

310.565

IV.

9

28
1986

ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

28. kötet / 1. szám



MTA

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1986

ATOMKI REPORT

D/2 (1986)

GAMMA-RAY ACTIVITY OF THE FALLOUT DUST PRODUCED BY THE
SUPER-HYDROGEN BOMB TEST EXPLOSION ON MARCH 1, 1954

Sakae Shimizu



Institute of Nuclear Research of the
Hungarian Academy of Sciences
Debrecen, P.O. Box 51, H-4001, Hungary

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

GAMMA-RAY ACTIVITY OF THE FALLOUT DUST PRODUCED BY
THE SUPER-HYDROGEN BOMB TEST EXPLOSION ON MARCH 1, 1954*

Sakae Shimizu

Institute for Chemical Research, Kyoto University, Kyoto, Japan

The super-hydrogen bomb test explosion, so-called Bravo test of a fission-fusion-fission bomb, was carried out on Bikini Atoll in mid-Pacific on March 1, 1954. Twenty-three Japanese fishermen on board a fishing boat about 90 miles north-east of Bikini Atoll were attacked unexpectedly by falling of white dust about 3 h after the explosion. The falling continued for several hours. The fishermen, tools, and fish caught by them on the boat were all covered by a white sheet of dust, which was fine radioactive debris of coral reef. By this tragic accident the fishermen suffered from radiation sickness. Medical treatments for them and extensive studies on the radioactive fallout were commenced immediately after the boat returned to her home harbor two weeks later. Many aspects of the accident including the nature of the radioactive dust were studied enthusiastically by many Japanese scientists from various fields concerned. At that time, pursuing sophisticated procedures of radiochemical analysis, some 20 nuclides of fission products and, to our surprise, ^{237}U were discovered in the fallout dust. Since this accident 31 years ago we have been preserving a minute amount of the dust collected on the boat. We have recently been trying to find some active nuclides, if they still exist. In the γ -ray spectrum observed by a high purity Ge detector there exist evident peaks of γ rays from ^{241}Am , ^{155}Eu , ^{137}Cs , and ^{60}Co . In the present paper are reported morphological features of the fine debris of fallout and absolute intensities of these 4 nuclides. Some discussion on our finding is also presented.

*Seminar given in ATOMKI on 17 October, 1985.

1. Introduction

At Bikini Atoll in the Marshall Islands in the mid-Pacific the so-called Bravo test explosion took place early in the morning, March 1, 1954. This was the first explosion of the fission-fusion-fission (F-F-F) bombs with the explosive yield of about 15 Mt, 1000 times more powerful than the Hiroshima bomb. The bomb consisted of three stages; normal fissile ^{239}Pu core covered by a fusion material, lithium deuteride (LiD), and as an outermost layer considerable amount of natural uranium or depleted uranium was used. It was presumed that in the explosion of such a super-hydrogen bomb half of the energy released is due to fission and half to fusion. The Bravo detonation was near the ground, about 2 m above a coral reef. After the cloud of explosion ascended to an altitude of about 35 km a great volume of radioactive particles in the cloud came down unexpectedly by an upper wind in a long plume in easterly direction.

Twenty-three Japanese fishermen on board a fishing boat, named Fukuryu Maru No.5 (99.9 tons), were engaged in fishing about 90 miles north-east of Bikini Atoll. They witnessed a reddish white flash on the horizon in the west-south-westerly direction at approximately 3.40 a.m. (J.S.T.) and 7 or 8 min later they heard a loud explosion. About 3 h after the explosion, fine dust and debris began to fall on the boat and the fallout lasted for several hours. After this strange accident, the boat contaminated by radioactive fallout returned to her home harbor, Yaizu, Shizuoka Prefecture, Japan. During the two-week voyage back to Yaizu the fishermen were exposed to nuclear radiations, of which total dosage was estimated between 200 and 500 R. They complained of skin lesions and loss of hair due to the direct effects of the fallout as well as general symptoms, which were commonly observed among those injured by the atomic bombs at Hiroshima and Nagasaki.

Immediately after they came back to their home harbor all crew members were sent to hospitals in Tokyo. They were restored to health a few years later by infallible medical treatments, except that an oldest member died of a liver trouble on September 23, 1954.

For several months following the serious disaster extensive studies on the radioactive dust were developed by many scientists from various fields in Tokyo, Shizuoka, and Kyoto, including nuclear physics, analytical and physical chemistry, hematology, nuclear medicine, meteorology, and oceanography, to explore the nature of the accident as well as to get useful information for medical treatment of the injured fishermen. The collection of Japanese studies had been published in two huge volumes in March 1956 [1].

A map of Bikini Atoll and neighboring atolls in the Marshall Islands is shown in Fig.1. The position of Fukuryu Maru No. 5 at the time of the Bravo test explosion (0340, March 1st, 1954, J.S.T.) and the dose contours of the fallout after the explosion are shown in the map.

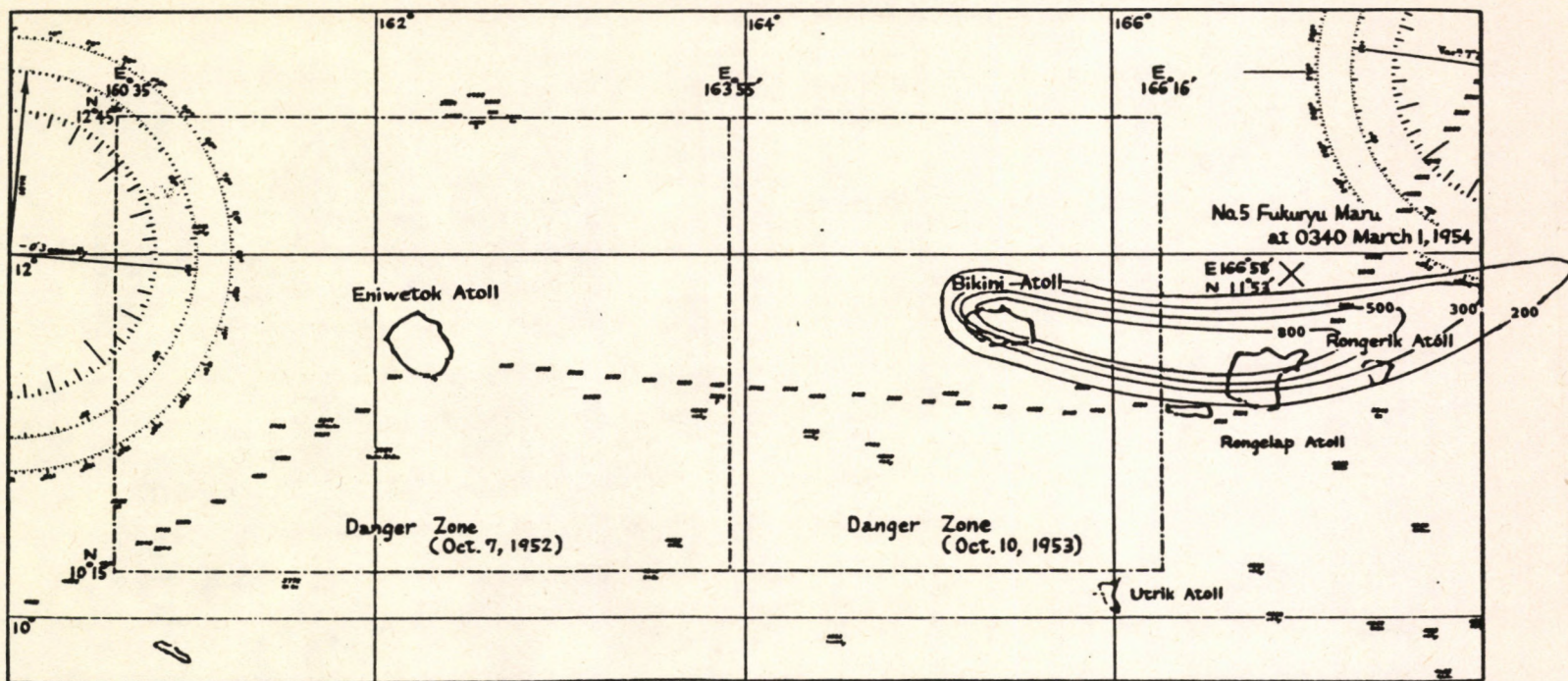


Fig. 1. Bikini Atoll and neighboring atolls in the Marshall Islands. The Bravo test explosion was executed about 2 m above a coral reef of the Bikini Atoll. The position of Fukuryu Maru No. 5 at the time of explosion, 0340, March 1, 1954 (J.S.T.), is shown. The numbers on the dose contours represent the dose, in Roentgen units, that would have been received over 48-h period, without shielding. The contour lines are drawn according to those given in *Providing Ground* by N. O. Hines (Univ. of Washington Press, Seattle, 1962), p. 167.

2. Morphological studies and radiochemical analysis of the fallout

We of Kyoto group, organized of about 25 workers of different fields, immediately commenced studies on all aspects of the accident. The research results were compiled 8 months later and published in a form of monograph from Institute for Chemical Research, Kyoto University in November 1954 [2]. In this chapter are given only some short accounts on the fallout, radioactive fine particles, fallen on the fishing boat and collected by us after the crew came back to their home harbor.

The fishermen, fishing tools, and all others on the deck were covered by the fallout of fine particles, so-called "Bikini Ash", which appear like white sands rather than ash and black spots were seen on their surfaces. The mean diameter of size of most particles ranges from 100 to 400 μm , with 2.4 apparent density, although there are found a few particles with a mean diameter less than 100 μm or larger than 400 μm . The ratio of the minimum diameter to the maximum diameter ranges from 1.0 to 0.3, averaging 0.74; the particles are mostly formed in irregular shape [3].

A photomicrograph of particles of the fallout is shown in Fig. 2. A radioautograph of the glove of a fisherman contaminated by the active particles is shown in Fig. 3 [4]. These pictures were taken immediately after the ash was collected in March 1954.

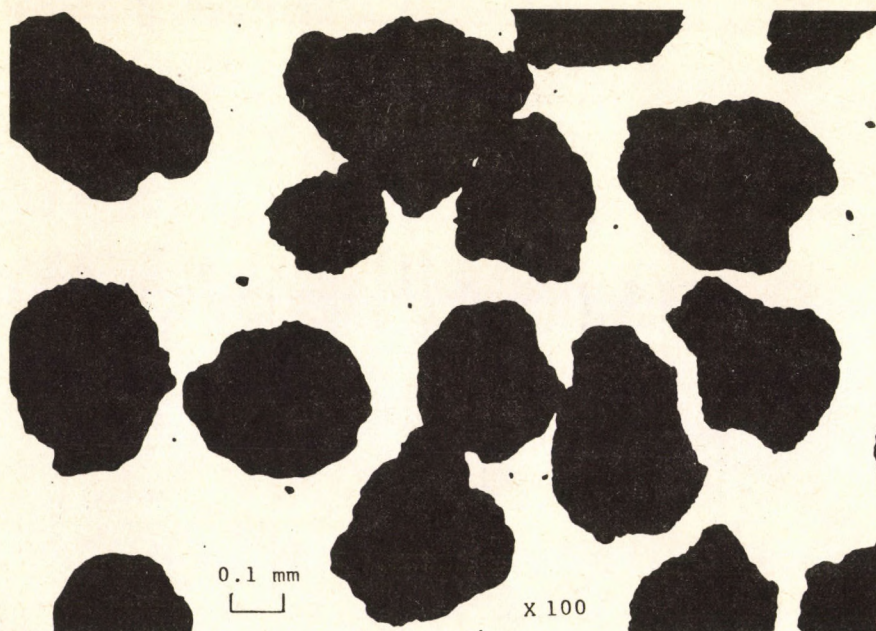


Fig. 2. Photomicrograph of the "Bikini Ash". Courtesy of E. Suito.



Fig. 3. Radioautograph of the contaminated fisherman's glove. Courtesy of H. Akagi.

By an electron microscope Suito, Takeyama, and Uyeda [5] found that the fine particles are aggregates of unit white granules of cubic or spindle shape of $0.1 \sim 3\mu\text{m}$ in size. Using the electron micro-diffraction and X-ray diffraction techniques they revealed that these granules are calcite, while the coral reef in the Southern Pacific was found to be aragonite. This means that a huge amount of coral reef was blown away and by the violent heat the CaCO_3 in aragonite form was first decomposed to CaO (decomposition temperature, ca 900°C), and then the CaO evaporated (boiling temperature, 2850°C) to the atomic state, and finally the CaO and Ca were crystallized to CaCO_3 in the form of calcite with H_2O and CO_2 in the air. This crystallographic finding may be compatible with the fact that the Bravo test explosion was a surface shot above the coral reef.

The Bikini Ash was analyzed radiochemically by applying the ion-exchange technique and paper chromatography. The physical assignment of separated nuclides was performed by determining β -ray and γ -ray energies by the absorption method and, if possible, their half-lives by means of end-window type G-M counters and scintillation detectors with liquid phosphorus available at that time. The hard work to analyse the dusts radiochemically was continued for several months by workers in Tokyo, Shizuoka, and Kyoto independently [1,2]. By their laborious work the following radioactive nuclides were identified: ^{32}P , ^{35}S , ^{45}Ca , $^{89,90}\text{Sr}$, $^{90,91}\text{Y}$, ^{95}Zr , ^{95}Nb , ^{103}Ru , $^{103\text{m}}\text{Rh}$, ^{106}Ru , ^{106}Rh , ^{129}Te , ^{131}I , ^{140}Ba , ^{140}La , ^{144}Ce , ^{144}Pr , ^{147}Nd , ^{147}Pm , and ^{156}Eu . The observation of α tracks in emulsion revealed the minute existence of ^{239}Pu [6]. To our great surprise, considerable amount of ^{237}U was found (Figs. 4-6) [7].

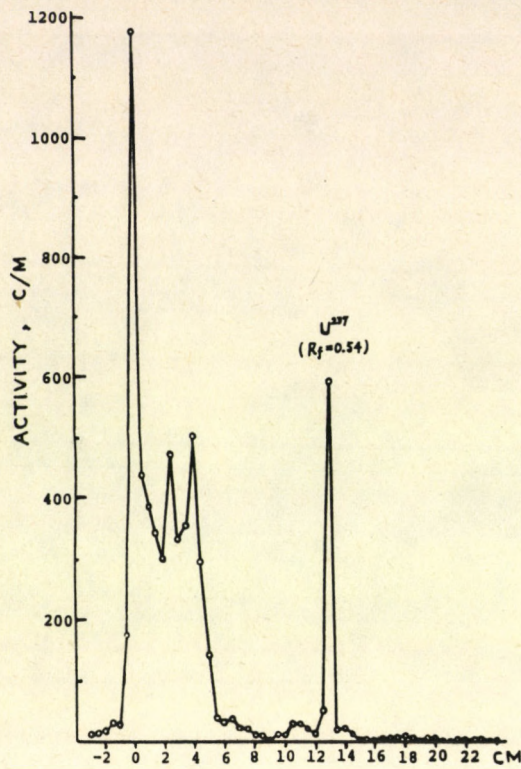


Fig. 4. Elution curve of paperchromatograph of ^{237}U . One drop of the concentrated sample solution prepared from the ash was spotted on a filter-paper strip and developed by HCl-butanol solution for 16 h at room temperature. The β -rays from the strip were measured by an end-window G-M counter through a slit of 5 mm in a lead sheet [7].

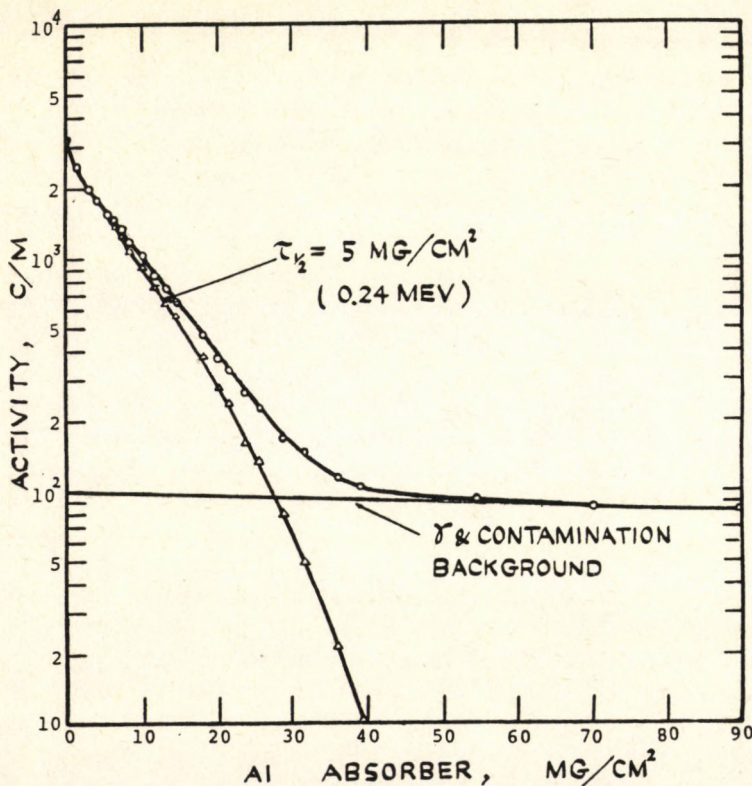


Fig. 5. Aluminum absorption curve of β -rays from ^{237}U . o: observed points. Δ : γ -ray background subtracted [7].

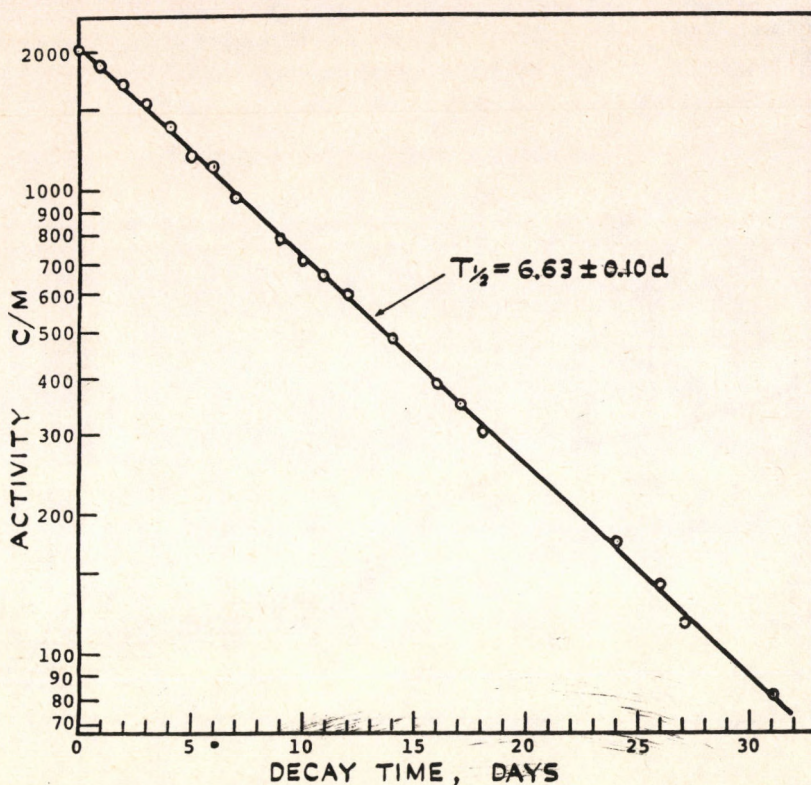


Fig. 6. Decay curve of ^{237}U [7].

Even in rain-water at Kyoto on May 16, 1954 the presence of some fission products, ^{89}Sr , ^{140}Ba , ^{95}Nb , ^{95}Zr , and ^{237}U were ascertained: ^{95}Zr was contained as $5.7 \times 10^{-2} \mu\text{Ci} \pm 20\%$ per liter. From an unexpected presence of ^{237}U in the Bikini Ash we could at once know that the nuclear explosion test at Bikini Atoll on March 1, 1954 might be the F-F-F bomb having bulk of natural or depleted uranium. The discovered ^{237}U can be produced by $^{238}\text{U}(n, 2n)^{237}\text{U}$ reaction.

3. Radioactivity of the "Bikini Ash" still remains 31 years later

Many studies, experimental and theoretical, of the decay rate of the gross fission products of ^{235}U and ^{239}Pu have so far been published [8]. The decay rate of the Bikini Ash was traced for various periods after the nuclear explosion [7,9-12]. These studies showed its decay behavior to be very complicated, since the ash contained not only many fission products but also other nuclides produced by the F-F-F bomb explosion above the coral reef. It may be interesting to find radioactive nuclides in the ash, if still remain more than three decades later, and measure its intensity.

Since we still have a small amount of the Bikini Ash and some long-life nuclides would be expected to be surviving in the ash, which could not be found in the period immediately after the accident, we have tried to search for such nuclides.

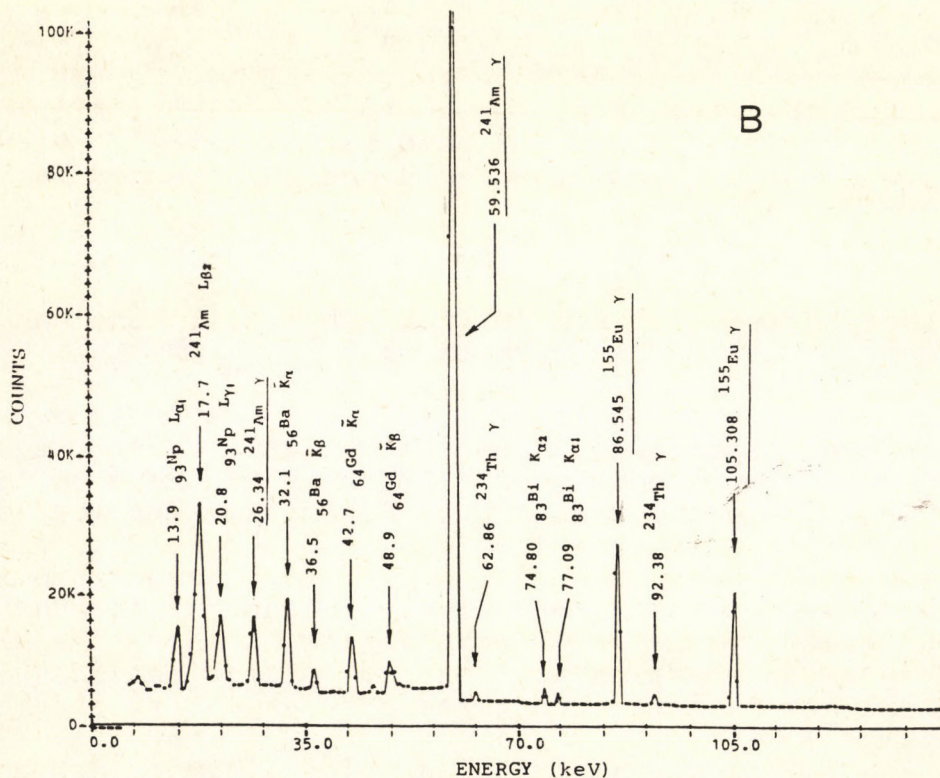
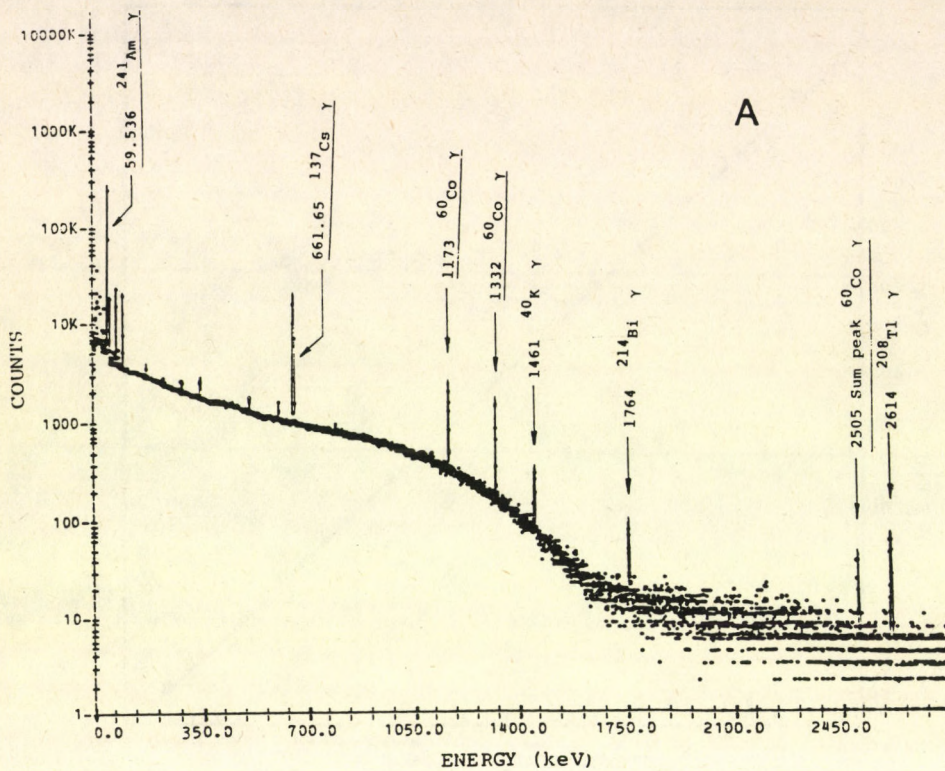


Fig. 7. Photon spectrum of the fallout produced by Bravo test explosion (F-F-F bomb) at Bikini Atoll on March 1, 1954. Measured with a high-purity Ge detector (52.0 mm \varnothing \times 48.1 mm length) for 50.65 h (February 23-25, 1985). Sample: 71.3 mg of Bikini Ash. Energy range: (A) 0-2700 keV, (B) 0-140 keV.

We did not dare to grind the ash into finer powder or dissolve into acid solution, as it was hoped to preserve it in the original state for the future. We observed γ - and X-rays from the original ash by the use of a high-purity Ge detector, EG&G ORTEC GMX H_p Ge photon detector of 52.0 mm \emptyset \times 48.1 mm length with energy resolution of 1.8 keV FWHM and efficiency of 22.3% relative to 76 mm \emptyset \times 76 mm NaI(Tl) crystal at 1332 keV, and the resolution is 0.540 keV FWHM at 5.9 keV. The total amount of the ash used in the measurement was 71.3 mg. The ash, spread in uniform circular layer of about 10 mm \emptyset on the flat bottom of a thin glass vial, was placed 2 mm above the detector surface.

The photon spectrum obtained by measurement for 50.65 h (February 23-25, 1985) is shown in Figs. 7-A and -B. There are evident γ -ray peaks of ^{241}Am , ^{155}Eu , ^{137}Cs , and ^{60}Co . In the region lower than the 59.5-keV γ -ray peak of ^{241}Am are also observed X-ray peaks accompanying the decay of these four nuclides. It is noted that all of these nuclides were not found by radiochemical analysis 31 years ago.

4. Results and discussion

Employing γ -ray standard sources with known intensities, ^{152}Eu , ^{137}Cs , ^{60}Co , and ^{241}Am , the absolute intensities of the observed nuclides could be easily estimated by taking into account the geometrical conditions of the measurement. The estimated intensities of the four nuclides per g of the ash are given in Table I.

Table I. Measured activities of the four nuclides that remain in the Bikini Ash 31 years later.

Nuclide	Half-life	Activity, nCi per g of the ash
^{241}Am	433 y	$7.88 \pm 5 \%$
^{137}Cs	30.17 y	$1.85 \pm 10 \%$
^{155}Eu	4.96 y	$1.21 \pm 15 \%$
^{60}Co	5.27 y	$0.60 \pm 30 \%$

The probable errors roughly estimated are due to those in the estimation of peak areas and uncertainties in measurement geometrical factors. These remaining γ -emitting nuclides have considerably longer life-times as compared with usual fission products which were abundant during several months after the collection of the ash but had been decayed out.

Two nuclides, ^{155}Eu and ^{137}Cs , found in the ash are descendants of fission products of ^{239}Pu and ^{238}U produced at the time of the explosion of the F-F-F bomb. The 5.27-y ^{60}Co , which still

remains after nearly 6 half-lives might be produced by some nuclear reactions with cobalt and nickel in the constituents of the bomb and in the surroundings.

It is more interesting to find considerable amount of ^{241}Am being contained in the ash. This transuranium nuclide has been known to exist in surface soils all over the world owing to the global fallout from the nuclear explosion tests after World War II. The specific activity of ^{241}Am per g of the ash found by the present work is higher than that per g of the surface soils or marine sediments in Japan by an order of 6 [13-15]. It is also noted that $^{240}\text{Pu}/^{239}\text{Pu}$ and $^{238}\text{Pu}/^{239,240}\text{Pu}$ ratios in the soil collected from Bikini Atoll have recently been measured by Komura, Sakanoue, and Yamamoto to be 0.34 ± 0.05 and 0.004 , respectively [16]. The former value is higher than that in the global fallout almost by a factor of 2, while the latter is an order of magnitude lower than that in the global fallout. For the ash sample used in the present work measurements of these ratios are hoped.

The remarkable amount of ^{241}Am in the ash partly came from ^{241}Pu , 14.3-y precursor, initially contained to some extent in the core plutonium of the bomb [17]. The other part might be produced by multiple sequential neutron capture starting with ^{238}U under tremendously large production of neutrons at the explosion of the F-F-F bomb of the Bravo project. The quantitative estimation of ^{241}Pu and the still remaining ^{241}Am in the ash is impossible, since the power of the reactor that produced the plutonium used as a core of the bomb and the time elapsed since its production, i.e. the time for ^{241}Am to grow from ^{241}Pu , and, in addition, the amounts of the core plutonium, fusion materials, and ^{238}U used in the bomb and the features of its explosion are completely unknown.

Since the energy of the main γ radiation from ^{241}Am is not so high, 59.536 keV, the external exposure to γ rays from it seems to be not so serious for the inhabitants of the coral-reef islands in Bikini area attacked by the Bravo fallout 31 years ago. But, possible inhalation of fine dusts from the surface soils containing ^{241}Am and plutonium isotopes may cause lung cancer, because these nuclides are α -ray emitters and surely highly toxic. From our data it can be concluded that more than 30 years later the surface soils of Bikini, Rongelap, and Rongerik Atolls are still active and harmful for inhabitants.

The author thanks Dr. Y. Isozumi and Mr. T. Sago for their cooperation in measurements. Valuable comments from Dr. J. A. Auxier and Dr. S. Okano are also gratefully acknowledged.

References

- [1] Research in the Effects and Influences of the Nuclear Bomb Test Explosion, Vols. I & II, ed. Japan Science Council (Japan Society for the Promotion of Sciences, Tokyo, 1956).
- [2] The Radioactive Dust from the Nuclear Detonation, Suppl. Issue, Bull. Inst. Chem. Res., Kyoto Univ., November 1954.
- [3] T. Kikuchi, G. Wakisaka, H. Akagi, and H. Goto, Paper II in ref. [2].

- [4] T. Kikuchi, H. Akagi, H. Goto, and G. Wakisaka, Paper V in ref. [2].
- [5] E. Suito, K. Takiyama, and N. Uyeda, Paper IV in ref. [2].
- [6] K. Kimura *et al.*, Vol. I, ref. [1], pp. 497-519.
- [7] M. Ishibashi, T. Shigematsu, T. Ishida, S. Okada, T. Nishi, H. Takahashi, C. Matsumoto, S. Shimizu, T. Hyodo, F. Hirayama, and S. Okamoto, Paper VII in ref. [2].
- [8] R. C. Bolles and N. E. Ballou, Nucl. Sci. and Eng., 5, 156 (1959); other references are given therein.
- [9] K. Kimura *et al.*, Japan Analyst, 4, 335 (1954).
- [10] T. Shiokawa, T. Ozaki, T. Kambara, M. Yagi, and Y. Matsuoka, Japan Analyst, 4, 349 (1954).
- [11] F. Yamazaki and H. Kakei, Kagaku, 24, 295 (1954).
- [12] S. Shimizu and T. Hyodo, Vol. I, ref. [1], pp.471-474.
- [13] M. Yamamoto, S. Yamamori, K. Komura, and M. Sakanoue, Journ. Rad. Res., 21, 204 (1980).
- [14] M. Yamamoto, K. Komura, and M. Sakanoue, Journ. Rad. Res., 24, 237 (1983).
- [15] S. Igarashi, M. Yoshida, T. Kitagawa, and M. Sakanoue, Health Phys., 46, 455 (1984).
- [16] K. Komura, M. Sakanoue, and M. Yamamoto, Health Phys., 46, 1213 (1984).
- [17] R. G. Nisle and I. E. Stepan, Nucl. Sci. and Eng., 39, 257 (1970).

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete
A kiadásért és szerkesztésért felelős
Dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója
Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában

ATOMKI REPORT

HU ISSN 0231-3693

A/5 (1986)

ON THE DEFINITION OF NUCLEAR SURFACE THICKNESS

I. Angeli and T. Tari



Institute of Nuclear Research of the
Hungarian Academy of Sciences
Debrecen, P.O. Box 51, H-4001, Hungary

ATOMKI Report A/5 (1986)

On the Definition of Nuclear Surface Thickness

I. Angeli and T. Tari

Institute of Experimental Physics, Kossuth University,
H-4001 Debrecen, Pf. 105, Hungary

Abstract. It is shown that - from the empirical point of view - a definition for the nuclear surface thickness can be given that is less arbitrary than that used generally. For a two-parameter Fermi distribution this definition leads to a surface thickness $t = 2\pi a$, corresponding to a density decrease from 96 % to 4 %.

