$

$$L^{-1} \frac{1}{E - (T_\beta + V_b^{\text{opt}} + H_\beta) + i\epsilon} (T_\beta - T_\alpha + V_b^{\text{opt}} + H_\beta - H_\alpha) \phi_a \quad /43/$$

Jelen tárgyalásunkban azonban nincs szükség a disztortált hullámfüggvényeknek az egész konfigurációs térben tanúsított viselkedésére, hanem csupán bizonyos csatornabejáratokon. Adott csatornabejáraton a hullámfüggvények az illető szeparációnak megfelelő kifutó jellegű csatornaállapotok szuperpozíciójaként előállíthatók. A Møller-operátorral való előállítását pótoljuk a differenciálegyenletnek, a beeső hullámnak és a lokálisan érvényes kifutó jellegű aszimptotikának előírásával.

Az exakt hullámfüggvények helyettesítése disztortált hullámokkal ugyanezekben a tartományokban a következő:

$$\text{Ha } r_\alpha \sim \rho_\alpha, \quad \text{úgy} \quad \Psi_\alpha^{(+)}(\mathbf{r}) \rightarrow \Phi_\alpha^{\alpha(+)}(r_\alpha, \xi_\alpha); \quad /44a/$$

$$\text{ha } r_\alpha \sim \rho_\alpha, \quad \text{úgy} \quad \Psi_{-b}^{(+)}(\mathbf{r}) \sim \Phi_{-b}^{-\alpha(+)}(r_\alpha, \xi_\alpha); \quad /44b/$$

$$\text{ha } r_\beta \sim \rho_\beta, \quad \text{úgy} \quad \Psi_\alpha^{(+)}(\mathbf{r}) \sim \Phi_\alpha^{b(+)}(r_\beta, \xi_\beta); \quad /45a/$$

$$\text{ha } r_\beta \sim \rho_\beta, \quad \text{úgy} \quad \Psi_{-b}^{(+)}(\mathbf{r}) \sim \Phi_{-b}^{-b(+)}(r_\beta, \xi_\beta); \quad /45b/$$

ahol a  $\Phi_\alpha^{\alpha(+)}$ ,  $\Phi_\alpha^{b(+)}$ ,  $\Phi_{-b}^{-\alpha(+)}$  és  $\Phi_{-b}^{-b(+)}$  disztortált hullámfüggvényeket a következő optikai-potenciálos differenciálegyenletek és tiszta kifutó jellegű határfeltételek definiálják:

A  $\Phi_\alpha^{\alpha(+)}$ ( $r_\alpha, \xi_\alpha$ ) disztortált hullámfüggvény definíciója:

$$\left[ T_\alpha(r_\alpha) + V_{\alpha k_\alpha A}^{\text{opt}}(r_\alpha) + H_\alpha(\xi_\alpha) - E \right] \Phi_\alpha^{\alpha(+)}(r_\alpha, \xi_\alpha) = 0 \quad /46a/$$

$$\Phi_\alpha^{\alpha(+)}(r_\alpha, \xi_\alpha) \xrightarrow{r_\alpha \rightarrow \rho_\alpha} \frac{1}{r_\alpha} \left\{ w_{\ell_\alpha}^{(0)}(r_\alpha, k_\alpha) + \text{konst. } w_{\ell_\alpha}^{(+)}(r_\alpha, k_\alpha) \right\} \times Y_{\lambda_\alpha}^{\ell_\alpha}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_\alpha}^{s_{\alpha A}}(\xi_\alpha); \quad /46b/$$

$\Phi_\alpha^{\alpha(+)}$  ezek szerint rugalmas szórást ír le a  $V_{\alpha k_\alpha A}^{\text{opt}}$  optikai potenciálon. A  $\Phi_{-b}^{-\alpha(+)}$ ( $r_\alpha, \xi_\alpha$ ) amelyet szintén az  $r_\alpha = \rho_\alpha$  felületen keressünk, már reakciót ír le:

$$\left[ T_\alpha(r_\alpha) + V_{\alpha k_\alpha A}^{\text{opt}}(r_\alpha) + H_\alpha(\xi_\alpha) - E \right] \Phi_{-b}^{-\alpha(+)}(r_\alpha, \xi_\alpha) = 0 \quad /47a/$$

$$\Phi_{-b}^{-a(+)} \xrightarrow{r_\alpha \rightarrow \rho_\alpha} \frac{1}{r_\beta} w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) Y_{-\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{-\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) +$$

$$+ \sum_{\alpha'(\alpha)} \text{konst.} \frac{1}{r_\alpha} w_{\ell_{\alpha'}}^{(+)}(r_\beta, k_b) Y_{\lambda_{\alpha'}}^{\ell_{\alpha'}}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_{\alpha'}}^{s_{\alpha'} A}(\xi_\alpha) . \quad /47b/$$

A következőes eljárás az, hogy a szórt hullámot az  $\alpha$  szeparációhoz tartozó  $\alpha'(\alpha)$  csatornák összességéből építjük fel. A tranzit-mátrix-elem /20/ kifejezéséből azonban az  $\alpha'(\alpha) \neq \alpha$  csatornák járuléka ortogonalitás következtében exaktul kiesik.

Az  $r_\beta = \rho_\beta$  konfigurációs térbeli felületen érdekes  $\Phi_\alpha^{b(+)}(r_\beta, \xi_\beta)$  és  $\Phi_{-b}^{-b(+)}(r_\beta, \xi_\beta)$  disztortált hullámfüggvények a  $V_{\beta k_b B}^{\text{opt}}(r_\beta)$  problémának reakció- ill. szórási sajátfüggvényei:

$$[T_\beta(r_\beta) + V_{\beta k_b B}^{\text{opt}}(r_\beta) + H_\beta(\xi_\beta) - E] \Phi_\alpha^{b(+)}(r_\beta, \xi_\beta) = 0 \quad /48a/$$

$$\Phi_\alpha^{b(+)}(r_\beta, \xi_\beta) \xrightarrow{r_\beta \rightarrow \rho_\beta} \frac{1}{r_\alpha} w_{\ell_\alpha}^{(0)}(r_\alpha, k_\alpha) Y_{\lambda_\alpha}^{\ell_\alpha}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_\alpha}^{s_\alpha A}(\xi_\alpha) +$$

$$+ \sum_{b(\beta)} \text{konst} \frac{1}{r_\beta} w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \quad /48b/$$

illetőleg:

$$[T_\beta(\hat{r}_\beta) + V_{\beta k_b B}^{\text{opt}}(r_\beta) + H_\beta(\xi_\beta) - E] \Phi_{-b}^{-b(+)}(r_\beta, \xi_\beta) = 0 \quad /49a/$$

$$\Phi_{-b}^{-b(+)}(r_\beta, \xi_\beta) = \frac{1}{r_\beta} \left[ w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) + \text{konst.} w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right] \times$$

$$\times Y_{-\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{-\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) . \quad /49b/$$

Valamennyi radiális hullámfüggvény egységnyi fluxusra normált. A háttérfeltételekben szereplő konstans szorzók az illető optikai potenciálon való "szórás"  $t_{\alpha\alpha}^a, t_{b\alpha}^a, t_{-a,-b}^b$ , ill.  $t_{-b,-b}^b$  tranzit-mátrix-elemei.

#### 7/ A DWRA szórási mátrixeleme

A szórási mátrixelem DWRA közelítését a /20/ és /30/ formulákból az exakt hullámfüggvényeknek a kérdéses tartományban jól-közelítő disztortált hullámfüggvényekkel való helyettesítéssel kapjuk, a /46/, /47/, /48/ és /49/ értelmében:

$$\left\{ \alpha T \begin{matrix} \ell_b \lambda_b s_b \sigma_b B \\ \ell_a \lambda_a s_a \sigma_a A \end{matrix} (E) \right\}^{DWRA} = \frac{k_a}{k_b} \times \quad /50/$$

$$\times \frac{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(r_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \Phi_a^{b(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta, E) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta; w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b)} \right\}}{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \left\langle Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(r_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \Phi_a^{a(+)}(r_\alpha, \hat{r}_\alpha, \xi_\alpha, E) \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha; w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a)} \right\}}$$

$$\left\{ \beta T \begin{matrix} \ell_b \lambda_b s_b \sigma_b B \\ \ell_a \lambda_a s_a \sigma_a A \end{matrix} (E) \right\}^{DWRA} = \frac{k_b}{k_a} \times \quad /51/$$

$$\times \frac{W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \left\langle Y_{-\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{-\sigma_a}^{s_a A} \left| \Phi_{-b}^{-a(+)}(r_\alpha, \hat{r}_\alpha, \xi_\alpha, E) \right. \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha; w_{\ell_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a)} \right\}}{W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle Y_{-\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{-\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \left| \Phi_{-b}^{-b(+)}(r_\beta, \hat{r}_\beta, \xi_\beta, E) \right. \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta; w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b)} \right\}}$$

A  $\beta \neq \alpha$  esetben csatornakeveredést jelentő  $\Phi_a^{b(+)}(\beta, \xi_\beta)$  és  $\Phi_{-b}^{-a(+)}$  függ-

vények bonyolult szerkezetűek: nem szeparálhatók egyik változó sorban sem.

Ezzel szemben spinfüggetlen centrális optikai potenciál esetén a  $\Phi_a^{a(+)}(\alpha, \xi_\alpha)$

és  $\Phi_{-b}^{-b(+)}(\beta, \xi_\beta)$  függvényekben a kezdeti csatorna-szeparációt az azonos

módon szeparált optikai Hamilton-operátor megtartja; így ezek a disztortált hullámok faktorizáltak az egyik változó sorban; végül is ortho-nalitás révén az /50/, /51/ DWRA-mátrixelemek nevezői lényegesen egysze-

rűsödnek. Így, ha  $V_{\alpha k_a A}^{\text{opt}}(r_\alpha) = V_{\alpha k_a A}^{\text{opt}}(r_\alpha)$  és  $V_{\beta k_b B}^{\text{opt}}(r_\beta) = V_{\beta k_b B}^{\text{opt}}(r_\beta)$ , akkor

$$\Phi_a^{a(+)}(r_\alpha, \xi_\alpha) = \frac{1}{r_\alpha} u_{\ell_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_a) Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha) \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) \quad /52a/$$

és

$$\Phi_{-b}^{-b(+)}(r_\beta, \xi_\beta) = \frac{1}{r_\beta} u_{\ell_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b) Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \quad /53a/$$

Itt a radiális faktorok a

$$\left[ \frac{d^2}{dr_\alpha^2} + k_a^2 - V_{\alpha k_a A}^{\text{opt}}(r_\alpha) - \frac{\ell_a(\ell_a + 1)}{r_\alpha^2} - \frac{Z'_\alpha Z''_\alpha \eta^2}{r_\alpha} \right] u_{\ell_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_a) = 0 \quad /52b/$$

$$\left[ \frac{d^2}{dr_\beta^2} + k_b^2 - V_{\beta k_b B}^{\text{opt}}(r_\beta) - \frac{\ell_b(\ell_b + 1)}{r_\beta^2} - \frac{Z'_\beta Z''_\beta \eta^2}{r_\beta} \right] u_{\ell_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b) = 0 \quad /53b/$$

differenciálegyenletek megoldásai az

$$u_{\ell_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_a) \underset{r_\alpha > \rho_\alpha}{\sim} w_{\ell_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a) + \text{konst.} \cdot w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \quad /52c/$$



i11.

$$u_{\ell_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b) \underset{r_\beta > \rho_\beta}{\sim} w_{\ell_b}^{(0)}(r_\beta, k_b) + \text{konst. } w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b)$$

határfeltétel mellett.

A most vázolt egyszerűsödés esetén a ki- és bemenőoldali disztorciót szimmetrikusan tartalmazó szórási mátrixelemet a következő formula adja meg:

$$\begin{aligned} 2 \left\{ T_{\ell_a}^{\ell_b} \lambda_b s_b \sigma_b B \right. & \left. \lambda_a s_a \sigma_a A (E) \right\}^{DWRA} \equiv 2 \left\{ T_a^b (E) \right\}^{DWRA} = & /54a/ \\ = \frac{k_a W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \middle| \Phi_a^{b(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta E) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta} \right\}}{k_b W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ u_{\ell_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_\alpha); w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_\alpha) \right\}} & + \\ + \frac{k_b \rho_{\ell_a}^{\ell_b} \lambda_a s_a \sigma_a W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) \middle| \Phi_b^{a(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha E) \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha} \right\}}{k_a W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ u_{\ell_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b); w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right\}} & \end{aligned}$$

Hasonló módon nyerhető a tranzitmátrixelem az  $| \ell s J M C \rangle$  reprezentációban is:

$$\begin{aligned} 2 \left\{ T_{\ell_a s_a}^{\ell_b s_b} J^B \right. & \left. J^A (E, \pi) \right\}^{DWRA} \equiv 2 \left\{ T_a^b (E, \pi) \right\}^{DWRA} = & /54b/ \\ = \frac{k_a W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ r_\beta \left\langle [ Y_{\lambda_b}^{\ell_b}(\hat{r}_\beta); \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) ]_M \middle| \Phi_a^{b(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta E) \right\rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta} \right\}}{k_b W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ u_{\ell_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_\alpha); w_{\ell_a}^{(+)}(r_\alpha, k_\alpha) \right\}} & + \\ + \frac{k_b W_{r_\alpha = \rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \left\langle [ Y_{\lambda_a}^{\ell_a}(\hat{r}_\alpha); \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) ]_M \middle| \Phi_b^{a(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_\alpha E) \right\rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_\alpha} \right\}}{k_a W_{r_\beta = \rho_\beta} \left\{ u_{\ell_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b); w_{\ell_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right\}} & \end{aligned}$$

### 8/ A DWRA differenciális hatáskeresztmetszete

Az új disztortált hullámu közelítés differenciális hatáskeresztmetszetét legegyszerűbb formájában semleges részek esetén a reprezentáció-transzformációt jelentő /34/ formula és /54a/ kombinálásából azonnal megkapjuk.