1. INTRODUCTION

Low-energy electron scattering experiments determine only one quantity of the nuclear charge distribution, the so-called RMS radius, i.e. the square root of the second moment of the charge distribution. It is model independent, and retained its importance even now when more detailed information on the charge distribution is available. In order to comply with our need for illustrative pictures, a radius R_U has been defined: this is the radius of the "equivalent" uniform distribution (the simplest one-parameter model) that has the same value for its second moment as the measured one. They are connected by the well-known formula

$$\langle r^2 \rangle_{\text{Exp}} = \langle r^2 \rangle_U = \frac{3}{5} R_U^2. \quad (1)$$

Further on, the quantity

$$R_n = \left(\frac{n+3}{3} \langle r^n \rangle_{\text{Exp}} \right)^{1/n} \quad (2)$$

will also be used; it can be regarded as a generalisation of R_U [1].

High-energy electron scattering and/or independent transitions in muonic atoms, especially if evaluated together, yield more information on the charge distribution [2,3]. This is represented either by a model function with two or three adjustable parameters, or by a numerical density function derived by some sort of model independent analysis of the experimental data [2-5]. Consequently, not only the second but higher moments can also be extracted from the experiment [4-9]. This means, in turn, that - in addition to an equivalent radius- an equivalent surface thickness parameter can also be introduced.

In this paper a natural extension of the concept of empirically equivalent distributions to two-parametric model functions will be shown. The application of this concept to the trapezoidal and to the two-parameter Fermi (2pF) distributions leads to unusual surface thickness. (The parametrization of model functions was discussed in the pioneering work of Hahn et al. [10]; more detailed formal treatments of the radial and surface moments are given in refs. [11] and [12].)

2. DETERMINATION OF THE PARAMETERS OF A TRAPEZOIDAL DISTRIBUTION FROM EXPERIMENTAL MOMENTS

It is reasonable to call a model distribution $\rho_M(r; p_1, p_2, \dots)$ empirically equivalent to the actual charge distribution, if

$$\langle r^2 \rangle_{\text{Exp}} = \langle r^2 \rangle_M, \quad \langle r^4 \rangle_{\text{Exp}} = \langle r^4 \rangle_M, \quad \dots;$$

here $p_1, p_2 \dots$ are the parameters of the model function. The simplest two-parametric density distribution, the trapezoidal distribution is described by

$$\rho_T(r; c_T, t) = \begin{cases} \rho_{T,0} & r \leq r_1 \\ \rho_{T,0} (r_2 - r) / (r_2 - r_1) & r_1 = r \leq r_2 \\ 0 & r_2 \leq r \end{cases}$$

Now we can define the radius parameter

$$c_T = (r_1 + r_2)/2 \quad (4a)$$

and the surface thickness

$$t = r_2 - r_1 \quad (4b)$$

of this simple distribution as equivalent radius and surface thickness of the actual distribution, if the second and fourth moments of the two distributions are equal. A simple calculation yields for the trapezoidal distribution:

$$\langle r^2 \rangle_T = \frac{3}{5} c_T^2 \frac{(1 + \frac{10}{3} \tau^2 + \tau^4)}{(1 + \tau^2)} \approx \frac{3}{5} c_T^2 (1 + \frac{7}{3} \tau^2 - \frac{4}{3} \tau^4 + \dots) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \langle r^4 \rangle_T &= \frac{3}{7} c_T^4 \frac{(1 + 7\tau^2 + 7\tau^4 + \tau^6)}{(1 + \tau^2)} \approx \\ &\approx \frac{3}{7} c_T^4 (1 + 6\tau^2 + \tau^4 + \dots), \end{aligned} \quad (6)$$

where $\tau = \frac{t}{2c_T}$.

Putting these equal to the respective experimental quantities, and neglecting fourth powers of τ , we have

$$c_T^2 \approx \frac{1}{2} (9R_2^2 - 7R_4^2), \text{ or} \quad (7a)$$

$$c_T \approx \frac{1}{2} (9R_2 - 7R_4). \quad (7b)$$

From (5) and (6): $\tau^2 \approx \frac{11}{31} \left(\frac{R_4^2 + \frac{3}{8} R_2^2}{\frac{11}{8} c_T^2} - 1 \right)$ or

$$\tau^2 \approx \frac{3}{7} (R_2^2 / c_T^2 - 1) \quad (8a, b)$$

3. CONNECTION BETWEEN THE PARAMETERS OF EQUIVALENT TRAPEZOIDAL AND 2pF DISTRIBUTIONS

It will be interesting to see these moments for the two-parameter Fermi distribution

$$\varrho_F(r; c_F, a) = \varrho_{F,0} \left\{ 1 + \exp \left[(r - c_F)/a \right] \right\}^{-1}$$

Instead of the diffusivity parameter \underline{a} , a surface thickness \underline{s} is often used: this is the interval, where the density falls from 90 % of the maximum value to 10 %; note that in this choice no physical criterion but the radix of our present numerical system (i.e. the biological fact that we have ten fingers) is the determining factor. For the calculation of the moments, the expression for the Fermi-integral was taken from ref. [13]. Neglecting terms containing fourth powers of $\psi = \pi a/c_F$, we have

$$\langle r^2 \rangle_F \approx \frac{3}{5} c_F^2 (1 + \frac{7}{3} \psi^2 + \dots), \quad (9a)$$

$$\langle r^4 \rangle_F \approx \frac{3}{7} c_F^4 (1 + 6 \psi^2 + \dots). \quad (9b)$$

Comparing these with the respective moments of the trapezoidal distribution, it follows that the two distributions are empirically equivalent if

$$c_T = c_F \quad \text{and} \quad t = 2\pi a \approx 6.28 a,$$

which is significantly higher than that used generally, ($s \approx 4.4 a$). In the $2p_F$ distribution the surface thickness $t = 2\pi a$ corresponds to a density decrease from 96 % to 4 %.

In order to see the extent to which the above conclusion is valid, it is worth-while to write the moments of the two distributions in a more general form

$$\begin{aligned} R_{T,n}^n &= c_T^n \left\{ 1 + \left[\frac{(n+3)(n+2)}{3!} - 1 \right] \tau^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{(n+3)(n+2)(n+1)n}{5!} - \frac{(n+3)(n+2)}{3!} + 1 \right] \tau^4 + \dots \right\}, \\ R_{F,n}^n &= c_F^n \left\{ 1 + \left[\frac{(n+3)(n+2)}{3!} - 1 \right] \psi^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{7}{3} \frac{(n+3)(n+2)(n+1)n}{5!} - \frac{(n+3)(n+2)}{3!} + 1 \right] \psi^4 + \dots \right\}. \end{aligned}$$

It can be seen that τ^2 and ψ^2 have identical coefficients for any n . The coefficients of τ^4 differ from those of ψ^4 ; it is to be noted, however, that $\psi^4 \approx 0.17$ for light nuclei ($A = 27$), 0.03 for medium ($A=60$) and 0.006 for heavy ($A=200$) nuclei. Exponential terms arising from the Fermi

integral have been neglected, because they are less than ψ^6 by at least two orders of magnitude.

4. CONCLUSION AND REMARK

The conclusion is that - extending the concept of empirically equivalent distributions to those with two or more parameters - the two-parameter Fermi distribution can be well approximated by a trapezoidal one with radius parameters being equal $c_T = c_F$, while the surface thickness $t = 2\chi a$ is significantly higher than that used generally.

It should be remarked, however, that experiments do not yield higher ($n > 2$) integer moments directly: therefore, the above considerations should be regarded only as an example for defining a second equivalent parameter (e.g. surface thickness) on physical principles (empirical equivalence) rather than on a merely formal (biological) basis.

References

- [1] E.R. Hilf, and R. Wolf, Gross Properties of Nuclear Density Distributions, Proc. 4th Int. Conf. on Nuclei far from Stability, L.O. Skolen, Helsingør, Denmark, 7-11 June 1981, CERN 81-89, p. 805
- [2] C.W. de Jager, H. de Vries, and c. de Vries, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14(1974) 479
- [3] R. Engfer, H. Schneuwly, J.L. Vuilleumier, H.K. Walther, and A. Zehnder, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 14 (1974) 509
- [4] J. Friedrich, and F. Lenz, Nucl. Phys. A183 (1972) 523
- [5] R.C. Barrett, and D.F. Jackson, Nuclear Sizes and Structure, Clarendon Press, Oxford (1977) p. 154
- [6] N.G. Shevchenko, N.G. Afanas'ev, G.A. Savitski', V.M. Khvastunov, I.S. Gul'karov, A.S. Omelaenko, V.D. Kovalev, Yad. Fiz. 6 (1967) 1119
- [7] G.A. Savitski', N.G. Afanas'ev, I.S. Gul'karov, V.D. Kovalev, V.M. Khvastunov, N.G. Shevchenko, and I.F. Andreeva, Izv. Akad. Nauk. SSSR, Ser. Fiz. 33 (1969) 60

- [8] D.W.L. Sprung, and M. Vallieres, Nucl. Phys. A325 (1979) 125
- [9] H.D. Wohlfahrt, O. Schwentker, G. Fricke, H.G. Andresen, and E.B. Shera, Phys. Rev. C22 (1980) 264
- [10] B. Hahn , D.G. Ravenhall, and R. Hofstadter, Phys. Rev. 101 (1966) 1131
- [11] G. Süssmann, Z. Physik A274 (1975) 145
- [12] D. Berdichevsky, and U. Mosel, Nucl. Phys. A388 (1982) 205
- [13] L.R.B. Elton, Nuclear Sizes, Oxford University Press, (1961)

Referee: L. Végh

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete
A kiadásért és szerkesztésért felelős
Dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója
Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában

ATOMKI REPORT

B/4 (1986)

ELASTIC SCATTERING OF ELECTRONS BY NOBLE GASES:
THE PRESENT STATE OF THE EXPERIMENTS AND THEORY

E. Szmola and J. Herbák



Institute of Nuclear Research of the
Hungarian Academy of Sciences
Debrecen, P.O. Box 51, H-4001, Hungary

ELASTIC SCATTERING OF ELECTRONS BY NOBLE GASES:
THE PRESENT STATE OF THE EXPERIMENTS AND THEORY

E. SZMOLA* and J. HERBÁK**

Institute of Nuclear Research of the Hungarian
Academy of Sciences, Debrecen, Hungary

A survey of the experiments and theory in elastic scattering of electrons by noble gases is given. A particular emphasis is laid on the presentation of the experimental techniques and the different types of the theoretical approximations. References of the measured and calculated cross sections of elastically scattered electrons are tabled in the intermediate and high energy range ($E > 50$ eV).

INTRODUCTION

The present state of the experiments and theory in elastic scattering of electrons by noble gases is a subject too large to cover in a short review.

Many comprehensive reviews of this field are available (HAS-64; REA-83; JAN-75a; BRO-75; KUY-68; WAG-84).

We have studied the elastic scattering of electrons in our institute for He, Ne, Ar in the impact energy region (HER-84) with an electron spectrometer which has been constructed for the study of atomic collision processes (KOV-84a,b; VAR-84). That is why we need a survey on this subject to have a possibility for comparisons from our point of view.

* Permanent address: Department of Physics, Technical University for Heavy Industry Miskolc, Hungary

** Permanent address: Medicor Works, Debrecen, Hungary

Another reason for us to make up the present work is, that the development on this field is very quick, almost every year we have new theoretical and experimental results giving newer and newer respects to the interpretation of data published previously. In this review our aim is to concentrate on the great amount of papers published on the elastic scattering of electrons in the past few years.

In the past decade a kind of renaissance can be observed in the field of atomic collisions with respect to the study of elastic and total scattering of electrons both experimentally and theoretically. Experimentally most of the earlier data were considered to be inaccurate and they were available only in a limited energy and angular range so the experimental results themselves are not only of interest but they serve to elucidate the various aspects of theoretical studies of electron scattering phenomena and at the same time they serve as a calibration standard for electron spectrometers.

The basic concept in the elastic scattering of electrons by atoms is the differential cross section. When these cross sections (double differential cross sections, DDCS) are measured as a function of the scattering angle, and the electron impact energy, valuable information can be obtained about the actual form of the interaction between the projectile electron and the target, and also about the atomic structure.

The cross sections σ for particular scattering processes, defined in the terms of the effective scattering area in square centimeters per atom, are derived in the following equation:

$$I_s = I_0 \sigma n \ell \quad (i)$$

where I_s is the scattered electron current, I_0 is the incident electron current, n is the number of atoms per cubic centimeter and ℓ is the path length for scattering in centimeters (KUY-68). Equation (i) is valid when only single collisions occur ($\sigma n \ell \ll 1$). The product $\sigma n \ell$ is just the function of that area of the incident beam out of which electrons are scattered.

If the scattered electrons are measured only in the specified energy range dE , or over a specified solid angle $d\Omega$ at a particular angle θ or both, then a cross-sectional differential must be defined in energy and/or angle.

So the DDCS is

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{I_s}{I_0 n \ell dE d\Omega} \quad (ii)$$

Several interesting effects occur at the cross section at intermediate energies (100-500 eV) and at relatively small angles ($\theta < 30^\circ$), for example

EXCHANGE: Because the electrons are fermions and they should obey the Pauli exclusion principle, the exchange effect occur between the incident and target electrons

POLARIZATION: At small angles long range interactions dominate, this phenomenon is connected with the charge cloud polarization of the atom by incident electron.

ABSORPTION: Due to the excitation and polarization of the target incident electrons are removed from the elastic channel.

The experimental study of these effects is essential for testing theoretical models. [See Ref. (JAN-75a) for a very excellent review on this subject].

In the present paper first we try to give a short review on the experimental techniques in Chapter I. In Chapter II some of the theoretical methods are described. In Chapter III the tabulated references concerning the elastic scattering are considered. Space limitations preclude a complete bibliography, a more complete listing can be acquired in the references cited.

I. EXPERIMENTAL TECHNIQUES

Many comprehensive reviews (MAS-52; MAS-56; KOL-58; FIT-62; DAN-64; HAS-64; KLE-65; KUY-68) are available on the equipments for the study of electron scattering. In the present review we would like to show only some of the typical arrangements.

It is assumed that the electron beam with the required energy, current, angular collimation and energy spread is available. The production of the electron beams and the related information in electron optics are discussed in considerable details elsewhere (PIE-54; SPA-48; COS-46; KLE-53; SIM-63a,b,-64; KUY-67; AVI-82; PRO-82; ERD-82). There are many excellent papers concerning the atomic beam sources (gas targets) as well. See references (BRI-81; SIL-59; OLA-69,70; ANG-72; LUC-72; REG-80). In the electron-atom collision measurements generally the "crossed-beam" ("crossed electron and modulated atom beam technique") method (FIT-58) is used.

The scattering geometry is very important not only in the absolute but also in the relative measurements. (Solid angle, collision volume, spectrometer factors etc.)

There are typical arrangements in the Figures 1,2,3 (and for the low energy measurements in the Fig. 4.).

Two different views of the scattering geometry are shown in the Figures 5, 6.

It should be emphasised that the measurement of the absolute cross sections is much more difficult than that of the relative cross sections. A number of conditions are imposed upon the apparatus which must be met if the measured cross sections are reliable. In the Figure 7. the relevant and the crucial components are given schematically (BRO-69).

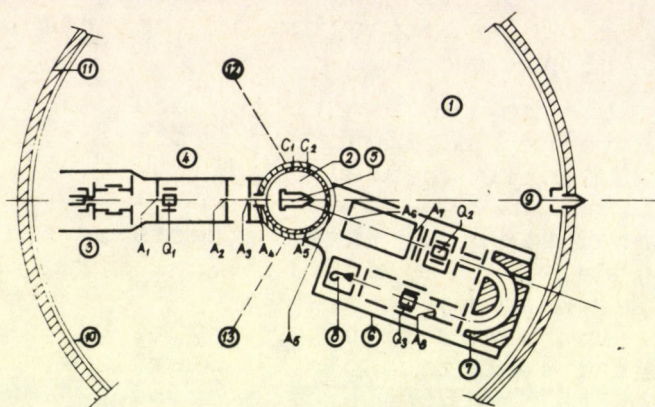


Fig. 1. An equipment for the study of electron scattering (horizontal cross section, schematically): 1 hv chamber; 2 collision chamber, consisting of static outer cylinder C₁ with entrance channel A₄ and rotatable inner cylinder C₂ with exit channels A₅ and A₅; 3 electron gun; 4 beam coll. system with pinholes A₁ and A₂, secondary electron stop A₃ and el. quadrupole Q₁; 5 Faraday cup 1 with suppressor ring; 6 rotatable analyzing system; 7 spherical analyser; 8 channeltron multiplier replaceable by a Faraday cup 3; 9 Faraday cup 2; A₆ and A₇ acceptance slit-pinhole pair; A₈ secondary electron stop; Q₂, Q₃ electric quadrupoles; 10 mu-metal shielding; 11 wall of high-vacuum chamber; 12 to gas inlet; 13 to membrane manometer (JAN-76).

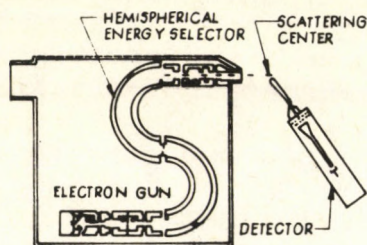


Fig. 2. Schematic diagram of an "electron-impact" spectrometer (REG-80; JEN-78).

The absolute differential cross section at angle θ is given by

$$\sigma(\theta) = \frac{I_s}{I_0 \cdot P \cdot n d\Omega \cdot \ell}$$

where I_s is the electron current, scattered into the solid angle $d\Omega$ at the scattering angle θ ; P is the pressure and n is the number of atoms per unit length scattering volume per unit pressure; $d\Omega$ is the solid angle subtended by S-2 about the rotation axis; ℓ is the length of the scattering volume and varies as $1/\sin\theta$; I_0 is the incident beam current density (BRO-75).

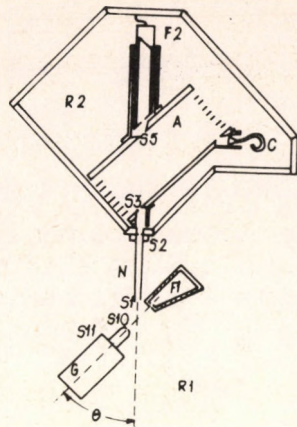


Fig. 3. Schematic diagram of a system for electron scattering studies containing a rotatable electron gun G (F1-Faraday cup, A- parallel plate spectrometer, C- channeltron multiplier); (DUB-75b).

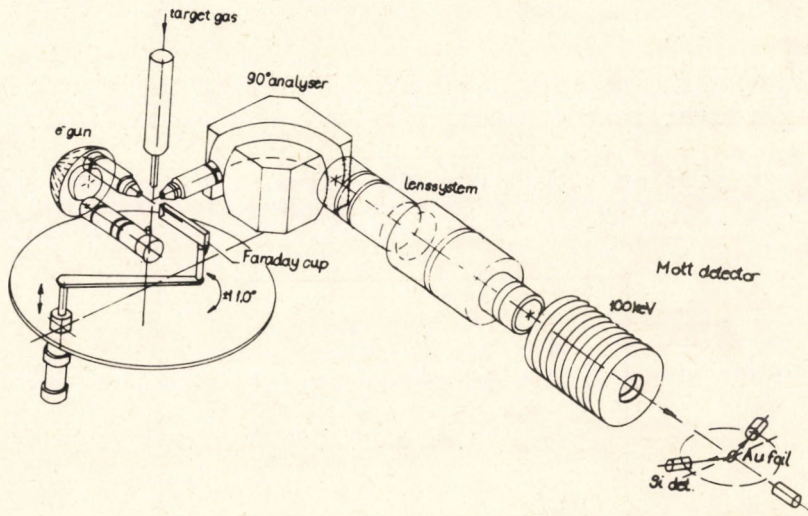


Fig. 4. Experimental arrangement for low energy electron scattering measurements (QIN-82).

Each of these variables should be measured accurately and absolutely, and each of them should be investigated in succession.

THE INCIDENT BEAM current density, I_0 takes the form of a narrow pencil of electrons the diameter of which is equal to that of the exit pinhole of the electron gun chamber.

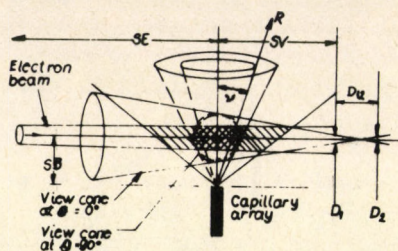


Fig. 5. Scattering geometry, viewed perpendicularly to both beam axes. The interaction of the target atomic beam, electron beam and the view cone is shown. Two equidensity contours are indicated for the atomic beam (BRI-81).

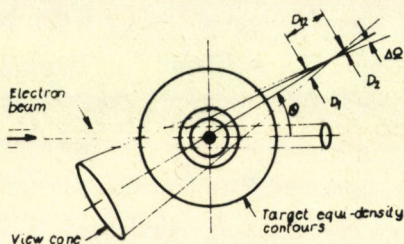


Fig. 6. Scattering geometry, viewed parallel to the target atomic beam axis and perpendicular to the electron beam and view cone axis. The detector view cone axis is at nominal scattering angle θ . The solid angle of detection ($\Delta\Omega$) at a point within the view cone is shown (BRI-81).

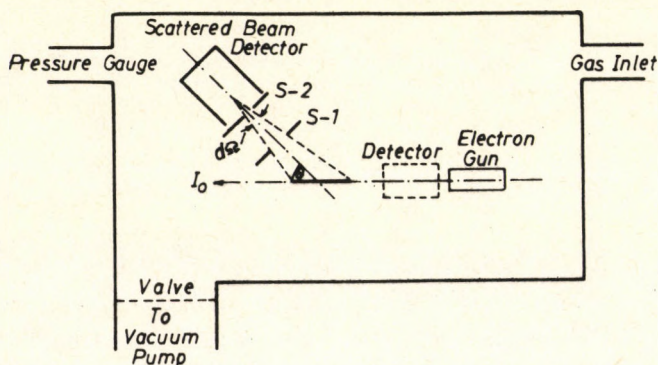


Fig. 7. A schematic arrangement of a spectrometer (BRO-75).

The detector is supposed to detect all the electrons entering the scattering chamber. Incident beam currents are normally about $1\mu\text{A}$, and a Faraday cylinder can be used to collect the charge. The cylinder must be properly aligned, and it should be floated below the ground to reject secondaries. The opening should be sufficiently large to accept all electrons in the incident beam, and the length should be sufficiently long to minimize the losses by backscattering. We have to note that I_0 may

not remain constant during a run, and a slowly varying function of the pressure, the angle, and the time may occur, hence the means must be provided to the periodical measurement of I_0 during an actual run.

THE SCATTERED CURRENT, I_s is typically less than 10^{-11} A. The scattered currents are also collected by a Faraday cylinder. To minimize the errors in the ratio I_s/I_0 this cylinder should have the same geometry as the primary beam cylinder. While in principle it would be possible to calibrate an electron counting system as a scattered beam detector, the practical difficulties may introduce large errors in the absolute cross sections.

THE PRESSURE, [typically in the range 0.1-30 mbar (10^{-4} - $3 \cdot 10^{-2}$ torr)] must be absolutely determined to provide a value for the density of target atoms in the scattering gas. The most suitable instrument in this range is the capacitance manometer, which permits the continuous and accurate monitoring of the pressure.

THE SLIT SYSTEM determines a wedge of the angle $d\Omega$ which intersects I_0 and determines the length of the scattering volume l . The solid angle subtended by S-2 about the rotation axis is determined from the area of the pinhole and the distance from the rotation axis.

THE ANGLE θ presents no difficulties as the rotating detector system (in some cases the electron gun is rotated) is arranged through a series of precision gears through vacuum feedthroughs. Angular errors can be minimized by measuring the scattered currents at $+\theta$ and $-\theta$, and taking the average result.

THE TOTAL FRACTIONAL ERROR will be the composite error due to the errors in pressure, beam currents, slit dimensions, temperature, background corrections, and random errors, and will be given by the expression

$$\delta_{\text{fract}}^2 = \delta_P^2 + \delta_I^2 + \delta_{\text{slit}}^2 + \delta_T^2 + \delta_{bg}^2 + \delta_{\text{rand}}^2 \quad (\text{BRO-75}).$$

We cannot consider here many of the other instrumental problems of the absolute and relative measurements of differential cross section of the elastically scattered electrons, e.g. the problems of the magnetic shielding, the surface and the edge effects in the low energy range and the system (and detector) efficiency etc.; they are different almost in every single measurement.

2. THEORETICAL METHODS

As it has been mentioned in the introduction, our aim is to give a short summary on the elastic scattering of electrons by noble gases, both experimentally and theoretically. The basis of our theoretical survey are Refs. (LAN-78, JOA-75). First we give some basic formulas (all quantities in atomic units).

Let us consider the non-relativistic (elastic) scattering of a spin-less particle by a local potential $U(r)$.

We look for the Schrodinger equation in the form

$$\psi \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} \quad (1)$$

where $f(\theta)$ is the scattering amplitude.

It can be seen, that the differential scattering cross section of the particle scattered in angle θ to solid angle $d\Omega$ is

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (2)$$

The scattering amplitude can be calculated by using different approximations, applying the methods of quantum mechanics.

2.1. The first order born approximation

In the case of

$$|U(r)| \ll \frac{\hbar v}{a} \quad (3)$$

where a is the range of $U(r)$, v is the velocity of the projectile, we can get the scattering amplitude in the form of

$$f(k, \theta, \rho) = -2\pi^2 \langle \phi_{k_2} | U(r) | \phi_{k_1} \rangle, \quad (4)$$

where ϕ_{k_1} and ϕ_{k_2} are the wave functions of incoming and scattered projectiles respectively.

Let us assume, that the scattering is elastic, $k=k_1=k_2$ (see Fig. 8.) the scattering amplitude is

$$f_{B1} = f(k, \theta, \rho) = \frac{1}{4\pi} \int \exp(iqr) U(r) dr \quad (5)$$

where $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$.

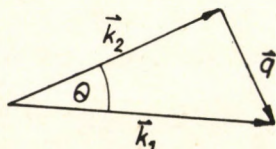


Fig. 8. The initial wave vector \vec{k}_1 , final wave vector \vec{k}_2 , and wave vector transfer \vec{q} .

In the first order of approximation for the cross section we get

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B_1} = |f_{B_1}|^2 \quad (6)$$

By applying the first order approximation for high energy electrons

$$d\sigma = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^2 q^4} \{Z - F(q)\}^2 d\Omega, \quad (7)$$

where Z is the atomic number.

2.2. The high order born approximation

Looking for the solution of the potential scattering's Lippmann-Schwinger equation (8) assumes that the zero order approximation is $\phi_{\vec{k}_1}^+(\vec{r})$ (the wave function of the incoming particle):

$$\Psi_{\vec{k}_1}^{(+)} = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{k}_1 \vec{r}) + \int G_0^+(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') \Psi_{\vec{k}_1}^+(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (8)$$

namely

$$\Psi_0(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_1}^+(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{k}_1 \vec{r}) \quad (9)$$

$$\Psi_1(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_1}^+(\vec{r}) + \int G_0^{(+)}(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') \phi_{\vec{k}_1}^+(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (10)$$

$$\Psi_n(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_1}^+(\vec{r}) + \int G_0^{(+)}(\vec{r}', \vec{r}) U(\vec{r}') \Psi_{n-1}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (11)$$

where the Green function $G_0^{(+)}(\vec{r}', \vec{r})$ is

$$G_0^{(+)}(\vec{r}', \vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|\vec{r}-\vec{r}'|)}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (12)$$

Using the (4) equation, the scattering amplitudes are the following:

$$f_{B_1} = -2\pi^2 \langle \phi_{\vec{k}_2}^+ | U | \phi_{\vec{k}_1}^+ \rangle \quad (13)$$

$$f_{B_2} = -2\pi^2 \langle \phi_{\vec{k}_2}^+ | U | \Psi_1 \rangle \quad (14)$$

$$f_{B_n} = -2\pi^2 \langle \phi_{\vec{k}_2}^+ | U | \Psi_{n-1} \rangle \quad (15)$$

Especially for the second order approximation the scattering amplitude is given by

$$f_{B_2} = f_{B_1}(k) + \left\{ \frac{A(k)}{h^2} + i \frac{B(h)}{h} \right\}, \quad (16)$$

where the real part and the imaginary part is connected with the polarization and the absorption effects, respectively.

2.3. The eikonal approximation

If

$$U \ll mv^2 \approx \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (17)$$

$$\text{and } |U| \geq \frac{\hbar v}{a}$$

(i.e. by the lower energy scattering) we cannot apply the Born approximation.

In this case we can approximate the solution of the scattering Lippmann-Schwinger equation in the form of

$$\psi_E(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp\{i\vec{k}\vec{r} - \frac{1}{k} \int_{-\infty}^z U(x,y,z') dz'\} \quad (18)$$

By the help of the wave function one can get the series of the scattering amplitudes. They are the Glauber (eikonal) series.

2.4. The optical model

The theoretical analysis of the elastic scattering of electrons by atoms at intermediate and high energies in the ab-initio optical model is particularly useful for the cases of complex atoms. It consists in the construction of a local, central, complex pseudopotential, derived from the first principles by using the properties of the Born and Glauber series.

The direct optical potential can be given in the form of

$$U_{\text{opt}}^d = U^{(1)} + U^{(2)}. \quad (19)$$

Here

$U^{(1)} = U_s = \langle 0 | U | 0 \rangle$ is the static potential which is real for short ranges and dominant at short distances, where it reduces to the Coulomb interaction ($-\frac{Z}{r}$) acting between the projectile and the target nucleus.

The second order part can be approximated by

$$U^{(2)} = U_{\text{pol.}} + i U_{\text{abs.}}, \quad (20)$$

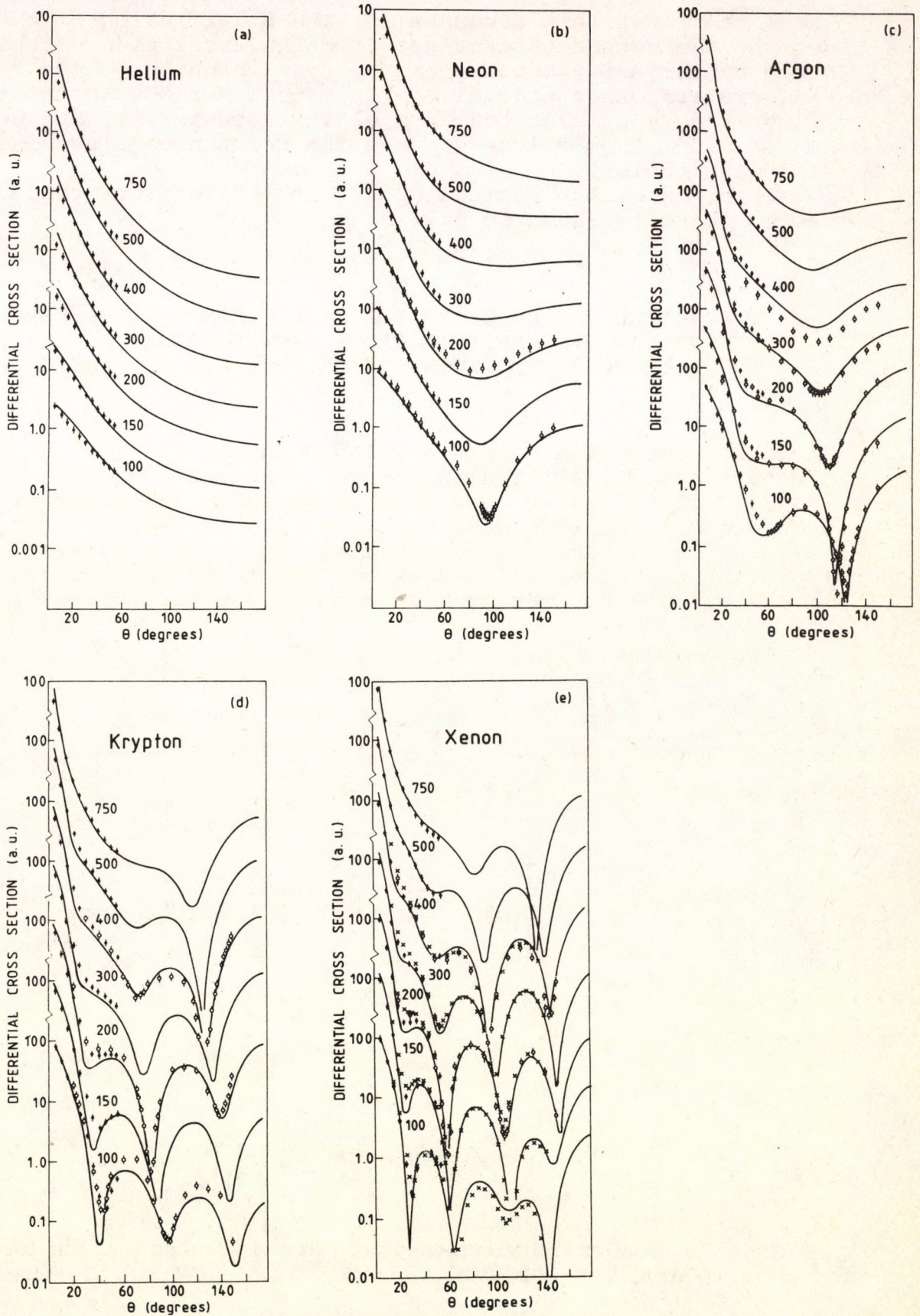


Fig. 9. Comparison of the optical model with differential cross section data • - (JAN-76a), ○ - (WIL-75a,b), x - (LEW-76a,b), - - theory (McC-77).

where the first term accounts for the polarization of the target and the second term arises from the absorption effects induced by unitarity because of the open channels.