Az új, DWRA elmélet differenciális hatáskeresztmetszete eszerint:

$$\left\{ \frac{d\sigma(\mathbf{k}_b B; \mathbf{k}_a A)}{d\Omega_\beta} \right\}^{DWRA} =$$

$$= (4\pi)^3 \frac{\mu_\alpha \mu_\beta}{(2\pi\hbar^2)^2} \frac{k_b}{k_a} \sum_{s_a=|l_a-l_a'|}^{l_a+l_a'} \sum_{s_b=|l_b-l_b'|}^{l_b+l_b'} \sum_{\sigma_a=-s_a}^{s_a} \sum_{\sigma_b=-s_b}^{s_b} \frac{1}{(2l_a'+1)(2l_a''+1)} \times$$

$$\times \left| \sum_{l_a=0}^{\infty} \sum_{l_b=0}^{\infty} \sum_{\lambda_b=-l_b}^{l_b} (2l_a+1)^{1/2} i^{l_a-l_b} Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{\mathbf{k}}_b) \right|^2 \times \quad /55/$$

$$\left\{ \frac{k_a}{k_b} \frac{W_{r_\beta=\rho_\beta} \left\{ r_\beta \langle Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{\mathbf{r}}_\beta) \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta) | \Phi_a^{b(+)}(r_\beta, \hat{\mathbf{r}}_\beta, \xi_\beta, E) \rangle_{\hat{\mathbf{r}}_\beta, \xi_\beta; w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_b)} \right\}}{W_{r_\alpha=\rho_\alpha} \left\{ u_{l_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_a); w_{l_a}^{(+)}(r_\alpha, k_a) \right\}} + \right.$$

$$\left. + \frac{k_b}{k_a} \frac{P_{l_a}^{l_a} s_a \sigma_a}{l_b \lambda_b s_b \sigma_b} \frac{W_{r_\alpha=\rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \langle Y_0^{l_a}(r_\alpha) \chi_{-\sigma_a}^{s_a A}(\xi_\alpha) | \Phi_b^{-a(+)}(r_\alpha, \hat{\mathbf{r}}_\alpha, \xi_\alpha, E) \rangle_{\hat{\mathbf{r}}_\alpha, \xi_\alpha; w_{l_a}^{(0)}(r_\alpha, k_a)} \right\}}{W_{r_\beta=\rho_\beta} \left\{ u_{l_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b); w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right\}} \right\}^2$$

Itt  $\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b$  a beeső ill. detektált hullámvektor;  $A = \{A', A''\}$  és  $B = \{B', B''\}$  a be- ill. kimenőoldali magok kvantált állapotait definiáló kvantum-

számok sorozatai;  $\Phi_a^{b(+)}$  és  $\Phi_b^{-a(+)}$  reakciót leíró disztortált hullám-

függvények a /47/, /48/ definíciós egyenletek értelmében;  $u_{l_a}^{a(+)}$  és  $u_{l_b}^{b(+)}$

rugalmas szórást írnak le a /46/ és /49/ egyenletek szerint. A kezdő

és végállapotbeli szeparált rendszerek belső állapotait a  $\chi_{\sigma_a}^{s_a A}$  és

a  $\chi_{\sigma_b}^{s_b B}$  képviselik. A  $w_{l_a}^{(+)}, w_{l_a}^{(-)}$  és  $w_{l_b}^{(0)}$  radiális hullámfüggvények -

semleges részecskék reakciójára korlátozódva - szabad mozgást írnak le, vé-

gül  $|b\rangle = |l_b \lambda_b s_b \sigma_b B\rangle; |a\rangle = |l_a 0 s_a \sigma_a A\rangle$ .

Ugyanezt a differenciális hatáskeresztmetszetet, megkaphatjuk a  $|c\rangle = |l s J M C\rangle$  reprezentáció segítségével is; /54b/ alapján:

$$\left\{ \frac{d\sigma(\mathbf{k}_b B; \mathbf{k}_a A)}{d\Omega_\beta} \right\}^{DWRA} = (4\pi)^3 \frac{\mu_\alpha \mu_\beta}{(2\pi\hbar^2)^2} \frac{k_b}{k_a} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \sum_{s_a}^{l_a+l_a''} \sum_{\sigma_a=-s_a}^{s_a} \sum_{s_b=l_b-l_b''}^{l_b+l_b''} \sum_{\sigma_b=s_b}^{s_b} \frac{1}{(2l_a'+1)(2l_a''+1)} \left| \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{l_a'=|s_a-j|}^{s_a+j} \sum_{l_b'=|s_b-j|}^{s_b+j} \sum_{\lambda_b=l_b-l_b}^{l_b} \right. \\
 & \times i^{l_a-l_b} \langle l_a 0 s_a \sigma_a | j \lambda_b + \sigma_b \rangle \langle l_b \lambda_b s_b \sigma_b | j \lambda_b + \sigma_b \rangle (2l_a'+1)^{1/2} Y_{\lambda_b}^{l_b}(k_b)^* \quad /56/ \\
 & \times \frac{1}{2} \left\{ \frac{k_a}{k_b} \frac{W_{r_\beta=\rho_\beta} \left\{ r_\beta \langle [Y_{\lambda_b}^{l_b}(\hat{r}_\beta); \chi_{\sigma_b}^{s_b B}(\xi_\beta)]_M | \Phi_a^{b(+)}(r_\beta \hat{r}_\beta \xi_\beta E) \rangle_{\hat{r}_\beta, \xi_\beta}; w_{l_b}^{(0)}(r_\beta, k_\beta) \right\}}{W_{r_\alpha=\rho_\alpha} \left\{ u_{l_a}^{a(+)}(r_\alpha, k_\alpha); w_{l_a}^{(+)}(r_\alpha, k_\alpha) \right\}} \right. \\
 & \left. + \frac{k_b}{k_a} \frac{W_{r_\alpha=\rho_\alpha} \left\{ r_\alpha \langle [Y_{\lambda_a}^{l_a}(\hat{r}_\alpha); \chi_{\sigma_a}^{s_a A}(\xi_a)]_M | \Phi_{+b}^{a(+)}(r_\alpha \hat{r}_\alpha \xi_a E) \rangle_{\hat{r}_\alpha, \xi_a}; w_{l_a}^{(0)}(r_\alpha, k_\alpha) \right\}}{W_{r_\beta=\rho_\beta} \left\{ u_{l_b}^{b(+)}(r_\beta, k_b); w_{l_b}^{(+)}(r_\beta, k_b) \right\}} \right\}^2
 \end{aligned}$$

Itt az  $|l s j M C\rangle \rightarrow |k s \sigma C\rangle$  transzformáció az irodalomból jól ismert kinematikai összefüggés.

Konkrét számolások céljaira az /55/ és az /56/ formulák Blatt- és Biedenharn-nak [8] a Racah-algebra tételeire támaszkodó tételei révén jelentős mértékben egyszerűsíthetők.

### 9/ Diszkusszió

Most több szempontból összevetjük a DWRA és a DWBA közelítések alapelveit.

Ami a hullámfüggvény disztortálását illeti: a DWBA elmélet mátrixeleme az összes változóra kiterjedő skalár szorzat lévén, az exakt kölcsönhatást az egész /belső/ térben helyettesíti a mátrixelem egyik tényezőjében a bemenő oldali, a másikban a kimenő oldali optikai potenciállal. A DWRA mátrixelemben adott szeparációval definiált felületi integrál áll és az adott szeparációbeli csatorna optikai potenciálját kizárólagosan a disztortált hullámfüggvénynek a szeparáció csatornabehatárán felvett értékének és deriváltjának meghatározására használtuk fel. Ez a tény első pillanatban döntően a DWRA közelítés javára billenti a mérleget; - túl messzire azonban nem mehetünk a következtetésben. A hullámfüggvények adott beeső hullám és adott potenciál melletti meghatározása nem-lokális feladat: a megoldás a potenciál teljes térbeli viselkedésének funkcionálja. -

Ami a disztortálás elvi alapját illeti: a két közelítés megegyezik egymással abban, hogy egyik sem modell-közelítés: nincs olyan mo-

probléma, amelynek tranzit-mátrixeleme  $T_{ba}^{DWRA}$  vagy  $T_{ba}^{DWRA}$  volna. Ennek oka az, mint már mondtuk, hogy a bemenő- és kimenőoldali optikai potenciállal definiált két probléma Hamilton-operátora különböző; modell-Hamilton-operátor létezése esetén a két szeparáció kölcsönhatásai nem függetlenek egymástól.

Az u.n. belső polarizáció figyelembevétele a DWBA-közelítésben csupán parciális differenciálegyenlet megoldási problémát vezet be. A tömegközéppont és az elektromos centrum összeesésének követelménye sajnos sokkal szerveesebb része a DWRA-beli csatornaállapotoknak tömegközéppont-távolság-argumentumu Coulomb-hullámfüggvényekkel való felírásának, mintsem hogy lényeges szerkezeti változások nélkül végrehajtható legyen a belső polarizáció tárgyalása.

A rugalmas csatornában, - amikor is egyetlen optikai potenciál szerepel, a DWRA és a DWBA elmélet, mint az kimutatható, azonos mátrixelemet ad. A reakció-mátrixelem optikai potenciáljai a DWRA elméletben is rugalmas szórás kísérletekkel nyerhetők.

A két elmélet megegyezik abban, hogy egyetlen mátrixeleme a-szimmetrikusan tartalmazza a be- és a kimenőoldali disztortálást. A DWRA mátrixelemnek a reciprocitás révén történő szimmetrizálása a két disztortáció szempontjából analogiája a szóráselméleti mátrixelem post- és prior-alakjai közepelésének.

A disztortált hullámfüggvények kiszámítása a DWBA közelítésben sokkal egyszerűbb differenciálegyenlet-megoldási feladat; ott az optikai potenciál Hamilton-operátorának szeparációja ráillik a beeső hullám faktorizálására; a csatornák így nem keverednek, és kizárólag rugalmas szórás hullámfüggvény kereséséről van szó. - A csatornaanalízisbeli disztortálásoknál szereplő négy hullámfüggvény közül kettőben csatorna-keveredés áll elő, mivel az egyik szeparáció csatornaállapota "szóródik" a másik szeparáció optikai potenciálján. Így a DWRA egyes hullámfüggvényei - reakcióként irnak le. Ez a körülmény a DWRA elgondolás legjellegzetesebb vonása. -

A szereplő skalár szorzatok a szóráselméleti DWBA mátrixelemben az összes változóra kiterjedő integrálok; a DWRA közelítés eggyel alacsonyabb dimenzióju integráljaiból éppen az egyik radiális koordináta hiányzik. Ez a körülmény jelentősen megkönnyítheti az integrál-numericus kiszámítását.



Akármilyenek is bizonyul a DWRA közelítés értéke, ezen alternatív lehetőség pusztán léte is elősegíti a hagyományos DWBA elmélet egyes mozzanatainak újbóli felülvizsgálását és jelentésüknek jobb megértését.

#### A korrektúra során tett kiegészítés

A kimenőoldali exakt kölcsönhatásnak egytagú optikai potenciállal történt

$$V_{\beta}(\mathbf{r}) \longrightarrow V_b^{\text{opt}}(\mathbf{r}) = V_b^{\text{opt}}(\mathbf{r}_{\beta}) \quad /*/$$

helyettesítése nem alkalmas közelítés. A kimenő oldalon a pontosabb kéttagú optikai potenciállal kell dolgozni:

$$V_{\beta}(\mathbf{r}) \longrightarrow V_b^{\text{opt}}(\mathbf{r}) = V_b^{(1)}(\mathbf{r}_{\beta_1}) + V_b^{(2)}(\mathbf{r}_{\beta_2}) \quad /* */$$

Ez a választás a végmag két-részecske felfogását tükrözi és pontos analogonja a DWBA kimenőoldali közelítésének. A dolgozat érintett formulái a \* \* definíció mellett érvényesek.

#### Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondok Hraskó Péternek és Zimányi Józsefnek, akik felhívták figyelmemet a \* közelítés nem megfelelő voltára.

#### I r o d a l o m

- [1] Kapur, P.L., Peierls, R.E.: Proc. Roy. Soc. A166, 277, /1938/.
- [2] Wigner, E.P., Eisenbud, L.: Phys. Rev. 72, 29, /1947/.
- [3] Humblet, J., Rosenfeld, L.: Nucl. Physics 26, 529, /1961/.
- [4] Dolinszky T.: KFKI Közl. 11, 385, /1963/.
- [5] Dolinszky T.: publikálatlan kézirat.
- [6] Fonda, L., Newton, R.G.: Ann. of Physics, 10, 490, /1960/.
- [7] Hraskó P.: KFKI Közl. 12, 57, /1964/.
- [8] Blatt, J.M., Biedenharn, L.C.: Revs. Mod. Phys. 24, 258. /1952/.

Érkezett: 1964. dec. 22.  
KFKI Közl. 13. évf. 1.szám, 1965.



## FERROMÁGNESES ANYAGOK ELEKTROMOS ELLENÁLLÁSA

Irta: Praveczi Endre

### Összefoglalás

Előző dolgozatainkban [3, 4] az ideális spinhullámelmélet egy lehetséges renormálását hajtottuk végre. Ebben a dolgozatunkban a renormált ideális spinhullámelmélet alapján a ferromágneses anyagok járulékos ellenállását számítjuk ki, felhasználva Mannari [1] általánosabb érvényű képletét. Megkapjuk a kritikus ellenállás leírását.

A fémek kollektivizált elektronjai elektromos tér hatására mozgásba hozhatók /elektromos áram/. Mozgásukat azonban akadályozza a különböző kvázi részecskékkel való kölcsönhatás /elektromos ellenállás/. Legismertebb a fononokkal történő kölcsönhatás. A ferromágneses anyagokban fontos szerepet játszik azonban a ferromagnonokkal történő kölcsönhatás is. Emiatt az ellenálláshoz olyan rész járul, amely kezdetben erősen nő, később állandóvá válik.

Ferromágneses fémek elektromos ellenállásának kiszámítására Mannari [1] vezetett le általános érvényű összefüggést. Van Hove [2] neutronszórási hatáskeresztmetszetre vonatkozó eredményének analógiájára kifejezte az elektromos ellenállás mágneses járulékát a

$$\gamma_k^{\alpha\beta}(t) = \langle S_0^\alpha(0) S_k^\beta(t) \rangle \quad (\alpha, \beta = x, y, z)$$

spin-korrelációs függvényekkel. Abban az esetben, amikor a ferromágnességet okozó 3d vagy 4f elektronoknak a vezetést végző 4s vagy 6s elektronokra kifejtett polarizáló hatása elhanyagolható, a következő formulát kapta:

$$\rho = \rho_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^2 \frac{\hbar\omega/\gamma}{1 - e^{-\hbar\omega/\gamma}} \frac{u}{2} \sum_{\alpha} \gamma_x^{\alpha\alpha}(\omega) \quad //1//$$

amelyben

$$\rho_0 = 3\pi J N m / 2\hbar e^2 \varepsilon_F$$

$$\kappa^2 = 2\kappa_F^2 u,$$

J az s és d ill. f elektronok kicserélődési integráljainak átlagértéke,  $\varepsilon_F$  az s elektronok Fermi-felületen vett energiája,  $\kappa_F$  a Fermi-felületen vett impulzusa, s végül a  $\gamma_{\kappa}^{\alpha\alpha}(\omega)$  függvények a spin-korrelációs függvények Fourier-transzformáltjai:

$$\gamma_{\kappa}^{\alpha\beta}(t) = N^{-1} \sum_{\kappa} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i(k\kappa - t\omega)}$$

A spinkorrelációs függvények meghatározására több módszert ismerünk. Ezek nagy része azonban csak meghatározott hőmérsékleti intervallumban vezet jó közelítéshez. Előző dolgozatainkban [3], [4] egy hőmérsékletileg renormált spinhullámelmélet alapösszefüggéseit irtuk fel, amely a mágnesezettségre, szuszceptibilitásra, belső energiára és a fajhőre vonatkozólag értelmezhető eredményhez vezet az egész hőmérsékleti tartományban.

Az alábbiakban /1/ alapján az elektromos ellenállást fogjuk meghatározni és röviden diszkutálni a [3], [4] -ben felírt renormált spin-korrelációs függvények segítségével.

[3] ill. [4] -ben az alábbi spinkorrelációs függvényeket kaptuk:

$$\gamma_{\kappa}^{xx}(t) = \frac{S\sigma}{2N} \sum_{\kappa} \left\{ \bar{n}_{\kappa} e^{i(k\kappa - t\bar{\omega}_{\kappa})} + (\bar{n}_{\kappa} + 1) e^{-i(k\kappa - t\bar{\omega}_{\kappa})} \right\},$$

$$\gamma_{\kappa}^{xy}(t) = \frac{S\sigma}{2iN} \sum_{\kappa} \left\{ \bar{n}_{\kappa} e^{i(k\kappa - t\bar{\omega}_{\kappa})} - (\bar{n}_{\kappa} + 1) e^{-i(k\kappa - t\bar{\omega}_{\kappa})} \right\}$$

$$\gamma_{\kappa}^{yx}(t) = -\gamma_{\kappa}^{xy}(t), \quad \gamma_{\kappa}^{yy}(t) = \gamma_{\kappa}^{xx}(t), \quad \gamma_{\kappa}^{xz}(t) = \gamma_{\kappa}^{zx}(t) = \gamma_{\kappa}^{yz}(t) = \gamma_{\kappa}^{zy}(t) = 0$$

$$\gamma_{\kappa}^{zz}(t) = \left(\frac{\delta}{N}\right)^2 \sum_{\kappa\lambda} \bar{n}_{\kappa} (\bar{n}_{\lambda} + 1) e^{i[k(\kappa - \lambda) - t(\bar{\omega}_{\kappa} - \bar{\omega}_{\lambda})]} + S^2 \sigma^2 \quad |2|$$

amelyekben

$$\begin{aligned}\sigma &= 1 - S^{-1} \rho \bar{n} \\ \sigma^2 &= [S(S+1) - S\sigma(S\sigma+1) - 2S\sigma] / \bar{n}(\bar{n}+1) \\ \rho &= 1 - \frac{2S+1}{\bar{n} \left[ \left(1 + \frac{1}{\bar{n}}\right)^{2S+1} - 1 \right]} \quad /3/ \\ \bar{n} &= N^{-1} \sum_{\kappa} \bar{n}_{\kappa}, \quad \bar{n}_{\kappa} = \frac{1}{e^{\beta E_{\kappa}} - 1},\end{aligned}$$

s végül  $\bar{E}_{\kappa}$  a ferromagnonok renormált energiája, amelyet legegyszerűbben a következő módon választhatunk meg:

$$\bar{E}_{\kappa} = \mu_B g \mathcal{H} + 2S\sigma \varepsilon_{\kappa}, \quad \varepsilon_{\kappa} = \sum_k J_k [1 - \cos(k \kappa)] \quad /4/$$

/2/-vel és /3/-al az alábbi képlethez jutunk /1/-ből:

$$\rho = \rho_0 \int_0^2 du \frac{u}{2} [\Gamma_1(u) + \Gamma_2(u)], \quad /5/$$

amelyben

$$\begin{aligned}\Gamma_1(u) &= S\sigma \frac{\hbar \bar{\omega}_{\kappa}}{\gamma} \bar{n}_{\kappa} (\bar{n}_{\kappa} + 1) \\ \Gamma_2(u) &= \sigma^2 N^{-1} \sum_{\lambda} \frac{\hbar (\bar{\omega}_{\lambda} - \bar{\omega}_{\kappa - \lambda})}{\gamma} \frac{\bar{n}_{\lambda}^2 (\bar{n}_{\lambda - \kappa} + 1)^2}{\bar{n}_{\lambda - \kappa} \bar{u}_{\lambda}} \quad /6/\end{aligned}$$

Diszkutáljuk röviden /5/-öt  $\mathcal{H} = 0$  mellett a hőmérséklet függvényében.

a/ Alacsonyhőmérsékletek esetén első közelítésben /3/ és /6/ alapján írhatjuk, hogy

$$\begin{aligned}\Gamma_1(u) &= S \frac{\hbar \omega_{\kappa}}{\gamma} n_{\kappa} (n_{\kappa} + 1) \\ \Gamma_2(u) &= 0\end{aligned}$$

amelyekben

$$\begin{aligned}\hbar \omega_{\kappa} &= 2S \varepsilon_{\kappa} \\ n_{\kappa} &= \frac{1}{e^{\hbar \omega_{\kappa} / \gamma} - 1}\end{aligned}$$

Ezek az alábbi eredményt adják:

$$\rho = \rho_0 \left(\frac{\pi}{2}\right)^4 \left(\frac{\mu}{m}\right)^2 \frac{S(S+1)}{m e^2} \frac{\gamma^2}{\varepsilon_F^4 \kappa_F} \quad /7/$$



ahol  $\mu$  a ferromagnonok effektív tömege.

b/ A Curie-hőmérsékleten /3/ alapján a következőket kapjuk /6/-ből:

$$\Gamma_1(u) = \frac{1}{3} S(S+1) \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{\kappa}}$$

$$\Gamma(u) = \frac{1}{3} S(S+1) N^{-1} \sum_{\lambda} \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon_{\lambda} \varepsilon_{\lambda-\kappa}}$$

amelyekben

$$\varepsilon = N \left\{ \sum_{\kappa} \frac{1}{\varepsilon_{\kappa}} \right\}^{-1}$$

Ezek segítségével /5/-ből a

$$\rho = \rho_0 S(S+1) \frac{c}{(d \kappa_F)^2} \quad /8/$$

eredményt nyerjük, és itt  $d$  a rácsállandó,  $c$  pedig csak a struktúráról függő dimenziótlan szám.

c/ Tekintsük végül a  $\nu \rightarrow \infty$  határesetet. Ekkor

$$\Gamma_1(u) = \frac{2}{3} S(S+1)$$

$$\Gamma_2(u) = \frac{1}{3} S(S+1)$$

tehát

$$\rho = \rho_0 S(S+1)$$

Megállapíthatjuk, hogy a hőmérsékletileg renormált spinhullámelmélet az elektromos ellenállásra vonatkozólag is elfogadható eredményhez vezet az egész hőmérsékleti tartományban:

1/ alacsony hőmérsékleten /7/-tel visszakaptuk a spinhullámelmélet eredményét [1] ;

2/ a Curie-hőmérséklet feletti tartományban a paramágneses anyagokra vonatkozó helyes aszimptotikus értéket nyertük;

3/ a Curie-hőmérsékleten /8/ alakjában véges értéket kaptunk. /8/-at és /9/-et összehasonlítva láthatjuk, hogy  $c > (d \kappa_F)^2$  esetén maximumot kapunk az ellenállás változására. Ez a jelenség a vezetési elektronok kritikus szóródása.

I r o d a l o m

- [1] Mannari, I.: Progr. Theor. Phys. 26, 1, 51, /1961/.
- [2] Van Hove, L.: Phys. Rev. 95, 249, /1954/.
- [3] Praveczi E.: Phys. Letters, 6, 2, 147, /1963/
- [4] Praveczi E.: KFKI Közl. 11, 5, /1963/.

Érkezett: 1964. nov. 3.  
KFKI Közl. 13.évf. 1. szám, 1965.



# NANOSZEKUNDUMOS TARTOMÁNYBAN MŰKÖDŐ TRANZISZTOROS IDŐ-AMPLITUDÓ KONVERTER

Írta: Kozma Gyula és Quittner Pál

## Összefoglalás

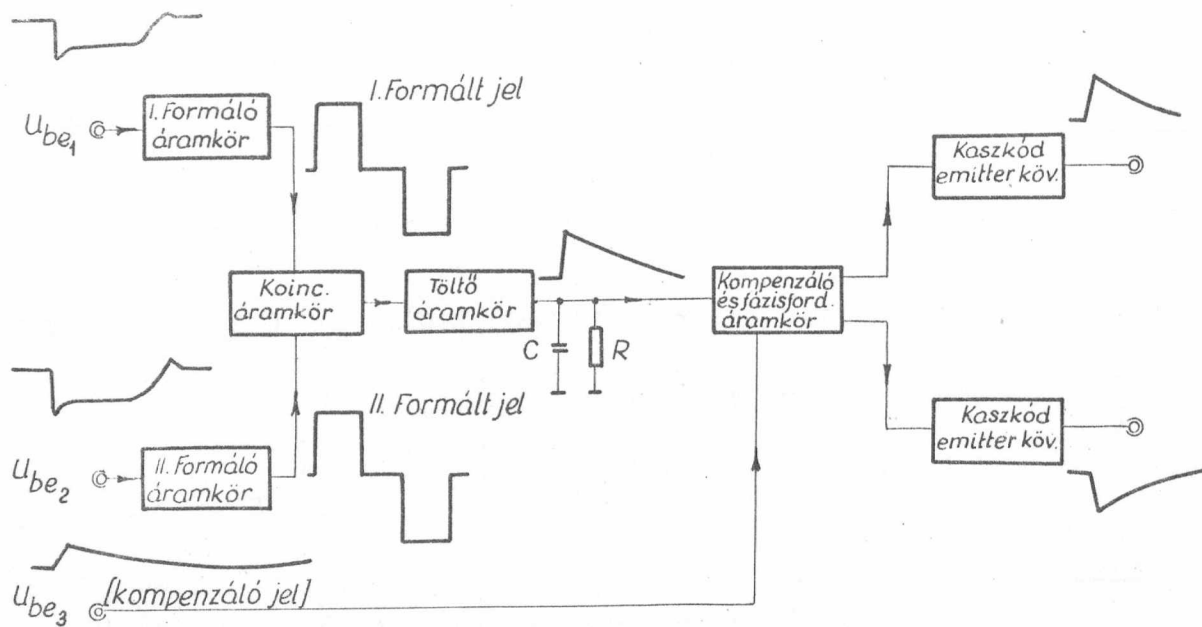
Gyorsneutron-spektroszkópiai célokra átfedési elven működő tranzisztoros idő-amplitudó konvertert építettünk. Az idő-amplitudó átalakítás 5-135 m/usec között 2 % belül lineáris. 14,7 MeV-es neutronokra 100 KeV-es energiaküszöbtől a teljes mérőrendszer időfelbontása  $2\tau=1,6$  m/usec, amelyből a konverter járuléka 0,1 m/usec-nál kevesebb. A szingli/koínc viszony 1:150.

## 1/ Bevezetés

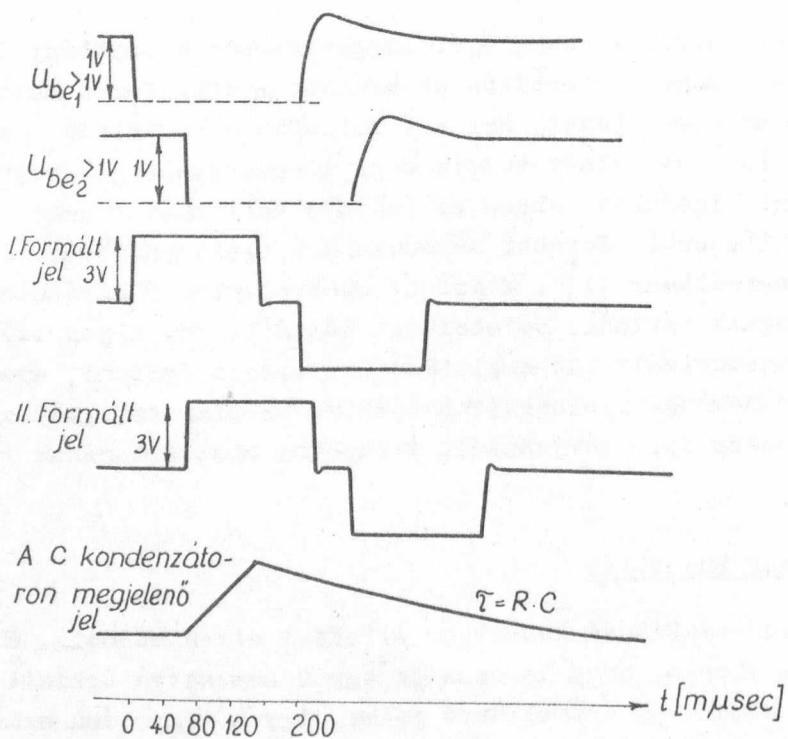
Gyorsneutronok energiáját leggyakrabban a repülési idő módszerével határozzák meg. Intenzitás okok miatt a detektor a neutronforrástól csak néhány méterre lehet. Ezt a távolságot a neutronok energiájuktól függően  $10^{-7}$ - $10^{-8}$  sec alatt teszik meg. A neutronenergia meghatározásához tehát repülési idejüket ebben az időintervallumban m/usec pontossággal kell megállapítanunk. Korábbi méréseinkhez elektroncsöves idő-amplitudó konvertert használtunk [1]. Mivel az elkövetkezendő méréseink igen hosszú ideig fognak tartani, célszerűnek látszott egy ilyen időtartományban működő tranzisztorizált idő-amplitudó konvertert építeni, amely azonban nyilvánvalóan nemcsak gyorsneutron-spektroszkópiai célokra, hanem egyéb fizikai mérésekre /pl. gerjesztett állapotok élettartamának mérésére stb./ is alkalmas.

## 2/ Elektronikus kapcsolás

Az idő-amplitudó konverter átfedési elven működik. Ennek a módszernek az az előnye, hogy ha csak az egyik bemenetre érkezik jel, akkor nem kapunk a kimeneten értékelhető jelet, így a nagyszámu szingli-jel a konverter utáni fokozatokat már nem terheli. A berendezés blokk-sémája, a különböző jelalakok és a részletes kapcsolási rajz az 1. 2. és 3. ábrán látható.



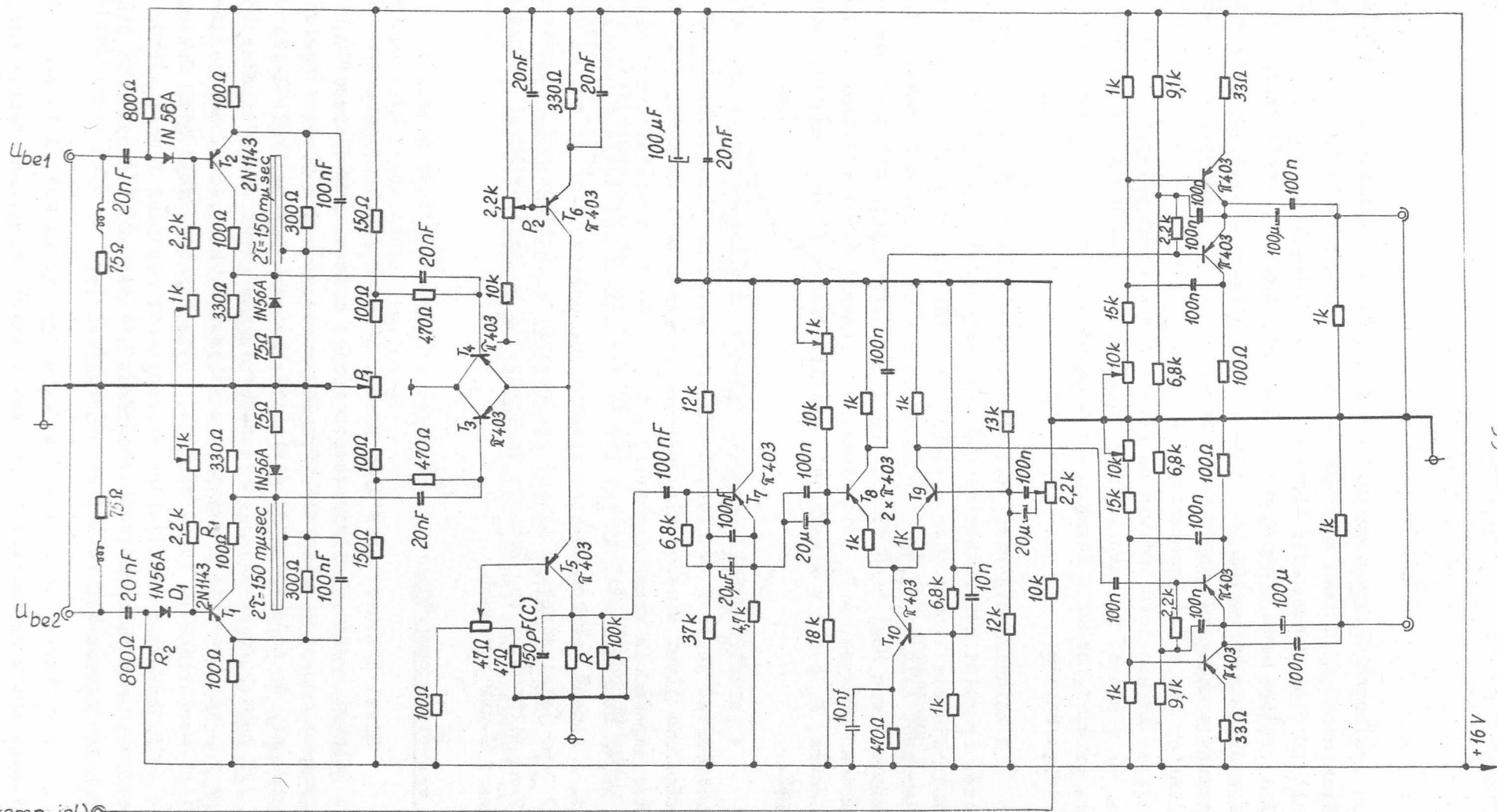
1. ábra



2. ábra



$U_{be3}(kamp.jel) \ominus$



3. ábra

A formáló körben az amplitudóformálás telítésbe vezérelt 2N1143 tranzisztorral  $/T_1/$ , az időformálás egyik végén rövidre zárt 75 Ohm-os kábellel  $/2\tau = 150 \text{ m}\mu\text{sec}/$  történik. Nyugalmi helyzetben a tranzisztoron nem folyik áram. Negatív impulzus hatására a  $D_1$  dióda lezár és az  $R_1$  ellenálláson keresztül a tranzisztor bázisába folyik az áram. Ennek az áramnak a nagysága szabja meg a formált jel felfutásának meredekségét. A kollektor kör eredő impedanciája a kábel hullámellenállásával egyenlő. Az emitter körben levő 100 Ohm-os ellenállás a tranzisztor áramát korlátozza. Ha a bemenő jel amplitudója legalább 150 m $\mu\text{sec}$ -ig meghaladja az 1 V-os szintet, akkor a formáló kör kimenetén 3 V-os 150 m $\mu\text{sec}$ -os formált jelet kapunk.