There are other special approximation methods in the field of the theory of electron-atom elastic scattering, but we cannot consider them all here, (see the references cited in the following tables).

A comparison of the optical model with the differential cross section data is shown in Fig. 9.

3. TABULATED REVIEW OF ARTICLES REFERRING ON THE EXPERIMENTAL AND THEORETICAL CROSS SECTIONS FOR THE ELASTIC SCATTERING OF ELECTRONS BY He, Ne, Ar, Kr, and Xe

In this chapter the papers dealing with the elastic electron scattering and published in the past few years are given in the form of tables. The tables are given in the order of the atomic number of rare gases (He, Ne, Ar, Kr, Xe) and after every second table a figure follows showing a comparison between the experimental results and the theoretical calculations on the gas of the previous two tables. See Tables 1-10 and Figures 10-14.

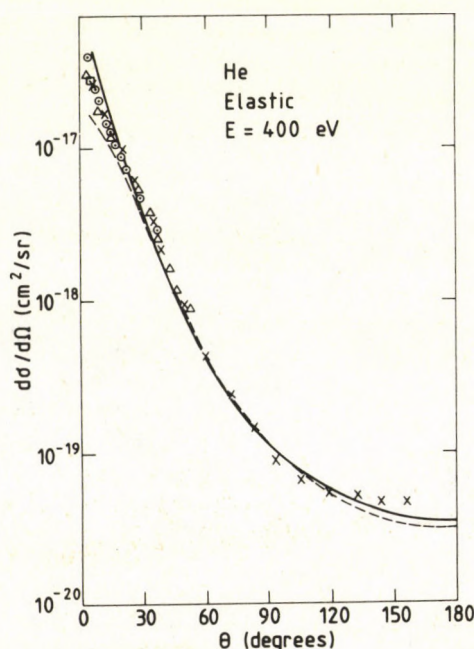


Fig. 10. Angular distribution of differential cross section for He target x - (SHY-80), \odot - (BRO-74b), - - (McC-77), Δ - (JAN-76), \square - (CHA-70).

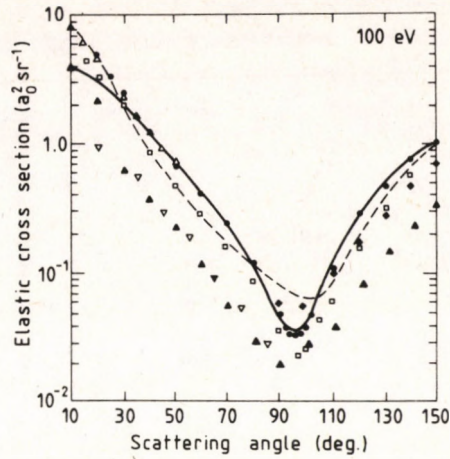


Fig. 11. Differential cross sections for the elastic scattering of electrons by Ne
 • - (WIL-75a), \square - (LEW-74b), - - rel. calc. (WAL-71), -- - opt. mod. (LEW-74b),
 ∇ - (PRE-72), \blacktriangle - (KUR-79), \blacklozenge - (GUP-75), \triangle - (JAN-76a).

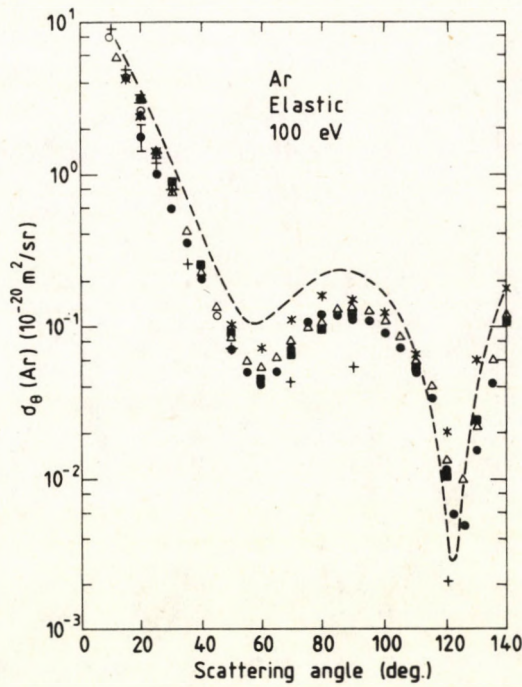


Fig. 12. Elastic differential scattering cross sections for Ar
 \blacksquare - (WIL-75b), \triangle - (DuB-76), \circ - (JAN-76a), * - (VUS-76) + - opt. mod. (JQA-77),
 --- - exch.+pol. (WAL-70), \bullet - (SRI-81)

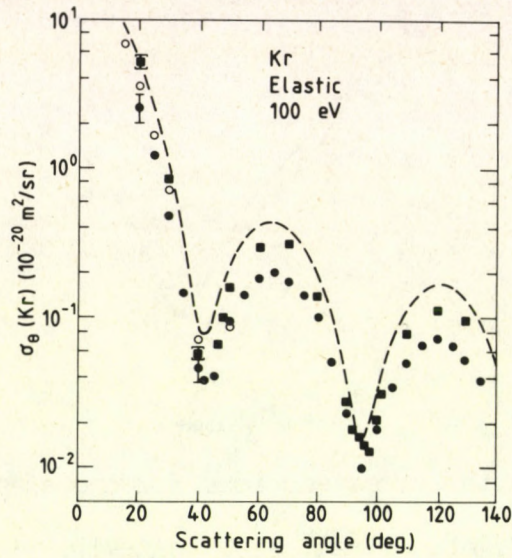


Fig. 13. Elastic differential scattering cross sections for Kr
 ■ - (WIL-75a), O - (JaN-76b), --- - exch. + pol. (WAL-70), • - (SRI-80).

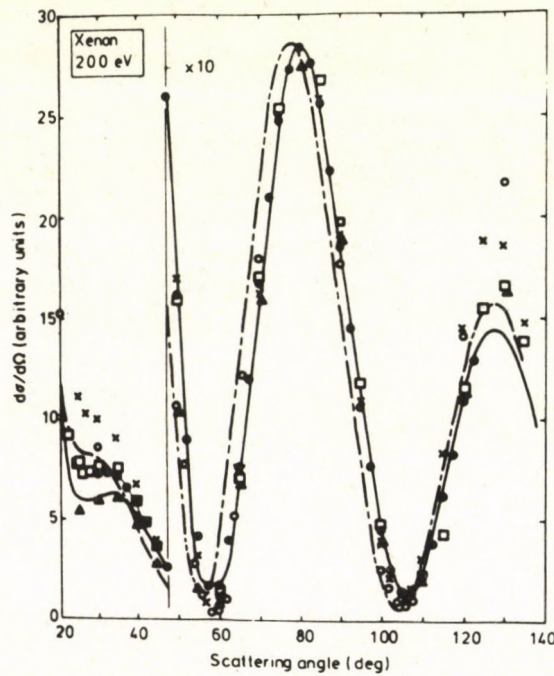


Fig. 14. Angular distribution of electrons elastically scattered from Xe;
 ◆ - theor. (KLE-80), - - (MEH-67), □ - (JOS-74), O - (WIL-75a),
 x - (BUC-78), -.- - theor. (FIN-70), ▲ - theor. (McC-77)

Table 1. Summary of the experimental work done on the elastic scattering of electrons by He

Angle (deg)	Energy (eV)	Comment	Reference
10-150	25-700	n	Hughes et.al. (HUG-32b)
20-150	5-1000	r	Mehr (MEH-67)
5-30	100-400	n	Vriens et.al. (VRI-68)
30-150	40-150	r	Schackert (SCH-68)
2-60	500	a	Bromberg (BRO-69a)
5	50-400	a	Chamberlain et.al. (CHA-70)
10-150	50-800	a	Crooks and Rudd (CRO-72a,b)
10-140	500	a	Oda et.al. (ODA-72)
10-150	25-500	n	Sethuraman et.al. (SET-72)
5-60	100-500	a	Jansen and De Heer (JAN-73)
20-90	1.5-300	n	McConkey and Preston (MCC-73)
3-135	100-1000	n	Jost et.al. (JOS-73)
2-110	200-700	a	Bromberg (BRO-74b)
30-150	100-500	n	Sethuraman et.al. (SET-74)
20-90	1.5-100	n	McConkey and Preston (MCC-75)
5-150	100-200	a	Kurepa and Vuskovic (KUR-75)
5-55	100-3000	a	Jansen et.al. (JAN-76a)
10-140	5-200	a	Register et.al. (REG-80)
96-156	2-400	n	Shyn (SHY-80)
1-10	20-100	a	Wagenaar (WAG-84)
50-130	500-3000	n	Herbak et.al. (HER-84)

r: relative measurement

a: absolute measurement

n: relative measurement made absolute by normalization to an absolute cross section (experimental or theoretical)

Table 2. Survey of recent theoretical works on the elastic scattering of electrons by He

Method	Comment	Reference
Glauber (eikonal) approxim.	P	Saha et.al. (SAH-73)
Glauber (eikonal) approxim.		Thomas and Chan (THO-73)
Second Born approximation	E,p	Bonham (BCN-71a,b)
Second Born approximation		Garibotti and Massaro (GAR-71)
Second Born approximation		Holt et.al. (HOL-71)
Second Born approximation	E	Buckley and Walters (BUC-74a)
Second Born approximation	E	Buckley (BUC-74b)
Second Born approximation	E	Dewangan and Walters (DEW-77)
Eikonal Born series	E,P,A	Byron and Joachain (BYR-73a,b)
Plane wave approximation	E,P	Khare and Shobha (KHA-71)
Phase shifts (partial waves)		
static potential	E,P	Winters et.al. (WIN-74)
static potential	R	Riley et.al. (RIL-75)
adiabatic polarization	E,P	Khare and Moiseiwitsch (KHA-65)
non-adiabatic	E,P	LaBahn and Callaway (LaB-69a,b)
non-adiabatic	P	Purcell et.al. (PUR-70)
non-adiabatic	P	Ganas et.al. (GAN-70)
Optical model - eikonal	P,A	Joachain and Mittleman (JOA-71)
Optical model - eikonal	E,P,A	Byron and Joachain (BYR-74a)
Optical model - ab initio	E,P,A	Byron and Joachain (BYR-74b)
Optical model	E,P,R	McCarthy et.al. (McC-77)
Optical model	A	Staszewsha et.al. (STA-84)
R-matrix calculation	P	Fon et.al. (FON-81a)
Matrix effective potential	E,P	Thirumalai et.al. (THI-82b)
Matrix effective potential		Truhlar and Onda (TRU-80)
Matrix effective potential		Onda and Truhlar (OND-80)
Matrix effective potential		Valone et.al. (VAL-81)
Rel. Hartree Fock	E,P,R	Kemper et.al. (KEM-84)

E: including exchange effects
P: including polarization effects
A: including absorption effects
R: including relativistic effects

Table 3. Summary of the experimental work done on the elastic scattering of electrons by Ne

Angle (deg)	Energy (eV)	Comment	Reference
10-120	29-830	r	Arnot (ARN-31)
20-155	50-150	r	Mohr and Nicoll (MOH-32)
10-150	10-800	r	Hughes and MacMillen (HUG-33)
20-155	5-1000	r	Mehr (MEH-67)
30-150	40-150	r	Schackert (SCH-68)
10-150	100-200	a	Kurepa et.al. (KUR-73)
20-90	1.5-100	n	McConkey and Preston (McC-73)
3-135	100-1000	n	Jost et.al. (JOS-73)
2-110	200-700	a	Bronberg (BRO-74b)
10-150	100-200	a	Kurepa et.al. (KUR-75)
10-150	100-500	n	Gupta and Rees (GUP-75)
15-140	100	n	Lewis et.al. (LEW-74b)
5-55	100-3000	a	Jansen et.al. (JAN-76a)
20-150	20-400	n	Williams and Crowe (WIL-75a)
2-150	20-800	a	DuBois and Rudd (DuB-76)
0-10	18-100	a	Wagenaar (WAG-84)
50-130	500-3000	n	Herbak et.al. (HER-84)

r: relative measurement

a: absolute measurement

n: relative measurement made absolute by normalization to an absolute cross section (experimental or theoretical)

Table 4. Survey of recent theoretical works on the elastic scattering of electrons by Ne

Method	Comment	Reference
Plane wave approximation	E,P	Khare and Shobha (KHA-74)
Phase shifts (partial wave)		
- static potential	R	Fink and Yates (FIN-70)
- static potential	E,R	Walker (WAL-71)
- static potential	R	Riley et.al. (RIL-75)
Optical model		
- semiphenomenological	E,P,A	Lewis et.al. (LEW-74b)
- ab initio	E,P,A	Byron and Joachain (BYR-74b)
Optical model	E,P,R	McCarthy et.al. (McC-77)
Optical model	A	Staszewsha et.al. (STA-84)
Second Born approximation	E	Dewangan and Walters (DEW-77)
R-matrix calculation	P	Fon and Berrington (FON-81b)
Matrix effective potential	E,P	Thirumalai and Trular (THI-82a)
Relativistic Hartree-Fock	E,P,R	Kemper et.al. (KEM-84)

E: including exchange effects

P: including polarization effects

A: including absorption effects

R: including relativistic effects

Table 5. Summary of the experimental work done on the elastic scattering of electrons by Ar

Angle (deg)	Energy (eV)	Comment	Reference
20-120	42-780	r	Arnot (ARN-31)
10-170	50-550	r	Hughes and McMiller (HUG-32)
30-155	30-150	r	Mohr and Nicole (MOH-32)
5-150	25-780	r	Webb (WEB-35)
20-155	5-1000	r	Mehr (MEH-67)
30-150	40-150	r	Schackert (SCH-68)
5-150	60-150	a	Vuskovic (VUS-72)
20-90	1.5-100	n	McConkey and Preston (McC-73)
3-135	100-1000	n	Jost et.al. (JOS-73)
20-140	15-200	n	Lewis et.al. (LEW-74a)
2-30	200-700	a	Bromberg (BRO-74b)
10-140	100-110	n	Gupta and Rees (GUP-74)
12-153	20-800	a	DuBois and Rudd (DuB-75b)
20-150	20-400	a	Williams and Willis (WIL-75b)
2-153	20-800	a	DuBois (DuB-75a)
5-150	60-150	a	Vuskovic and Kurepa (VUS-76)
5-55	100-3000	a	Jansen et.al. (JAN-76a)
2-150	20-800	a	DuBois and Rudd (DuB-76)
20-135	3-100	n	Srivastava et.al. (SRI-81)
40-110	25-50	n	Qing et.al. (QIN-82)
0-10	18-100	a	Wagenaar (WAG-84)
50-130	500-3000	n	Herbak et.al. (HER-84)

r: relative measurement

a: absolute measurement

n: relative measurement made absolute by normalization to an absolute cross section (experimental or theoretical)

Table 6. Survey of recent theoretical works on the elastic scattering of electrons by Ar

Method	Comment	Reference
Plane-wave approximation	E,P	Khare and Shobha (KHA-74)
Phase shifts (partial waves)		
- static potential	R	Fink and Yates (FIN-70)
- static potential	E,R	Walker (WAL-70,71)
- static potential	R	Riley et.al. (RIL-75)
- non adiab. polariz.	P	Berg et.al. (BER-71)
Optical model		
- semiphenomenological	E,P,A	Furness and McCarthy (FUR-73)
- semiphenomenological	E,P,A	Lewis et.al. (LEW-74a)
- ab initio	E,P,A	Joachain et.al. (JOA-75)
- ab initio	E,P,A	Joachain et.al. (JOA-77)
Optical model	E,P,R	McCarthy et.al. (McC-77)
Optical model	A	Staszewska et.al. (STA-84)
Effective local potential	E,R	Kemper et.al. (KEM-83)

E: including exchange effects

P: including polarization effects

A: including absorption effects

R: including relativistic effects

Table 7. Summary of the experimental work done on the elastic scattering of electrons by Kr

Angle (deg)	Energy (eV)	Comment	Reference
10-120	41-820	r	Arnot (ARN-31)
5-150	25-950	r	Webb (WEB-35)
20-155	5-1000	r	Mehr (MEH-67)
30-150	40-150	r	Schackert (SCH-68)
3-135	100-1000	n	Jost et.al. (JOS-73)
3-25	200-700	a	Bromberg (BRO-74b)
3-135	100-1000	n	Jost and Hermann (JOS-74)
15-140	30-200	n	Lewis et.al. (LEW-74b)
10-25	200-300	a	Vuskovic (VUS-74)
5-55	100-3000	a	Jansen and de Herr (JAN-76b)
20-150	20-400	a	Williams and Crowe (WIL-75a)
20-135	3-100	n	Srivastava et.al. (SRI-81)
40-110	25-50	n	Qing et.al. (QIN-82)
0-10	20-100	a	Wagenaar (WAG-84)

r: relative measurement

a: absolute measurement

n: relative measurement made absolute by normalization to an absolute cross section (experimental or theoretical)

Table 8. Survey of recent theoretical works on the elastic scattering of electrons by KR

Method	Comment	Reference
Phase shifts (partial waves)		
- static potential	R	Fink and Yates (FIN-70)
- static potential	R	Riley et.al. (RIL-75)
- non adiab. polar.	P	Berg et.al. (BER-71)
- non adiab. polar.	E,R	Walker (WAL-71)
Optical model		
- semiphenomenological	E,P,A	Lewis et.al. (LEW-74a)
Optical model	E,P,R	McCarthy et.al. (McC-77)
Effective local potential	E,R	Kemper et.al. (KEM-83)

E: including exchange effects

P: including polarization effects

A: including absorption effects

R: including relativistic effects

Table 9. Summary of the experimental works done on the elastic scattering of electrons by Xe

Angle (deg)	Energy (eV)	Comment	Reference
10-120	41-820	r	Arnot (ARN-31)
20-155	5-1000	r	Mehr (MEH-67)
30-150	40-150	r	Schackert (SCH-68)
3-135	100-1000	n	Jost et.al. (JOS-73)
3-135	100-1000	n	Jost and Hermann (JOS-74)
3-25	200-700	a	Bromberg (BRO-74b)
15-140	60	n	Lewis et.al. (LEW-74b)
5-55	100-3000	a	Jansen and de Heer (JAN-76b)
20-150	20-400	a	Williams and Crowe (WIL-75a)
15-140	50-400	r	Buckman et.al. (BUC-78)
30-120	2-300	r	Klewer et.al. (KLE-80)
0-10	20-100	a	Wagenaar (WAG-84)

r: relative measurement

a: absolute measurement

n: relative measurement made absolute by normalization to an absolute cross section (experimental or theoretical)

Table 10. Survey of recent theoretical works on the elastic scattering of electrons by Xe

Method	Comment	Reference
Phase shifts (partial waves)		
- static potential	R	Fink and Yates (FIN-70)
- static potential	R	Riley et.al. (RIL-75)
- non adiab. polarization	P	Berg et.al. (BER-71)
- non adiab. polarization	E,R	Walker (WAL-71)
Optical model		
- semiphenomenological	E,P,A	Lewis et.al. (LEW-74a)
- semiphenomenological	E,P,R	McCarthy et.al. (McC-77)
Relativistic Hartree-Fock	R,E	Awe et.al. (AWE-83)

E: including exchange effects
P: including polarization effects
A: including absorption effects
R: including relativistic effects

CONCLUSIONS

In this survey we want to give a review on the articles published in the past few years, on the elastic scattering of electrons by noble gases in high and intermediate energy region.

As we have seen there are many comprehensive experimental and theoretical works on this subject.

From the comparison of the results (experimental to experimental, theoretical to theoretical and experimental to theoretical) fairly agreeing and roughly disagreeing results have been equally observed.

Anyway, there is a "vacancy" in the experimental data for the differential cross sections of elastic electron scattering at relatively high electron impact energies in large scattering angles.

ACKNOWLEDGEMENTS

We wish to express our best thanks to the Department of Physics, Technical University for Heavy Industry, Miskolc (E. Szmola) and to the Medicor Works, Debrecen, (J. Herbák) resp., as these institutions have made it possible for us to work in ATOMKI Debrecen, even as a holder of a scholarship (E. Szmola), for our doctor's degree.

We are greatly indebted to Professor D. Berényi and Dr. Á. Kövér for their patience and understanding, for without their help, and their unerring and continuous work, this work would not have been possible.

We are utmost grateful to Dr. G. Hock for his enlightenment and discussions concerning the theoretical issues.

We would also like to thank the various investigators for communicating their results, first of all Dr. R. D. DuBois and Dr. R. H. J. Jansen whom we are the most grateful to, for sending us his Ph. D. thesis.

REFERENCES

- (ANG-72) G.C. Angel and R.A. Giles, J.Phys. B5, 80 (1972)
- (ARN-31) F.L. Arnot, Proc. Roy. Soc., A113, 615 (1931)
- (AVI-82) R. Avida, Rev. Sci. Instr. 53 /10/, 1577 (1982)
- (AWE-83) B. Awe, F. Kemper, F. Rosichy and R. Feder, J. Phys. B16, 603 (1983)
- (BER-71) R.A. Berg, J.E. Purcell and A.E. Sm Green, Phys. Rev. A3, 508 (1971)
- (BON-71a) R.A. Bonham, Phys. Rev. A3, 298 (1971)
- (BON-71b) R.A. Bonham, Phys. Rev. A3, 1958 (1971)
- (BRI-81) R.T. Brinkman and S. Trajmar, Rev. Sci, Instr. 14, 245 (1981)

- (BRO-69) J.P. Bronberg, J. Chem. Phys. 50, 3906 (1969)
 (BRO-74) J.P. Bromberg, J. Chem. Phys. 61, 963 (1974)
 (BRO-75) J.P. Bromberg, in "IX. ICPEAC Invited Lectures, p.18 (1975)
 (BUC-74a) B.D. Buckley and H.R.J. Walters, J. Phys. B7, 1380 (1974)
 (BUC-74b) B.D. Buckley, PhmD.Thesis, University of Manchester (1974)
 (BUC-78) S.J. Buckmann, P.J.O. Teubner and H. Ariola, Institute for Atomic Studies, The Flinders University of South Australia, Repoert FIAS-R-33 (1978)
 (BYR-73a) F.W. Byron and C.J. Joachain, Phys. Rev. A8, 1267 (1973)
 (BYR-73b) F.W. Byron and C.J. Joachain, Phys.Rev.A8, 3266 (1973)
 (BYR-74a) F.W. Byron and C.J. Joachain, Phys.Rev.A9, 2559 (1974)
 (BYR-74b) F.W. Byron and C.J. Joachain, Phys.Lett. 49A, 306 (1974)
 (CHA-70) G.E. Chamberlain, S.R. Mielczarek and C.E. Kuyatt, Phys. Rev. A2, 1905 (1970)
 (COS-46) V.E. Coslett, "Introduction to Electron Optics" Oxford Univ.Press, London and New York, (1976)
 (CRO-72a) G.B. Crooks and M.E. Rudd, Bull. Am.Phys.Soc. 17, 131 (1972)
 (CRO-72b) G.B. Crooks, Ph.D. Thesis, University of Nebraska, Lincoln (1972)
 (DEW-77) D.P. Dewangan and H.R.J. Walters, J.Phys. B10, 637 (1977)
 (DuB-75a) R.D. DuBois, PhmD. Thesis, University of Nebraska, (1975)
 (DuB-75b) R.D. DuBois and M.E. Rudd, J. Phys. B8, 1474 (1975)
 (DuB-76) R.D. DuBois and M.E. Rudd, J. Phys. B9, 2657 (1976)
 (ERD-82) P.W. Erdman and E.C. Zipf, Rev. Sci. Instr. 53, 225 (1982)
 (FIN-70) M. Fink and A.C. Yates, Atomic Data Tabl.1. 385 (1970)
 (FIT-58) W.L. Fite and T.R. Brackmann, Phys. Rev. 112, 1141 (1958)
 (FIT-62) W.L. Fite, in "Atomic and Molecular Processes" (Ed. D.R.Bates), p421, Academic Press, New York (1962)
 (FON-81a) W.C. Fon, K.A. Berrington and A. Hibbert, J. Phys. B14, 307 (1981)
 (FON-81b) W.C. Fon and K.A. Berrington, J. Phys. B14, 323 (1981)
 (FUR-73) J.B. Furness and I.E. McCarthy, J. Phys. B6, 2280 (1973)
 (GAN-70) P.S. Ganas, S.K. Dutta and A.E.S. Green, Phys. Rev. A2, 111 (1970)
 (GAR-71) C.R. Garibotti and P.A. Massaro, J. Phys. B4, 1270 (1971)
 (GUP-74) S.C. Gupta and J.A. Rees, J. Phys. B7, L381 (1974)
 (GUP-75) S.C. Gupta and J.A. Rees, J. Phys. B8, 417 (1975)
 (HAS-64) J.B. Hasted "Physics of Atomic Collisions", London, Butterworths (1964)
 (HER-84) J. Herbak, A. Kover, E. Szmola, E. Berényi and I. Cserny, Acta Physica Hungarica, in press
 (HOL-71) A.R. Holt, J.Hunt and B.L. Moiseiwitsch, J. Phys. B4, 1318 (1971)
 (HUG-32a) A.L. Hughes and J.H. McMillen, Phys. Rev. 39, 585 (1932)

- (HUG-32b) A.L. Hughes, J.H. McMillen and G.M. Webb, Phys. Rev. 41, 154 (1932)
- (HUG-33) A.L. Hughes and J.H. McMillen, Phys. Rev. 43, 875 (1933)
- (JAN-73) R.H.J. Jansen and F.J. de Heer, in "Abstr. of Papers of the Eighth International Conference on the Phys. of Electronic and Atomic Collisions", (Inst. of Physics, Belgrade, Yugoslavia), p269, (1973)
- (JAN-75a) R.H.J. Jansen, Ph.D. Thesis, University of Amsterdam Amsterdam (1975)
- (JAN-76a) R.H.J. Jansen, F.J. de Heer, H.J. van Wingerden and H.J. Blaauw, J. Phys. B9, 185 (1976)
- (JAN-76b) R.H. Jansen and F.J. de Heer, J.Phys.B9, 213 (1976)
- (JEN-78) S.W. Jensen, Ph.D. Thesis, University of California, Riverside (1978)
- (JOA-71) C.J. Joachain and M.H. Mittleman, Phys. Rev. A4, 1492 (1971)
- (JOA-75) C.J. Joachain, Quantum Collision Theory, North Holland Publ. Cy., Amsterdam (1975)
- (JOA-77) C.J. Joachain, R. Vanderpooten, K.H. Winters and F.W. Byron, J. Phys. B10, 227 (1977)
- (JOS-73) K. Jost, M. Fink and D. Herrmann, in "Abstr. of Papers of the Eight International Conference on the Phys. of Electronic and Atomic Collisions", (Inst. of Physics, Belgrade, Yugoslavia), p277 (1973)
- (JOS-74) K. Jostand, D. Herrmann, Verhandlungen der D.P.G. fruhjahrstagung Stuttgart (Physik Verlag, Weinheim, Germany), p412 (1974)
- (KEM-83) F. Kemper, B. Awe, F. Rosicky and R. Feder, J. Phys. B16, 1819 (1983)
- (KEM-84) F. Kemper, F. Rosicky and R. Feder, J. Phys. B17, 3763 (1984)
- (KHA-65) S.P. Khare and B.L. Moiseiwitsch, Proc. Phys. Soc. 85, 821 (1965)
- (KHA-71) S.P. Khare and P. Shobha, J. Phys. B4, 208 (1971)
- (KHA-74) S.P. Khare and P. Shobha, J. Phys. B3, 420 (1974)
- (KLE-53) O. Klemperer, "Electron Optics", Cambridge Univ. Press, London and New York (1953)
- (KLE-65) O. Klemperer, Rept. Progr. Phys. 28, 77 (1965)
- (KLE-80) M. Klewer, M.J. van Beerlage and M.J. van der Wiel, J. Phys. B13, 571 (1980)
- (KOL-58) R. Kolath, in "Handbuch der Physik" (Ed. S.Flugge), 34 p.1, Springer, Berlin (1958)
- (KOV-84a) A. Kövér, D. Varga, E. Szmola, Gy. Móri and J. Herbák, Nucl. Instr. Meth. (in press), (1984)
- (KOV-84b) A. Kövér, E. Szmola, J. Herbák, I. Cserny and D. Varga, in "Proc. of the 5th Seminar on Electron Spectroscopy of Socialist Countries", Dresden, Aug. 26-29, p69
- (KUR-73) M.V. Kurepa, L.D. Vuskovic and S.D. Kalezic, in "Abstr. of Papers of the Eighth International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions" (Institute of Physics, Belgrade, Yugoslavia), p267 (1973)
- (KUR-75) M.V. Kurepa and L. Vuskovic, J. Phys. B8, 2067 (1975)

- (KUY-67) C.E. Kuyatt and J.A. Simpson, *Rev. Sci. Instr.*, 38, 103 (1967)
- (KUY-68) C.E. Kuyatt, *Methods of Experimental Physics*, 7A (1968)
- (LaB-69a) R.W. LaBahn and J. Callaway, *Phys. Rev.* 180, 91 (1969)
- (LaB-69b) R.W. LaBahn and J. Callaway, *Phys. Rev.* 188, 520 (1969)
- (LAN-78) Landau and Lifsic, *Theoretical Physics III. Tk.* (1978)
- (LEP-81) J.B. Lepoole, *Nucl. Instr. Meth.* 187, 241 (1981)
- (LEW-74a) B.R. Lewis, J.B. Furness, P.J.O. Teubner and E. Weigold, *J. Phys.* B7, 1083 (1974)
- (LEV-74b) B.R. Lewis, I.E. McCarthy, P.J.O. Teubner and E. Weigold *J. Phys.* B7, 2549 (1974)
- (LUC-72) C.B. Lucas, *Vacuum* 23, 395 (1972)
- (MAS-52) H.S.W. Massey and E.H.S. Burhop, "Electronic and Ionic Impact Phenomena", Oxford Univ. Press, London (1952)
- (MAS-56) H.S.W. Masey, in "Handbuch der Physik" (Ed. S. Flugge), 36, p307, Springer, Berlin (1956)
- (MEH-67) J. Mehr, *Z. Physik*, 198, 345 (1967)
- (McC-73) J.W. McConkey and J.A. Preston, in "Abstr. of Papers of the Eighth International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions" (Inst. of Physics, Belgrade, Yugoslavia), p273 (1973)
- (McC-75) J.W. McConkey and J.A. Preston, *J. Phys.* B8, 63 (1975)
- (McC-77) I.E. McCarthy, C.J. Noble, B.A. Phillips and A.D. Turnbull, *Phys. Rev.* A15, 2173 (1977)
- (McD-64) E.W. McDaniel, "Collision Phenomena in Ionized Gases" Wiley, New York (1964)
- (MOH-32) C.B.O. Mohr and F.H. Nicoll, *Proc. Roy. Soc.* A138, 469 (1932)
- (ODA-72) N. Oda, F. Nishimura and S. Tahira, *J. Phys. Soc. Jap.* 33, 462 (1972)
- (OLA-69) D.R. Olander, *J. Applied Phys.* 40, 4650 (1969)
- (OLA-70) D.R. Olander, V. Kongev, R.H. Jones and W.J. Sieghaus, *J. Applied Phys.* 41, 2769, 4388 (1970)
- (OND-80) K. Onda and D.G. Truhlar, *Phys. Rev.* A22, 86 (1980)
- (PIE-54) J.R. Pierce, "Theory and Design of Electron Beams" (Ed. V.Nostrand, Princeton, New Jersey (1954)
- (PRE-72) J.A. Preston, Ph. D. Thesis, The Queen's University of Belfast (1972)
- (PRO-82) M. Proulx, P. Marmet and R. Dutil, *Rev. Sci. Instr.* 53, 778 (1982)
- (PUR-70) J.E. Purcell, R.A. Berg and A.E.S. Green, *Phys. Rev.* A2, 107 (1970)
- (REA-83) F.H. Read, *Physica Scripta* 27, p103 (1983)
- (QIN-82) Z. Qing, M.J.M. Beerlage and M.J. van der Wiel, *Physica* 113C, 225 (1982)
- (REG-80) D.F. Register, S. Trajmar and S.K. Srivastava, *Phys. Rev.* A21, 1134 (1980)
- (RIL-75) M.E. Riley, C.J. MacCallum and F. Briggs, *Atomic Data and Nuclear Data Tabl.* 15, 443 (1975)
- (SAH-73) B.C. Saha, K. Sarkar and A.S. Ghash, *J. Phys.* B6, 2303 (1973)
- (SCH-68) K. Schackert, & *Physik*, 213, 316 (1968)