A koincidencia-rész két, közös ellenállásra  $/T_6$  tranzisztorra/dolgozó, nyugalmi helyzetben vezető emitter követő  $/T_3, T_4/ [2]$ . Mindkét koincidencia tranzisztor egyidejű lezárása esetén a  $T_5 T_6$ -os tranzisztorokból álló áramgenerátor konstans árammal tölti a C kondenzátort. A kondenzátoron megjelenő feszültség a két bemenő jel átfedési idejével lineárisan arányos. A  $P_1$  potencióméter a tranzisztorok áramának szimmetrizálására,  $P_2$  pedig a kimenő jel amplitudójának finom szabályozására szolgál.

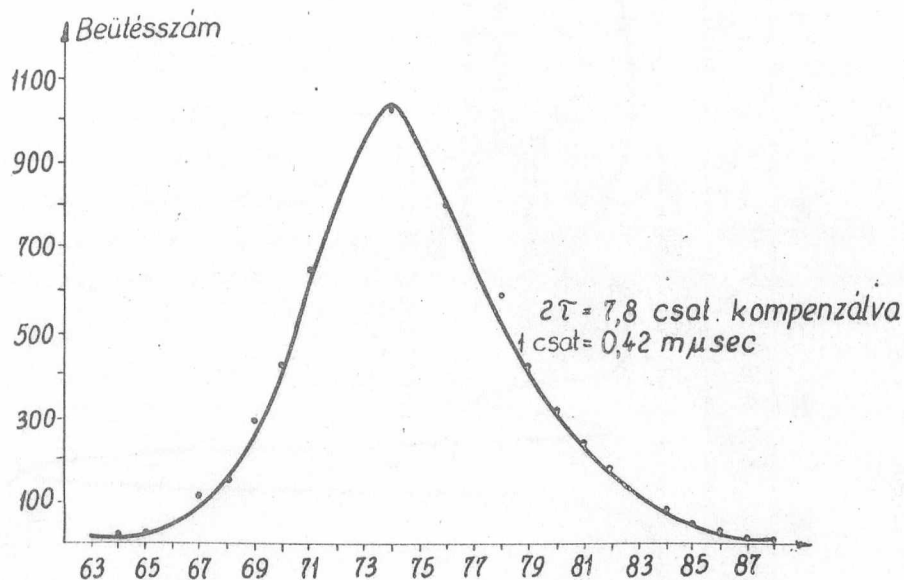
A jelfelfutásból származó időszórást a konverter és az elektronsokszorozó jelének megfelelő összegezésével csökkentettük  $[3]$ . Ez az időszórás jóval kisebb, mint elektronsöves konvertereknél. A  $T_7$  tranzisztor impedancia transzformátor, a  $T_8, T_9$  és  $T_{10}$  tranzisztorok végzik el a jelek összegezését. Az így kompenzált kimenő jel kétféle polaritású lehet. A kimenő kaszkód emitter követők 100 Ohm-os terhelés esetén maximum 2 V-os jelet adnak. A kimenő jel maximális értékét a  $P_2$  potméterrel 1,5 V-ra állítottuk be. Ebben a tartományban az emitter-követő nonlinearitása 2 %-nál kevesebb.

### 3/ A konverter bemérése

Mivel a konverterre üzem közben sohasem impulzus-generátorról adjuk a jeleket, hanem elektronsokszorozóról, ezért a bemérést is RCA6810-A elektronsokszorozóra helyezett 50 x 100 mm-es pasztik foszfor jeleivel végeztük el. Az idő-amplitudó átalakítás linearitását a KFKI NK-103 típusu 128 csatornás amplitudó analízátor segítségével ellenőriztük. A konverter mindkét bemenetére ugyanazt a jelet vittük rá, de a két jel között kábellel mesterségesen időkülönbséget hoztunk létre, majd 14,7 MeV energiájú neutronoknak a startjelhez viszonyított repülési idejét mértük különböző repülési távokon  $[4]$ . A mérések alapján az idő-amplitudó átalakítás 5-135 m $\mu\text{sec}$  között 2 %-on belül lineáris.

A konverter időfelbontását ugyanígy vizsgáltuk. A lassu ágak által megszabott energiaküszöb 100 KeV elektronenergiának felelt meg, ami

kb. 0,4 MeV protonenergiával egyenlő. Így minden meglökött protont regisztráltunk, melynek energiája 0,4 és 14,7 MeV között volt. Az időfelbontási görbe a 4. ábrán látható. A neutron repülési idő mérésénél a konverter saját időszórása már biztosan elhanyagolható, de még egy detektor jeleinek vizsgálatánál is valószínűleg az elektronsokszorozótól és a kristálytól származik az időszórás legnagyobb része és



4. ábra

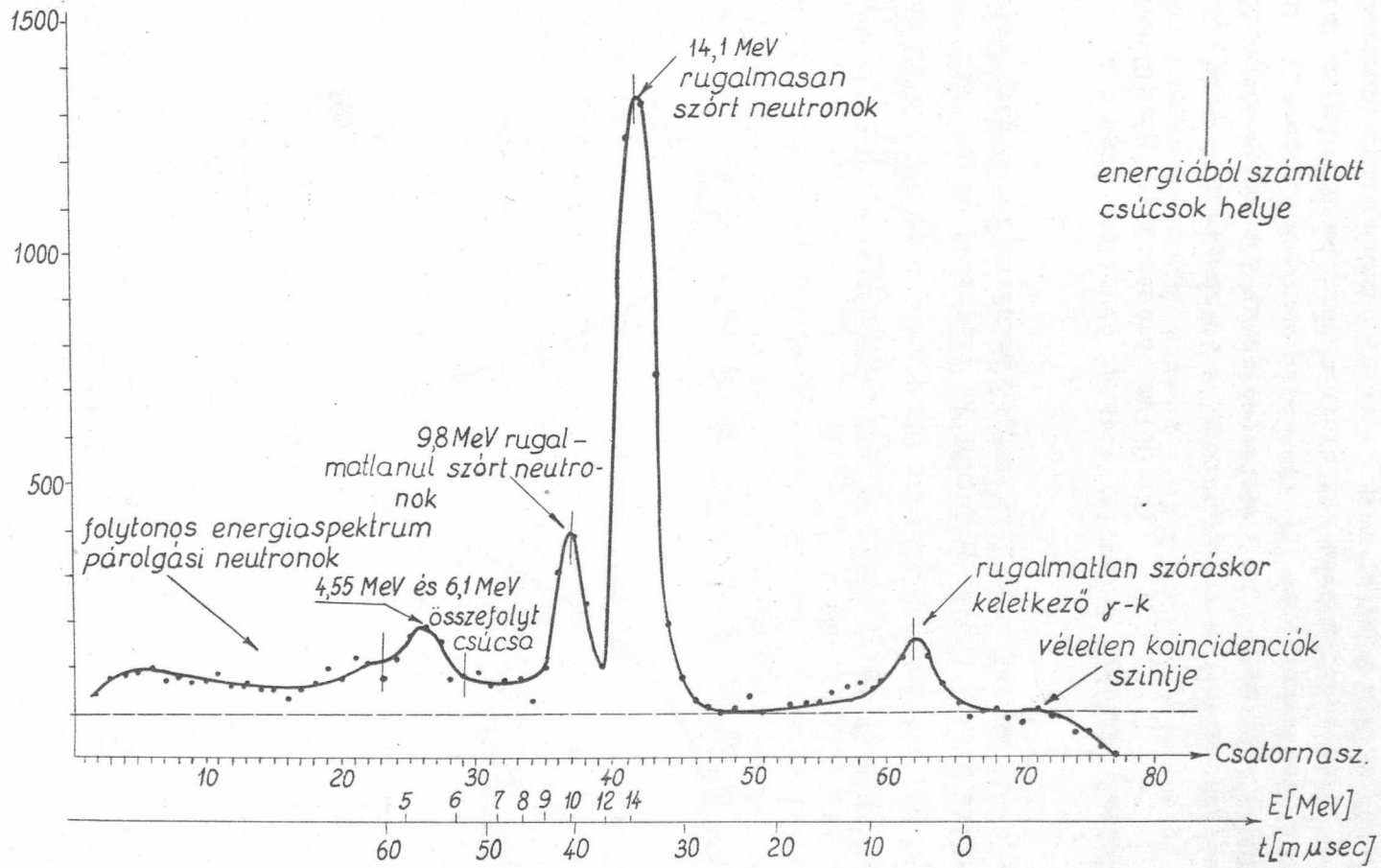
gyorsabb elektronsokszorozóval /pl. 56 AVP/, valamint kisebb kristályal kevesebb lenne.

Az egyik bemenetre egyidejűleg adunk jelet, akkor csak az bemenetre érkező jel hatására megjelenő kimenő jelnek 150-szeresét kaptuk.

A kimenő amplitudó relativ változása 15-65 C<sup>o</sup> között 1<sup>o</sup>/oo/C<sup>o</sup>, a tápfeszültség ingadozására 1%/100 mV.

Végezetül megmértük a tranzisztoros konverter segítségével a szénről szórt neutronok energiaspektrumát L = 1,8 m-es repülési távnál /5. ábra/. A szén ismert energianívói [5] és a konverter idő - amplitudó kalibrálási görbéje alapján megjelöltük hová kellene kapni a monoenergiás neutronoktól származó jeleket. Mint látható a mért energiaértékek megegyeznek az irodalmi értékekkel.

Tapasztalataink alapján a tranzisztoros idő-amplitudó konverter felbontásban jobb és linearitásban egyenértékű az általunk használt



5. ábra

elektroncsöves konverterrel, így további méréseinkhez már tranzisztori-  
zált konvertereket fogunk használni.

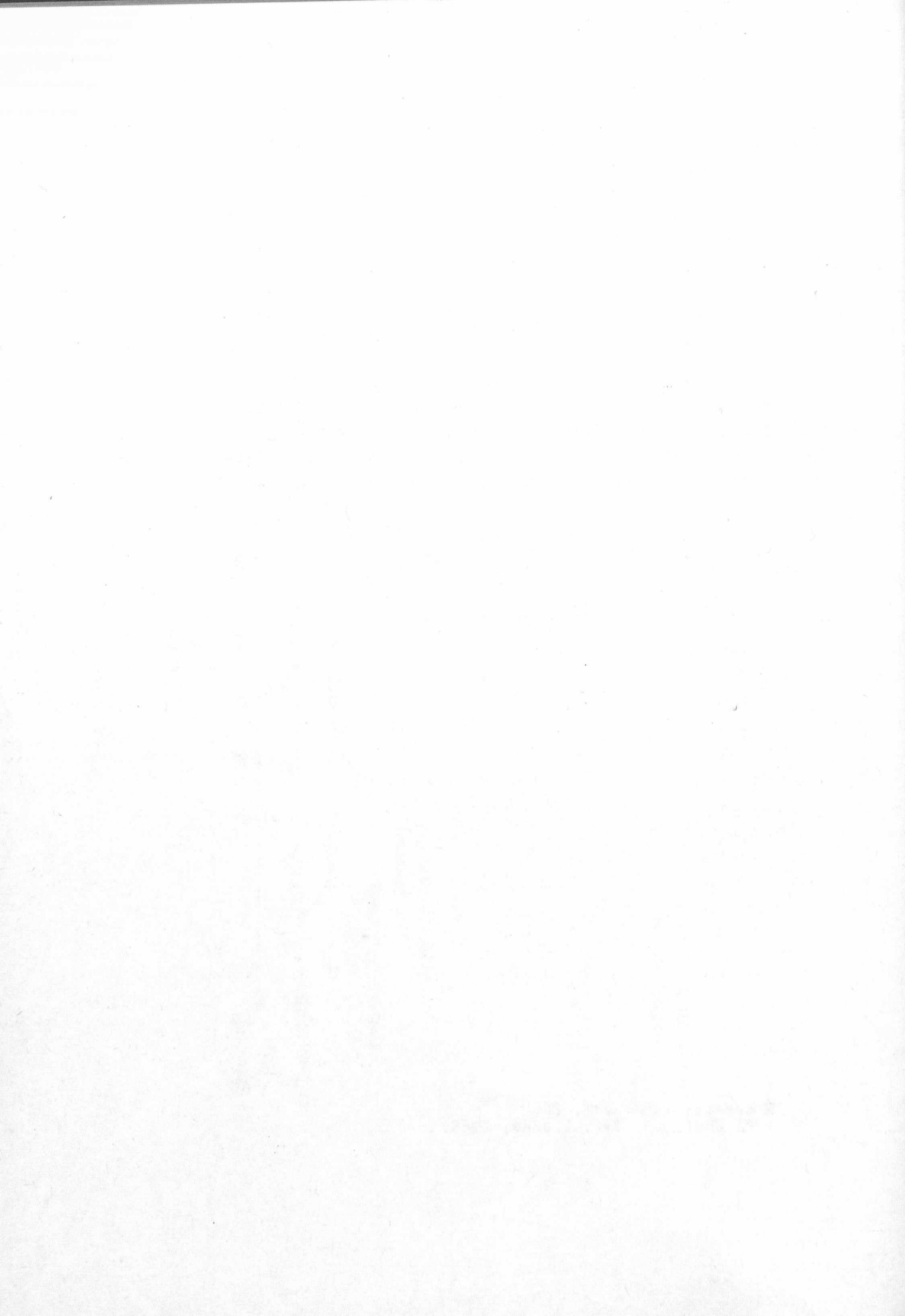
Ezúton mondunk köszönetet Szabó Lászlónak a konverter terve-  
zéséhez nyújtott értékes segítségéért.

I r o d a l o m

- [1] Garg, J.B.: Nucl. Instr. and Methods 6, 72, /1960/.
- [2] Bonitz, M.: Nucl. Instr. and Methods 22, 238, /1963/.
- [3] А.Адам, Г.Палла, П.Квиттнер, П.Т.Э. 1964. № 4. 49
- [4] Ádám A., Pál G., Quitner Pál: Acta Physica, megjelenés alatt.
- [5] Aisenberg-Selove, F., Lauritsen, T.: Nucl. Phys. 11, 130, /1959/.

Érkezett: 1964. okt. 28.  
KFKI Közl. 13. évf. 1.szám, 1965.





## A VVR-Sz REAKTOR AKTIV ZÓNÁJÁNAK ÁTRENDÉZÉSE

Irta: Várkonyi Lajos

### Összefoglalás:

A reaktor aktív zónájában nem egyenletes a kötegek kiégése, illetve elsalakosodása. A fűtőelemek maximális kiégethetősége céljából az üzemvitel folyamán az aktív zóna átrendezése többször szükségessé válik. Cikkünkben eljárást adunk a fűtőelem kötegek cseréjének és az aktív zóna újra rendezésének egyik optimális végrehajtására.

### I.

VVR-Sz reaktorunkban, mint ismeretes, 10 % dúsítású uránt tartalmazó fűtőelemekből áll az aktív zóna, a moderátor és a hűtőközeg pedig desztillált könnyű víz. Az EK-10 jelű fűtőelemek 16-osával alkotnak egy fűtőelem köteget, amelyek szerkezeti okokból nem egyező keresztmetszetűek. Az abszorbens rudak melletti kötegek le vannak sarkitva. Az aktív zóna ezért háromféle alakú köteget tartalmaz /háromsarkú, két sarkon sarkított és négyzetes/, következésképpen a kötegek egymásközti cseréjének korlátjai vannak. Az 1959 március 25-én induló reaktor 31. köteges aktív zónájának leírása a [1] irodalomban található.

Az üzemeltetés folyamán a reaktivitástartalék folyamatosan csökkent. Az üzemeltethetőség biztosítása érdekében az aktív zónát új kötegekkel kellett kiegészíteni. Így 1963 közepére a zóna 44 rekeszében már kötegek voltak, a további 8 pozíció az izotópgyártásra és a sugárkémiai vizsgálatokra volt lefoglalva. Szükségessé vált tehát a kiégett kötegek cseréje.

A cserélendő kötegek kiválasztásához ismerni kellett volna az egyes kötegek kiégetettségi fokát. Ez azonban nehezen számítható elméleti úton, így kísérleti eljáráshoz kellett folyamodni. Az elméleti számításokra vonatkozóan az irodalomban található módszereket [2] .

A maximális fűtőelem-kiégetést folyamatos egymásközti és új kötegeket felhasználó cserélési program végrehajtásával lehet biztosítani. A reaktor üzemeltetése és a sokféle feladat végrehajtása miatt egy ilyen programot nem lehetett megvalósítani, így a 44 köteges aktív zóna kötegeinek kiégetettsége nem volt követhető. A zóna felújítására meg kellett állapítani a kötegek relatív kiégetettségét és ennek alapján felépíteni az adott kötegekből a maximális reaktivitás tartalékkal rendelkező zónát. Ezen eljárástól reméljük azt, hogy a rendelkezésre álló kötegekkel a leghosszabb ideig fogjuk a reaktort üzemeltetni.

## II.

A fűtőelemköteg az aktív zónán belüli helyétől és saját tulajdonságaitól /salak-, urántartalom/ függően befolyásolja a reaktivitástartalékot. Egyszerű perturbációs modell keretein belül ezt a hatást egyetlen kötegre nézve a

$$d\rho_{ij} = E_i K_j \quad /1/$$

formulával fejezhetjük ki, ahol  $d\rho_{ij}$  az egy köteg reaktivitási járuléka az összreaktivitáshoz az  $i$  indexnek megfelelő elhelyezés esetén / $E_i$  a köteg helyére jellemző állandó helyértékekesség/,  $K_j$  pedig a köteg tulajdonságaitól-, többek közt kiégetettségétől függ.

A zóna reaktivitástartalékára jellemző a

$$\rho_z = \sum_{\substack{i=1 \\ j=f(i)}}^n d\rho_{ij} = \sum_{\substack{i=1 \\ j=f(i)}}^n E_i K_j \quad /2/$$

összeg. Adott  $E_i$  és  $K_j$  mennyiségek esetén a  $\rho_z$  értéket úgy tehetjük maximálissá, ha az  $E_i$  és  $K_j$  értékeket megfelelő módon rendeljük egymáshoz. Ez azt jelenti, hogy az egyes kötegeket az összreaktivitás szempontjából a legmegfelelőbb helyekre tesszük /azaz optimális  $j=f(i)$  összerendelést választunk/.

Egyszerű matematikai okfejtésből adódik, amelyet a függelékben ismertetünk, hogy úgy célszerű a kötegeket elhelyezni, hogy a legértékesebb zóna pozícióba a legtöbbet érő köteg kerüljön, a többi kötegeket pedig úgy helyezzük el, hogy értékességeik csökkenése szerint egyre kisebb értékű zóna pozícióba kerüljenek.

Az optimális zóna elrendezés megvalósítása céljából tehát meg kellett mérni az  $E_i$  és  $K_j$  értékeit. Erre a következő módon van lehetőség:

Legyen  $E_i$  egyenlő a zóna  $i$ -edik pozíciójába helyezett új köteggel ( $\rho_f$ ) és köteg nélkül ( $\rho_l$ ) mért reaktivitástartalékok különbsége:

$$E_i = (\rho_f - \rho_l)_i, \quad /3/$$

$d\rho_{ij}$  pedig a régi köteggel ( $\rho_{aj}$ ) és nélküle ( $\rho_l$ ) mért reaktivitástartalékok különbsége:

$$d\rho_{ij} = (\rho_{aj} - \rho_l)_i \quad /4/$$

/1/ alapján felírhatjuk, hogy

$$K_j = \frac{d\rho_{ij}}{E_i} \quad /5/$$

amely csak  $j$ -től függ, adott kötegre nézve állandó érték. Az  $E_i$  és  $K_j$  meghatározása céljából el kell végezni a következő reaktivitástartalék méréseket: mérni kell az érintetlen, régi aktív zóna ( $\rho_{aj}$ ) reaktivitástartalékát; utána az  $i$ -edik helyen lévő  $j$ -edik régi köteget új köteggel kell kicserélni, így nyerhető a  $\rho_{fi}$  érték, majd pedig mérni kell az új köteg kiemelése után keletkező vizüreges zóna reaktivitástartalékát ( $\rho_{li}$ ). A mérés után a régi köteget vissza kell tenni a helyére. Ezt az eljárást kell ismételni, azonos új köteggel, az egymás között cserélhető 24. db. köteg helyén. Ezeket a méréseket elvégezve jutottunk a táblázatban látható eredményekhez / 1, 2, 3 táblázat/.

A táblázatokban a reaktivitás  $\text{pcm} = 10^{-5}$  egységekben van feltüntetve. A reaktivitás méréseket a periódus méréssel kalibrált szabályozó rudakkal végeztük. Feltételeztük, hogy zónánkra  $\beta_{eff} = 0,0075$ . A reaktivitásmérés pontossága nem jobb mint  $\pm 10$  pcm, amely a szabályozó rudak visszaállási pontosságából és a rudak súlyából becsülhető. Figyelemmel voltunk arra, hogy a mérések során a tranziensek ne zavarjanak.

Az 1./ formula felállítására szolgáló modell ellenőrzésére egyszerű kísérleti lehetőség van. Egyazon régi köteg  $K_j$  értékét különböző  $i_1$  és  $i_2$  tetszőleges zónapozíciókban meghatározzuk. A 3. sz. táblá-

1.sz. táblázat

Zónaadatok az átrendezés előtt

Pozíció	dφ	E	K
64/6	267	319	0,8369
3/6	281	324	8689
67/7	332	353	9436
71/7	335	351	9544
59/7	325	369	8807
8/7	321	330	9727
17	270	277	9747
19	240	275	8727
40/7	285	324	9214
25/7	180	200	9000
32	184	191	9633
52/7	304	352	8636
49/7	280	323	8668
60/8	428	491	8716
4/8	406	505	8039
56/8	392	483	8115
9/8	381	444	8581
41/8	346	405	8543
22/8	333	381	8740
37/8	300	353	8810
26/8	326	370	8810
57/10	949	1115	8511
5/10	1008	1081	9314
38/10	993	1072	9269



2.sz. táblázat

Az átrendezett zóna adatai

K	Pozicióból	Pozíció-ba	E	d <sub>p</sub>
0,9747	17	57/10	1115	1087
9727	8/7	5/10	1081	1050
9633	32	38/10	1072	1030
9544	71/7	4/8	505	482
9436	67/7	60/8	491	463
9314	5/10	56/8	483	450
9269	38/10	9/8	444	411
9214	40/7	41/8	405	373
9000	25/7	22/8	381	343
8810	26/8	26/8	370	326
8807	59/7	59/7	369	325
8740	22/8	52/7	353	308
8727	19	67/7	353	308
8716	60/8	37/8	353	308
8689	3/6	71/7	351	305
8668	49/7	8/7	330	286
8636	52/7	40/7	324	280
8581	9/8	3/6	324	278
8543	41/8	49/7	323	276
8511	57/10	64/6	319	261
8498	37/8	17	277	235
8369	64/6	19	275	230
8115	56/8	25/7	200	162
8039	4/8	32	191	153

3.sz. táblázat

Pozíció	ρ <sub>a</sub>	ρ <sub>1</sub>	ρ <sub>f</sub>	d <sub>p</sub>	E	K
1. 38/10	2537	1630	2702	907	1072	0,848
2. 40/7	2609	2331	2655	278	324	0,856

zatban foglalt adatok bizonyítják, hogy a modell kielégítő /3.sz. táblázat/.

III.

Módszerünkkel nemcsak az optimális zónaelrendezést állapíthatjuk meg, hanem becslést tehetünk az elérhető reaktivitástartalék nyereségre is:

$$\Delta \rho = \rho_{z_{opt}} - \rho_z$$

Esetünkben az 1, 2. táblázatok adataiból nyereségként  $\Delta \rho = 264$  adódik, az átrendezés után pedig  $\Delta \rho = 190$  pcm-et mértünk. A becslt és mért értékek egyezése a reaktivitás mérés pontosságának megfelelő.

A mérések elvégzéséért a Reaktor Üzem Vezénylőtermi Csoportjának, a lektorálás előtti konzultációért Vigassy József tudományos munkatársnak, valamint a matematikai modell elkészítéséért a Matematikai Főosztályon Varga László tudományos munkatársnak köszönetet mondok.

F Ü G G E L É K

Legyen

és  $a_k$

$b_k$   $K = 1, 2, \dots, n$

monoton növekedő sorozat. Legyen továbbá  $i_1, i_2, \dots, i_n$  az  $n$ -ig terjedő pozitív egész számok egy permutációja.

Állítás:

$$\sum_{K=1}^n a_K b_{i_K} \leq \sum_{K=1}^n a_K b_K$$

Ezt a következőképpen láthatjuk be: tegyük fel, hogy a baloldali összeg olyan permutációnál veszi fel maximumát, ame-

lyikre egyenlőtlenségünk nem áll fenn. Tekintsük ekkor azt a legnagyobb  $k_1$  indexet, amelyikre  $i_{k_1} < k_1$ . Ekkor  $b_{k_1}$  nyilván olyan  $a_{k_2}$ -vel megszorozva szerepel az összegben, amelyre  $k_2 < k_1$ .

A sorozatok monotonitása szerint:

$$0 \leq (b_{k_1} - b_{i_{k_1}})(a_{k_1} - a_{k_2}) = (a_{k_1} b_{k_1} + a_{k_2} b_{i_{k_1}}) - (a_{k_1} b_{i_{k_1}} + a_{k_2} b_{k_1})$$

A szumma értéke tehát nem csökken, ha a szóbanforgó két tagját

$(a_{k_1} b_{k_1} + a_{k_2} b_{i_{k_1}})$  -el cseréljük fel. Ezt az eljárást azonban mindaddig folytathatjuk, amíg olyan permutációnk van, amelynél az  $i_k < k$  egyenlőtlenségnek van megoldása. Így véges lépésben eljutunk a  $\sum_{k=1}^n a_k b_k$  összeghez úgy, hogy a szumma értéke az egyes lépéseknél nem csökken. Ez feltevésünknek ellentmond, tehát eredeti állításunk igaz.

#### I r o d a l o m

- [1] Munkaközösség: Die Erfahrungen des einjährigen Betriebes des ungarischen Forschungsreaktors. /Dresden, 1960/.
- [2] Petrov, P.A.: Atomreaktorok. Műszaki Könyvkiadó /1962/.

Érkezett: 1964. dec. 10.  
KFKI Közl. 13.évf. 1. szám, 1965.



## NÉHÁNY SZERVES FOSZFOR- ÉS ARZÉNVEGYÜLET RÉTEGKROMATOGRÁFIÁS ANALIZISE

Írta: Berei Klára

### Összefoglalás

Magreakciók kémiai következményeinek tanulmányozása során szükségessé vált néhány aromás foszfor- és arzénvegyület, valamint difenil szétválasztása és meghatározása, amit rétegekromatográfiás módszerrel oldottunk meg. Optimális körülmények kiválasztása céljából meghatároztuk az említett vegyületek  $R_F$ -értékeit különböző oldószerkelegyek és adszorbensek alkalmazása esetén. A  $^{32}\text{P}$ -vel és  $^{76}\text{As}$ -al jelzett vegyületek mennyiségi meghatározása radiometrikusan történt. E célból a kromatográfálást a szokásos üveglapok helyett üvegcsikokra vitt adszorbensrétegen végeztük, a radiokromatogramokat automatikus regisztráló mérőműszer segítségével vettük fel.

A rétegekromatográfiás analízist mindössze néhány éve alkalmazták széles körben szerves vegyületek szétválasztására [1, 2, 3]. Az üveglemezre felvitt adszorbens tulajdonképpen nyitott, vékony rétegben "kiterített" oszlopnak tekinthető, amelyen a vizsgált elegy komponenseinek szétválasztása és előhívása a papirkromatográfiában alkalmazott módon történik. Az új módszer egyesíti magában a két régebben használt eljárást - az adszorpciós oszlopkromatográfia és papirkromatográfia - előnyeit, mert gyors, egyszerű és ezzel egyidejűleg kitűnik az adszorbensek, oldószerkelegyek, valamint az előhívás módjainak sokrétűségével.