- (SET-72) S.K. Sethuraman, J.A. Rees, and J.R. Gibson, Report, Dept. of Electronical Eng, and Electronics, Univ. of Liverpool (1972)
- (SET-74) S.K. Sethuraman, J.A. Rees and J.R. Gibson, J. Phys. B7, 1741 (1974)
- (SHY-80) T.W. Shyn, Phys. Rev. A22, 916 (1980)
- (SIL-59) E.A. Silverstein, Nucl.Instr.Meth. 4, 53 (1959)
- (SIM-63a) J.A. Simpson and C.E. Kuyatt, J. Res. Natl. Bur. Std. C67, 279 (1963)
- (SIM-63b) J.A. Simpson and C.E. Kuyatt, Rev. Sci. Instr. 34, 265 (1963)
- (SIM-64) J.A. Simpson, Rev. Sci. Instr. 35, 1698 (1964)
- (SPA-48) K.R. Spangenberg, "Vacuum Tubes", McCraw-Hill, New York (1948)
- (SRI-81) S.K. Srivastava, H. Tanaka, A. Chutjian and S. Trajmar, Phys. Rev. A23, 2156 (1981)
- (STA-84) G. Staszewska, D.W. Schwenke and D.G. Truhlar, Phys. Rev. A29, 3078 (1984)
- (THI-82a) D. Thirumalai and D.G. Truhlar, Phys. Rev. A25, 3058 (1982)
- (THI-82b) D. Thirumalai, D.G. Truhlar, M.A. Brandt, R.A. Eades and D.A. Dixon, Phys. Rev. A25, 2946 (1982)
- (TRU-80) D.G. Truhlar and K. Onda, Phys.Lett.76A, 119 (1980)
- (THO-73) B.K. Thomas and F.T. Chan, Phys. Rev. A8, 252 (1973)
- (VAL-81) S.M. Valone, D. Thirumalai and D.G. Truhlar, Int. J. Quantum Chem. Symp. 15, 341 (1981)
- (VAR-84) D. Varga, Á. Kövér, L. Kövér and L. Redler, Nucl. Instr. Meth. /submitted/ (1984)
- (VRI-68) L. Vriens, C.E. Kuyatt and S.R. Mielczarek, Phys. Rev. 170, 163 (1968)
- (VUS-72) L.D. Vuskovic, Ph. D. Thesis, Institute of Physics Beograd, Yugoslavia (1972)
- (VUS-74) L.D. Vuskovic, M.V. Kurepa and V. Bocvarski, "Abstr. of Papers of the Sevents Yugoslav Symposium on Phys. of Ionized Gases /Inst.of Phys., Zagreb, Yugoslavia/ pl9 (1974)
- (VUS-76) L. Vuskovic and M.V. Kurepa, J. Phys.B9, 837 (1976)
- (WAG-84) R.W. Wagenaar, Ph. D. Thesis, Amsterdam (1984)
- (WAL-70) D.W. Walker, J. Phys. B3, 788 (1970)
- (WAL-71) D.W. Walker, Adv. Phys. 20, 257 (1971)
- (WEB-35) G.M. Web, Phys. Rev. 47, 379 (1935)
- (WIL-75a) J.F. Williams and A. Crowe, J. Phys. B8, 2233 (1975)
- (WIL-75b) J.F. Williams and B.A. Willis, J.Phys. B8, 1670 (1975)
- (WIN-74) K.H. Winters, C.D. Klark, B.H. Brandsen and J.P. Coleman, J. Phys. B7, 788 (1974)

Referee: Gy. Szabó

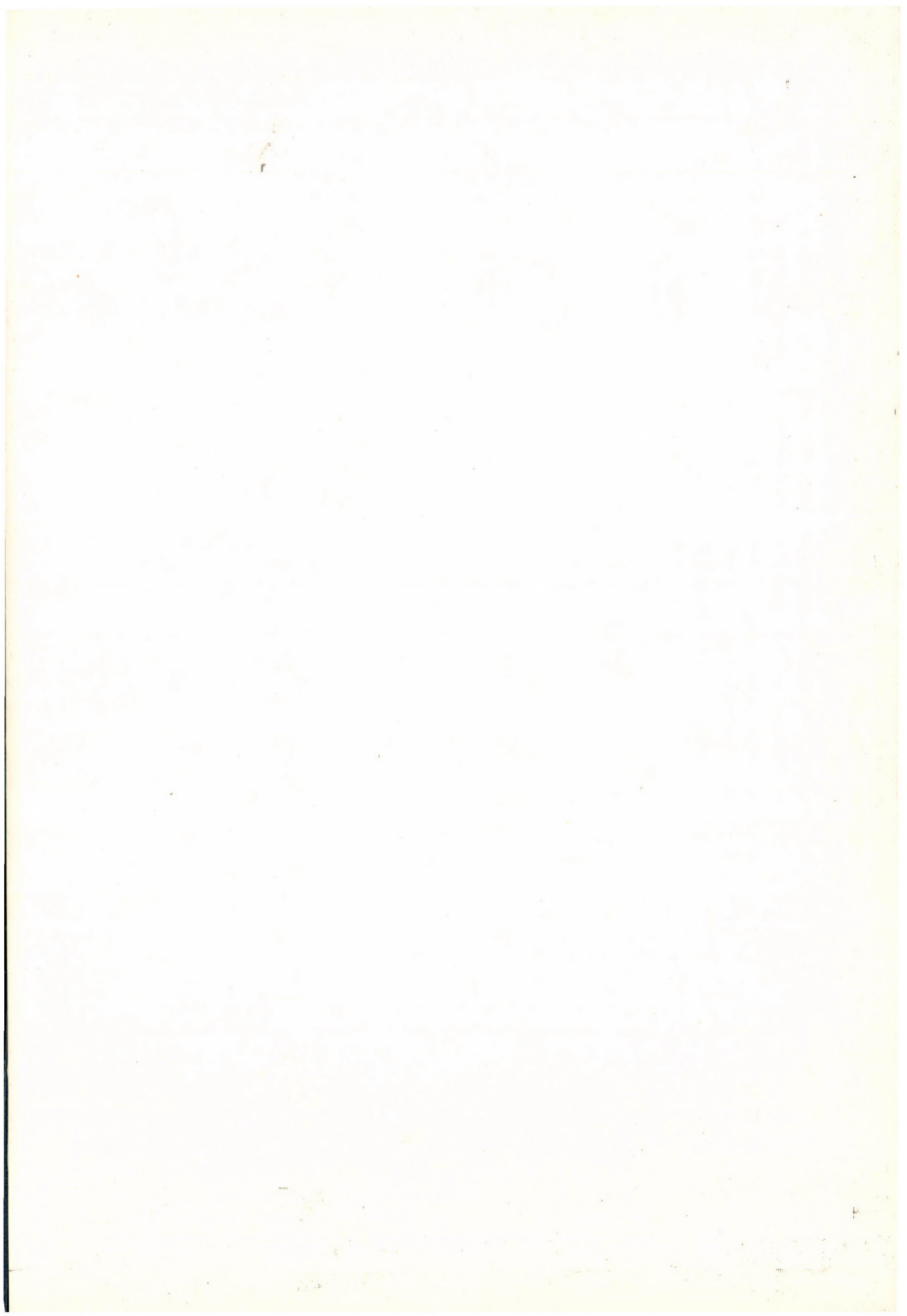
Az ATOMKI Közlemények a Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézetének riportjait gyűjti egybe, és negyedévenként jelenik meg. Terjeszti az ATOMKI Könyvtára (Debrecen, Postafiók 51, 4001). Tudományos intézetek és könyvtárak kiadványaiért cserébe vagy ellenszolgáltatás nélkül is megrendelhetik. Egyes számokat a Könyvtártól, egyes riportokat közvetlenül a szerzőktől (gyűjteményes riportok esetén a riportok szerkesztőitől) lehet kérni.

Szerkesztő Bizottság: Szalay Sándor elnök, Lovas Rezső titkár, Berényi Dénes, Cseh József, Csikai Gyula, Gyarmati Borbála és Medveczky László.

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete
A kiadásért és szerkesztésért felelős
dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója
Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában

Törzsszám: 65767
Debrecen, 1986 március

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete
A kiadásért és szerkesztésért felelős
Dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója
Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában



ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

Volume 28/ Number 1

CONTENTS

- S. Shimizu: Gamma-ray activity of the fallout dust produced by the super-hydrogen bomb test explosion on March 1, 1954 1
- I. Angeli, T. Tari: On the definition of nuclear surface thickness 13
- E. Szmola, J. Herbák: Elastic scattering of electrons by noble gases: the present state of the experiments and theory 19

510.565

IV. 9

ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

28. kötet / 2. szám



MTA

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1986

INVESTIGATION OF THE SIZE-EFFECT OF RESIDUAL RESISTIVITY
RATIO OF HIGH PURITY GALLIUM

D. NOVÁK and K. BOTOS

Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy,
Debrecen, P.O. Box 51, Hungary, H-4001

In the low temperature laboratory of our Institute large-scale residual resistivity measurements were carried out on gallium samples, for the practical purposes of the Hungarian aluminium industry. These measurements involved the investigation of the effect of sample size on residual resistivity ratio of gallium. The results obtained have completed the data previously published in the literature on this subject.

It is well known that the residual resistivity ratio ($RRR=R_{RT}/R_{4,2K}$ or $R^*=R_{4,2K}/R_{RT}$, where RT means room temperature) of pure metals is a quantity widely used for checking the purity of the metal matrix. But when comparing various R^* values measured under different experimental conditions, it is necessary to apply correction factors, taking into account the experimental circumstances, among others (e.g. the actual temperatures of measurements, measuring currents, etc.) the effect of surface scattering depending on the shape and size of the specimen. In the case of gallium even the resistance anisotropy in different crystal-axis orientations should be taken into consideration. In order to get data free from the effect of surface scattering the bulk value of R^* is frequently used when qualifying the purity.

The bulk residual resistivity ratio, $R_{bulk}^*(4,2/RT)$, can be obtained by measuring the resistance on a series of specimens of different diameter and extrapolating the results to infinite size. Executing the low temperature measurements even below 4.2 K, also an $R_{bulk}^*(0 K/RT)$ can be obtained by extrapolations to 0 K and infinite size. Practically it is not convenient to perform the measurements on a wide variety of specimens of different diameter in every single case. Instead, it is desirable to use a formula for extrapolation, if such a connection is known for the given metal.

1. Size effect relations

Concerning the size effect, experimental residual resistivity data are evaluated usually on the basis of the Nordheim-Fuchs-Dingle formula:

$$\rho_D = \rho_{\text{bulk}} + G \frac{\rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}}}{D}, \quad (1a)$$

or with resistivity ratios:

$$R_D^* = R_{\text{bulk}}^* + G \frac{R_{\text{bulk}}^* \cdot \lambda_{\text{bulk}}}{D}, \quad (1b)$$

where:

- ρ_D - resistivity of a specimen with diameter D , [ohm cm];
- ρ_{bulk} - extrapolated bulk resistivity, [ohm cm];
- λ_{bulk} - bulk mean free path of electrons, [cm];
- D - specimen size, specimen diameter, [cm];
- $\rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}}$ - an intrinsic quantity of the metal, characteristic of its electronic structure [ohm cm²];
- G - a dimensionless quantity; the value of G depends on the λ/D ratio, and on the specimen shape, furthermore, on the scattering mechanism of the electrons on the surface of the specimen;
- R_D^* - dimensionless residual resistivity ratio ($R_{4,2}/R_{RT}$) of a specimen of diameter D ;
- R_{bulk}^* - dimensionless extrapolated bulk residual resistivity ratio.

For wires of circular cross-section G can be evaluated by using Dingle's calculations (based on the assumption of a spherical Fermi surface and isotropic relaxation time [Di50]). According to Dingle's analysis:

$$G = 0,75 (1-p), \quad \text{when } D \gg \lambda, \quad (2)$$

and

$$G = (1-p)(1+p), \quad \text{when } D \ll \lambda, \quad (3)$$

where the parameter p is the ratio of specular to diffuse scattering of the electrons at the specimen surface. Practically the most probable case is when $p=0$, i.e. the scattering is completely diffuse, as the roughness of the specimen surface always exceeds the wavelength of electrons at the Fermi surface by orders of magnitude. Assuming that $p \approx 0$ in the Dingle-relation, the value of G varies between 0.75 and unity as λ/D varies from zero ($D \gg \lambda$), to infinity ($D \ll \lambda$). A precise and complete tabulation of $\rho_{\text{bulk}}/\rho_D$ in the function of D/λ and p is given by Svoboda [Sv71]. For wires of square cross section the analysis of the size effect has been worked out by McDonald and Sarginson [McD50]. Recent reviews and treatises of the question are given in the work of Boughton et al [BoN72] and Falkovsky [Fa83].

When analysing experimental data, the values of ρ_{bulk} (respectively R_{bulk}^*) and $G \cdot \rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}}$ (respectively, $G \cdot R_{\text{bulk}}^* \cdot \lambda_{\text{bulk}}$) can be obtained from formula (1) as the intercept and slope of the straight line, showing the relation between the measured ρ_D (or R_D^*) and $1/D$. With the assumption of diffuse scattering ($p=0$) an electron bulk mean free path can be estimated and attributed to the metal of given purity. The λ_{bulk} mean free path itself may serve for the qualification of the purity grade of the metal.

2. Previous size-effect data on gallium

Concerning gallium samples of various purity and crystal-axis orientations, different size-effect investigations have been published in the literature.

Frederking and Reiman [FrR60] studied the size-effect of the residual resistivity ratio between 4.2 K and 1.5 K on 0.28-1.1 mm diameter cylindrical gallium wires of (probably) 5N purity and (probably) a[100] axial direction. By extrapolations to 0 K and infinite size they stated a value of $\lambda_{\text{bulk}}(0 \text{ K}) \sim 1.2 \text{ mm}$ for the electron bulk mean free path. The bulk residual resistivity ratio of their sample was at 0 K: $R_{\text{bulk}}^*(0 \text{ K}/293 \text{ K}) = R(0 \text{ K})/R(293 \text{ K}) = 1.5 \times 10^{-5}$, while at 4.2 K: $R_{\text{bulk}}^*(4.2 \text{ K}/293 \text{ K}) = R(4.2 \text{ K})/R(293 \text{ K}) = 2.3 \times 10^{-5}$.

The measurements of Weisberg and Josephs [WeJ61] were carried out on 5N+ nominal purity (ALCOA product) gallium wires of 0.4-2 mm diameter. The axial orientation of their specimens was close to the a-axis [100]. Their results: $R_{\text{bulk}}^*(4.2 \text{ K}/295 \text{ K}, \text{ a-axis}) = 1.3 \times 10^{-5}$ and $\lambda_{\text{bulk}}^{\text{a-axis}}(4.2 \text{ K}) \sim 1.2 \text{ mm}$, while their size-effect relation:

$$R_D^* = 1.3 \times 10^{-5} \left(1 + \frac{0.12}{D_{\text{cm}}}\right). \quad (4)$$

A detailed experimental investigation of the size-effect in gallium was performed by Yagub and Cochran on ALCOA-6N+ ("super-pure") gallium material. Their measurements were carried out along the c[001] crystal-axis [CoY63, YaC65] as well as the a[100] and b[010] crystal-axes [CoY65], on specimens of square cross section, where the size of the square, D, was within the 0.01-0.1 cm interval. Quoting here from their results the case of c[001] orientation (as it has the greatest importance in the practical measurements, because of the highest resistivity) the following expression is valid for the size dependence of resistivity at 4.2 K:

$$\rho_{4.2} = (5.17 + 0.787/D_{\text{cm}}) \times 10^{-10} [\text{ohm cm}]. \quad (5)$$

Taking into consideration the form factor and the room temperature resistivity of gallium, the size dependence of the R^* residual resistivity ratio can be transformed from (5) for cylindrical specimens:

$$R_D^*(4.2 \text{ K}/295 \text{ K}, \text{ c}[001]) = 0.92 \times 10^{-5} \left(1 + \frac{0.17}{D_{\text{cm}}}\right). \quad (6)$$

Here $R_{\text{bulk}}^* = 0.92 \times 10^{-5}$ is the extrapolated bulk value of the R^* residual resistivity ratio of their gallium material. An electron bulk mean free path of $\lambda_{\text{bulk}}(4.2 \text{ K}) = 0.17 \text{ cm}$ can be estimated at 4.2 K with the assumption of diffuse scattering ($p \sim 0, G \sim 1$). They quote a bulk mean free path of $\lambda_{\text{bulk}}^{\text{c-axis}}(0 \text{ K}) \geq 0.8 \text{ cm}$, extrapolated to 0 K [CoY63, YaC65].

Other measurements on the low temperature resistivity of gallium samples of various purity and size - though they do not provide formulae for the size effect correction - supply sporadic, but, for comparison, useful additional information and data in this field [KrF62, JM69, MoA80, NeN67, WaB72]. The measurements of [NeN67] and [WaB72] were carried out on a

gallium material similar to that used in the investigations of Yaqub and Cochran (ALCOA-6N+ "superpure"), but the diameters of their specimens were much larger: $\phi 9.5$ mm and $\phi 10$ mm respectively. According to the estimation of [NeN67], the impurity concentration of the ALCOA-6N+ "superpure" gallium material is in the order of 0.1 ppm. From the point of view of the size effect one can try to bridge the intermediate size interval between these thin and thick specimens, by using the results of [NeN67, WaB72] together with the largest diameter ($\phi 1$ mm) data of [YaC65]. From these data the following relation can be calculated for the R^* ratio in the $c[001]$ axial direction, at 4.2 K:

$$R_D^*(4.2 \text{ K}/295 \text{ K}, c\text{-axis}) = 0.685 \times 10^{-5} \left(1 + \frac{0.24}{D_{\text{cm}}}\right). \quad (7)$$

Applying (1b) and (2), a mean free path of $\lambda_{\text{bulk}}^{c\text{-axis}}(4.2 \text{ K}) \approx 3 \div 3.5$ mm can be estimated, while the $G \cdot \rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}}$ value is: $12.08 \times 10^{-11} \text{ ohm cm}^2$.

Finally the size effect investigation of Boughton [Bo79] is worth mentioning. It was carried out in the lowest resistance $b[010]$ orientation, on square cross section specimens with dimensions from 0.3 mm up to 2.5 mm. Boughton got the following relation for the 0 K residual resistivity by the extrapolation of his data measured between 4.2 K and 1.2 K:

$$\rho_D(0\text{K}) = \rho_{\text{bulk}}(0 \text{ K}) + G \cdot \rho_{\text{bulk}}(0 \text{ K}) \cdot \lambda_{\text{bulk}}(0 \text{ K}) / D = \\ = 1.6 \times 10^{-12} [\text{ohm cm}] + 7.25 \times 10^{-12} [\text{ohm cm}^2] / D [\text{cm}]. \quad (8)$$

With the first order approximation of $G \sim 1$, Boughton obtained a mean free path of $\lambda_{\text{bulk}}^{b\text{-axis}}(0 \text{ K}) \geq 4$ cm.

3. Measurements and results

It is clear from the previous compilation, that all explicit formulae on the size effect of gallium published in the literature were based on data obtained at small specimen size. On the other hand, we considered the validity of our interpolation (7) to be dubious. Our residual resistivity measurements for practical-industrial purposes have been carried out on cylindrical gallium wires (with $\sim c[001]$ orientation) within the diameter interval $\phi 1 \div \phi 6.3$ mm, mostly on $\sim \phi 2$ mm and $\sim \phi 6$ mm samples. These dimensions lie between the range of measurements of [WeJ61, YaC65] and the large diameter of the specimens of [NeN67, WaB72]. So an R_{bulk}^* extrapolation of our data would not be undoubtedly justified on the basis of any of the above-mentioned formulae. Also the purity-grades of the gallium materials examined were mostly between that of Ga-ALCOA-5N+ of [WeJ61] and Ga-ALCOA-6N+(superpure) of [YaC65]. So it seemed necessary to study the size-effect relation in the range of intermediate sizes and purity.

Our measurements were performed on a gallium material ("Ga-HUNGALU-30H/6N+") produced by the Hungarian Aluminium Trust (HUNGALU). Directional crystallization and zone melting were

used in the final stages of its purification. Its nominal purity grade was 6N+, with a measured metallic impurity content of 0.57 ppm by weight.

The usual four-contact method has been applied for resistance measurements. The specimens were cylindrical single crystal wires grown in teflon moulds by seeding. The diameters of the wires, D , were between 0.68 mm and 6.3 mm. In the case of the thinnest specimens (below $\phi 1$ mm) the determination of the diameter could be performed with a rather large inaccuracy (represented by the dashed portion of the straight line in Fig.2 and Fig.3), because of the irregularities and roughness of the surface. The total length of the specimens was 40 mm, the measured length 20 mm (when $D > 3$ mm) or the total length 55 mm, the measured length 30-35 mm (when $D \leq 3$ mm). In most cases the potential drop was measured by a P348-type potentiometer with a sensitivity of $2 \cdot 10^{-8}$ V. In the low temperature (4.2 K) measurements the measuring currents were varied from 0.5 A to 2.5 A in 0.5 A steps and with reversals of current; the resistance values obtained at different currents were averaged. Measuring currents of 1 mA to 10 mA were used in the room temperature measurements ($T = 295$ K). In the case of the thickest samples ($\phi 3$ mm and $\phi 6.3$ mm) the voltage measurements were performed with a SQUID-picovoltmeter [MÉV79, MÉV84, MÉV85]. The sensitivity of this equipment exceeded 10^{-13} V and the measuring currents were varied between 1 ÷ 100 mA. The inaccuracy of the determination of the R^* residual resistivity ratio was $\pm 5\%$, when $R^* < 2 \times 10^{-5}$, and $\pm 2\%$ when $R^* > 2 \times 10^{-5}$.

The crystal-axis orientation of our specimens was close to $c[001]$. The orientation was checked only by room temperature resistivity measurements, concordant with the method employed in our measurements for industrial purity control (where the application of crystal-diffraction in the case of each specimen would have been too expensive and unpractical). To be sure that such a procedure is acceptable, we have studied the connection between room temperature resistivity and R^* ratio of a high purity and homogeneous gallium material ("Ga-6N+/1-K") also produced by the Hungarian Aluminium Trust (HUNGALU). The purity grade of this material was similar to that of the sample investigated in the size-effect measurements. From the results (Fig.1.) it became evident, that R^* is - within the limits of errors of the measurement - practically independent of the room temperature resistivity when $\rho_{295K} > 25 \times 10^{-6}$ ohm cm. In our size-effect investigations specimens only with room temperature resistivities above 52×10^{-6} ohm cm were used. On the basis of the results of Erny [Er58], the criterium of $\rho_{295K} > 52 \times 10^{-6}$ ohm cm means a maximal ~ 10 - 12 degree deflection of the specimen axis from the direction of the $c[001]$ crystal-axis.

Our results are presented in Fig.2. The R^* residual resistivity ratio in the function of the reciprocal diameter of the specimen, $1/D_{cm}$, can be described with a Dingle-type linear relation:

$$\begin{aligned} R_D^*(4.2K/295K; \nu_{c\text{-axis}}) &= 0.78 \times 10^{-5} + 0.195 \times 10^{-5} / D_{cm} \\ &= 0.78 \times 10^{-5} [1 + 0.25 / D_{cm}] \end{aligned} \quad (9)$$

From the linearization of the data with the method of least squares:

$$R_{\text{bulk}}^* (4.2 \text{ K}/295 \text{ K}; \sim c\text{-axis}) = (0.78 \pm 0.09) \times 10^{-5} \quad (9a)$$

and

$$G \cdot R_{\text{bulk}}^* \cdot \lambda_{\text{bulk}} = (0.195 \pm 0.013) \times 10^{-5} [\text{cm}] \quad (9b)$$

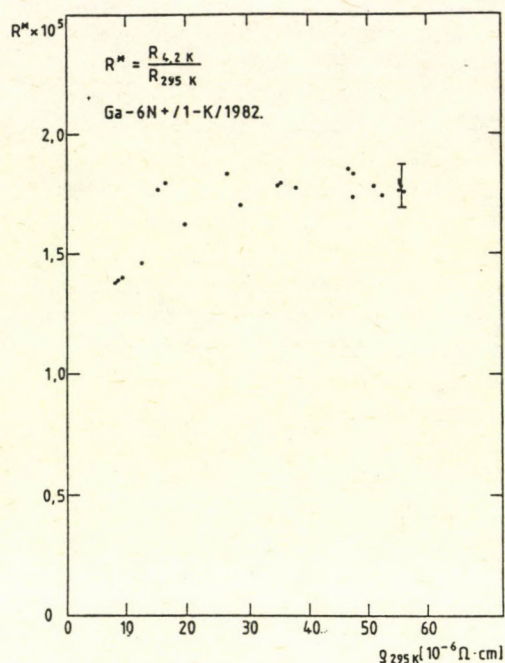


Fig. 1. Dependence of the $R^* = R_{4.2\text{K}}/R_{295\text{K}}$ residual resistivity ratio on the room temperature resistance of the specimens at the "Ga-6N+/1-K" sample.

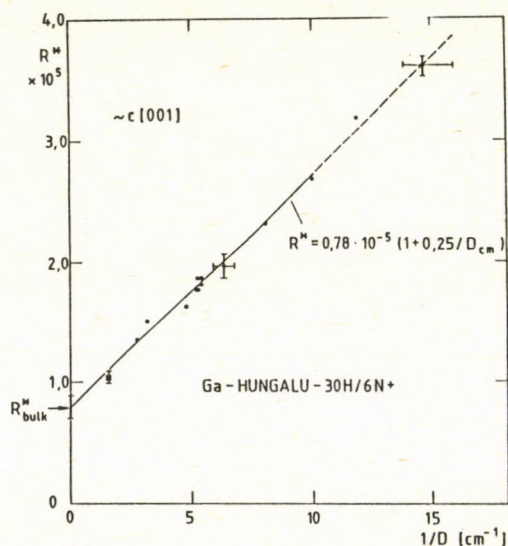


Fig. 2. Dependence of the R^* residual resistivity ratio on the reciprocal diameter of specimens, in case of a 6N+ purity-grade sample ("Ga-HUNGALU-30H"), produced by the Hungarian Aluminium Trust. The crystal-axis orientation of the specimens was close to $c[001]$.

Assuming $\rho \sim 0$, a $\lambda_{\text{bulk}} (4.2 \text{ K})$ value of 2.5 - 3.3 mm can be obtained from our results, depending upon whether (2) or (3) approximations are applied. When comparing the dimensions of the specimens to this approximated λ_{bulk} value, the use of (3)

seems somewhat more reasonable, as in the case of most of our specimens D was smaller than λ_{bulk} . So the more probable value of λ_{bulk} can be supposed to be near to 2.5 mm (naturally within the validity of the $\rho \sim 0$ assumption).

The $G \cdot \rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}}$ quantity can be obtained from $G \cdot R_{\text{bulk}}^* \cdot \lambda_{\text{bulk}}$ by multiplying with the room temperature resistivity. As a first approximation, - with $\rho_{295\text{K}}\{\text{C}[001]\} = 56 \times 10^{-6} \text{ohm cm}$ - we got: $G \cdot \rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}} = 10.9 \times 10^{-11} \text{ohm cm}^2$. It is a higher value than that of [YaC65] ($8.11 \times 10^{-11} \text{ohm cm}^2$), but near the value that can be deducted from the interpolation (7) ($12.1 \times 10^{-11} \text{ohm cm}^2$).

Besides performing measurements on the Ga-HUNGALU-30H sample, we were able to investigate the size-effect on a gallium material got from the Kawecki-Ingall Firm. The purity grade was 6N with a nominal total impurity content of < 0.5 ppm by weight [Ka76]. Because of the small amount of the material at our disposal a less rigorous criterium had to be applied to the axial orientation of the specimens. All specimens with $\rho_{295} > 25 \times 10^{-6} \text{ohm cm}$ were included in the measurements. The results are shown in Fig. 3.

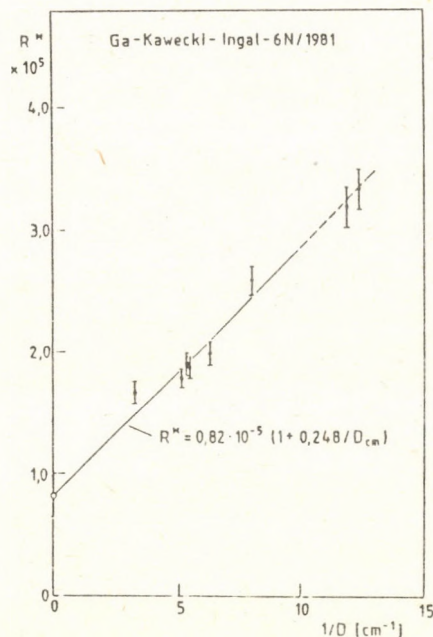


Fig. 3. Dependence of the R^* residual resistivity ratio on the reciprocal diameter of specimens of a Kawecki-Ingall Ga-6N sample.

The size-effect relation could be expressed as:

$$R_D^* (4.2 \text{ K}/295\text{K}; \nu_{\text{c-axis}}) = 0.81 \times 10^{-5} \left[1 + \frac{0.25}{D_{\text{cm}}} \right], \quad (10)$$

where:

$$R_{\text{bulk}}^* (4.2/295 \text{ K}, \nu_{\text{c-axis}}) = [0.81 \pm 0.16] \times 10^{-5} \quad (10a)$$

$$G \cdot R_{\text{bulk}}^* \cdot \lambda_{\text{bulk}} = [0.203 \pm 0.020] \times 10^{-5} [\text{cm}]. \quad (10b)$$

With the assumption of $p \approx 0$ we got for the mean free path again: $\lambda_{\text{bulk}}(4.2 \text{ K}) = 0.25 \div 0.33 \text{ mm}$, depending on G [(2) vs. (3)]. From (10b) we obtained: $G \cdot \rho_{\text{bulk}} \cdot \lambda_{\text{bulk}} = 11.4 \times 10^{-11} \text{ ohm cm}^2$.

Our experimental results obtained both on the Ga-HUNGALU-30H and the Ga-Kawecki-Ingál-6N samples confirm interpolation (7). To both materials a somewhat shorter electron mean free path can be attributed, than in the case of the ALCOA-6N+-"superpure" gallium, and this fact is in agreement with the stated impurity contents.

Finally we express our thanks to Dr. S. Mészáros and Dr. K. Vad, physicists, research fellows of our institute, for their help in performing the measurements, to Dr. G. Székely, mathematician, for making available his computer programs, to us and to, the Hungarian Aluminium Trust (HUNGALU) for supporting our investigations.

References

- [Bo79] Boughton, R.I.: Physics Lett. 74A (1979) 141.
- [BoN72] Boughton, R.I., Neighbor, J.E.: J. Low Temp. Phys. 7 (1972) 241.
- [CoY63] Cochran, J.F., Yaqub, M.: Physics Lett. 5 (1963) 307.
- [CoY65] Cochran, J.F., Yaqub, M.: Phys. Rev. A140 (1965) 2174
- [Di50] Dingle, R.B.: Proc. Roy. Soc. A201 (1950) 454
- [Er58] Erny, M., Métaux Corrosion, 33 (1958) 253.
- [Fa83] Falkovsky, L.A.: Adv. Phys. 32 (1983) 753.
- [FrR60] Frederking, T., Reimann, R.: Helv. Phys. Acta, 33 (1960) 998.
- [JM69] Johnson-Matthey Chem. Ltd-Puratronic: High Purity Metals Catalogue No.1765. (Johnson-Matthey edition, London, 1969) p.123.
- [Ka76] Kawecki-Billiton Metaalindustrie: High Purity Metals catalogue, Gallium (Ingál International Gallium GmbH edition, Arnhem, 1976)
- [KrF62] Kramer, R.A., Foster, L.M.: Residual Resistivity. Compound Semiconductors; Eds.: R.K. Willardson, H.L. Goering (Reinhold Publ. Co., New York, 1962) Vol. 1. p.146.
- [McDS50] McDonald, D.K.C., Sarginson, K.: Proc. Roy. Soc. A203 (1950) 223.
- [MéV79] Mészáros S., Vad K., Novák D.: ATOMKI Közl. 21 (1979) 13
- [MéV84] Mészáros S., Vad K., Novák D.: SQUID picovoltmeter system for residual resistivity measurements. Proc.XVI. Internationales Symposium der Tieftemperaturphysik und Kryoelektronik, Bad Blankenburg, (DDR) 3-7 Dez. 1984. (Friedrich Schiller Universität, Jena, 1985) p.122.
- [MéV85] Мэсарош, Ш., Вад Н., Новак Д.: П.Т.Э. № 6 (1985) стр.167
- [MoA80] Морозова, Н.П., Абрютин, В.И., Чупятова, Л.П., Бельский, А.А.: Научные Труды ГИРЕДМЕТ-а, 96 (1980) 103.
- [NeN67] Newbower, R.S., Neighbor, J.E.: Phys. Rev. Lett. 18 (1967) 538.
- [Sv71] Svoboda, P.: Czech. J. Phys. B21 (1971) 694.

- [WaB72] *Waldorf, D.L., Boughton, R.P., Yaqub, M., Zych, D.:*
J. Low. Temp. Phys., 9 (1972) 435.
- [WeJ61] *Weisberg, L.R., Josephs, R.M.:* Phys. Rev. 124 (1961) 36
- [YaC65] *Yaqub, M., Cochran, J.F.:* Phys. Rev. A137 (1965) 1182

Referee: F. Kedves

TRACE ELEMENTS, HEALTH AND HAIR ANALYSIS

Samir Seif El-Nasr*

Teacher's College for Women, Kuwait

Introduction

The majority of diseases begin when biochemical imbalances occur at the cellular level. "Deficiencies or excesses of metal ions cause most adverse biological effects." ¹

Ocasionally these imbalances actually cause illnesses more often they simply hinder the body's efficiency, thereby weakening any chemically based immunity processes. Imbalance of those elements essential to health or interference due to heavy metal accumulation will leave the door open to potential diseases; yet more and more, research points out that modern health care has the prospect of correcting these imbalances before disease reaches the stage of physical symptoms.

Trace elements:

Expressions like heavy metals, transition metals and trace elements are used to indicate certain elements (mainly metals) found in the human (mammalian) organism. These terms differ in meaning. Trace elements, are those elements that are naturally present in the human body in quantities of less than 0,01 % of the total body weight, ² see figure 1. The trace elements defined in this way include the elements which are indispensable for the proper functioning of the organism (the essential bioelements), as well as those which are either only harmful to the body (the toxic elements), or which do not interact with the metabolism at all (the indifferent elements). Being essential does not necessarily mean that a trace element cannot be toxic at the same time. Small amounts of Zn are indispensable in our food though larger quantities of Zn - salts have been used as an emetic. On the other hand it seems likely

* Visiting scientist in ATOMKI in summer 1985.

that small amounts of so called toxic trace elements may be harmless because detoxifying mechanisms in the organism can handle them. It has therefore been argued that it might be better to speak of toxic concentrations rather than of toxic elements.

Function of Trace Elements

Trace elements may be essential because they are need for specific functions. Some of these are well known, e.g. they may be a part of the active center of enzymes or of similar active, very specific compounds (like Co in vitamine B₁₂). Many enzymes are known to depend on the presence of Cu (particularly oxidases) or Zn. Some contain Se, the best-known being glutathione peroxidase, while Cr became of interest because of its function as a part of the so called glucose tolerance factor (GTF), these are just some few examples among other ones.

The process of hair analysis

How do you monitor your nutrient trace element balance and toxid metal pollution? Which specimen will tell the story, blood, urine, tissue biopsy or hair analysis?

Each method has its strengths and limitations, and none should be relied upon as your sole mineral or trace element diagnostic tool. However as an overall health indicator and as a measuring tool for biochemical mineral balance, hair analysis is the most convenient screening choice. Hair analysis can also be the most accurate method to monitor the exposure to certain toxic metal pollutants such as lead, cadmium or arsenic /3/. Hair is like a strip of chart paper curling out of a scientific measuring instrument that is comparable to body. It is permanently recording the past events of trace element status, in body. As examples, see figure 2 for the Ca-concentration variation in daily shaven beard as a function of time, and figure 3 for x-ray spectrum obtained from the exposure of single hair to a beam of 3 MeV protons, and figure 4 for Ca/Zn, Cu/Zn, Sr/Zn, Fe/Zn and Br/Zn measured along a human hair as a function of distance (time) from the scalp.

As hair grows about one millimeter every three days or one-

half inch per month, it takes protein from the blood and during the process, concentrates nutrient and toxic elements into the growing hair shaft. Elemental concentrations in the hair are often ten-hundred times or more greater than that in blood or urine.

Research has shown that for many elements hair more closely reflects body mineral stores than blood or urine, particularly in cases of toxic metal accumulation. Hair will often show a toxicity level while blood and urine will not. The blood shows only what is circulating at the present moment and the urine contains what the body is eliminating not what is stored. Hair grows slowly and the analysis of hair levels will indicate the average levels in the body over a long period of time. The alternative to hair analysis is to obtain biopsy specimens from body organs. This requiring surgery, and being is very expensive is objectionable, and well as would not be acceptable to most people. Hair analysis may be so accurate as surgical biopsy, or be of more value as well, it provides an excellent screening measurement and is simple, safe and relatively inexpensive.

The advantages of hair as a specimen

Hair analysis is an important screening tool that is cost-effective. If used properly, it will significantly extend the benefits of health care. If used improperly, it can cause misdiagnosis, mistreatment or give false security. Hair analysis must be interpreted by a professional, skilled in the inter-relations outlined in this field. Hair has several advantages as a specimen as follows:

- a biologically stable (stores easily, well transportable, will not deteriorate)
- b easy to obtain (non-traumatic, non-invasive)
- c not buffered against changes as blood and urine /4/
- d reflective of certain systematic mineral levels /5-6/
- e more easily and accurately measured than other specimens
- f in equilibrium with systematic activities and reflects metabolic balance over a period of time.

g a capsule of the body is general condition, not just a specific organ or tissue.

Hair analysis for trace elements provides earlier detection of some diseases and some nutrient imbalances. Some clinicians are reporting that they can detect several diseases with great reliability, just by observing patterns of ratios of elements in hair. These early findings may prove to be of great significance, but as this writing, our view is that this research needs further confirmation by several observers to prove its universality /7/.

Limitations of hair analysis

There are of course, limitations in the use of hair analysis. Which must be taken into consideration when measuring trace element concentrations /9/.

Firstly, one should not expect hair trace element levels to bear a direct relation to body levels unless the transfer of trace elements into the hair from the fluid from which it is growing, it itself directly related to the body concentration and independent of other factors.

Secondly, one needs to know what kind of hair treatment has been used. It is known that strong treatments, such as bleaching and dyeing have gross effects on hair trace element levels /10-11/.

As far as it is known, mild treatments do not have significant effects, although little has been done to investigate the effect of shampoo additives such as compounds of Zn and Se.

Thirdly, one should recognize that there are a number of specific trace element diseases where hair does not give the expected answer, e.g. Wilson's Disease /12/ and one needs to be able to account for this.

Hair analysis and claim

Whatever the method (PIXE, PIGE, XRF, NAA or AAA) used for hair element analysis should be a lot of research work has been done to get a correlation between trace element level in hair and

some human diseases, but up till now there are a lot of differences and confusing results between the different researchers for the same aspect, which urge more potential work to unify the different results or at least to get it closer to each other. In this case, hair analysis may help in the diagnosis of different human diseases, or at least decrease the disease side effects and pain.

There are a lot of examples, indicating how helpful is hair element analysis for medical diagnosis, one of them is calcium metabolism. It appears now that hair element analysis may prove exceptionally useful in the identification and treatment of an increasingly common major health problem which is rapidly assuming epidemic proportions, known as osteoporosis or bone demineralization /osteopenia/. In addition the other major, chronic degenerative diseases, including arteriosclerosis, heart disease, and hypertension, are being linked more and more to disorders of calcium metabolism.

For example J. Bacsó et al /13/ /14/ has found that calcium level of hair in pre- and post infarction states is ~5 times lower than in hair of healthy people of the same age. There are a lot of problems to be mentioned about the disorders of calcium metabolism and its link with many human diseases /15-16/.

References

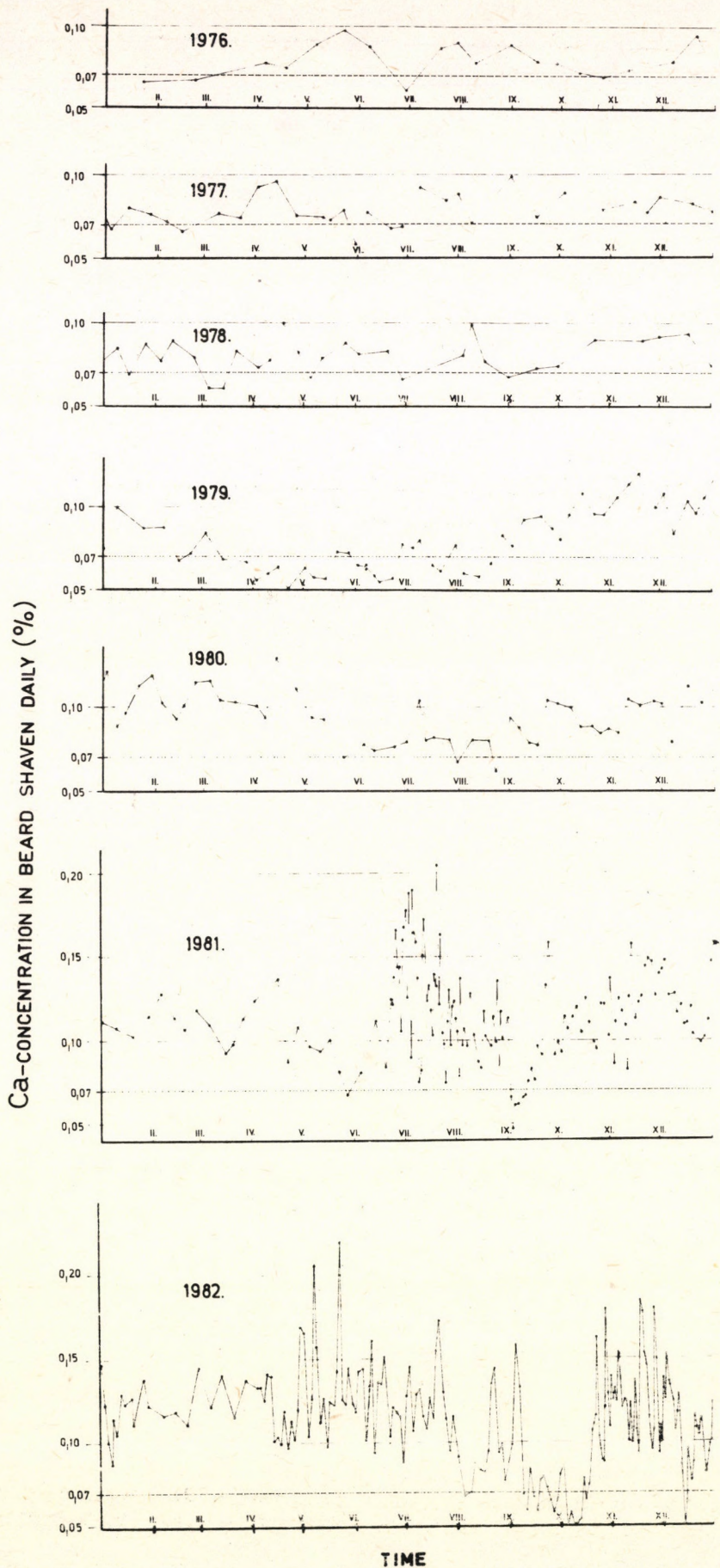
1. Williams, D-R., ed 1976 An introduction to bioinorganic chemistry. Springfield, Illinois: Charles C. Thomas, p. 315
2. IUPAC Information Bulletin no. 18, Oxford, 1972
3. Chattopadhyay, A., et al. 1977. Arch. Environ. Health 32/5/: 226-236
4. Gibson, R.S. 1980. J. Hum. Nutr. 34: 405-416
5. Chittleborough, G.A. 1980. Sci. Total Environ. 14/1/:53-75.
6. Jacob, R., et al. 1978. Am. J. Clin. Nutr. 31/3/:477-480
7. Passwater R.A. et al, Trace elements, Hair analysis and nutrition, Keats publishing, Inc. New Canaan, CT-/18-27/
8. Van den Hamer C. J. A. Proceedings of an international symposium held at Amsterdam, 17-18 sept. 1982.

9. Martin Laker, Trace elements, Health and hair analysis symposium 1982 - Amsterdam - /95-99/
10. J.M. McKenzie, Alteration of the Zinc and Copper Concentrations in hair. *Am. J. Clin. Nutr.* 27(1974)505
11. J.L. Abraham, Trace elements in hair. *Lancet* ii /1982/
12. G.M. Martin, Copper content of hair and nails of normal individuals and patients with hepatolenticular degradation. *Nature* 202/1964/903
13. J. Bacsó et al, Investigation of some inorganic compounds in hair. *Radiochem. Radioanal. letters* 33, 273-280 /1978/
14. J. Bacsó et al, Relationship between the hair's Ca-level and the ischaemic heart disease (X-ray fluorescent measurements), *Magyar Belorvosi Archivum* 35 245-250 (1982)
15. Garry F. Gordon, Calcium Metabolism and hair element analysis, symposium 1982 - Amsterdam, chapter 12 - Page 127-134
16. Richard A. Passwater, Trace elements, Hair analysis and Nutrition, Keats Publishing, Inc. New Canaan, CT, Chapter 4. Page /31-59/

H																			
Na	Mg																		
K	Ca			V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn								
					Mo														

Figure 1. Part of the periodic system of elements showing the elements essential for mammals. The so-called bulk elements - those elements present in man in amounts larger than 10g- are shown in small characters, the trace elements in large characters. Not shown are the purely toxic elements and those elements which do not seem to have a physiological function (C.J.A. Van den Hamer, /8/, 1982)

Figure 2. The Ca-concentration variation in daily shaven beard as a function of time. The boarderline /0.07%/ dividing the defended and the endangered groups is shown by dashed line in the figure. (J. Bacsó, 1983)



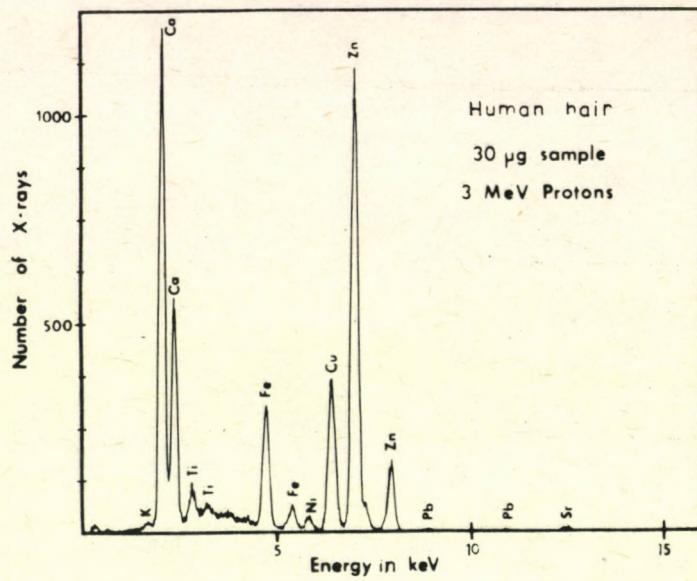


Figure 3. X-ray spectrum obtained from the exposure of single hair to a beam of 3 MeV protons (Valkovic', et al., 1973)

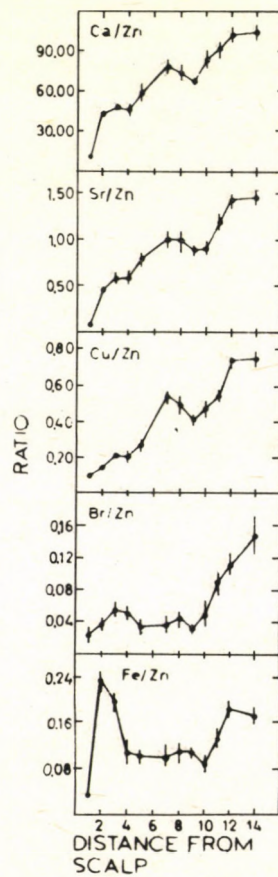


Figure 4: Ca/Zn, Cu/Zn, Sr/Zn, Fe/Zn and Br/Zn measured along a human hair as a function of distance from the scalp. (Valkovic', et al., 1973).

ATOMKI Riport X/26 (1986)

INTÉZETI HIREK '85

1. Kitüntetések, személyi hírek

Dr. SCHLENK BÁLINT a fizikai tudományok doktora, az MTA Atommag Kutató Intézetének tudományos igazgatóhelyettese, pártvezetőségének tagja, a KLTE c. docense, az MTA Magfizikai Albizottságának tagja, a DAB Agrofizikai Munkabizottságának társelnöke, a Munka Érdemrend ezüst és arany fokozatának kitüntettje 1985. november 6-án, életének 53. évében rövid, súlyos betegség után elhunyt.

Hazánk felszabadulásának 40. évfordulója alkalmából a Magyar Tudományos Akadémia Főtitkára *Gál Ferenc* szakmunkásnak eddigi munkája elismeréseként a "*Kiváló Munkáért*" kitüntetést adományozta.

Az 1985 évi intézeti díjak ugyancsak hazánk felszabadulásának 40. évfordulója alkalmából kerültek kiosztásra, az alábbiak szerint:

Az *ATOMKI Intézeti Díjat* *Dr. Zolnai László* tudományos főmunkatárs kapta, a magstruktúra és a magreakció vizsgálatok terén elért kiemelkedő eredményeiért.

Az *Interdiszciplináris Díjat* *Dr. Langer Gábor* tudományos munkatárs nyerte el, a vákuumfizikai módszerek eredményeinek állat- és növényélettani, továbbá fermentációs folyamatokra vonatkozó kutatásokban történő alkalmazásáért.

Az *Oktatási Díjat* 1985-ben *Dr. Kövér Ákos* tudományos munkatárs kapta elismerésre méltó oktatási tevékenységéért.

Intézeti Kiváló Dolgozó jelvényt kapott *Bartha László* mérnök, *Módy György* szakmunkás és *Tutor Piroska* takarító.

Az 1985 évi *Alkotó Ifjúság pályázaton* az alább pályázók pályamunkáját díjazta intézetünk vezetősége: *Dr. Pécskay Zoltán* tudományos munkatárs, *Dr. Krasznahorkay Attila* tudományos ügyintéző, *Dr. Kibédi Tibor* tudományos ügyintéző, *Dr. Kruppa András* tudományos munkatárs, *Dr. Pál Károly* tudományos munkatárs, *Papp Tibor* tudományos segédmunkatárs, *Dr. Pállinkás József* tudományos munkatárs, *Timár János* tudományos segédmunkatárs, *Andó László* kutatói ügyintéző, *Dr. Tóth József* tudományos segédmunkatárs.

1985-ben is megrendezésre került az Intézetben a *Szakma Ifju Mestere* intézeti vetélkedő. A *Szakmai Ifju Mestere* kitüntető címet és az ezzel járó jutalmat az alábbiak nyerték el: Budai Zoltán, Papp Attila, Bálint József, Pétercsák Tibor, Sári Attila. Budai Zoltán és Kelemen Tibor harmadik alkalommal teljesítette a követelményeket, ezért mindketten külön-díjban részesültek.

1985 novemberében a *Ciklotron Laboratórium* átadási ünnepsége alkalmából a *Ciklotron Laboratórium* tervezési, építési munkálatainak eredményes irányításáért és az ezzel kapcsolatos magas-szintvonalu kutatási-szervezési munka elismeréseként Dr. Valek Aladár tudományos osztályvezető a *Munka Érdemrend arany fokozatát* kapta. Ugyanakkor a *Ciklotron Laboratórium* létesítésével kapcsolatos munkájuk elismeréseként Dombi Imre főmunkatárs és Szücs István mérnök "*Kiváló Munkáért*" kitüntetést kaptak.

A Magyar Népköztársaság Elnöki Tanácsa Dr. Kovács Gyula gazdasági igazgatót nyugállományba vonulása alkalmából az intézet alapítása óta végzett eredményes gazdasági vezetői tevékenységéért "*Április Negyedike Érdemrend*" kitüntetésben részesítette.

A Magyar Népköztársaság honvédelmi minisztere a Fegyveres Erők Napja alkalmából a polgári védelem szervezése, fejlesztése és a feladatok végrehajtása terén több éve végzett kiemelkedő tevékenységük elismeréseként; Gál Ferenc kiemelt szakmunkást és Sári Kálmán osztályvezetőt *Honvédelmi Érdeméremmel* tüntette ki 15 illetve 10 év alatt végzett eredményes munkájuk elismeréseként.

Nyugállományba vonulása alkalmából "*Kiváló Munkáért*" kitüntetést kapott Erdész Jánosné gyors- és gépiró, több mint két évtizeden keresztül végzett lelkiismeretes és szorgalmas munkája elismeréseként.

2. Rendezvények

A *Finn Tudomány Napjai* Magyarországon rendezvénysorozat keretében 1985 április 17-én "*Workshop on Low Temperature Physics*" címmel egynapos tudományos műhely került megrendezésre Debrecenben, az ATOMKI-ben finn és magyar résztvevőkkel és előadókkal. A Workshop-on összesen nyolc tudományos előadás hangzott el. Az ülés kiemelkedő előadója Prof. O. Lounasmaa (Helsinki Műszaki Egyetem) a tématerület nemzetközileg ismert szaktekintélye volt.

A Nemzetközi Vákuum Unió (*International Union of Vacuum Science and Technical Applications - IUVSTA*) Végrehajtó Bizottsága 1985 október 4-6 között Debrecenben, az ATOMKI szervezésében tartotta 51. tanácsülését. A tanácsülésen 31 fő külföldi és 8 fő belföldi bizottsági tag vett részt.

1985 október 7-9 között került megrendezésre Debrecenben a **3. Magyar, Osztrák és Jugoszláv közös Vákuum Konferencia**, az Ötvös Loránd Fizikai Társulat, az Osztrák Vákuumtechnikai Tár-

sulat és a Jugoszláv Vákuum Társulatok Uniója rendezésében. A konferencia szervezőbizottságának elnöke *Dr. Berecz István*, az ATOMKI tudományos főosztályvezetője volt. A konferencia színhelye Debrecenben a DAB székház volt. A konferencia résztvevője a szorosabban vett vákuumfizika és a csatlakozó tudományágak (vékonyréteg fizika, felületfizika, ionfizika, tömegspektrometria, stb.) területén elért eredményeikről számoltak be. A résztvevők között 20 fő meghívott előadó volt, akik átfogó értékelést adtak az egyes kutatási területek nemzetközi helyzetéről, fő irányairól. A meghívott előadók nagy része nyugat-európai országokból és az USA-ból érkezett, köztük sokan a Nemzetközi Vákuum Unió vezető testületének tagjai. A konferenciára többen jöttek az NDK-ból, Lengyelországból, és Csehszlovákiából is.

A Vákuumfizikai Konferencia és az IUUSTA VB Debrecenben történt megrendezése egyértelmű elismerése az ATOMKI-ben a vákuumfizika és a kapcsolódó tudományok terén hosszú ideje végzett színvonalas kutató munkának, továbbá az olyan módszerek és műszerek (berendezések) kifejlesztésének, amelyek mind az alap- mind az alkalmazott kutatásban eredményesnek bizonyultak.

A hatodik ötéves terv legnagyobb hazai tudományos beruházásaként elkészült az *ATOMKI új Ciklotron Laboratóriuma*. A Ciklotron Laboratórium avatási ünnepsége 1985 november 15-én volt. A laboratóriumi épület kivitelezése 1982-ben kezdődött meg, 1984-ben megérkeztek a ciklotron alkatrészei Leningrádból és még 1984 őszén megkezdődött az összeszerelési munka, ezt követte a bemérés. A ciklotron szektorfókuszálású modern kis kompakt ciklotron, amelyet az Elektronfizikai Berendezések Jefremov Intézetében (Leningrád) készítettek. Az avatási ünnepség napján a vezérlő helyiség bejáratánál kifeszített szalagot *Pál Lénárd* akadémikus, az MSZMP KB titkára vágta át. *Berend T. Ivánnak*, az MTA Elnökének, *Láng Istvánnak* az MTA főtitkárának és sok más, a tudományos és politikai élet kiemelkedő személyiségének jelenlétében. Az avató ünnepségen *Pál Lénárd* és *Láng István* méltatták az új létesítmény jelentőségét, majd felszólalt a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség képviselője *J. Montes*, a Szovjet Atomenergia Bizottság nevében *A. A. Vasziljev*, a Techsnabexport Külkereskedelmi Vállalat képviselőjében pedig *V. Sz. Alihanján*. A felszólalók során *Vajda György* akadémikus, az OAB elnökhelyettese zárta.

A *Debreceni Akadémiai Bizottság Agrofizikai Munkabizottsága* 1985 november 26-án ülését az ATOMKI-ben tartotta. A munkabizottság ülésén előadást tartott az ATOMKI három munkatársa: a ciklotron laboratóriumról, a ciklotron analitikai alkalmazásairól, továbbá a ciklotron izotópok és neutron források felhasználásának lehetőségeiről.

1986 december 16-án az MTA Atommag Kutató Intézete és a *Debreceni Orvostudományi Egyetem IX. Együttes Tudományos ülését* az ATOMKI-ben tartotta. A programban szerepelt az új Ciklotron Laboratórium meglátogatása, és három tudományos előadás, amelyek közül egyet az ATOMKI kutatója (*Dr. Kovács Zoltán*) tartott, míg a másik két előadást a DOTE két munkatársa (*Dr. Szabó Tibor* és *Dr. Vámosi Bertalan*) tartotta.

3. Látogatások

Az alábbiakban - a teljesség igénye nélkül - néhány kiemelkedő belföldi vendégnek az ATOMKI-ben tett látogatásáról számolunk be, időrendi sorrendben.

1985 január 29-én látogatást tett az ATOMKI-ben *Pozsgai Imre* a Hazafias Népfront Országos Tanácsának főtitkára, *Dr. Postás Sándor* a városi pártbizottság első titkára és *Dr. Alberth Béláné* a Hazafias Népfront megyei titkára kíséretében. Berényi Dénes intézeti igazgató tájékoztatta a vendégeket az ATOMKI munkájáról és legújabb terveiről. A vendégek megtekintették az épülő ciklotron-laboratórium már akkor meglévő létesítményeit.

1985. február 20-án együttműködés ki- és továbbfejlesztése céljából látogatott az ATOMKI-be *Dr. Balázs Sándor* akadémikus a kecskeméti Zöldségtermesztési Kutató Intézet és Fejlesztő Vállalat főigazgatója néhány vezető munkatársa kíséretében. A téma közelebbről a mikroelem meghatározás módszerei és azok alkalmazása volt.

1985. április 19-én látogatást tett az Intézetben *Dr. Szürös Mátyás*, a Magyar Szocialista Munkáspárt Központi Bizottságának titkára, *Dr. Ónosi László* a megyei pártbizottság titkára kíséretében. A vendégeket *Dr. Berényi Dénes* akadémikus, intézeti igazgató, † *Dr. Schlenk Bálint* igazgatóhelyettes és *Dr. Zolnai László* az intézet párttitkára fogadta. Az intézet igazgatója tájékoztatta a vendégeket a debreceni intézet multjáról, ismertette a jelenlegi kutatási munkákat és őszintén beszélt a problémákról is. Az eszmecsere után a vendégek néhány laboratóriumot és az épülő Ciklotron laboratórium egyes létesítményeit tekintették meg.

1985. november 14-én ellátogatott az ATOMKI-be *Borisz Sztukalin*, a Szovjetunió magyarországi rendkívüli és meghatalmazott nagykövete *Dr. Bényei Miklós* az MSZMP debreceni városi bizottságának titkára és *I. G. Baljaszinszkij*, a Szovjetunió debreceni főkonzulja kíséretében. A rövid látogatás módot nyújtott arra, hogy tájékozódjon a vendég az ATOMKI-ben művelt legfontosabb kutatási területekről és a megfelelő szovjet kapcsolatokról.

4. Nemzetközi kapcsolatok

1985-ben tovább fejlődtek az intézet nemzetközi kapcsolatai. Az előző évekhez képest emelkedett a külföldi kiküldetések, illetve a külföldi látogatások száma, tovább fejlődtek a külföldi intézetekkel folyó eredményes tudományos együttműködések.

Az alábbiakban - a teljesség igénye nélkül - rövid áttekintést adunk az intézet 1985 évi nemzetközi kapcsolatainak egyes területeiről.

1985 folyamán az ATOMKI összesen 147 fő KÜLFÖLDI VENDEGET, illetve látogatócsoportot fogadott.

Az Intézetben hosszabb-rövidebb ideig itt tartozkodó vendégek közül név szerint az alábbiakat említjük meg:

Befejező *aspiránsi* évét kezdte meg *Abdel Fattah Hafez Abdel Rehim* egyiptomi fizikus, aki Dr. Somogyi György tudományos főmunkatárs irányítása alatt dolgozik az Intézetben negyedik éve.

Egy-egyéves NAŰ tanulmányuton volt az ATOMKI-ben két vietnámi kutató 1985 január közepétől: *Nguyan Xuan Than* vegyészmérnök és *Hoan Thi Nhan* fizikusnő, (az előbbi a National Institute for Nuclear Research of Viet-Nam, Hanoi, az utóbbi a Nuclear Physics Department, Hanoi Polytechnic Inst., Hanoi munkatársa). Témavezetőjük Dr. Somogyi György tudományos főmunkatárs volt.

1985.április 25-én 25 fő részvételével *NAŰ Study Tour* keretében fogadott látogatókat az intézet, főként a népi demokratikus és a fejlődő országokból. A látogatást az OAB szervezte, a Study Tour témája a kisenergiájú gyorsítók felhasználása volt.

Egyhónapos *TESCO* tanulmányuton volt az ATOMKI-ben április végétől *Dang Huy Uyen* vietnámi fizikus a Hanoi Egyetem Magfizikai Tanszékének munkatársa.

Vendégkutatóként két hónapot dolgozott az ATOMKI-ben 1985 július és augusztusában *Dr. Samir Seif El-Nasr* egyiptomi (Kuwaitban élő) fizikus-kutató, aki évek óta visszajár az intézetbe hosszabb-rövidebb vendégkutatói munkára.

Az ATOMKI meghívására érkezett az Intézetbe 1985.szeptember 26-án *Prof. K. Siegbahn* svéd egyetemi tanár, Nobel-díjas, az Uppsalai Egyetem Fizikai Intézetének igazgatója. Felkérésünkre előadást is tartott Siegbahn professzor és megtekintette az intézet néhány kutatólaboratóriumát.

Ugyancsak intézeti meghívásra érkezett 1985.szeptember 27-én néhány napra az intézetbe *Prof. Gustaf Arrhenius* egyetemi tanár (Kaliforniai Egyetem, San Diego, USA), aki felkérésünkre előadást is tartott az ATOMKI kutatói részére.

Prof. S. Shimizu japán vendég látogatását említjük még meg, (Laboratory of Nuclear Radiation, Institute for Chemical Research Kyoto University, Japan), a japán professzorral igen jó szakmai kapcsolatban van az Intézet Nukleáris Atomfizikai Osztálya, illetve az Osztály munkatársai. A japán vendég európai útja alkalmából meghívásunkra iktatta be programjába a két-napos intézetlátogatást. Ő már harmadszor járt intézetünkben.

1985.folyamán az intézet kutatói és mérnökei összesen 160 alkalommal utaztak külföldre; nemzetközi konferenciákon szemináriumokon, tudományos üléseken stb. való részvétel, ill. hosszabb-rövidebb tanulmányut, tapasztalatcsere vagy közös kutatások folytatása céljából. Nemzetközi kapcsolatainkban 1985-ben fokozott szerepet játszottak a külföldről érkező személyes meghívások, ezek növekvő száma egyrészt jelzi az intézetben dolgozó kutatók szakmai megbecsülését, másrészt e meghívások több kiutazást, ill. tanulmányutat, tehát intenzívebb nemzetközi kapcsolatokat eredményeztek.

Többéves *dubnai munkavállalásról* tért vissza az Intézet Nukleáris Atomfizikai Osztályának négy kutató munkatársa: *Dr. Varga Dezső, Dr. Kádár Imre, Dr. Ricz Sándor és Végh János*, akik négy éven át 1981-től 1985-ig a dubnai Egyesített Atomkutató Intézetben végeztek vizsgálatokat a nagyenergiájú nehézion-atom ütközések területén. *Dr. Sulik Béla* két évre, *Dr. Hock Gábor* három hónapra, *Köblös József* üzemmérnök és *Barta László* szakmunkás egy évre, illetőleg másfél évre kapcsolódtak be ebbe a munkába.

A vizsgálatok során a dubnai U-300 nehézion ciklotronnal gyorsított, különböző töltésállapotú 5,5 MeV/amu sebességű szén, nitrogén, neon és argon lövedékeknek neon atom targettel történő ütközéséből származó neon KLL Auger elektronok energiaspektrumát vizsgálták és szögeloszlás méréseket végeztek.

Az elektron spektrumok mérését a program előkészítéseként Debrecenben kifejlesztett és Dubnába kiszállított elektron-spektrométerrel végezték. Az ESA-21 elektronspektrométer lehetővé teszi mind a jó feloldású energiaeeloszlás mérést, mind a szögeloszlás ezzel egyidejű mérését.

A vizsgálatok célja a nagyenergiájú nehézion-atom ütközésekben lejátszódó többszörös ionizációs folyamatok tanulmányozása volt. A kapott eredmények: a neon K-héj ionizációs hatáskeresztmetszete és a K-héj ionizációt kísérő többszörös L-héj ionizáció valószínűsége töltésfüggésének meghatározása (alhéjanként is), s a neon szatellit Auger átmenetei anizotrop szögeloszlásának kimutatása ezekben az ütközésekben.

Dr. Gyarmati Borbála a Mexikói Egyetem Fizikai Intézetének meghívására meghívott előadóként utazott ki a VIII. Symposium on Nuclear Physics (Oaxtepec, Mexico, 1985. jan. 8-10) c. nemzetközi rendezvényre. A meghívó intézet vállalta kinti tartózkodásának összes költségeit, sőt a szimpózium után intézetlátogatásra is meghívták további egy hétre. *Dr. Gyarmati Borbála* így 1985. január 7-19-ig tartózkodott Mexikóban a meghívó fél költségére. Az utiköltséget az MTA fizette.

Dr. Koltay Ede tudományos igazgatóhelyettes a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség felkérésére nemzetközi továbbképző tanfolyam (Training Course) előadójaként utazott 1985. április végén három hétre a Kínai Népköztársaságba, majd ugyancsak a NAÜ felkérése alapján NAÜ szakértőként és előadóként június 12-től két hétre Portugáliába.

Dr. Szabó Gyula tudományos főmunkatárs 2 hónapos vendégkutatói munkára kapott meghívást a J. W. Goethe Egyetem Magfizikai Intézetétől (Frankfurt/M., NSZK) 1985. augusztusától.