A módszer igen alkalmasnak bizonyult egyes szerves foszfor-, ill. arzénvegyületek, valamint oldószerük egymás melletti meghatározására, amelyre a  $^{31}\text{P}/n$ ,  $\gamma/^{32}\text{P}$  és  $^{75}\text{As}/n$ ,  $\gamma/^{76}\text{As}$  magreakciók kémiai következményeinek tanulmányozása során volt szükségünk. A feladat megoldásához - jellegének megfelelően - a rétegekromatográfiás módszer radiometrikus kiértékeléssel kombinált változatát dolgoztuk ki. Ebben a formában a módszer alkalmasnak látszik a magreakciók kémiai következményeinek tanulmányozására, különösen ha a magreakcióban viszonylag rövidéletű radioaktív izotóp képződik. Mivel a rétegekromatográfiás analízis elsősorban magasabb forráspontú, molekulavegyületek szétválasztására és megha-



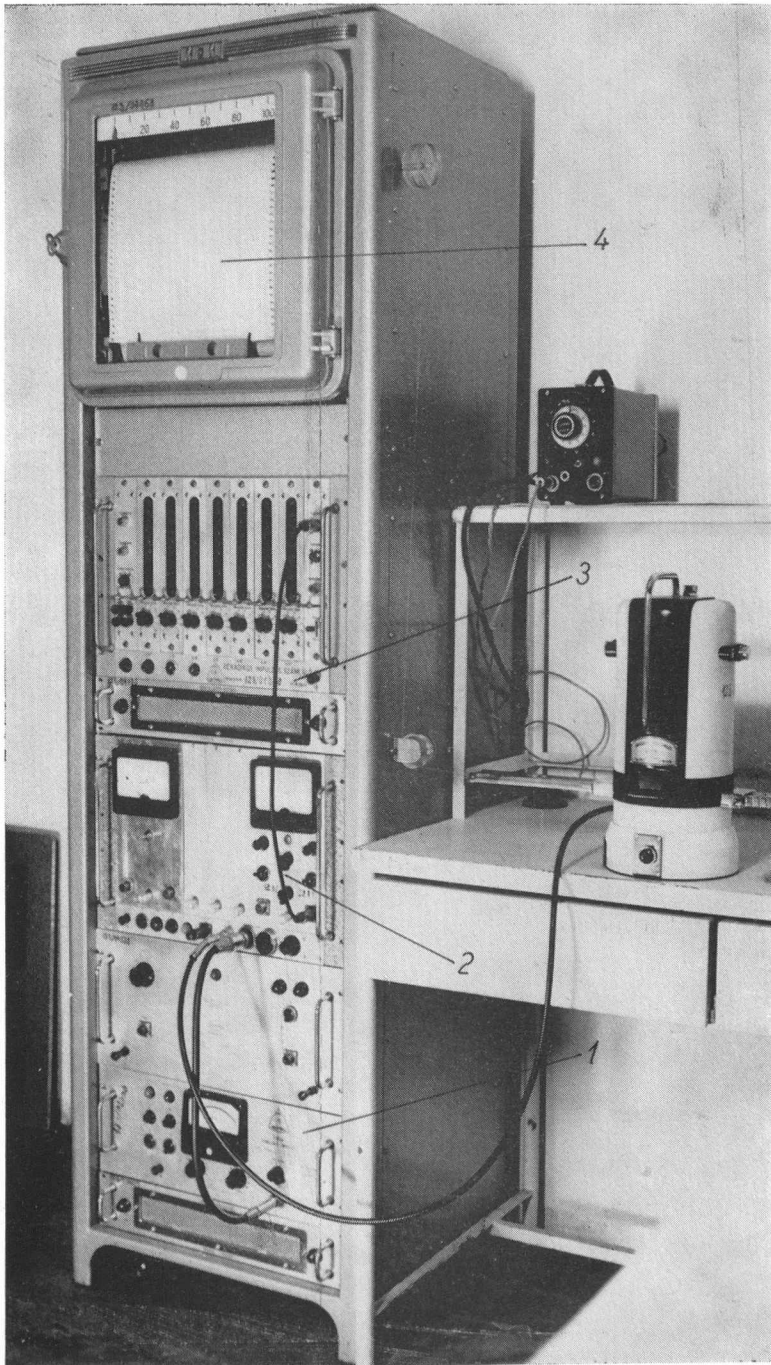
tározására használatos, jól kiegészíti a "forróatomkémiai" kutatásokban már bevált gázkromatográfiás, valamint elektroforézises módszereket.

### Kísérleti technika

Eddigi kísérleteink során radiometrikus meghatározás céljából az adszorbens réteget nem a rétegekromatográfiában általánosan használt 20x20 cm-es üveglapokra, hanem 3x20 cm-es üvegcsikokra vittük fel. Erre azért volt szükség, hogy a radio-rétegekromatogramok felvételénél felhasználhassuk a papirkromatogramok regisztrálására jól bevált berendezést. Az üvegcsikokra vizes pép alakjában felvitt adszorbenst /kötőanyagként gipszet vagy keményítőt tartalmazó szilikagél, alumíniumoxid, ill. ezek keveréke/ kevés ideig levegőn hagytuk állni, míg megszilárdult, majd 120 °C-on /keményítőtartalmu rétegeket 105 °C-on/ két órán át szárítottuk, exsiccatorban kalciumklorid felett hagytuk kihűlni. Az ilymódon előkészített rétegekre felcseppentettünk az analizálandó mintából 0,005 - 0,010 ml-t, majd becsiszolt tetejü üvegcádákban, - amelyek alján kb. 100 ml oldószerkelegy volt - szoba-hőmérsékleten, felszálló fejlesztéssel választottuk szét a felvitt anyagokat. A szétválasztás ideje 30-40 percnek adódott. A mérhető mennyiségben jelenlévő anyagok feltjainak előhívása az aromás vegyületeknél jól bevált módon elemi jóddal és Dragendorffreagenssel történt [4]. Radiometrikus meghatározás céljából az üvegcsikokat Gamma gyártmányu univerzális ólomtorony továbbító sinjére helyeztük és a szétválasztott vegyületek aktivitását automatikus mérőberendezéssel regisztráltuk /1. ábra/. A végablakos GM-csővet 3,5 kV-os nagyfeszültségü tápegység /1/ táplálta, a GM-csőről kimenő jeleket egyidejűleg lineáris ratemeterrel /2/ és dekadikus impulzusszámlálóval /3/ mértük, a ratemeter kimenő jelfeszültségét automatikus potenciométerrel /EPP/ /4/ regisztráltuk. Az ólomtorony továbbítósinjén elhelyezett üvegcsik a réssel ellátott GM-cső alatt szinkron mozgott az írószerkezet papírjával. A 2. ábrán látható rétegekromatogram trifenilfoszfin besugárzásakor képződött radioaktív termékek megoszlását mutatja a Kieselgel-G adszorbens-rétegen acetonos fejlesztés után.

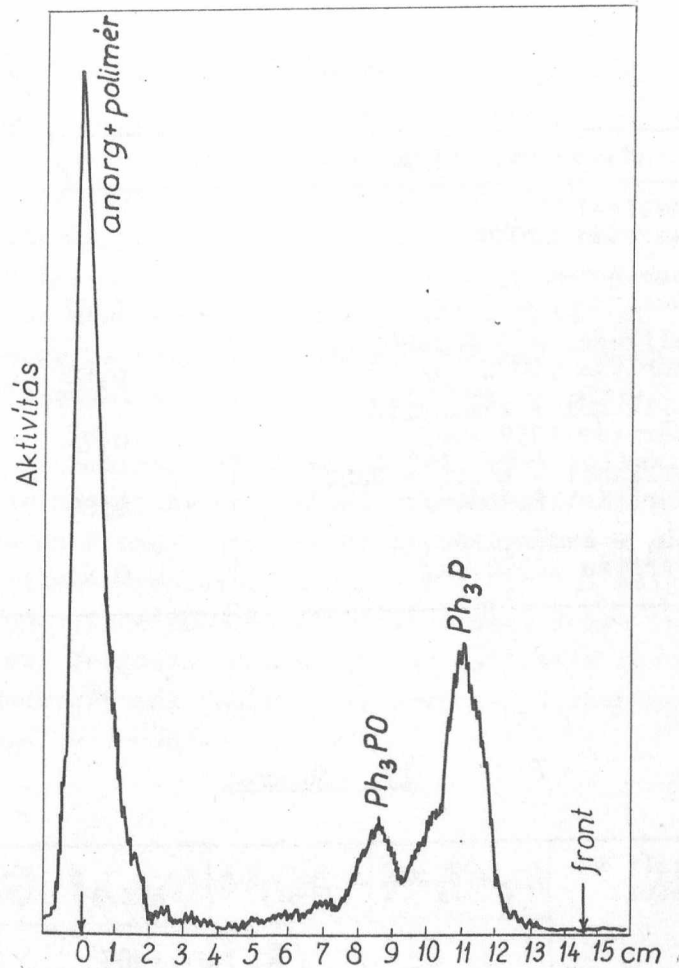
### Eredmények

Radiokémiai vizsgálatainkhoz használt foszfor- és arzénvegyületek közül csak a trifenilfoszfinoxid rétegekromatográfiás azonosítására volt ismeretes [5] eljárás. Megfelelő, jó elválasztást biztosító rendszerek kiválasztása céljából meghatároztuk a vizsgált ve-



1. ábra





2. ábra

gyületek rétegekromatográfiás  $R_F$ -értékeit különböző adszorbensekkel és különböző oldószerkelegyekkel.

Trifenilfoszfinoxid különböző adszorbensekkel kapott  $R_F$ -értékeit az I. táblázatban foglaltuk össze. A különböző összetételű rétegekkel nyert  $R_F$ -értékek foszforvegyületek esetében nem mutatnak ugyan lényeges eltérést, de a 13 % gipszet tartalmazó szilikagél "Kieselgel-G"-réteg mechanikai tulajdonságai / a réteg egyenletessége, üveghez való tapadása, stb. / messze a legkedvezőbbek, ezért a további vizsgálatokat ezen adszorbens felhasználásával végeztük.

A II. táblázatban felsorolt - 120°C-on szárított Kieselgel-G rétegen 3x20 cm-es üvegcsikok alkalmazásával különböző oldószerkelegyekkel kapott -  $R_F$ -értékek megbízhatóságának ellenőrzése céljából a szokásos 20-20 cm-es lapokon is végeztünk vizsgálatokat. A kétféle mó-

I. táblázat

Adsorbens réteg	$R_F$
Kieselgel-G /száritás 120°C-on/	0,87
Kieselgel-G /száritás 160°C-on/	0,81
Szilikagél + 5 % CaSO <sub>4</sub> /száritás 120°C-on/	0,82
Szilikagél + keményítő /száritás 105°C-on/	0,76
Szilikagél + Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + CaSO <sub>4</sub> /száritás 120°C-on/	0,80
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + keményítő /száritás 105°C-on/	0,90

II. táblázat

Vizsgált vegyületek Oldószer- elegy	(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> PO	(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> P	(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>3</sub> As	(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub>
	$(\bar{R}_F \pm \sigma) \cdot 100$				
Aceton	90±1,42	87±1,10	95±0,50	94±0,71	92±1,36
Aceton /egyenletesen telített gőztér/	78±1,42	54±0,54	73±0,73	69±0,71	74±1,18
Petroléter	0,00	0,00	21±1,05	38±3,00	61±1,00
Benzol	28±0,71	0,00	93±0,42	89±1,58	96±0,71
Kloroform	50±7,50	13±0,97	93±3,54	93±0,71	96±0,0
Benzol-Aceton /1:1/	92±5,48	75±1,33	75±3,00	92±0,52	0,92±0,71
Benzol-Aceton /9:1/	95±5,29	23±2,45	95±1,00	95±0,71	90±3,54
Kloroform-Aceton /6:4/	89±2,12	65±1,14	95±1,00	95±1,00	92±0,58
Kloroform-Aceton /9:1/	90±3,46	65±1,41	93±2,0	94±1,00	95±0,71



don kapott  $R_F$ -értékek a hibahatáron belül megegyeztek. A II. táblázat adataiból látható, hogy trifenilfoszfinoxid elválasztására trifenilfoszfintól, ill. "forróatomkémiai" kísérleteinkben higitószerként használt difeniltől az egyenletesen telített gőztérrel alkalmazott acetone bizonyult legjobbnak, míg trifenilarzin azonosítására a petrolétert találtuk a legalkalmasabb oldószernek. Az  $R_F$ -értékek egyes esetekben tapasztalható nagyobb szórását elsősorban a kézzel felvitt rétegek egyenetlensége okozza. Gépi rétegfelkenéssel, azaz egyenletesebb rétegek kialakításával a pontosság jelentősen növelhető.

Bár vizsgálataink előkísérlet jellegűek voltak, már az eddigi eredmények is mutatják, hogy a rétegekromatográfiás módszer sikeresen használható az aromás foszfor- és arzénvegyületek szétválasztására és radiometrikus meghatározására. Ez a biológiai jelentőségű foszforvegyületek analízise szempontjából is érdeklődésre tarthat számot. Ezért a kísérleti technika tökéletesítése mellett a továbbiakban megkíséreljük a módszert más foszfor- és arzénvegyületek szétválasztására és azonosítására is kiterjeszteni.

#### I r o d a l o m

- [1] Stahl, E.: Dünnschicht - Chromatographie. Springer Verlag, 1962.
- [2] Randerath, K.: Dünnschicht - Chromatographie. Verlag Chemie, 1962.
- [3] Truter, E.V.: Thin Film Chromatographie. London, 1963.
- [4] Vágújfalvi D.: Planta Medica 8, 34, /1960/
- [5] Ertel, H., Horner, L.: J. Chrom. 7, 268, /1962/

Érkezett: 1964. nov. 4.  
KFKI Közl. 13.évf. 1.szám, 1965.



## URÁN/VI/-OXID NYOMSZENNYEZŐINEK MEGHATÁROZÁSA SPEKTROFOTOMETRIÁS MÓDSZERREL<sup>x/</sup>

Irta: Csada Imréné és Rausch Henrik

### Összefoglalás

Az intézetben előállított reaktortisztaságu urán/VI/-oxid nyomszennyezőinek meghatározására kidolgozott spektrofotometriás eljárásokról adunk rövid tájékoztatót. Az urán zavaró hatásának kiküszöbölésére lecsapasos, extrakciós, ill. desztillációs eljárást alkalmaztunk.

A reaktor-fűtőelemekkel szemben igen nagy tisztasági követelményeket támasztunk. Az ún. "reaktortisztaságu minősítés" csak néhány ppm nagyságrendű, szennyezőket engedélyez még az egyes kis hatáskeresztmetszetű elemekből is. Ezek a szennyezők ugyanis, amennyiben fémurán a fűtőelem, károsan befolyásolják a fém tulajdonságait. A nagy hatáskeresztmetszetű elemek /pl. B, Cd, ritkaföldfémek/ csökkentik a fűtőelemben lejátszódó maghasadások számát, és ezáltal csökken a neutronfluxus is.

Ezen közleményben a spektrofotometriás eljárásokról adunk rövid összefoglalót. Az urán/VI/-oxid nyomszennyezőit egyéb nagyérzékenységű módszerekkel is meghatároztuk, spektroszkópiai és aktivációs elemzési módszerekkel [1].

Vizsgálatainkhoz a KFKI Magkémia II. Laboratóriumában előállított urán/VI/-oxidot használtuk fel [2].

Az egyes szennyezők meghatározására az irodalomban ismerttetett módszereket [3] kritikai értékelésnek vetettük alá, és megfelelő módosításokkal olyan eljárásokat dolgoztunk ki, amelyek lehetővé teszik a jelenlévő nagymennyiségű urán mellett a nyomszennyezők kellő érzékenységgel való meghatározását.

---

<sup>x/</sup>A Magyar Kémikusok Egyesületének vegyészkonferenciáján elhangzott előadás. Pécs, 1964. VIII. 27-29.

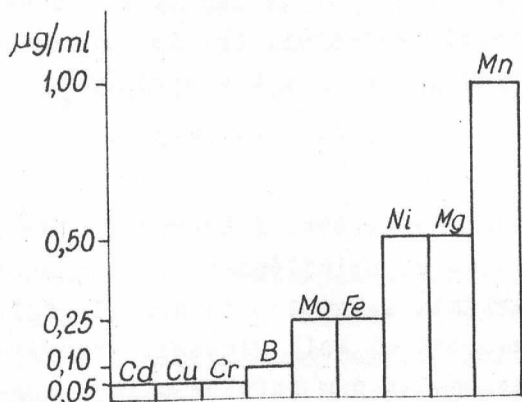
A következő táblázatban feltüntettük a megvizsgált nyomele-  
meket, neutronbefogási hatáskeresztmetszetüket, barb-ban kifejezve,  
 $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>, az egyes elemek urán/VI/-oxidban megengedett felső határérté-  
két, valamint a talált mennyiségeket is ppm-ben.