Dr. Kövér Ákos tudományos munkatárs ugyanitt és ugyancsak meghívás alapján 1985. októberében egy hónapot dolgozott. Az ATOMKI és a fenti intézet között évek óta igen eredményes együttműködés áll fenn, most a következő évekre tervezett együttműködés előkészítése és más konkrét vizsgálatok végzése volt a két kutató feladata.

Dr. Kruppa András tudományos munkatárs meghívás alapján 1985. szeptemberétől négy hónapot töltött az NSZK-ban lévő Magfizikai Kutató Centrumban, Karlsruheban. A kutatócentrummal 1980 óta folynak közös kutatásaink, korábban Kruppa András már egy évet töltött ösztöndíjjal a fenti intézetben. Mostani tanulmányutjának konkrét célja az együttműködés során kialakított és sikeresen alkalmazott ugynevezett lélegző klaszter-modell további vizsgálata volt a ${}^6\text{Li}$ -on történő elektronszórási folyamatban. A számítások befejezéséhez a karlsruhei részeredményekre és az ottani nagy számítógépre volt szükség.

Dr. Lovas Rezső tudományos főmunkatárs ugyancsak meghívás alapján töltött három hónapot a fenti kutatócentrumban, 1985 szeptember elejétől, külföldi munkavállalás formájában. A munkavállalás ideje alatt Lovas Rezső konkrét feladata a ${}^6\text{Li}$ atommag részrendszerekre való szétesésének leírására szolgáló számítások befejezése volt, ehhez az ottani nagy számítógépre is szükség volt. A munkavállalás formájában végzett kutatómunka mindkét intézet érdeke volt, mivel a kinti elméleti csoport mindkét tagja váratlanul elhunyt, így az elkezdett kutatások befejezetlenül maradtak volna.

Vass Albert tudományos segédmunkatárs 1985. augusztus 30-tól 6 hónapot töltött NAÜ ösztöndíjjal Darmstadtban a GSI-ben (Gesellschaft für Schwerionenforschung, Experimental Electronics Department). Előreláthatólag Vass Albert a fenti intézettől 1987-re további egyéves időtartamra szóló vendégkutatói meghívást fog kapni.

Dr. Somogyi György tudományos főmunkatárs, csoportvezető a NAÜ felkérésére meghívott előadóként és laboratóriumi kísérleti munka vezetői minőségben vett részt az 1985. szept. 2-27. között Kielben (NSZK) és Rómában (Olaszország) rendezett Nemzetközi Szilárdtest Magfizikai Nyomdetektorokkal foglalkozó Training Course-on.

Dr. Zolnai László tudományos osztályvezető meghívást, ill. felkérést kapott arra, hogy NAÜ szakértőként a Zágrábban 1985. nov. 11. és dec. 13. között rendezendő, röntgenfluoreszcenciás analitikai adatok feldolgozása és értékelése tárgyában tartandó tanfolyamon meghívott előadóként, ill. gyakorlatvezetőként résztvegyen. A kiküldetés összes költségét a NAÜ fedezte.

Dr. Berényi Dénes intézeti igazgató 1985. decemberében (dec. 3-7. között) résztvett a bécsi Nemzetközi Atomenergia Ügynökség Tudományos Tanácsadó Bizottságának ülésén. Dr. Berényi Dénest 1985. októberében hároméves időtartamra választották meg a Tudományos Tanácsadó Bizottság (SAC) tagjának.

Összeállította: Kovách Ádámné

Az ATOMKI KÖZLEMÉNYEK évenként több számban jelenik meg. Tudományos intézeteknek cserepéldányképpen vagy kérésükre díjtalanul megküldjük, kötelezettség nélkül. Magánszemélyeknek esetenkénti kérésére 1-1 számot vagy különlenyomatot szívesen küldünk. Ilyen irányú kéréseket az intézet könyvtárszolgálatához kell irányítani. /ATOMKI, 4001 Debrecen, Postafiók: 51./

Szerkesztő Bizottság: Szalay Sándor elnök, Lovas Rezső titkár, Berényi Dénes, Csikai Gyula, Gyarmati Borbála, Medveczky László.

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete

A kiadásért és szerkesztésért felelős
Dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója

Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában

Törzsszám: 65768

Debrecen, 1986. június

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

340.565

IV. 29

ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

28. kötet / 3. szám



MTA

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1986

ATOMKI Riport X/27 (1986)

ANYAGVIZSGÁLATI MÓDSZEREK ÉS MŰSZEREK

a KFKI, az Izotóp Intézet és az ATOMKI
laboratóriumaiban

S Z E M I N Á R I U M

Budapest, 1986. április 26.

Debrecen, 1986. május 20.

Szerkesztette Gyulai József és Máthé György

AZ ELŐADÁSOK SZÖVEGE A SZERZŐI KÉZIRATOK VÁLTOZATLAN LENYOMATA

DEBRECEN

1986

ELŐSZÓ

A korszerű anyagvizsgálat igénye egyre sürgetőbben jelentkezik országunkban. Számos módszer létéről különböző konferenciákon, tudományos és népszerűsítő cikkekből, sőt hirdetésekben értesülhettünk. A KFKI, Izotóp Intézet és az ATOMKI részéről felmerült a gondolat, hogy legalább a saját intézetekben művelt, vagy ismert, esetleg kisebb-nagyobb műszerparkkal rendelkező módszerekről rendezzünk egy seregszemlét. A kapcsolat felvétel az információ átadáson túl kombinált módszerek kialakítására közös feladatok megoldására is kaput kívánt nyitni. A közös szeminárium két részletben Budapesten 1986 április 26-án, ill. Debrecenben május 23-án zajlott le. Az elhangzott, illetve beküldött előadások anyagát a szélesebb körű információ tovább adása céljából jelen kiadványban adjuk közre.

Gyulai József
KFKI

Máthé György
ATOMKI

mint a szeminárium szervezői

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Fehér András és Török Szabina:</i> Anyagvizsgálat a röntgenfluoreszcenciás elem- analízis (RFA) módszerével	79
<i>Szőkefalvi-Nagy Zoltán:</i> Biofizikai munkacsoport analitikai módszerei	82
<i>Kis-Varga Miklós:</i> Energiadiszperzív röntgenfluoreszcencia analízis	84
<i>Vatai Endre:</i> Hordozható röntgenemissziós analizátor	87
<i>Borbélyné Kiss Ildikó, Koltay Ede és Szabó Gyula:</i> A protongerjesztéses röntgenemisszió (PIXE), mint analitikai módszer	88
<i>Zolnai László és Szabó Gyula:</i> Röntgenspektrumok kiértékelése különös tekintettel PIXE mérésekből nyert spektrumok kiértékelésére	90
<i>Guczi László:</i> Elektronspektroszkópia a szilárd anyagok legkülső felületéről (1-5 atomrétegből)	94
<i>Kövér László és Tóth József:</i> Elektronspektroszkópia és felületvizsgálat az ATOMKI-ben	95
<i>Bohátka Sándor:</i> Kvadrupól tömegspektrométer	108
<i>Vértes Ákos:</i> Lézerionizációs tömegspektrometria	110
<i>Nyáry István, Matus Lajos és Künstár Mihály:</i> Szikraionforrásos tömegspektrometria	112
<i>Mészáros Sándor, Novák Dezső és Vad Kálmán:</i> SQUID analitikai alkalmazásai	114
<i>Pogány Lajos:</i> Pásztázó elektronmikroszkóp és mikroszonda	118
<i>Zsoldos Lehelné:</i> Röntgen diffrakciós laboratórium	119
<i>Balaskó Márton:</i> Dinamikus neutron-, gamma- és röntgen radiográ- fiai vizsgálati lehetőségek a KFKI-ban	121
<i>Pócsik István:</i> Szilárdtestek mag mágneses rezonanciája (NMR)	123
<i>Nagy Dénes Lajos:</i> Hagyományos Mössbauer-spektroszkópia	126

<i>Fetzer Csaba:</i>		
	Konverziós elektron Mössbauer spektroszkópiai módszer (CEMS)	127
<i>Rausch Henrik, Elek Antal, Sziklainé László Ibolya és Simonits András:</i>		
	Reaktor neutronaktivációs analízis	129
<i>Zemplénné Papp Éva:</i>		
	Neutrongenerátoros aktivációs elemzés	137
<i>Mezei Gábor és Gyulai József:</i>		
	A Rutherford-visszaszórás, a rugalmasan meglökött magok detektálása a csatornahatás, valamint magreakciók alkalmazása analitikai célokra	139
<i>Cser László, Sváb Erzsébet és Rosta László:</i>		
	Neutrodiffrakció és kisszögű neutronszórás	145
<i>Lőrincz András:</i>		
	Fotoakusztikus és hőhullámspektroszkópiai módszerek az Izotóp Intézetben	147
<i>Mink János:</i>		
	Nagyérzékenységű Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópia	149
<i>Bakos József és Vértes Ákos:</i>		
	Lézeres rezonancia módszerek a kémiai analízisben	151
<i>Lohner Tivadar, Fried Miklós és Jároli Erika:</i>		
	Az ellipszometria alkalmazása vékonyrétegek minősítésére és vizsgálatára	153
<i>Elter Dénes:</i>		
	Számítógépes potenciometriás stripping analízis	155
<i>Elek Antal:</i>		
	Nagyterefogatu vizes oldatok tisztaságának és radioaktivitásának vizsgálata	157
<i>Ditrói Ferenc, Mahunka Imre és Takács Sándor:</i>		
	Ciklotronra alapozott anyagvizsgálati lehetőségek	159

ANYAGVIZSGÁLAT A RÖNTGENFLUORESZCENCIÁS ELEMÁNALIZIS (RFA) MÓDSZERÉVEL

(POTENCIÁLIS IPARI ÉS MEZŐGAZDASÁGI FELHASZNÁLÓK RÉSZÉRE
KÉSZÜLT TÁJÉKOZTATÓ)

FEHÉR ANDRÁS ÉS TÖRÖK SZABINA

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A módszer alkalmazásával a vizsgált anyagminta vékony, legfeljebb néhány mm vastagságu /például felületi/ rétegének elemösszetétele adható meg a készülék minőségétől függő pontossággal és gyorsasággal.

A módszer lényege egyszerűen szemléltethető a jóval ismertebb szinképelemzéshez hasonlítva. Szinképelemzés esetén az anyagmintát fénykibocsátásra készítjük /izzitással, égetéssel, intenzív megvilágítással, stb./ és a kibocsátott fény szinképvonalainak erősségét mérve következtetünk az elemi összetételre. Az RFA módszerrel az anyagot röntgensugárzás emittálására bírjuk /gerjesztjük/ és az elemenként különböző energiájú röntgensugárzás vonalainak intenzitását mérjük. Az intenzitás adatok birtokában adható meg a minta összetétele.

Az RFA módszerre alapozott készülékek lényegében a gerjesztés és a detektálás módjai, illetve eszközei szerint osztályozhatók:

A/ A gerjesztést végezhetjük radioizotópos forrással, röntgensővel, vagy részecskegyorsítóval. 10 ppm koncentráció felett az első két módszer valamelyikét alkalmazó készülékek előnyösebbek olcsóságuk és hordozhatóságuk miatt.

B/ A szinkép elemzését, tehát a kibocsátott röntgenfotonok detektálását, osztályozását alapvetően kétféleképpen végezhetjük: a röntgenfotonoknak vagy energiáját, vagy hullámhosszát mérjük. Az első esetben néhány speciálisan egyszerű feladattól eltekintve általában félvezető detektorra és a hozzá kapcsolódó elektronikus egységekre, valamint a

feladattól függő nagyságu számítógépre van szükség /többnyire kisteljesítményű személyi számítógép/. Az alkalmazások többsége ilyen.

Nagyobb pontosság érhető el és többféle elem határozható meg, ha a gerjesztett röntgensugárzás hullámhosszát mérjük. Az ehhez szükséges berendezés ára általában az előbbi többszöröse.

A legelterjedtebben használt közepes teljesítőképességű RFA készülékek tehát a minta röntgengerjesztésére radioizotópos /zárt/ sugárforrást, vagy röntgensövet használnak, detektorként többnyire félvezető szilícium - Si/Li/- detektort.

Ehhez járulnak az elektronikus egységek és egy kisteljesítményű számítógép olcsó mágnes tárolóval és nyomtatóval. Egy jellegzetes mérés - például Ca és S meghatározás erőművi szekben - az alábbiak szerint történik: A mintát őröljük, szárítjuk, bórsavval keverjük és homogenizáljuk, majd tablettát préselünk belőle. A tablettát a készülékbe helyezzük és 1000 s időtartamu mérést végzünk. A mérőműszerek adataiból és előző hitelesítési adatokból a számítógép 30 s alatt megadja a minta Ca- és S-tartalmát és a hozzá tartozó mérési hibát.

Egy ilyen "közepes" RFA készülékre vonatkozó jellemzők:

- az alumíniumnál /Z=13/ nagyobb rendszámú elemek bármelyike, a gerjesztő sugárzás energiáját megfelelően megválasztva, vizsgálható;
- a spektrumban 15-18 elem karakterisztikus vonalait jól fel lehet bontani;
- 10 ppm-100 % koncentrációtartományban pontos eredményt ad;
- vizsgálható bármilyen szilárd minta, porok, tabletták, megfelelő körülmények esetén folyadékok is;
- a minta előkészítés minimális, kémiai eljárást nem igényel. Darabos anyagok esetén őrlés, pasztillázás elegendő, de sok esetben még mechanikusan is roncsolásmentes /pl. fémlemez csikok analízise/;
- tipikus analízis-idő mintánként 5-30 perc;
- a mérés jól automatizálható, gyorsan és kis költséggel elvé-

gezhető. Áramló, csuszó minták folyamatosan mérhető;

- a készülék helyigénye kicsi /íróasztalnyi/, így akár mikrobuzsba is beépíthető.

Javasolt analitikai feladatok:

- multielemes kvalitatív analizisek;
- makroszkópikus mintákból kis- és nyomkoncentrációk meghatározása;
- mikroszkópikus minták fő alkotóelemeinek analizise;
- folyamatosan áramló, elhaladó minták, felületek analizise /pl. bevonatok/.

Eddigi felhasználások:

- búzák mangán-, vas-, réz- és cinktartalmának meghatározása;
- különböző kiörlésű lisztek kalcium-, kálium-, mangán-, vas-, réz-, cink- és ólomtartalmának meghatározása;
- állati takarmány premixek kvantitatív analizise /P, Ca, K, Mn, Fe, Cu, Zn, Se, Pb/;
- toxikus elemek /Hg, Pb/ meghatározása vizekben;
- nagytisztaságú kerámiák nyomszennyezőinek mérése;
- erőművi hűtővizek kiszűrt lebegő szennyezőinek analizise;
- légköri porminták összehasonlító vizsgálata;
- erőművi szén és pernye Ca- és S-analizise.

Technikai és vállalási lehetőségek a KFKI Kémiai Főosztályán:

Rendelkezésre áll két Canberra gyártmányú izotópforrásos rendszer és közvetlen /in-line/ számítógépes méréskiértékelés. Így lehetőség van elemanalizisre. RFA-s és korábbi mérésautomatizálási tapasztalatok birtokában célorientált izotópforrásos, vagy röntgensöves feladatok megoldására, készülékfejlesztésre, ipari rendszerbe illesztésre tudnánk vállalkozni.

BIOFIZIKAI MUNKACSOPORT ANALITIKAI MÓDSZEREI

SZŐKEFALVI-NAGY ZOLTÁN

Központi Fizikai Kutató Intézet, 1525 Budapest, Pf. 49.

1. Részecskék keltette röntgensugárzás emisszió módszere (PIXE)

A PIXE vizsgálatoknál a mintát a KFKI 5 MV-os Van de Graaff gyorsítójával előállított 2-4 MeV energiájú protonokkal (esetként alfa- vagy deuteron nyalábbal) bombázzuk. A protonok a minta atomjainak belső, zárt elektronhéjaiból elektronokat ütnek ki, az elektronszerkezetek helyreállása során karakterisztikus röntgensugárzás bocsátódik ki. A sugárzás energiája a kibocsátó elem rendszámával, az erőssége pedig annak koncentrációjával van egyértelmű kapcsolatban. A röntgensugárzást nagy felbontóképességű Si(Li) detektorból, jelformáló és erősítő elektronikából és sokcsatornás analizátorból álló spektrométerrel mérjük, az adatokat számítógéppel dolgozzuk fel.

A módszer főbb jellemzői:

- Nagyérzékenységű, sokelemes, gyors elemanalitikai eljárás.
- Gyakorlatilag minden, a magnéziumnál nehezebb elem egyidejűleg mérhető.
- A kimutatási érzékenység minden elemre közel azonos, 1-10 ppm nagyságrendű.
- A mérés maga roncsolásmentes, a minták gyakran közvetlenül, minden előkészítés nélkül vizsgálhatók.
- Vastag minták esetén a módszer felületanalitikai eljárásnak tekinthető, mivel a protonok behatolási mélységéből, azaz a minta néhány mikrométer vastag külső rétegéből szolgáltat információt.
- Igen kis anyagmennyiség (<1 mg) elegendő a méréshez.
- Jól kombinálható a visszaszórásos és a magreakciós technikával.
- A részecskenyaláb vékony fólián keresztül kihozható az atmoszférára és így vákuumba nem helyezhető minták (pl. folyadékok) és nagyméretű tárgyak pl. (régészeti leletek) részletei közvetlenül vizsgálhatók.
- A nyaláb kollimálásával 0,1 mm-es laterális felbontás könnyen elérhető.
- Mélységeloszlás vizsgálatára nem alkalmas.

2. Analízis néhány MeV energiájú részecskék keltette prompt magsugárzás segítségével

Az 1-5 MeV energiájú protonok, deutronok a minta atomjainak magjaival kölcsönhatásba lépve magreakciókat hoznak létre. Az analízis azon az alapon végezhető, hogy a reakciótermékek milyensége (gamma sugárzás, töltött részecskék), illetve energiája jellemző arra, hogy milyen izotóppal történt a kölcsönhatás. A könnyű elemek (C, N, O...) legkönnyebben 1-3 MeV energiájú deutronokkal előidézett (d, p) reakciók segítségével vizsgálhatók, míg a nehezebb elemek 1-5 MeV-es protonok keltette gamma sugárzás segítségével határozhatók meg (PIGE módszer). A töltött részecskék spektrumát felületi záróréteges Si detektorral, a gamma sugarakét Ge(Li) detektorral és a PIXE módszerrel is használt feldolgozó elektronikával mérjük.

A módszer főbb jellemzői:

- Izotóppérezékeny, többelemes analitikai eljárás.
- A kimutatási érzékenység izotópról izotópra erősen változhat (0,1 ppm - néhány %)
- Kombinálható a PIXE módszerrel.
- Vastag minták esetén a módszer felületanalitikai.
- Alkalmos rezonancia reakciók esetén kiválóan használható mélységeloszlás meghatározásra.
- A PIXE módszerhez hasonlóan a nyáláb atmoszférára is kiterjeszhető.

3. Izotópperjesztéses röntgenfluoreszcencia analízis

A PIXE módszerrel analóg eljárás, az egyetlen különbség az, hogy ebben az esetben nem részecskenyáláb, hanem gyűrű alakú radioaktív forrás által kibocsájtott röntgen- vagy gamma sugárzás ionizálja a minta atomjait és kelti a karakterisztikus röntgen sugarakat. A könnyebb elemeket (Si-V) Fe-55, míg a nehezebbeket Cd-109 forrással mérjük. A mérőrendszer teljesen azonos a PIXE méréseknél használttal. Főbb jellemzői a PIXE sajátosságaihoz hasonlóak, a legfontosabb különbség az, hogy elfogadható mérési időkhöz nagyságrendekkel nagyobb mintamennyiségre van szükség. Ennek a tulajdonságnak a további következménye, hogy egy-két négyzetmilliméternél kisebb területek gyakorlatilag nem analízálhatók.

ENERGIADISZPERZIV RÖNTGENFLUORESZCENCIA ANALIZIS

KIS-VARGA MIKLÓS

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51. 4001

A röntgenfluoreszcencia analízisnek több válfaja terjedt el világszerte. Így hazánkban is, amely egyrészt a gerjesztés, másrészt a detektálás módjában különböznek egymástól. Klasszikus, jól bevált módszert képvisel a *hullámhossz-diszperzív* röntgenfluoreszcencia analízis, amely a kristálydiffrakció elve alapján igen jó energiafelbontású, sokelemes analízisre nyújt lehetőséget. Hazánkban több ilyen készüléket használnak, elsősorban az alumínium-, színesfém-, szilikát- és vasiparban. A Si(Li) detektoros *energiadiszperzív* módszerek közé sorolható lényegében a PIXE és az elektronsugaras mikroanalízis is, egyszerűségénél fogva azonban jóval szélesebb körben terjedt el a foton (elsősorban izotóp) gerjesztéses megoldás.

A módszer főbb jellemzői (szimultán, sokelemes, roncsolásmentes analízis, néhány ppm érzékenység, néhány relatív %-os pontosság, széles rendszámtartomány, stb.) jól ismertek. Az utóbbi években az alábbi főbb fejlődési irányok figyelhetők meg:

Gerjesztés:

- A korlátozott számban rendelkezésre álló radioaktív izotópok mellett egyre több helyen alkalmaznak *röntgencsővet* gerjesztésre. Ezek javarészt kis teljesítményű, léghűtéses csövek, amelyeket folytonos vagy pulzált üzemmódban használnak. A háttér csökkentésének ígéretes módja a gerjesztő nyaláb polarizálása (pl. reflexió, kis szögű szórás) amellyel ng-os érzékenységet értek el.

Detektálás:

- A *hűtött Si(Li)* detektorok energiafelbontó képessége (kb. 150 eV 6 keV-nél) lényegében az elvi határ közelében van. A törekvések elsősorban a belépő ablakok abszorpciójának csökkentésére irányulnak (ablak nélküli detektorok, vékonyabb holtréteg, stb.)
- Elfogadható energiafelbontó képességet értek el *driftelés nélküli hűtött* detektorokkal:
 - p-típusú nagy tisztaságú Si: 170 eV
 - neutron transzmutációs dopolású Si: 190 eV
 - HpGe: 150 eV.
- Próbálkozás történt a cseppfolyós N₂ *hűtés kiküszöbölésére*. Többfokozatú Peltier-kaszkáddal kb. 190 eV-et értek el. Létezik a piacon gázexpánziós hűtésű Si(Li) detektor, de készítették kis méretű, zárt ciklusú hűtőgéppel működő spektrométert is.

- Szobahőmérsékletű detektorok: passzívált, ionimplantált Si detektorral 1,1 keV, míg HgI₂ kristállyal 190 eV felbontást értek el.

Jelfeldolgozás:

- A röntgenscő által keltett *nagy beütésszám* magas követelményeket állít a jelfeldolgozókkal szemben. A legjobb eredményt pulzált röntgenscő és analóg jelfeldolgozó kombinációban érték el. Megfigyelhető a hagyományostól eltérő elveken működő jelfeldolgozó kifejlesztésére (pl. digitális szűrés) irányuló törekvés is.

Kiértékelés:

- A számítógépek széleskörű elterjedésével egyre inkább tért hódítanak az ugynevezett *alapvető paraméter* módszerek, illetve egyéb korrekciós eljárások, amelyek minimális számú etalont igényelnek, viszont nagy mennyiségű adattal komplikált számítások eredményeként szolgáltatják az összetételt. Ugyancsak jogos igény ma már a szinte teljesen *automatizált spektrumkiértékelés*. A módszerek egy része analitikus függvényeket, más része mért spektrumkönyvtárat illeszt a spektrumra.

A téma jelenlegi helyzete az ATOMKI-ban.

Műszerfejlesztés:

- Kis sorozatban forgalmazzuk az NZ-860 *vertikális Si(Li)* mérőfejet (150-170 eV)
- Elektronmikroszkóphoz, PIXE és kristálydiffrakciós célra alsó kivezetésű *ferde*, illetve *horizontális* kriosztátot készítettünk.
- Elkészült egy új *flexibilis Si(Li)* kriosztát prototipusa.
- Sorozatban készül az NZ-870 *jelfeldolgozó*, amely az igen jó spektroszkópiai paraméterek mellett az alábbi szolgáltatásokat nyújtja: iongetter-szivattyú tápegység, detektor tápfeszültség forrás, holtidő korrekció.
- Kifejlesztettük az NZ-854 *röntgenanalizátort*, amely tartalmazza lényegében az NZ-870-et, egy BASIC nyelven programozható számológépet, nyomtatót és kazettás magnó tárolót. 1024 csatornás röntgenspektrum gyűjtésére alkalmas.
- Egy 50 kV, 200 μ A-es *röntgenscő tápegységet* fejlesztettünk ki, amelyhez egy BH-1 típusú változtatható anódu röntgenscövet illesztettünk.
- Végéhez közeledik egy *digitális szűrésen* alapuló *jelfeldolgozó* egység kifejlesztése, amelytől a nagy terhelhetőséget és jó energiafelbontást várjuk. Alkalmazásával elhagyható az ADC is, annak minden hátrányával (nonlinearitás, holtidő, stb.) együtt.

Analitikai mérőrendszerek:

- Elsősorban biológiai kutatásokhoz: ATOMKI Si(Li)+jelfeldolgozó
CANBERRA 35 + analizátor
Macintosh számítógép
I-125 és Fe-55 izotópok

- Elsősorban fejlesztéshez, illetve analitikai célra:

ATOMKI Si(Li) + jelfeldolgozó
ICA-70-TPAI, illetve NZ-854
I-125 és Fe-55 izotópok
Am-241 szekunder targetes gerjesztő elrendezés
50 kV, 200 μ A változtatható
anodu (Fe, Cu, Ge, Mo, Ag) röntgencső

Alkalmazások:

- biológiai vizsgálatok
- fémötvözetek analizise
- régészeti vizsgálatok
- környezetszennyezés vizsgálatok
- talaj, kőzet analízis

Rutinszerűen használt módszereink és programjaink:

- könnyű mátrixu minták ($Z < 15$) mikro- és makroelemeinek meghatározása
- rézötvözetek analizise empirikus korrekciós eljárással
- fémötvözetek elemzése alapvető paraméterek módszerével
- urántartalom meghatározása széles koncentráció tartományban, eltérő mátrixokban
- kőzetek nyomelemeinek analizise.

HORDOZHATÓ RÖNTGENEMISSZIÓS ANALIZÁTOR

VATAI ENDRE

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51. 4001

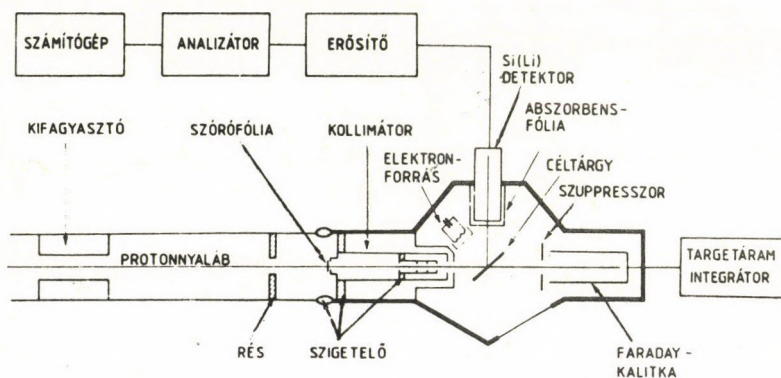
Hordozható röntgenemissziós analizátor céljaira alapvetően két módszer használható. Az 1965-75 közötti évtizedben az abszorpciós-él típusu szűrők alkalmazásával készült analizátorok voltak tulsulyban. A proporcionális számlálók (spektrométerek) területén elért fejlődés, melynek során a spektrométer feloldását az Mn K_{α} sugárzására 17 %-ról 10-11 %-ra sikerült csökkenteni, kiegészülve a mikroszámítógépek alkalmazásával, ahhoz vezetett, hogy a proporcionális spektrométerek alkalmazásán alapuló analizátorok terjedtek el a legutóbbi évtizedben. Az elmúlt években olyan, az abszorpciós-él típusu szűrőkön alapuló analizátort hoztunk létre, amely bizonyos területen versenyképes, illetve jobb a proporcionális spektrométert alkalmazóknál. A fejlesztés lényege az, hogy röntgensöves gerjesztést (25 kV, 0,1 mA) és ionizációs kamrát alkalmazunk áramméréssel. Több detektor alkalmazásával a mérést egyidejűleg hajtjuk végre az alul- és felülvágó szűrőkkel. Az árammérés azt eredményezi, hogy a detektor holtideje nem korlátozza a hasznosítható beütésszámot, így a röntgenső által szolgáltatott a radioaktív forrásokhoz viszonyítva nagy gerjesztő intenzitás teljes mértékben hasznosítható. Ez a statisztikus hiba 2-3 nagyságrenddel történő lecsökkentését tette lehetővé a mérési idő megnövelése nélkül (10-20 sec). A meghatározás teljes, a hitelesítési görbe, a mintakészítés, stb. hibáját is magába foglaló hibája egy nagyságrenddel is kisebb lehet, mint a proporcionális spektrométerrel elérhető. Így pl. gyengén ötvözött acélok Cr és Mn tartalmát a 0-1,5 % koncentráció tartományban 0,02 illetve 0,03 % standard hibával határoztuk meg. A finn OUTOKUMPU OY készülékével a Cr 0,1 %-os hibával határozható meg, a mangán a vas által létrehozott nagy háttérsugárzás miatt nem mérhető. Analizátorunk alapvetően egy elem meghatározására szolgál, másik elem meghatározására szűrőcserével lehet áttérni. A röntgenső anódjának megválasztásával egy adott elem meghatározása optimalizálható.

A PROTONGERJESZTÉSES RÖNTGENEMISSZIÓ (PIXE), MINT ANALITIKAI MÓDSZER

BORBÉLYNÉ KISS I., KOLTAY E., SZABÓ GY.

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51, 4001

Az ATOMKI 5 MeV-es VdG gyorsítójának jobb 45° -os mérőcsatornáján elhelyezett mérőkamrában végzünk PIXE módszerrel (nyom)elem-analizist. A minták diakereten vannak elhelyezve, melyeket egy diatáras adagolóval juttatunk a mérőkamrába. Így csak minden 36 minta mérése után kell megszüntetni a kamrában a vákuumot, majd a diatár cseréje után újra leszívni azt. Más mintatartót használva lehetséges hely szerinti elemeloszlás mérése is, jelenleg 1 mm-es feloldással. Az analízis levegőre kihozott nyalábbal is végezhető, de ebben az esetben csak a $Z > 18$ rendszámú elemekre. A mérési elrendezés az 1. ábrán látható.



1. ábra. Mérési elrendezés

A karakterisztikus röntgensugarak keltésére 2 MeV-es szóratott, illetve szóratás nélküli protonnyalábot használunk, a kívánt nyalábátmérőre kollimálva. A nyalábátmérő jelenleg 1 mm és 6 mm között változtatható. A szóratás a protonnyaláb homogenizálását szolgálja. Homogén intenzitáseloszlású protonnyalábra van szükség minden olyan minta analízisének, amely maga nem tekinthető homogénnek és mérete a nyalábméretnél kisebb.

A szigetelő anyagu minták feltöltődésének megszüntetésére egy elektronforrást alkalmazunk.

A röntgensugarak detektálása Si(Li) detektorral történik, melyet a nyalábirányhoz viszonyítva 90° -ban, illetve 135° -ban helyezhetünk el.

A kamra a földtől és a mérőcsatornától szigetelt, így vastag minta analizisénél is lehetséges a pontos árammérés.

A jelfeldolgozás NZ-871 típusu analóg jelfeldolgozó rendszerrel történik, a spektrumok tárolását és előzetes feldolgozását egy PDP8/I 50/50 rendszerrel végezzük.

A PIXE módszerrel a $Z \geq 13$ rendszámú elemek mutathatók ki egyidejűleg a minta olyan vastag rétegéből, ameddig abba a protonok behatolnak. Ez a mélység általában néhányszor tíz mikrométer.

A módszer relatív érzékenysége 10^{-6} - 10^{-7} g/g, a kimutathatósági határ függ az elemtől, a begyűjtött töltéstől és a minta matrixától.

A mérés pontossága elemtől és matrixtól függ 5-15 % között változik.

Biológiai (szerves) mintáktól eltekintve az analizis roncsolásmentes.

A minta előkészítése egyszerű, az elemanalizishez szükséges anyagmennyiség vastag mintánál ~ 80 mg (1 mm vastag, 10 mm átmérőjű tabletta), vékony mintánál ~ 60 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

A spektrumok kiértékelését azaz a mintát alkotó $Z \geq 13$ elemek meghatározását jelenleg el tudjuk végezni minden vékony minta esetén és minden olyan vastag mintánál, amelynél a mátrix ismert és a másodlagos gerjesztési effektusok elhanyagolhatók.

A spektrumfeldolgozás menete Zolnai Lászlónak a "röntgenspektrumok kiértékelésére vonatkozó ismertetésében" található.

A PIXE módszer alkalmazása széleskörű, jól használható aeroszolok vizsgálatára a légkör kutatásban vagy a munkahelyek levegőszennyezőinek kimutatásában.

Alkalmas a nyomelemek meghatározására biológiai mintákban, a mezőgazdaság, orvostudomány területén.

A PIXE lehetővé teszi archeológiai minták roncsolásmentes analizisét (kihozott nyalábbal) és felhasználható a geológia, a talajkutatás és az anyagszerkezeti kutatások területén is.

RÖNTGENSPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSE KÜLÖNÖS TEKINTETTEL PIXE MÉRÉSEKBŐL NYERT SPEKTRUMOK KIÉRTÉKELÉSÉRE

ZOLNAI L. és SZABÓ GY.

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51, 4001

A modern nukleáris mikroanalitikai eljárások egy része röntgenspektrumok mérését és kiértékelését igényli. Az intézetünkben végzett PIXE munkák céljaira létrehoztunk egy programrendszert, amellyel a spektrumokból közvetlenül koncentrációadatokat határozhatunk meg. A programrendszer napi 100-200 spektrum kiértékelésére alkalmas (lebegő pontos aritmetikai egység nélküli PDP-11/40 processzoron). Ez ideig főleg légköri és biológiai minták analizisét végeztük ezzel a programrendszerrel. A teljes (mérő- és kiértékelő) rendszerre vonatkozó abszolút koncentráció meghatározási pontosság jobb mint 5 százalék (NBS orchard leaves standarden mérve).

A programrendszer spektrumkiértékelő programja más, bármilyen gerjesztésből kapott röntgenspektrumok kiértékeléséből abszolút koncentrációértéket szolgáltat, ha az egyes elemekhez tartozó átmenetek egységnyi gerjesztésre eső effektív intenzitása (irodalomból vagy a mérési összeállítás hitelesítéséből) megadható. Protongerjesztés esetére ezeket az adatokat a programrendszer egy másik tagja számolni tudja (vékony és vastag minta esetére egyaránt). Az adatok hiányában a spektrumkiértékelő program relatív mérések kiértékelésére is alkalmas (a standard lehet magában a mért mintában, de megadható egy másik minta is standardként).

1. A programrendszer alkotórészei

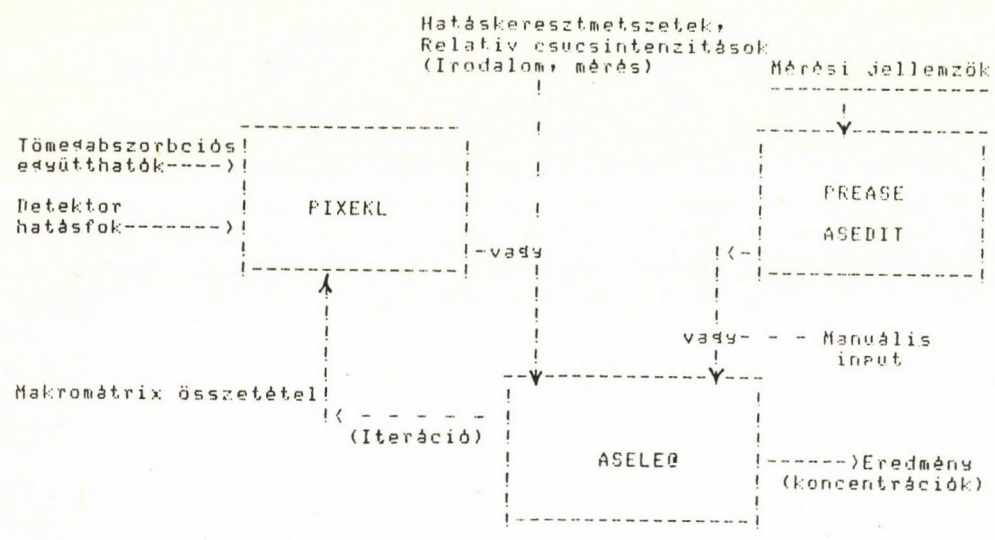
- I. - PIXEKL - Fundamentális paramétereket használó, K és L effektív röntgenkeltési hatáskeresztmetszeteket adott makromatrix összetételre, protongerjesztés esetén számoló program.
- II. - PREASE - Kezdeti értékeket becsülő program.
- III. - ASEDIT - Menüsisztémán alapuló input file szerkesztő program.
- IV. - ASELE@ - (@=X,C,S) spektrumkiértékelő program

2. Az egyes programok jellemzői

- I. - PIXEKL
 - 1. Elmélet: ECPSSR
 - 2. Vékony és vastag targetre számolhat
 - 3. Si(Li) hatásfok görbe paramétereit és a mérés geometriai jellemzőit igényli
 - 4. Különböző szűrőket vehet figyelembe a detektor előtt
 - 5. Gép, O.S., nyelv: PDP-11/40, RSX-11M V3.2, FORTRAN-IV
 - 6. Továbbfejlesztési irányok: Röntgen és elektrongerjesztés esetére való számolás, M vonalak
- II. - PREASE -
 - 1. Gép, O.S., nyelv: PDP-11/40, RSX-11M V3.2, FORTRAN-IV; DEC-350 (380), TPA-11/440, RSX-11M V4.2, FORTRAN-IV, FORTRAN'77
- III. - ASEDIT
 - 1. Gép, O.S., nyelv: PDP-11/40, RSX-11M V3.2, FORTRAN-IV; DEC-350 (380), TPA-11/440, RSX-11M V4.2, FORTRAN-IV, FORTRAN'77
 - 2. Megjegyzés: VT52 típusu, vagy azzal kompatibilis terminál szükséges
- IV. - ASELE@
 - 1. Koncentrációsámítás: Abszolút, relatív mérés, vékony és vastag target
 - 2. Változatok:
 - a. - ASELEX - rutinfeladatokra
 - b. - ASELEC - nehezebb esetekre (javított iterációs eljárás)
 - c. - ASELES - pile-up -os spektrumokra
 - 3. Korlátok:
 - a. Max. 512 csatornás spektrumok
 - b. Max. 128 csucs
 - c. Max. 32 fittelendő paraméter (kb. 20 elem)
 - 4. Egyedi és sorozatspektrum feldolgozási lehetőség (nem-lineáris és lineáris illesztés)
 - 5. NZ-871 jelprocesszorral mért spektrumokban nul-csucs kiértékelés és holtidő korrekció
 - 6. Részenként szabályozható output
 - 7. A nyert adatok statisztikai feldolgozását lehetővé tevő másodlagos output file
 - 8. Bemelő spektrum kód: 8 különböző, választható
 - 9. Illesztett spektrum kimenet
 - 10. Sornyomtató típusu plot (logaritmikus vagy lineáris)
 - 11. Összefoglaló táblázat
 - 12. Matematikai model: $\text{Spektrum} = \text{Háttér} + \text{Strukturák}$ összege
 - a. $\text{Háttér} = \text{Nulcsucs} + \text{Alacsonyenergiájú háttér} + \text{Fékezési háttér} + \text{Magasenergiájú háttér} + \text{Pile-up}$
Az egyes háttérkomponensek egymástól függetlenül választhatók, a Pile-up csak ASELES-ben.

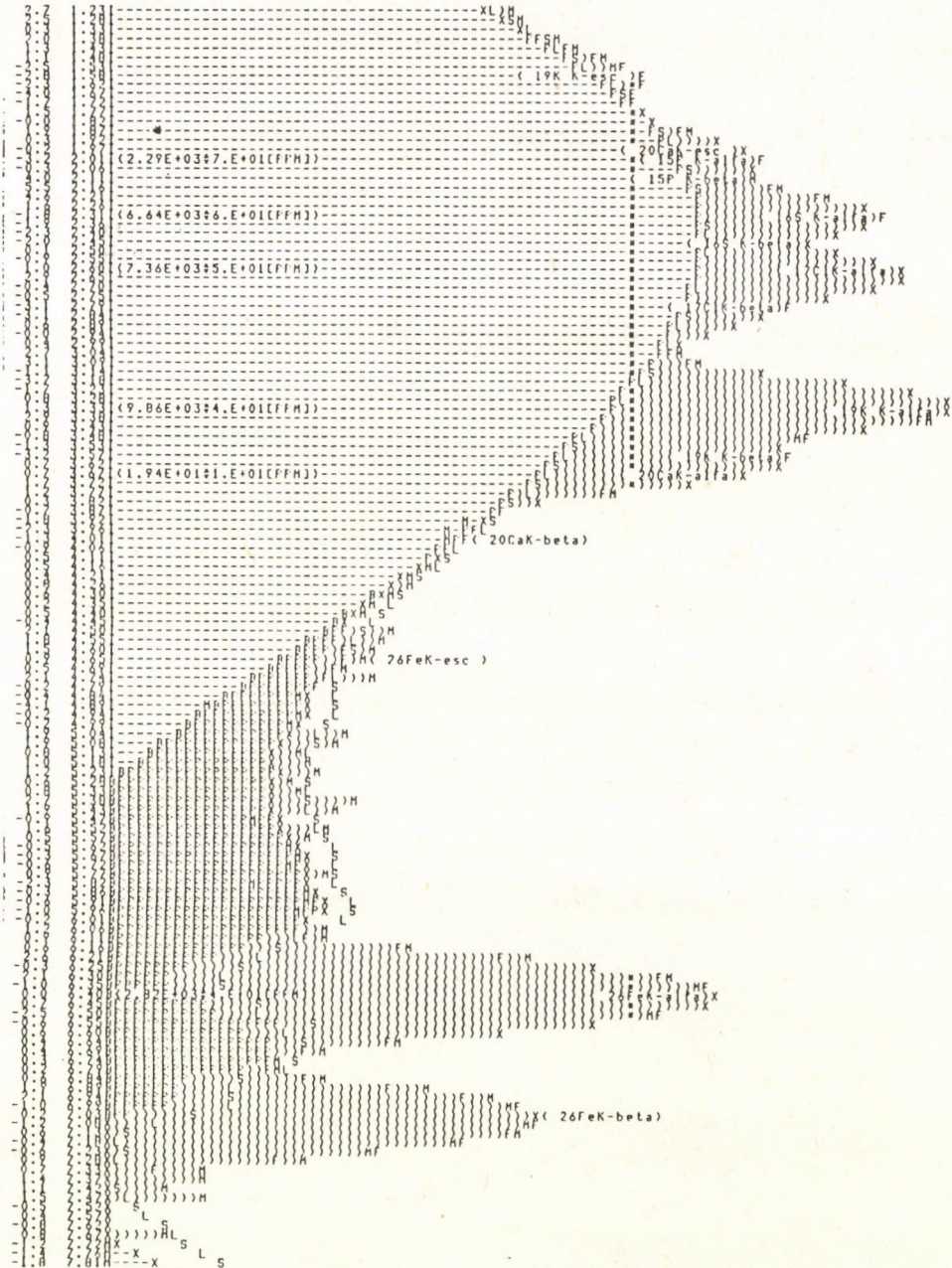
- b. Struktura = Azonos elemhez tartozó csucok összege
- Csucs = Gauss + Lépcső + Alacsonyenergiájú farkok
 - Szélesség kalibráció: kétparaméteres
 - Energia kalibráció: Max. másodfoku

13. Gép, O.S., nyelv: PDP-11/40, RSX-11M V3.2, FORTRAN-IV; DEC-350 (380), TPA-11/440, RSX-11M V4.2, FORTRAN-IV, FORTRAN'77
14. Továbbfejlesztési irányok: Más gerjesztéssel kapott röntgenspektrumok feldolgozása, visszaszórás csucs kiértékelése, másodlagos fluoreszcencia hatások figyelembevétele, grafikus kimenet



1. ábra. A programrendszer működésének sémája

.ASD , 0= 1110.0 PLOTTED BY "ASELES"
 #CHI2#ECKEVJ B:BACKGROUND, M:MEASURED, F:FIT, X:F=M, SL:SENS. LIM., #:HIGH RATE, P:FILE-UP



2. ábra. Vörösvértest minta pile-up figyelembevételével kiértékelt PIXE spektruma.

ELEKTRONSPEKTROSKÓPIA A SZILÁRD ANYAGOK LEGKÜLSŐ FELÜLETÉRŐL (1-5 ATOMRÉTEGBŐL)

GUCZI LÁSZLÓ

MTA Izotóp Intézete

A vizsgálatokban különféle gerjesztések hatására kilépő elektronokat energiájuk szerint félgömbanalizátorral választjuk szét 10^{-7} Pa nyomáson. A gerjesztés módjától függően a kapható információk:

1) Aluminium vagy magnézium K_{α} röntgensugárzásával gerjesztve (ESCA vagy XPS módszer):

- felület kémiai összetétele 1-2% kimutathatósági határral;
- vegyértékállapotok azonosítása mindkét esetben mintegy 15 mm átmérőjű területről kapunk információt.

2) HeI vagy HeII ultraibolya sugárzással gerjesztve (UPS módszer):

- a minta vezetési és vegyérték elektronsávjainak szerkezete a Fermi szint környezetében.

3) Elektronsugárral gerjesztve (Auger elektron spektroszkópia)

- a felület kémiai összetétele 1-2% kimutathatósági határral;
- egyes esetekben a vegyértékállapot is meghatározható az elektronsugár mintegy $50 \mu\text{m}$ átmérőjű foltba fókuszálható és a folt a minta teljes felületén mozgatható. A gerjesztést gyorsan lehet változtatni, így ugyanolyan felületi állapotú minta vizsgálható mindhárom módszerrel, ami nagyban növeli a kapott információk megbízhatóságát. A mintákat a spektrométerben, illetve a hozzákapcsolt előkezelő kamrában lehet in situ hőkezelné (-150°C, +500°C) ion maratni, és gázokkal kezelni (maximum 1 kPa nyomásig).

ELEKTRONSPEKTROSKÓPIA ÉS FELÜLETVIZSGÁLAT AZ ATOMKI-BEN*

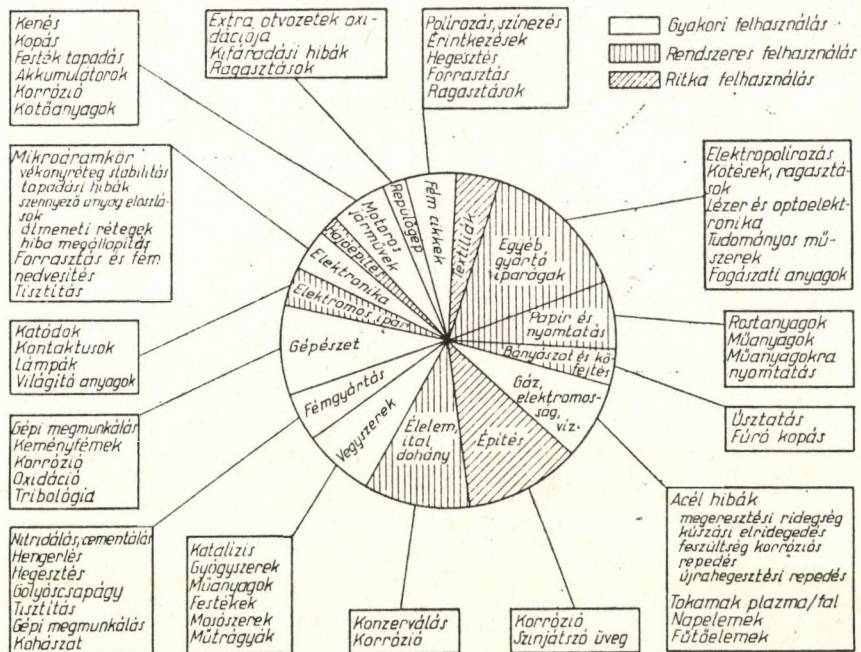
KÖVÉR LÁSZLÓ ÉS TÓTH JÓZSEF

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51, 4001

A felületvizsgálati, ezen belül az elektronspektroszkópiai módszerek és alkalmazásai áttekintése után az ATOMKI-ben az utóbbi években kifejlesztett elektronspektrométereket és elektronspektroszkópiai eszközöket mutatjuk be, jellemző alkalmazási példák-
kal. Végül a további fejlesztési és alkalmazási terveinkről lesz szó.

1. A felületvizsgálati módszerek jelentősége napjainkban

Az utóbbi évtizedben a szilárd testek felületének különféle vizsgálati módszerei körében robbanásszerű fejlődés ment végbe az eszközök bonyolultsága, érzékenysége, valamint a segítségükkel nyerhető információk pontossága és sokoldalúsága tekintetében. A fejlődéssel párhuzamosan, egyúttal serkentve azt, gyorsan bővül a felületi strukturákról és a határfelületeken lejátszódó jelenségekről az ismereteink köre. A gyakorlati alkalmazások az ipar-
nak csaknem minden területén stratégiai fontosságúvá váltak, melyet az 1. ábrán levő diagram jól illusztrál [1].



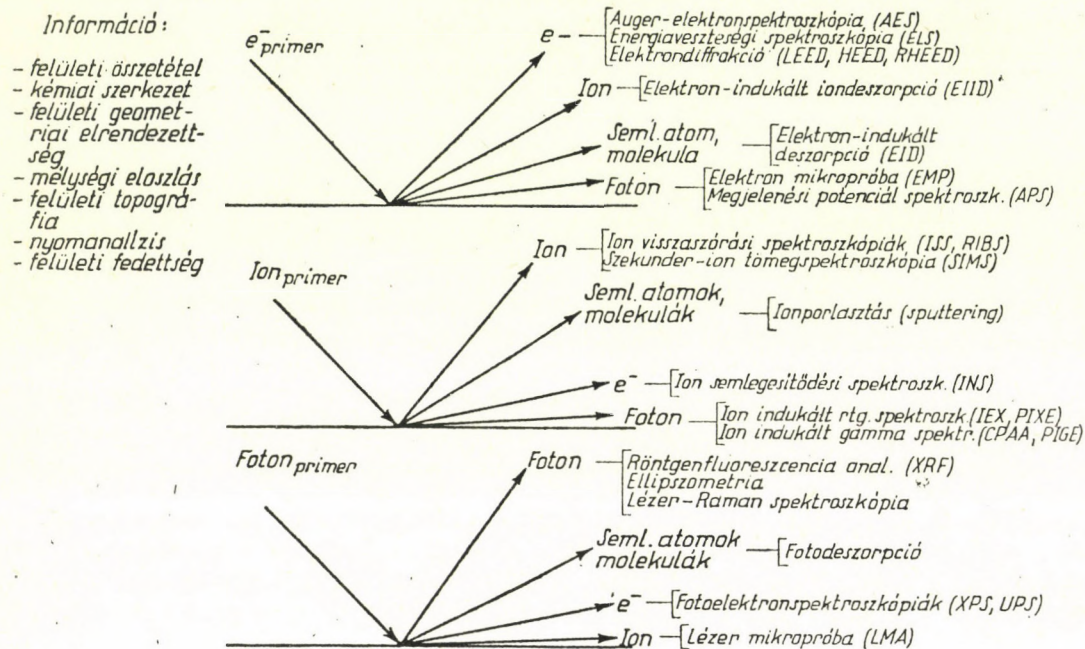
1. ábra. A felületvizsgálati módszerek alkalmazásának intenzitása az Egyesült Királyság gyártó iparában [1]. A szeletkéek területe az iparágak termelésével arányos, mintázatuk jelzi az alkalmazások gyakoriságát.

*A *Finomechanika és Mikrotechnika*, 23 (1984) 257 cikk módosított változata.

Az említettek azonban közel sem érzékeltetik azokat a rendkívüli erőfeszítéseket, amelyeket a világ sok országában tesznek a felületanalitikai módszerek továbbfejlesztéséért és gyakorlati alkalmazásaik bevezetéséért.

2. Elektronspektroszkópiai módszerek a szilárdtestek felületvizsgálatában

A 2. ábrán a felületvizsgálatban leggyakrabban előforduló vizsgálati lehetőségeket foglaltuk össze. Részletesebb, összehasonlító információ pl. [2] -ben található.



2. ábra. Elterjedtebb felületvizsgáló módszerek.

A szilárdtest-felületek és az ismert fizikai jellemzőkkel rendelkező töltött részecskék vagy elektromágneses hullámok kölcsönhatásának eredményeképpen megjelenő, a felületről kilépő részecskék analiziséből lehet a felület jellemzőire következtetni. Az összefoglalás még a vizsgálati elveket tekintve sem teljes, hiszen olyan jól ismert módszerek is hiányoznak, melyek a termodeszorpción vagy a fotoakusztikus effektuson alapulnak.

Noha első látásra is szembetűnően nagyszámú módszerről beszélhetünk, mégis, mindössze néhány olyan van ezek között, amely az alkalmazhatóság széles körénél és elterjedtségénél fogva meghatározó szerepet játszik a felületanalitikában. Ezek közül is érzékenységükkel és sokoldalúságukkal kiemelkednek az elektronspektroszkópiai módszerek, melyeknél a felületi rétegből kiváltott elektronok energia- és irányeloszlásának mérése szolgáltatja az információt a réteg összetételéről, szerkezetéről.

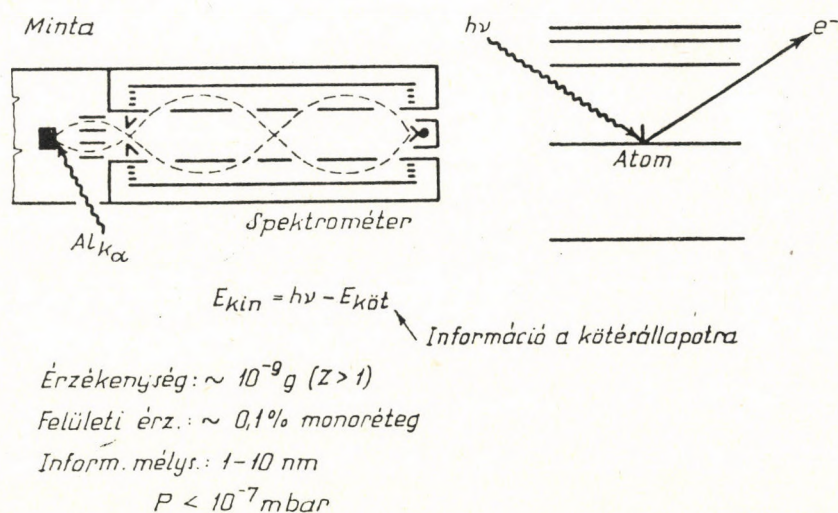
Az 1. táblázat a legelterjedtebb felületvizsgáló módszerek néhány fontos jellemzőjét hasonlítja össze. Az adatok tipikus, a legtöbb berendezéssel átlagosan elérhető paraméterek. Ugyanakkor meg kell említeni, hogy a jelenleg vásárolható eszközök alig több, mint egy évtizeddel az első, piacon kapható felület-

analitikai berendezések megjelenése után már a negyedik generációt képviselik, és az egyes módszerek továbbfejlődése tekintetében még nem látszanak áttörhetetlen korlátok.

1. táblázat. Néhány felületvizsgálati módszer jellemzőinek összehasonlítása

Módszer	Kémiai információ	Érzékenység (nagyságrendben) érzékenységi változása	Információ-mélység (monoréteg)	Laterális feloldás
Auger elektronspektroszkópia (AES)	elemi (H, He kivételével) kisebb mértékben szerkezeti	0,3%/10	3	0,2 μm
Röntgen-fotoelektronspektroszkópia (XPS)	elemi (H, He kivételével) szerkezeti	0,3%/10	3	1 mm
Szekunder ion tömegspektroszkópia (sztatikus SIMS)	főként szerkezeti	0,1%/10 ³	2	0,5 mm
Ion visszaszórású spektroszkópia (ISS)	elemi (H, He kivételével)	0,1%/10	1	0,5 mm

A 3. ábra az egyik leghatékonyabb elektronspektroszkópiai felületvizsgálati módszert, a röntgen-fotoelektronspektroszkópiát (XPS, ESCA) mutatja be, melynek alkalmazásában mi is tapasztalatokat szereztünk.



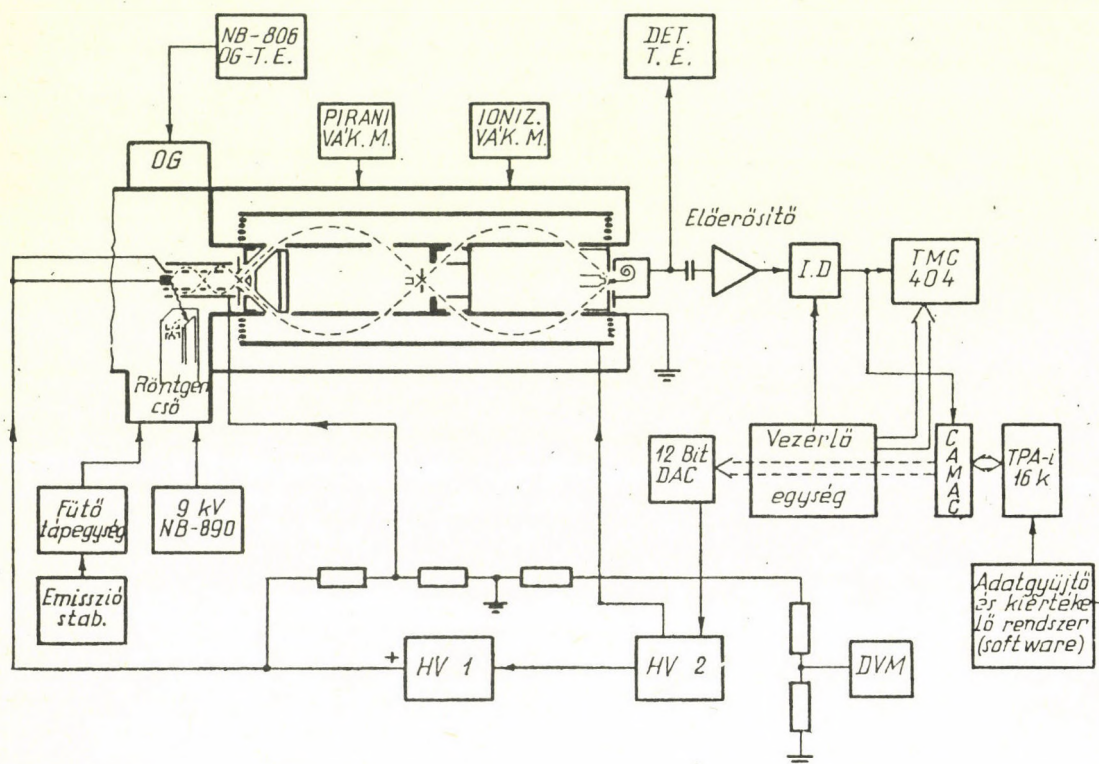
3. ábra. A röntgengerjesztéses fotoelektronspektroszkópia (XPS, ESCA) elve és néhány jellemzője.

3. Az ATOMKI-ben kifejlesztett elektronspektrométerek és kiegészítő berendezések

Intézetünkben régi hagyományai vannak az elektronspektroszkópiai eszközök és módszerek fejlesztésének mag- és atomi folyamatok vizsgálatának a céljaira. Ennek a hagyománynak a szerves folytatásaként épültek azok a kisenergiájú (<20 keV) elektrosztatikus elektronspektrométerek, amelyek konstrukciójuk és jó energiafeloldásuk révén lehetővé tették a szilárdtest-felületeken végbemenő jelenségek vizsgálatát is.

A 2. táblázat tartalmazza az eddig épült kisenergiájú elektron-spektrométereink összehasonlító jellemző adatait. Közös sajátosságuk, hogy ugynevezett hengertükör típusu elektrosztatikus spektrométerek. Az elektronspektrométereknek ez a típusa kedvező transzmisszióval rendelkezik, széles energiatartományban jó az energiafeloldása. Az említett tulajdonságok széleskörű alkalmazási lehetőségeket rejtenek magukban.

A berendezések közül az ESA-11 spektrométer készült elsőként [3], jelenleg ezt XPS vizsgálatokra használjuk. A mérőrendszer és a spektrométer vázlatát a 4. ábrán látható. Az analizátor jel-

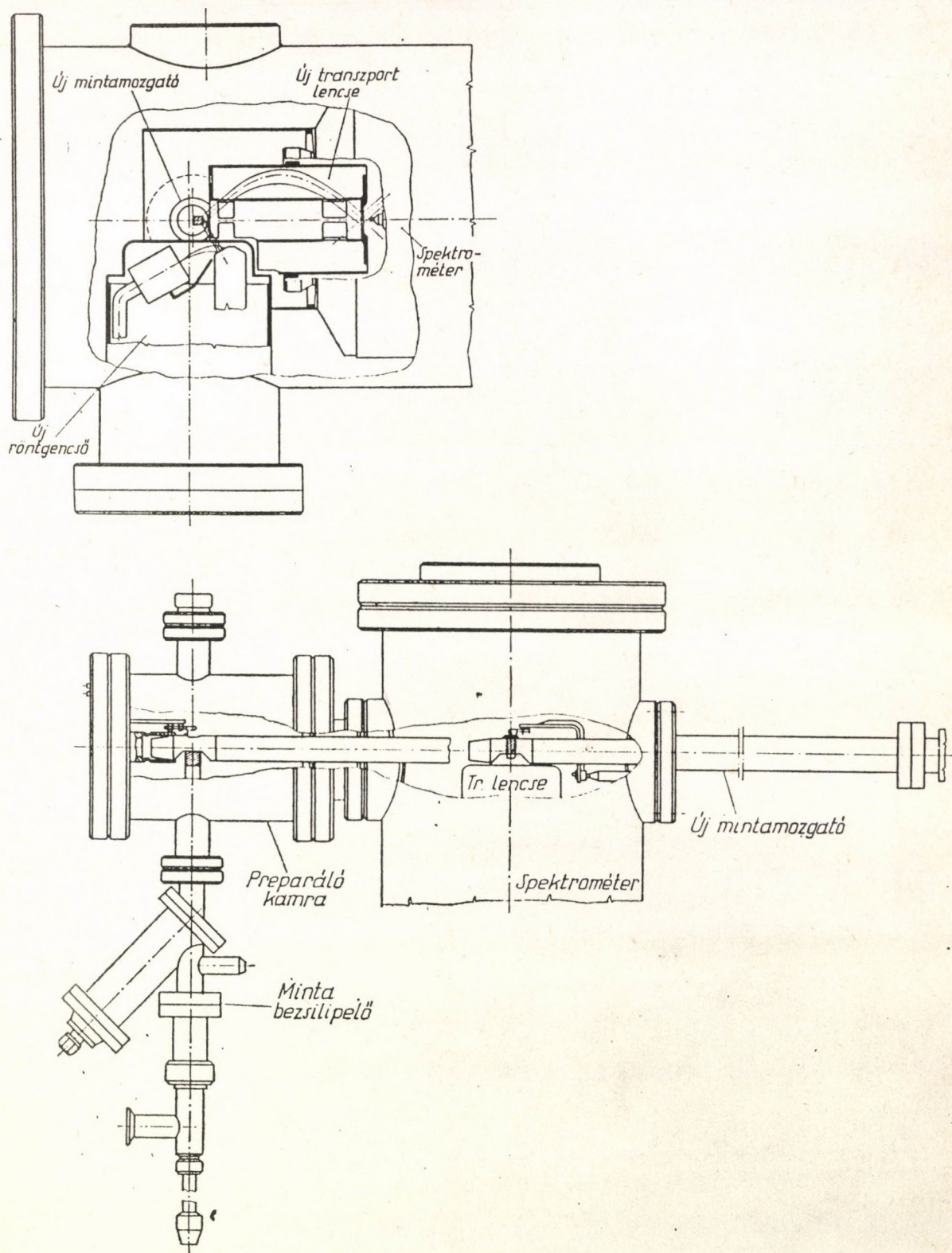


4. ábra. Az ESA-11 spektrométer és mérőrendszer vázlatát (rögzített fékezési arányú üzemmód).

legzetessége, hogy a virtuális mintahelyzet a belépő rés hengerpálást alakú felülete (ellentétben a pontból pontba fókuszáló rendszerekkel), ami nagyobb felületű minták vizsgálatát teszi lehetővé. Ez az előny jól kihasználható mind a magspektroszkópiai, mind a fotoelektron-spektroszkópiai vizsgálatoknál. A minta jobb besugárzási lehetőségének, valamint a jobb abszolút feloldás elérésének biztosítására az analizátort transzportlencse, illetve fékezőlencse egészíti ki. A feloldás a spektrométer-rések szélességének a vákuumrendszeren kívülről történő változtatásával szabályozható.

A spektrométert és mérőrendszerét nemrégiben felújítottuk, melynek eredményeként a berendezés csaknem minden fontosabb jellemzőjénél (intenzitás, maradék mágneses tér, vákuum, stb.) nagyszámú javulást sikerült elérni [4], [5]. Az 5. ábrán látható az

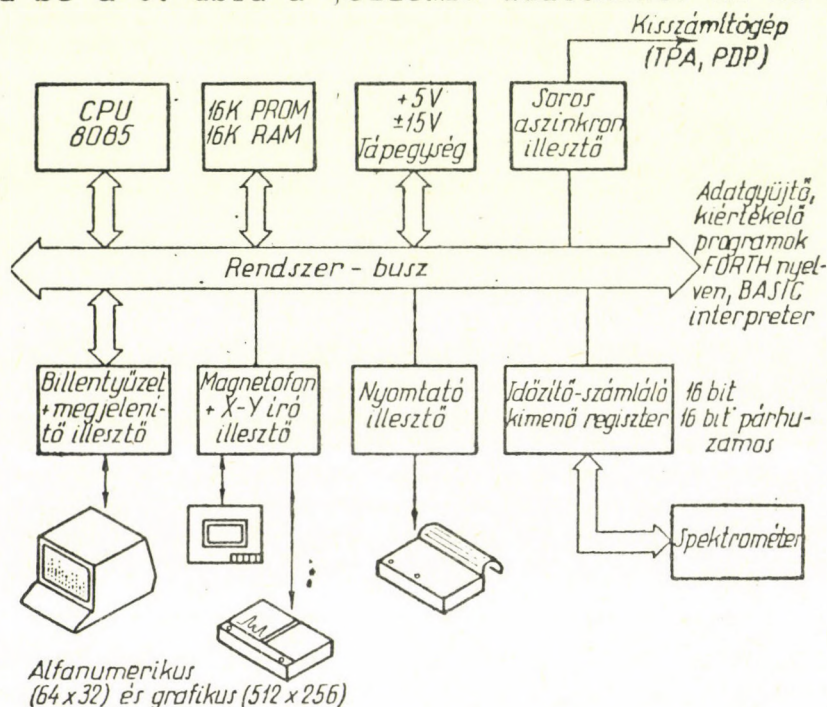
átalakítás utáni besugárzási geometria és a mintamozgató egység vázlata. A nagyobb teljesítményű Al K_{α} röntgenforrás beépítése



5. ábra. A minta besugárzási geometriája (a) és a mintamozgató egység (b) az ESA-11 átalakítása után.