I. táblázat

Nyom- szeny- yező	Neutron- <sup>[4]</sup> befogási hatáske- reszt- metszet	Megengedett <sup>[5]</sup> mennyiség ppm	Talált mennyiség ppm
1. Cd	2550	0,2	0,6
2. B	755	0,2	0,2
3. Mn	13.2	5	4
4. Ni	4.6	15	∅
5. Cu	3.69	10	10
6. Cr	2.9	10	∅
7. Fe	2.53	30	10
8. Mo	2.50	1	4
9. Mg	0,063	25	14

Az urán főalkatrész zavaró hatásának kiküszöbölésére két lehe-  
tőségünk van. Eltávolíthatjuk az uránt lecsapással. Ezt az utat válasz-  
tottuk a magnézium meghatározásánál. A lecsapás azonban azzal a veszély-  
lyel jár, hogy a nagyfelületű csapadék, adszorpció következtében, jelen-  
tős mennyiségű nyomszennyezőt visz magával. Ezért inkább a nyomszennye-  
zőket igyekeztünk kinyerni az urán mellől. Általában extrakciós, ill.  
desztillációs eljárást alkalmaztunk. Így a nyomszennyezőket sikerült  
tisztább formában és kisebb veszteséggel meghatározni. Néhány szennye-  
zőt urán jelenlétében határoztunk meg. Egyes esetekben, amikor lugos  
pH-nál történt a meghatározás, az urán kicsapódását ammóniumcitráttal a-  
kadályoztuk meg, azaz komplexben tartottuk.

Az urán/VI/-oxidot általában salétromsavban oldottuk, és kén-  
savval szulfáttá alakítottuk.



1. ábra

határozásánál alkalmazott módszert, az elválasztási módokat, valamint az urán/VI/-oxid vizsgálathoz szükséges optimális kiindulási mennyiségét grammban.

Az 1.sz. ábrán láthatjuk az egyes nyomszennyezők legkisebb, még kimutatható mennyiségét µg/ml-ben, az általunk alkalmazott meghatározási módszerekkel. A kis hatáskeresztmetszetű elemek meghatározására kevésbé érzékeny módszerek is megfeleltek, azonban a neutronmérgek meghatározására olyan módszerekre volt szükségünk, amelyekkel 0,1, sőt 0,01 µg/ml érzékenységet is elérhettünk.

A II. táblázatban feltüntettük az egyes nyomszennyezők meghatározásánál alkalmazott módszert, az elválasztási módokat, valamint az

II. táblázat

Nyomszennyező	Vizsgálati módszer	Elválasztás körülményei	Urán/VI/-oxid g
1. Cd	ditizon-CCl <sub>4</sub>	uránkomplex + extrakció	5
2. B	kurkumin	desztillálás	25
3. Mn	permanganát	-	10
4. Ni	dimetil-glioxin	uránkomplex	2
5. Cu	ditizon-CCl <sub>4</sub>	extrakció	1
6. Cr	difenil-karbazid	-	1
7. Fe	o-fenantrolin	-	1
8. Mo	ammónium-szulfocianid	extrakció	1
9. Mg	titánsárga	urán lecsapása	10

### Mangán

Salétromsavas oldás, valamint szulfáttá való átalakítás után, foszforsav jelenlétében, káliumperjodáttal a mangánt permanganáttá oxidáltuk. A színes fémek zavaró hatásának kiküszöbölésére úgy jártunk el,



hogy az oldat extinkció értékének leolvasása után, néhány csepp nátrium-nitrittel elszintelenítettük a permanganátot, és az így kapott oldat extinkció értékét levontuk az eredeti extinkció értékből. Ugy is eljárhatunk, hogy az oxidálás előtt az oldat felét félretesszük vakpróbának.

#### Króm

A meghatározást difenil-karbaziddal végeztük. A kromáttá való oxidálást kálium-permanganáttal végeztük, és az oxidálószer feleslegét sósavval bontottuk el. A króm-difenil-karbazid színintenzitása legfeljebb 15 percig állandó, ezért a mérést azonnal el kell végezni. Vanádium, molibdén, vas, mangán tízszeres mennyiségben sem befolyásolja a meghatározást.

#### Vas

A meghatározást 3-as pH-nál o-fenantrolinnal végeztük. Vakpróbának vasat nem tartalmazó U-törzsoldatot használtunk fel. Réz, nikkel, kobalt zavaró hatása, amennyiben koncentrációjuk kisebb, mint a vas koncentrációja, nem érvényesül.

#### Nikkel

A meghatározást dimetil-glioximmal végeztük. Az oxidálást savas közegben ammónium-perszulfáttal végeztük, majd az oldatot ammónium-hidroxiddal semlegesítettük, és 11-es pH-nál dimetil-glioximmal kezeltük. A vakpróba ez esetben is nikkelmentes urántörzsoldat volt. A kobalt zavaró hatása a mérési hullámhossznál nem számottevő.

#### Kadmium

Az uránt ammónium-citráttal komplexben tartottuk, és 9-es pH-nál szén-tetrakloridos ditizonnal előzetes extrakciót végeztünk. A szerves fázist vízzel való mosás után sósavval kezeltük. Ezáltal a kadmium-ditizon komplexet elbontottuk, és a kadmium a vízsavas fázisba kerül, és így a legtöbb zavaró elemtől elválasztható. Ajánlatos ezt a savas-vizes fázist szén-tetrakloridos ditizonnal extrahálni, hogy az esetleges réz, nikkel nyomokat is eltávolíthassuk. Miután a savas-vizes fázisban csak a kadmium maradt, az oldatot meglugosítottuk, szén-tetrakloridos ditizonnal extraháltuk a kadmiumot, 9-es pH-nál. Cink, ólom nem zavar, mivel mindkét elem elenyésző mennyiségben van jelen a mintában.

### Réz

Az extrahálást szén-tetrakloridos ditizonnal végeztük. A reagens nagy feleslegben való alkalmazását kerültük, mivel azt tapasztaltuk, hogy a fölösleg eltávolításakor színintenzitás-csökkenés állt be; a fölösleg eltávolítására karbonát-pirofoszfát-oldatot használtunk.

### Molibdén

A meghatározást ammónium-rodaniddal végeztük, és a molibdén/VI/-rodanidot sztanno-kloriddal redukáltuk, s az így nyert színes komplexet i-butilalkohollal extraháltuk. A vizsgálatot 10-15°C-os oldatokkal végeztük. A színes komplexet csak a molibdén/V/ adja. A sztanno-klorid redukálószer molibdén/VI/-ot molibdén/IV/-gyé redukálja, azonban a molibdén/IV/ diszproporcionálódik molibdén/III/-má és molibdén/V/-té. Így tulajdonképpen a várható színintenzitásnak csak a felét kapjuk. Ideális lenne olyan redukálószer alkalmazása, amely molibdén/VI/-ot teljes egészében molibdén/V/-té redukálná. De ez esetben a vas csak nyomokban lehetne jelen. Sztanno-klorid esetében azonban a vas, sőt a legtöbb zavaró elem sem befolyásolja a meghatározást.

### Bór

Urántól való elválasztását desztillációval oldottuk meg. A vizsgálandó mintát zárt rendszerben, kvarc-desztillálóban, foszforsavban oldottuk. Metilalkoholos desztillációval a bórsavas metilésztert glicerines lugban fogtuk fel. A desztillátumot bepároltuk, a glicerint izzitással távolítottuk el. A bór meghatározását kurkuminnal végeztük. A módszer érzékenységének növelésére a vizsgálatához felhasznált reagensteket, oldatokat tisztítottuk. Edényzetünk kvarc és platina volt.

### Magnézium

Meghatározásánál az uránt távolítottuk el az oldatból. Ammónium-klorid jelenlétében, cc. ammónium-hidroxiddal, kétszeri lecsapással. A szűrletet bepároltuk, az ammóniumsókat izzitással eltávolítottuk. A maradékot kénsavval felvettük, és a meghatározást lugos pH-nál titánsárgával végeztük.

Összefoglalva megállapítottuk, hogy a "reaktortisztaságu" urán/VI/-oxid egyes nyomszennyezőinek meghatározására kidolgozott spektrofotometriás eljárások közül a legnagyobb érzékenységet azoknál a módszereknél értünk el, amelyeknél a szennyező elemet /Cd, Cu, Mo, B/

akár extrakcióval, akár desztillációval választottuk el a nagy mennyiségben jelenlévő urán mellől. Ezen módszerek előnye, hogy néhány tájékoztató mérés után a vizsgálandó urán/VI/-oxid kiinduló mennyiségének megválasztásával, a szennyező elem olyan koncentráció értékére állhattunk be, amely a fotometrálas szempontjából a legkedvezőbb. Azok a nyomszennyezők, amelyek nagyobb mennyiségben lehetnek jelen, mint pl. vas, nikkel, mangán, kevésbé érzékeny, direkt eljárásokkal is meghatározhatók. Ezen utóbbi módszereknél azonban az a követelmény, hogy a mérést olyan uránoldattal végezzük, amelyben az urán stabilizálható komplexben van jelen, és így a mérést nem zavarja.

#### I r o d a l o m

- [1] Ördögh M., Szabó E., Hegedüs D.: Determination of impurities in reactor grade uranium oxide. Symposium on Radiochemical Methods of Analysis. Salzburg, Austria, 19-20 October 1964.
- [2] Bakos L., Szabó E.: Reaktortisztaságu uránvegyületek előállítása. Magyar Kémikusok Lapja. 8, 1964.
- [3] Rodden, J.C.: Analytical Chemistry of the Manhattan Project. National Nuclear Energy Series Manhattan Project. Technical Section Division VIII. Vol.1. 1950. Manuel of Analytical Methods. Vol.III. Analysis of Purified Materials, Jan. 1946. New York.
- [4] Петров, Р.А.: Ядерные энергетические установки, Госэнергоиздат. 1958.
- [5] Reactor Handbook. Second Edition. Vol.I. Materials. London, 1960. Progr. in Nucl.Eng.Ser.V. Vol.2. Metallurgy and Fuels 1959.

ALKIL-FOSZFÁTOK KÖLCSÖNHATÁSAINAK VIZSGÁLATA  $^{32}\text{P}$ -VEL JELZETT  
VEGYÜLETTEL

Irta: Szabó Elek és Szabon János

Összefoglalás

Meghatároztuk a di-/2-etil/-hexil-foszforsav benzolos és szén-tetrakloridos oldatában fellépő dimerizáció mértékét, és megvizsgáltuk elhanyagolható mértékű dimerizáció körülményei mellett a di/2-etil/-hexil-foszforsav és tri-n-butyl-foszfát kölcsönhatás mértékét ugyancsak benzolos és szén-tetrakloridos oldataikban. A megoszlásmérésen alapuló meghatározást  $^{32}\text{P}$ -vel jelzett D2EHPA felhasználásával végeztük. A keresett dimerizációs, asszociációs és megoszlási állandókat "curve fitting" eljárással nyertük:

Értékek: $\log K_2 = + 2.90 \pm 0.14$	benzolos és
$\log K_2 = + 1.98 \pm 0.11$	szén-tetrakloridos,
$\log K_{\text{assz}} = + 0.78 \pm 0.06$	benzolos,
$\log K_{\text{assz}} = + 1.12 \pm 0.04$	szén-tetrakloridos,
$\log K_d = + 1.30 \pm 0.04$	benzolos-/0,2 M $\text{MClO}_4$ /-os,
$\log K_d = + 1.22 \pm 0.03$	szén-tetrakloridos - /0,2 M $\text{HClO}_4$ / oldatban.

A D2EHPA disszociációs állandója  $\text{p}K_a = 2.85 \pm 0.05$ .

A dialkil-foszforsav és trialkil-foszfát keverékek jól felhasználhatók a reaktortisztaságú uránvegyületek előállításában [1]. Az ilyen típusú extrahálószeret használva, azt az érdekes jelenséget figyelték meg, hogy egyes fémek esetében /pl. urán/ a megoszlási hányados magasabb, mint a külön-külön használt extrahálószerénél mért megoszlási hányados, más esetekben pedig alacsonyabb. A szinergetikus és antagónisztikus hatások mechanizmusának felderítésére széleskörű vizsgálatokat végeznek több ország kutatói [2], e mérésekkel a kérdések tisztázását kívánjuk elősegíteni.

Vizsgálati körülmények, jelölések

A méréseket  $25^\circ\text{C}$ -on végeztük tisztított anyagokkal.

A  $^{32}\text{P}$  izotóppal jelzett di-/2-etil/-hexil-foszfor-sav /AERE, Harvell/ lugos, savas, majd 5-7-szeri vizes mosás után szabad aktivitást nem tartalmazott. A töményebb oldatokat vízzel mosott inaktív D2EHPA-val /Union Carbide Corp./ való elegyítéssel készítettük.

A semleges komponensek; tri-n-butyl-foszfát /Fluka A.G./, benzol és szén-tetraklorid /Reanal/ p.a. tisztaságuk voltak, tisztításukat a szokásos módon /savas, lugos, vizes mosással/ végeztük.

Az aktivitás mérésekhez  $4\pi$  számlálót használtunk. A kis fajlagos aktivitás miatt a statisztikus hiba  $\pm 10\%$ . A pH méréseket és az ellenőrző titrálásokat Radiometer Titrigraph segítségével végeztük el /hiba:  $\pm 0,5\%$ /.

Jelöljük HA-val a D2EHPA-t /di-2-etil-hexil-foszforsavat/ és

$\text{H}_2\text{A}_2$  -vel a dimert,

$C_A$  a D2EHPA összkoncentrációja,

$C_V$  és  $C_0$  a sav /D2EHPA/ vizes, ill. szerves fázisban mért egyensúlyi koncentrációja, /1./5/ és /6//,

[ ] ill.

[ ] a vizes, ill. a szerves fázisban az egyensúlyi koncentrációra vonatkozik,

$$q = \text{a megoszlási hányados} = \frac{C_0}{C_V}$$

TBP = tri-n-butylfoszfát,

továbbá

$$|1| \quad K_2 = \frac{[\text{H}_2\text{A}_2]_0}{[\text{HA}]^2} \quad \text{a dimerizációs állandó,}$$

$$|2| \quad K_d = \frac{[\text{HA}]_0}{[\text{HA}]} \quad \text{a megoszlási állandó,}$$

$$|3| \quad K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \quad \text{a savi disszociációs állandó.}$$

#### Az asszociációs állandók mérése

$^{32}\text{P}$  izotóppal jelzett D2EHPA felhasználásával a radioaktivitás eloszlása segítségével megmértük a megoszlás-értékeket, - vál-



tozó paraméter volt a D2EHPA összkoncentráció, ill. változatlan D2EHPA koncentráció mellett a változó TBP koncentráció - és a "görbe illesztés" /8/ módszerének segítségével jutottunk a keresett állandókhoz.

a/ A dimerizációs állandót  $K_2$  az I.sz. táblázatban közölt mérőszámok segítségével nyertük.

I. táblázat

A D2EHPA megoszlása benzol, ill. szén-tetraklorid és 0,2 mól  $\text{HClO}_4$  között a D2EHPA koncentráció függvényében  $25^\circ\text{C}$ -on /fázisarány = 1:3/.

a/ benzolban

b/ szén-tetrakloridban

$\log C_0$	$\log q$	$\log \frac{C_0}{q}$	$\log C_0$	$\log q$	$\log \frac{C_0}{q}$
-2.00	1.92	-3.92	+0.04	2.36	-2.32
-2.30	1.81	-4.11	-1.26	1.74	-3.00
-3.01	1.42	-4.43	-1.57	1.60	-3.17
-3.11	1.37	-4.48	-2.02	1.41	-3.43
-3.31	1.39	-4.70	-2.32	1.31	-3.63
-3.40	1.32	-4.72	-2.63	1.28	-3.91
-3.60	1.36	-4.96	-3.13	1.22	-4.35
-3.72	1.28	-5.00	-3.43	1.25	-4.68
-4.01	1.33	-5.34	-3.48	1.27	-4.75
-4.32	1.28	-5.60	-3.73	1.25	-4.98
-4.61	1.26	-5.87			
-5.10	1.34	-6.44			

Változtattuk a D2EHPA koncentrációját  $10^{-4}$  - 1 mól között/hígító: 1, benzol 2, széntetraklorid/. Azonos ionerősségű vizes fázissal /0,2 mól  $\text{HClO}_4$  / 30 percig rázva az elválasztás után mért aktivitásokból  $q$  -t kaptuk meg. A koncentrációkra az alábbi összefüggések érvényesek / a  $^{32}\text{P}$ -vel jelzett D2EHPA megoszlásának mérésénél értelemszerűen a dimer forma koncentrációjának kétszeresét kell figyelembe venni/:

|4|

$$C_A = C_V + C_0$$

|5|

$$C_V = [\text{HA}] + [\text{A}^-]$$

6/  $C_0 = 2[H_2A_2]_0 + [HA]_0$  feltételezve, hogy

a dimerizáció csak apoláros közegben számottevő, másrészt a dimer vízoldhatósága elhanyagolható, a vizes fázisban  $H_2A_2$  formációt nem vetünk figyelembe.

A mért megoszlásértéket felhasználva

7/ 
$$q = \frac{C_o}{C_v} = \frac{2[H_2A_2]_0 + [HA]_0}{[HA] + [A^-]} = \frac{2K_2K_d^2[HA]^2 + K_d[HA]}{[A^-](1 + \frac{[H^+]}{K_a})}$$

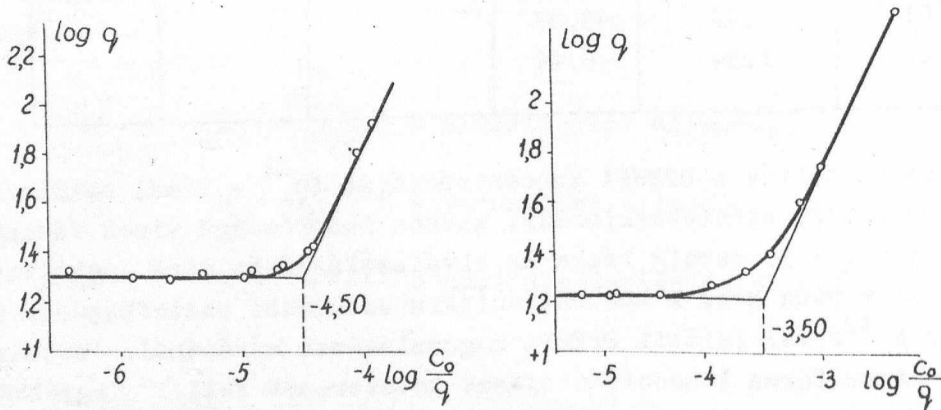
$q$  kifejezését a grafikus kiértékelhetőség érdekében  $\log Y = \log(1+X)$  alakúra kell rendezni: /1. függelék/

$$\log q - \log \frac{K_d}{s} = \log(1 + 2K_2 \frac{K_d}{s} \frac{C_o}{q})$$

ahol

$$s = 1 + \frac{K_a}{[H^+]}$$

A megoszlási hányadosnak a vizes fázis koncentrációjától való függését ábrázoló görbéről, ha ezt a képletnek megfelelően  $\log q - \log \frac{C_o}{q}$  alakban ábrázoljuk, és a  $\log Y = \log(1+X)$  alakkal egyeztetjük, úgy a horizontális aszimptota helyzetéből  $\log \frac{K_d}{s}$ ; az aszimptoták metszéspontja helyéből  $\log 2K_2 \frac{K_d}{s}$  kapható meg. /Lásd 1. és 2. ábra./



1-2. ábra

Megoszlási hányados változása a D2EHPA koncentráció függvényében:

- 1/ benzolos oldat - 0,2 mól  $HClO_4$
- 2/ szén-tetrakloridos oldat -  
- 0,2 mól  $HClO_4$  között.

A sav disszociációs állandóját csak 70 % etanoltartalmu vizes oldata esetére ismertük /  $pK = 3.20$  /7//, ezért tiszta vizes oldatban is meg kellett mérnünk a  $pK$ -t. A meghatározást potenciometrikus titrálás segítségével / NaOH, üveg-kalomel elektródópár/ végeztük, a fél-neutralizáció pH értékéből számolva a  $pK$ -t;

$$(pK = pH + \log [HA] - \log [A^-])$$

$$pK = 2.85 \pm 0.05$$

/A  $pK$ -t kevésbé pontos méréssorozatból megoszlásmérés segítségével hasonló értékűnek találtuk. Tapasztalataink szerint a D2EHPA kismértékű hidrolizise - a hidrolizisfok mintegy  $5 \cdot 10^{-3}$  - okozta a pontatlanságot./

Az  $S$  értékét a használt körülmények között egynek vehetjük.

$$\log K_d \text{ benzolos oldatnál} = + 1.30 \pm 0.04$$

$$\text{szén-tetrakloridnál} = + 1.22 \pm 0.03$$

$$2 K_2 K_d \text{ benzolnál} = + 4.50 \pm 0.10$$

$$\text{szén-tetrakloridnál} = + 3.50 \pm 0.08$$

$$\log K_2 = + 2.90 \pm 0.14 \quad \text{benzolban, és}$$

$$\log K_2 = + 1.98 \pm 0.11 \quad \text{szén-tetrakloridban.}$$

/Megjegyzendő, hogy a  $C_A 0,1$  feletti D2EHPA értékeknél, melyeket nem vettünk figyelembe, a kísérleti görbe iránytényezője nem egyenlő egygyel, hanem ennél magasabb értékű; - valószínű, hogy ebben az esetben már tovább-polimerizálódással kell számolni./

b/ A D2EHPA - TBP asszociátum képződésének vizsgálatát állandó D2EHPA koncentráció mellett végeztük / $1,4 \cdot 10^{-3}$  mól, alacsonyabb koncentráció mellett a kis fajlagos aktivitás miatt a mérés kiértékelhetetlen volt, ezért el kellett tekintenünk az ilyen körülmények között már fellépő dimerizációtól, mely  $\sim 20\%$  /. Változtatva a szerves fázis TBP koncentrációját /TBP vizoldékonyságát elhanyagolhatjuk/, az aktivitás megoszlásából előbbiekhez hasonlóan

$$q = \frac{K_d}{S} (1 + K_{assz} [TBP]_0)$$

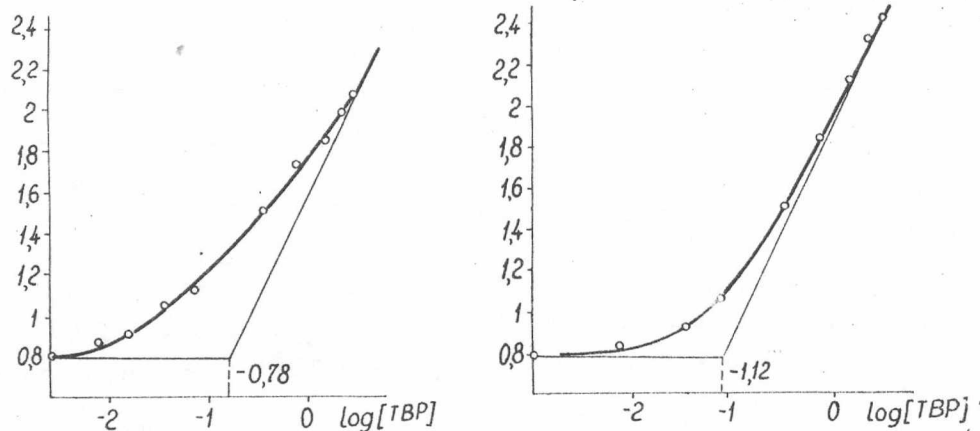
ahol

$$K_{assz} = \frac{[D2EHPA \cdot TBP]_0}{[D2EHPA]_0 \cdot [TBP]}$$

Ábrázolva  $\log q - \log [TBP]_0$  függvényt, fenti megoldási mód segítségével kaptuk:

$$\log K_{assz} \text{ értéke benzolos oldatban} = + 0.78 \pm 0.06$$

$$\text{széntetrakloridos "-"} = + 1.12 \pm 0.04$$



3-4. ábra

D2EHPA megoszlása a TBP koncentráció függvényében

3/ benzolos,

4/ szén-tetrakloridos oldatban, 25°C-on.

II. táblázat

A D2EHPA megoszlása változó TBP koncentráció függvényében, 25°C-on

a/ 5 ml benzolos, ill.

b/ 5 ml szén-tetrakloridos és 5 ml 0,2 mólos  $\text{HClO}_4$  oldat között /D2EHPA =  $1,4 \cdot 10^{-3}$  mól/

a/

b/

V ml TBP	5-V ml oldatban	$\log[\text{TBP} \cdot \text{H}_2\text{O}]_0$	$\log q$	V ml TBP	5-V ml oldatban	$\log[\text{TBP} \cdot \text{H}_2\text{O}]_0$	$\log q$
4		+0.437	2.072	4		+0.437	2.408
3		+0.313	1.982	3		+0.313	2.327
2		+0.136	1.828	2		+0.136	2.139
1		-0.165	1.713	1		-0.165	1.837
0,5		-0.466	1.533	0,5		-0.466	1.506
0,1		-1.165	1.136	0,1		-1.165	1.056
0,05		-1.466	1.081	0,05		-1.466	0.923
0,02		-1.863	0.912	0,01		-2.165	0.858
0,01		-2.165	0.885	0			0.773
0			0.861	0			0.798
0			0.803				

Diszkusszió

Dyrssen a di-n-butyl-foszforsav /DBP/ és tri-n-butyl-foszfát /TBP/ kölcsönhatásainak vizsgálatára radioaktív indikációs megoszlás-mérést használt [3, 4] és kimutatta a DBP nagymérvű / $K_2$  mintegy  $10^7$  nagyságrendű/ dimerizálódását apoláros oldószerben, és mérte a DBP-TBP kölcsönhatás mértékét.

Hardy és Scargill [5] hasonló eredményeket kaptak DBP esetében; különböző apoláros oldószerekben a sav dimerizációs állandója  $10^5 - 10^7$  közötti érték. Baes [6] izopiesztikus méréssel a dimerizációt n-oktánban di/2-etil/-hexil-foszforsavnál /D2EHPA/ is kimutatta, az állandót  $10^4$  nagyságrendűnek találta.

A D2EHPA dimerizációs állandóira kapott értékeket a DBP megfelelő értékeihez hasonlítva /3/ kitűnik, hogy egyrészt a D2EHPA kisebb mértékben képez dimert a rövidebb szénláncu, kisebb  $pK$ -ju DBP-nál, ami a savhomológok dimerizátumainál eddig tapasztaltakkal egyezik. /Növekvő  $pK$ -hoz csökkenő  $K_2$  tartozik./ Másrészt viszont nem illik a DBP-nál kialakult képbe az oldószer hatása /4/, mert nem tapasztaltuk a  $\frac{K_2}{K_d}$  konstans tendenciát. Bár csak két oldószerre kaptunk adatokat, ezekből arra lehetne következtetni, hogy a D2EHPA állandóbb szolvátot képez  $CCl_4$ -dal /  $\log K_2 = 1.98$  /, mint az egyébként megoszlás szempontjából azonos /  $\log K_d$ -k a hibahatárokon érintkeznek/ viselkedésű benzol. Ez a kérdés részletesebb vizsgálatot érdemelne, ami jelen munkánkban nem volt feladatunk.

Az a/ és b/ pont alattiak összevetéséből látható, hogy a di/2-etil/-hexil-foszforsavnak apoláros oldószerekben normál körülmények között létrejövő dimerizálódása mellett a tri-n-butyl-foszfáttal az asszociátum képződése háttérbe szorul; az állandók viszonya mintegy százszoros a dimerizáció javára.

F ü g g e l é k

/7/ átrendezése  $\log Y = \log (1+x)$  alakra:

$$q = \frac{2K_2K_d \frac{[H^+]^2[A^-]^2}{K_a} C_v}{[A^-]^2 \left(1 + \frac{[H^+]}{K_a}\right)^2} + \frac{K_d \frac{[H^+][A^-]}{K_a}}{[A^-] \left(1 + \frac{[H^+]}{K_a}\right)}$$

$$q = \frac{2K_2 K_d \frac{2[H^+]^2}{K_a^2} \frac{C_0}{q}}{\left(1 + \frac{[H^+]}{K_a}\right)^2} + \frac{K_d \frac{[H^+]}{K_a}}{1 + \frac{[H^+]}{K_a}}$$

$$q = \frac{2K_2 K_d^2 \frac{C_0}{q}}{\left(\frac{K_a}{[H^+]} + 1\right)^2} + \frac{K_d}{\frac{K_a}{[H^+]} + 1}$$

$$q = 2K_2 \frac{K_d^2}{s^2} \frac{C_0}{q} + \frac{K_d}{s},$$

ahol

$$s = 1 + \frac{K_a}{[H^+]};$$

$$\log q - \log \frac{K_d}{s} = \log \left( 2K_2 \frac{K_d}{s} \frac{C_0}{q} + 1 \right)$$

normál paraméterek bevezetésével

$$X = x + p_1 = \log w$$

$$Y = y + p_2 = \log(1+w), \quad \text{ahol}$$

$$x = \log C_0 - \log q \quad p_1 = \log 2K_2 \frac{K_d}{s},$$

továbbá

$$y = \log q \quad p_2 = -\log \frac{K_d}{s}$$

$$X = 0 \text{-nál} \quad x = x_0 = -p_1, \quad Y = 0 \text{-nál} \quad y = y_0 = -p_2.$$



I r o d a l o m

- [1] Szabó E., Bakos L., Czeglédi B., Fodor M., Müller P.: Recent results in the processing of Hungarian Uranium ores, Third United Nat. Int. Conf. on the Peaceful Uses of Atomic Energy A. Conf. 28, /P/ 450, /1964/.
- [2] Bakos L., Szabó E.: Szinergetikus és antagonisztikus hatások különböző fémionok extrakciójában. MTA Kémiai Tud. Oszt. Közleményei, 32, 399-420 /1964/.
- [3] Dyrssen, D.: Acta Chem. Scand. 11, 1771, /1957/.
- [4] Dyrssen, D. és Liem Djiet Hay: Acta Chem. Scand. 14, 1091, /1960/.
- [5] Hardy, C.J. és Scargill, D.: J. Inorg. Nucl. Chem. 11, 128, /1959/.
- [6] Baes, C.F. Jr.: J. Phys. Chem. 66, 1629, /1962/.
- [7] Blake, C.A. Jr., Baes, C.F. Jr., Brown, K.B., Coleman, C.F. és White, J.C.: Proc. Second Intern. Conf. Peaceful Uses Atomic Energy, 28, 289, /1958/.
- [8] Sillén, L.G.: Acta Chem. Scand. 10, 186, /1956/.

Érkezett: 1964. dec. 16.  
KFKI Közl. 13.évf. 1.szám, 1965.