[5] mellett ultravákuum forgómozgás bevezetővel biztosítottuk, hogy a mintát a külön preparáló kamrából ultravákuumban lehessen az előkészítés (pl. felülettisztítás) után a mérőhelyzetbe juttatni. A preparáló kamrára épített ionágyu lehetővé teszi a minták felületi rétegeinek ionmarásos mélységi analizisét is. Az 5. ábrán látható elrendezés előnyös pl. a korróziós vizsgálatok számára.

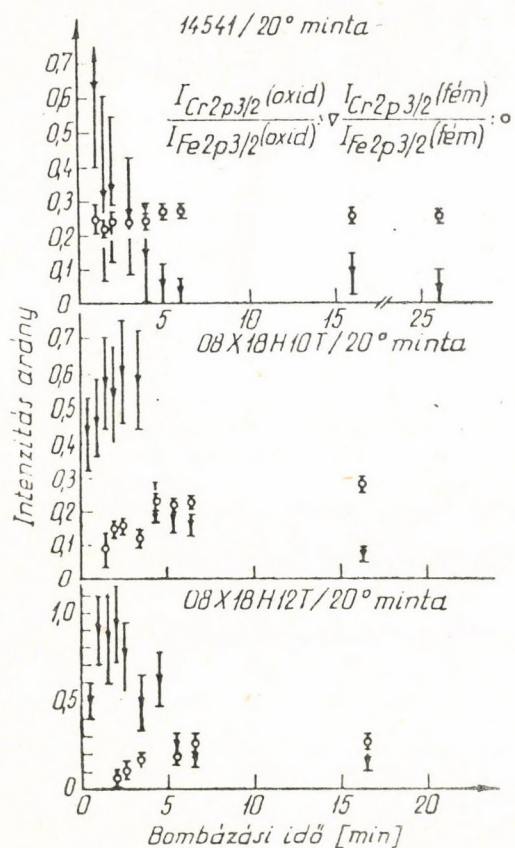
A mérőrendszerhez csatlakozó új, mikroprocesszoros mérésvezérlő és adatkezelő rendszer [6] biztosítja az automatikus vezérlést, az adatok gyűjtését, megjelenítését, előzetes kiértékelését, és adathordozókra történő rögzítését, és egyben nagyobb számítógép termináljaként üzemeltethető. A rendszer blokkképét mutatja be a 6. ábra a jellemző adatokkal. Ez az egység



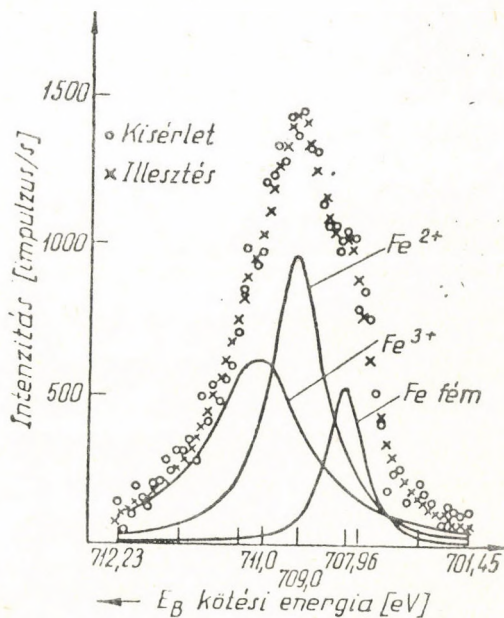
6. ábra. A mikroprocesszoros mérésvezérlő és adatkezelő rendszer blokkképája.

bármilyen elektronspektrométerhez illeszthető, csakugy, mint a szintén ujonnan kifejlesztett moduláris szervezésű biztonsági rendszer [7], amely flexibilisen alkalmazható változó konfigurációjú mérőrendszerek felügyeletére. Az XPS módszerrel többek között különböző típusu rozsdamentes acélok felületi passzív rétegének szerkezetét vizsgáltuk. Az eredményeinkből a 7. ábrán mutatunk be egy részletet [8]. A fotoelektroncsucok energia-helyzetének, alakjának analizisével szétválaszthatók a különböző kémiai állapotoknak megfelelő komponensek (7b ábra), az ionbombázásos mélységi XPS profilból (7a ábra) a felületi passzív rétegről különféle információkat nyerhetünk pl. a felületi oxidréteg vastagságára, összetételére, egyes komponensek bedusulására vagy elszegényedésére az oxidrétegben és az ötvözet legfelső rétegeiben. Az ESA-11 spektrométer egy magspektroszkópiai vizsgálatok céljára megépített változata az ESA-12 [9] a Cseh-szlovák Tudományos Akadémia prágai Magfizikai Intézetében működik (8. ábra). Ezzel a spektrométerrel érték el a konverziós

elektronspektroszkópiában az eddigi legjobb abszolút energiafeloldást (1,0 eV félérték szélesség a Tc^{99m} 2,17 keV-es M4 és M5 átmenetekhez tartozó konverziós vonalaira), ami lehetőséget nyújt a belső konverziós elektronspektroszkópia nagyérzékenységű mikroanalitikai alkalmazására is [10].

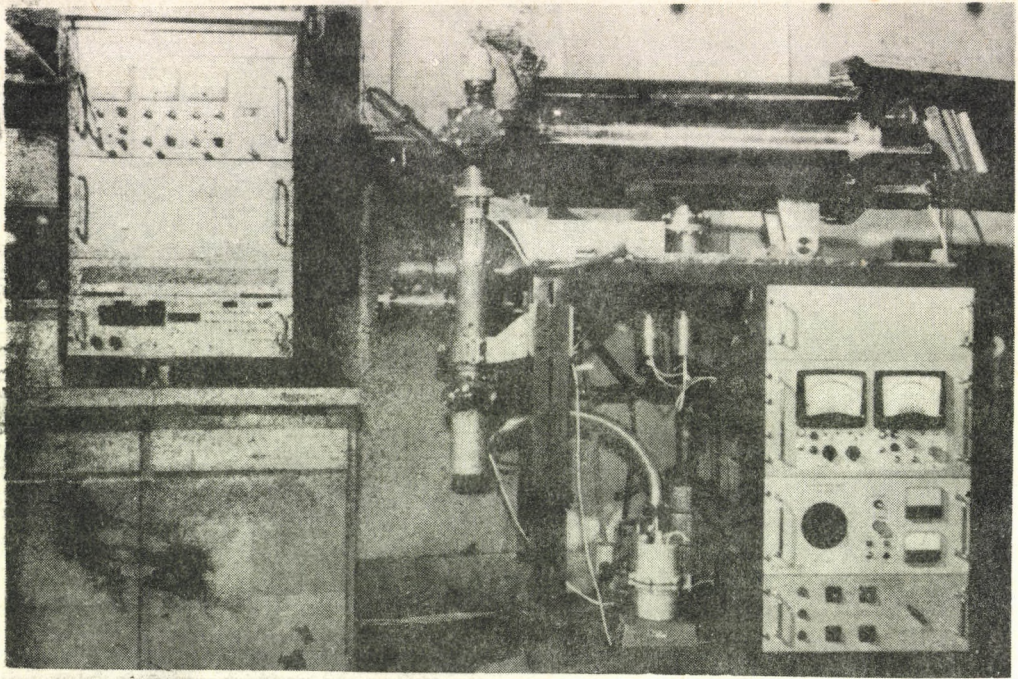


7a.ábra. 20°C-os vízzel kezelt különböző típusu rozsdamentes acél minták felületi rétegének mélységi XPS profilja [8].

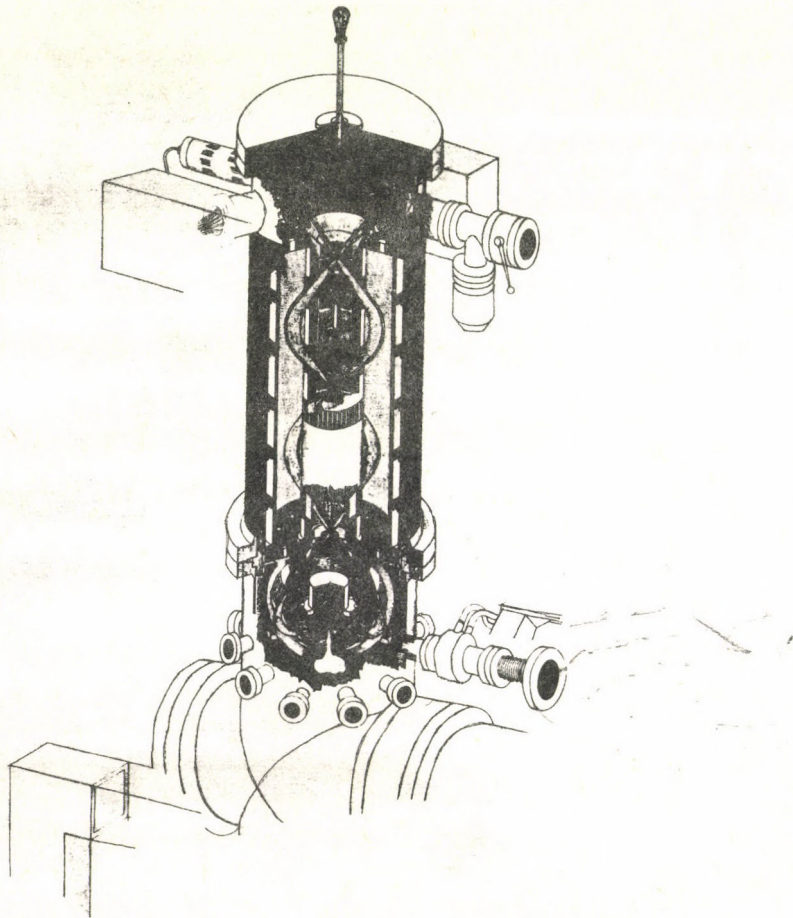


7b.ábra. A $Fe\ 2p_{3/2}$ fotoelektronvonal dekompozíciója szimmetrikus Lorentz-függvényekkel [8].

Az ESA-11 és ESA-12 elektronspektrométereken kívül kifejlesztettünk az intézetünkben újabb spektrométer típusokat is, az ESA-21 és az ESA-13 jelzésűeket. Az ESA-21 -el nemcsak energiaszétválasztást, hanem szögelszétválasztást is lehet mérni egyidejűleg. Az ESA-21 -el eddig ion-atom és elektron-atom ütközések során kiváltott elektronok spektrumait tanulmányozták, amely vizsgálatokban a belsőhéj-ionizációs folyamatokra kaptak információt. A 9. ábrán az ESA-21 metszete látható. A 10. ábrán látható Auger-elektron spektrum sorozatot különböző bombázó részecskével kaptak a Ne gáztárgy atomjaiból Dubnában az U-300 -as ciklotron nyalábjára telepített ESA-21 -el [12]. A berendezés néhány jellemző paramétere a 2. táblázatban található.



8. ábra. Az ESA-12 spektrométer és mérőrendszere



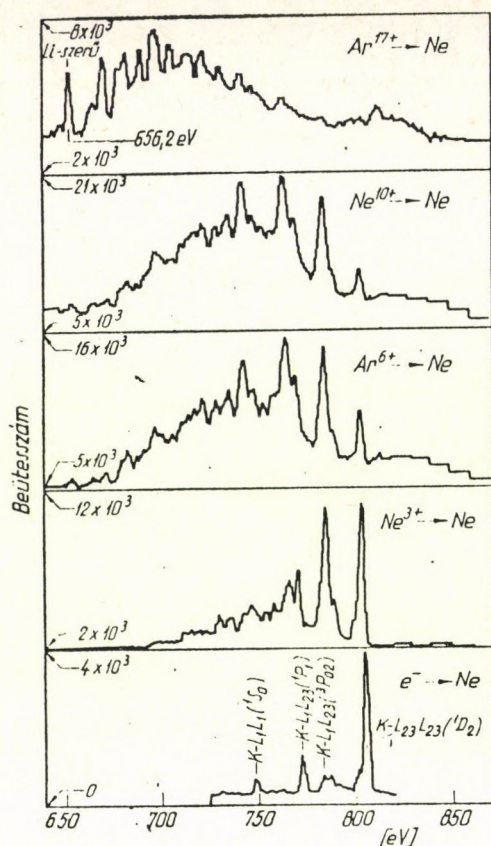
9. ábra. Az ESA-21 spektrométer metszetének vázlata.

2. tábl. Az ATOMKI-ben kifejlesztett elektrosztatikus elektronspektrométerek legfontosabb jellemzői

Spektrométer	Tipus*	Energiatartomány	Feloldás** (fékezés lehetősége:F)	Detektálási szög (a gerjesztő nyaláb irányához képest)	Vákuum (Pa)	Minta	Alkalmazás
EMESE	CMA	100 eV- 5 keV	1 %	nincs szögfeloldásuk	10^{-5}	gáz	ion-atom ütközés (ATOMKI)
ESA-11	DCMA	50 eV-20 keV	0,5-0,2% F		10^{-7}	szilárd	XPS (ATOMKI)
ESA-12	DCMA	20 eV-19,5 keV	0,5-0,1% F		10^{-6}	szilárd	magspektroszkópia (Prága) XPS feltét- tel ellátva (1985)
ESA-21	SMA+ DCMA	20 eV-14 keV	0,5-0,1% F	0°-180°-ig 15°-on- ként, egyidejűleg	10^{-5}	gáz	ion-atom ütközés (ATOMKI, Dubna)
ESA-13	DFA	20 eV-10 keV	2%- 0,5%	0°-180° folyamato- san változtatható	10^{-5}	gáz	ion-atom ütközés (ATOMKI, Frankfurt)
(BME)ESA-13	DFA	2 eV-10 keV	0,5%-0,1%		10^{-7}	gáz, szilárd	BME Szervetlen Kémiai Tanszék

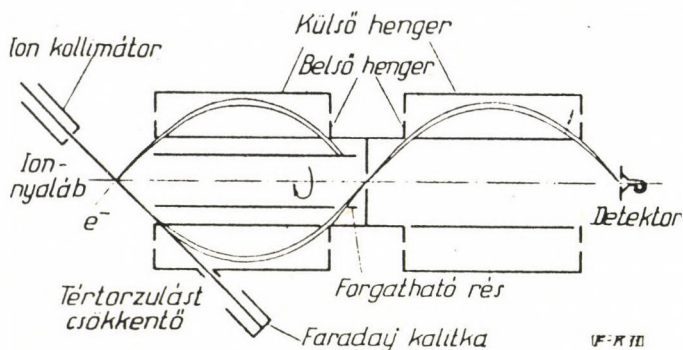
*CMA=Cylindrical Mirror Analyzer (Hengertükör analizátor),
DCMA=Double pass CMA (Kétmenetű CMA),
SMA= Spherical Mirror Analyzer (Gömbtükör analizátor),
DFA= Distorted Field CMA (Torzított terű hengertükör).

**Fékezés nélkül (a detektálandó elektronok fékezésével kb. egy nagyságrenddel javítható).



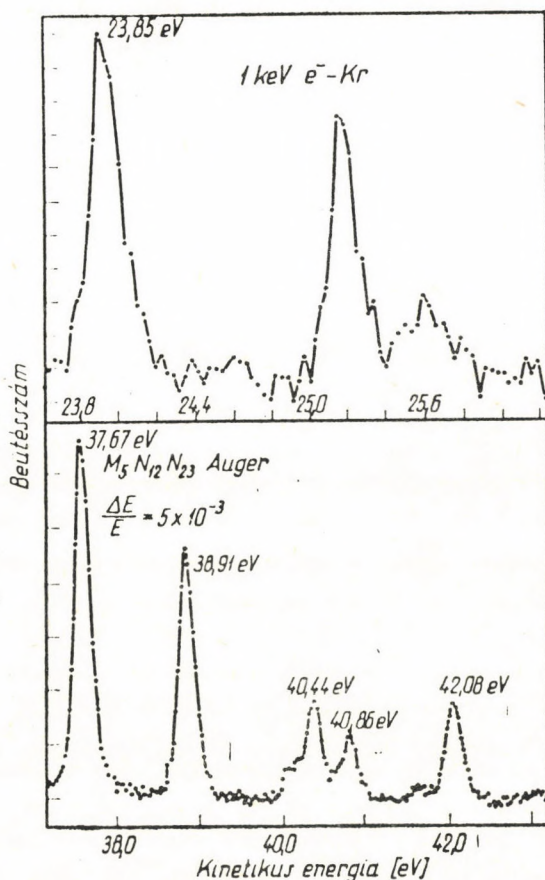
10. ábra. Azonos sebességű (5,6 MeV/amu) Ne^{3+} , Ne^{10+} , Ar^{6+} , Ar^{17+} ionokkal és 1,5 keV energiájú elektronokkal neon atomokból kiváltott Ne K Auger elektronspektrumok [12].

Az ESA-13 ugynevezett "torzított terű" hengertükör elektron-spektrométer. Az eddig említett típusokhoz képest azzal az előnnyel rendelkezik, hogy a minta (forrás) és a detektor helyzete a hengereket lezáró végektől távolabb került, ami a besugárzási és a detektálási lehetőségeket javítja, ezt a tulajdonságát az analizátor hengerek végének speciális módon történő kialakításával lehetett elérni (11. ábra). Másik fontos előnye a moduláris felépítés (pl. a 11. ábra egy két modulos rendszert ábrázol).



11. ábra. Az ESA-13 spektrométer vázlatos metszete

A megépült spektrométer [13] egy forgatható rés segítségével szögeloszlás mérésére is alkalmas hasonlóan az ESA-21-hez azzal a különbséggel, hogy a különböző szögeknél különböző időben történik a mérés. Ez a berendezés kis (<50 eV) elektronenergiáknál is jó energiafeloldással és hatásfokkal rendelkezik. Ezt bizonyítják a 12. ábrán látható, az ESA-13 spektrométerrel mért, elektrongerjesztéses Kr autoionizációs és Auger-elektronspektrumok [14].



12. ábra. Az ESA-13 spektrométerrel mért, 1 keV energiájú elektronokkal Kr atomok gerjesztése során kapott autoionizációs elektronspektrum [14].

Az ESA-13 típusu spektrométer egy példánya jelenleg az ATOMKI Van de Graaff generátorának nyalábjára van telepítve ion-atom ütközési folyamatok tanulmányozása céljából [11]. Egy másik példány készült a miskolci Nehézipari Műszaki Egyetem Fizikai Tanszék részére. A harmadik példány a Budapesti Műszaki Egyetem Szeretlen Kémiai Tanszékén található, amelyet jelenleg UPS (ultraibolya-fotoelektronspektroszkópia) vizsgálatok céljára használnak. Ez PIES (Pening ionizációs elektronspektroszkópia) vizsgálatokra is alkalmassá tehető a megfelelő Penning gerjesztő forrás illesztésével. Az ESA-13-nak ez a harmadik példánya az első szögfeloldású fotoelektronspektrométer hazánkban.

4. Terveink és lehetőségeink

Fejlesztési terveink között szerepel, mintegy a nagyenergiájú ion-atom ütközésekkel végzett belsőhéj-ionizációs kutatások szerves folytatásaként, az ion-szilárdtest ütközések elektron-spektroszkópiájához szükséges feltételek létrehozása. Ugyanakkor szeretnénk - elsősorban módszer fejlesztés oldaláról - az elektronspektroszkópia analitikai alkalmazásai terén is továbblépni.

Az ATOMKI elektronspektroszkópiai eszközei iránt az utóbbi években a külső igények is fokozódtak, a műszerfejlesztésre fordítható anyagi lehetőségek azonban erőteljesen csökkentek. Mindamellettt jelenleg a saját alapkutatói igényeken kívüli módszer és eszközfejlesztésre sem belső fejlesztő, sem gyártó kapacitás nem áll rendelkezésre.

Hivatkozások

- [1] *M.P. Seah*, A review of the analysis of surfaces and thin films by AES and XPS, *Vacuum*, Vol.34 (1984) No 3-4, p.463.
- [2] *Berényi D.*, A modern felületvizsgálati módszerek áttekintése; A szilárdtestkutatás újabb eredményei 5, (1979) 7.o.
- [3] *D. Varga, I. Kádár, A. Kövér, L. Kövér and Gy. Mórlik*, An electron spectrometer of double-pass cylindrical mirror type for nuclear spectroscopy and atomic physics, *Nuclear Instruments and Methods* 154, (1978) 477.
- [4] *Tóth J.*, Egyetemi doktori értekezés, MTA ATOMKI, 1984.
- [5] *L. Kövér, D. Varga and Gy. Mórlik*, New X-ray source of the ATOMKI ESA-11 spectrometer, *ATOMKI Közlemények* 22 (1980) 20.o.
- [6] *I. Cserny, T. Lakatos, J. Molnár, G. Pintér and S. Fekete*, Data Acquisition Systems for Electron Spectrometers, *Proceedings of the 5th Seminar on Electron Spectroscopy of Socialist Countries*, Drezda, 1984 aug. 26-29 (megjelenés alatt)
- [7] *Cserny I.*, Közlés előkészületben
- [8] *Kádár I., Kövér L., Cserny I., and Tóth J.*, Korrózióálló acélok felületi rétegeinek vizsgálata röntgen-fotoelektron-spektroszkópiai (ESCA, XPS) módszerrel, *Korróziós Figyelő*, XXII. évf. 5. szám (1982) 83-87.o.
- [9] *D. Varga, I. Kádár, A. Kövér, I. Cserny, Gy. Mórlik, V. Brabec, O. Dragoun, A. Kovalik and J. Adam*, Electrostatic spectrometer for measurement of internal conversion electrons in the 0.1-20 keV region, *Nuclear Instruments and Methods*, 192 (1982) 277.
- [10] *O. Dragoun, M. Fiser, V. Brabec, A. Kovalik and A. Kuklik*, A new method of valence state determination based on measurements of internal conversion electrons, *Physics Letters*, 99A, (1983) No. 4. p.187.
- [11] *A. Kövér, D. Varga, Gy. Szabó, D. Berényi, I. Kádár, S. Ricz, J. Végh and G. Hock*, A study of the angular distribution of the electrons in the peak near $v_e=v_i$ in the electron spectra from He^+-Ar and H_2^+-Ar collisions, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 16 (1983) 1017-1027.

- [12] *D. Berényi, G. Hock, I. Kádár, S. Ricz, V.A. Schegolev, B. Sulik, D. Varga and J. Végh*, A study of Auger spectra from $\text{Ne}^{3+}, 10+$, $\text{Ar}^{6+}, 17+$ (5.6 MeV/amu) Ne collisions; Abstracts of Contributed Papers of the XIII International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (Berlin, 1983), Eds.: J. Eichler, W. Fritsch, I.V. Hertel, N. Stolterfoht, U. Wille, p.390.
- [13] *A. Kövér, D. Varga, E. Szmola, J. Herbák, L. Kövér and I. Cserny*, An electron spectrometer (ESA-13) for atomic research, Proceedings of the 5th Seminar on Electron Spectroscopy of Socialist Countries, Drezda, 1984, aug. 26-29 (megjelenés alatt)
- [14] *Kövér A.*, Közlés előkészületben

KVADRUPÓL TÖMEGSPEKTROMÉTER

BOHÁTKA SÁNDOR

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51. 4001

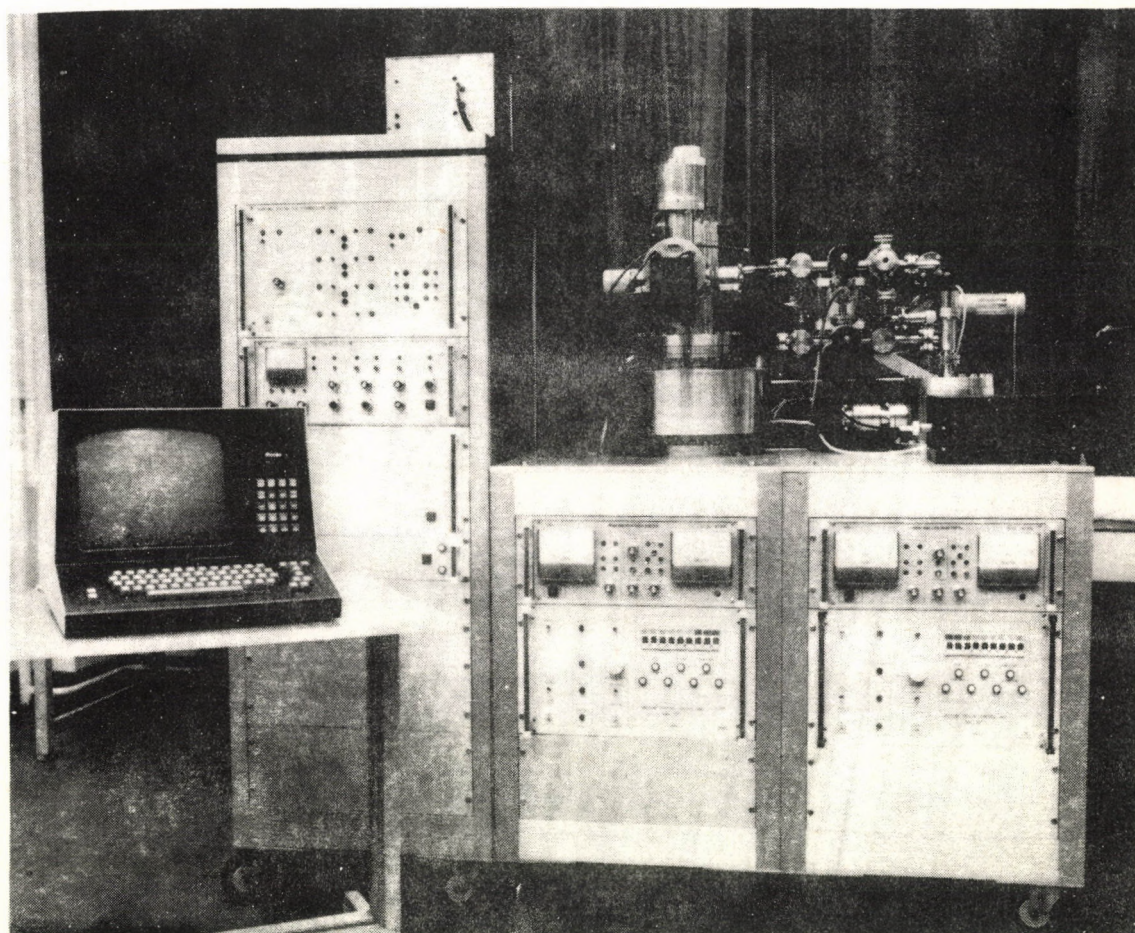
A kvadrupól tömegspektrométer analizátora négy párhuzamos rudból áll, amelyek közül a szemköztiakat összekötve a rudpárokra nagyfrekvenciás és arra szuperponált egyenfeszültséget kapcsolunk. Az ATOMKI-ban 1970-től fejlesztett és gyártott kvadrupólok ionforrása elektronütközéses, izzókatódos; rudjai 8 mm átmérőjűek, 200 mm, illetve 100 mm hosszúak; az alkalmazott nagyfrekvencia 1,75 MHz, illetve 3,25 MHz. A leginkább használt típusu (Q300) tömegtartománya 1-300 u. Ennek változatai a Q60U (1-60 u) és Q100 (1-100u), illetve legújabban az 1-500 u tartományban mérő Q500. A maradékgáz analízis céljára készített Q60U-nak össznyomásmérő és lyukkereső üzemműdja is van. A 100, 300 és 500 jelű készülékek digitálisan vezérelhető változatban is léteznek. Vezérlésre a korábbi PS-500 típusu csucskiválasztó mellett ma már inkább az egyidejű kijelzéssel és gazdagabb szolgáltatással bíró μ Ps-500 programozható csucskiválasztót használjuk. Kvadrupóljaink detektálási érzékenysége Faraday-kalitkával kb. 10 ppm, elektronsokszorozóval kb. 0,1 ppm.

Eddig mintegy 90 kvadrupólt gyártottunk önálló, illetve célberendezésbe beépített kivitelben. A fejlesztés koncepciója: a nemzetközi színvonalnak megfelelő paraméterű készülékek előállítására és olyan speciális alkalmazások kimunkálása, melyek valamilyen szempontból újdonságnak számítanak. Az alapeszközök fejlesztése a stabilitás és üzemi megbízhatóság fokozása mellett a gépi vezérlés és különösen az adatfeldolgozás korszerűsítésére irányul.

Alkalmazások:

- Légzésvizsgáló berendezést fejlesztettünk ki, amelyet jelenleg kooperációs részvételünkkel a MEDICOR gyárt. A készülék a kilégzett levegő összetevőiből 8 közül választhatóan egyszerre 5 koncentrációját méri nagy sebességgel (válaszidő 50 ms).
- Gáz-elektrondiffrakciós méréseknél kvadrupól elemzi a tényleges anyagösszetételt és segít a minta elgőzölögtetési körülményeinek optimalizálásában (KKKI-ATOMKI kooperáció, ma az SZKKL-ben művelik).
- Műtőlevegő narkotikum koncentrációjának mérése, narkotiumszűrő hatásosságának kimutatására (DOTE-ATOMKI).
- Lyukkereső berendezés nagynyomású edények szivárgásának vizsgálatára.

- Kvadрупól-derivatográf csatolás. A kvadрупól növeli a MOM által gyártott termoanalitikai berendezés lehetőségeit a termo-reakciók gáztermékeinek egyidejű analizisével.
- Fermentációs gázok mérése. A fermentorokból eltávozó gázok és a fermentáléban oldott gázok "on-line" és "off-line" mérésére gázelemző rendszert készítettünk. A kvadрупól a sok-komponensű analizist, a csatolt mintavevő rendszer a sokcsatornás (több mintavevős) analizist teszi lehetővé. A fermentáció mérés technikájában ez a legfejlettebb eszközök közé tartozik.
- Növényélettani kutatások és műszeres fejlesztés. Növények testszövetében oldott állapotban vagy testüregeiben szabadon lévő gázok koncentrációját mérjük a növénybe helyezett szondák segítségével "in vivo" módon. (ATOMKI-TAKI, Bp., illetve Gabonaipari Kut. Int., Szeged együttműködése).



1. ábra. Kvadрупól tömegspektrométeres gázelemző több fermentor oldott és szabad gázainak mérésére.

LÉZERIONIZÁCIÓS TÖMEGSPEKTROMETRIA

VÉRTES ÁKOS

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A lézerionizációs ionforrásban a Q kapcsolt impulzuslézerek által biztosított nagy teljesítménysűrűségű fény és a szilárd anyag kölcsönhatásával keltett plazma szolgáltatja az ionokat. Az analitikai alkalmazás lehetőségét a szilárd test elemösszetételének és az ionfelhő iontartalmának egyértelmű megfeleltetése biztosítja.

Az ionforrásban a minta felületének kiválasztott részletét fókuszált lézernyalábbal pillanatszerűen plazmává alakítva, majd az így keltett ionokat repülési idő tömegspektrométerbe vezetve meghatározható a lokális elemösszetétel. Az analízis laterális felbontóképessége így az optikai rendszer által korlátozott, tipikusan néhány mikrométer.

A gerjesztő fény leképező rendszerének és a tömegspektrométer ionoptikájának egymáshoz viszonyított helyzetét tekintve véve megkülönböztetünk transzmissziós és reflexiós geometriát. Előbbinél vékony minták átlövésével, míg utóbbinál bulk minták felületén kráter létrehozásával atomizáljuk a vizsgálatához szükséges anyagmennyiséget. Az abszolút kimutatási határ jellegzetesen mintegy 10^{-18} - 10^{-20} g. A módszerrel a periódusos rendszer valamennyi eleme meghatározható. Lényeges előny a kompetív eljárásokkal szemben, hogy a különböző elemekre vett érzékenységi faktorok nem térnek el jelentősen egymástól.

A KFKI-ban épülő lézerionizációs tömegspektrométer tervezésének kulcskérdéseit a következőkben foglalhatjuk össze:

- a/ megfelelő időfelbontású repülési idő tömegspektrométer építése;
- b/ a szükséges teljesítménysűrűség elérése és a lézeres ionforrás kialakítása;

- c/ a nagy energiaszórással keltett ionok másodrendű energiafókuszálása iontükörrel;
- d/ jó laterális felbontóképesség biztosítása az optikai fókuszáló rendszer segítségével;
- e/ a repülési idő tömegspektrumok detektálása és rögzítése gyors tranziens rekorderrel;
- f/ a spektrumok számítógépes feldolgozása és kiértékelése.

A készülék kísérleti példányának üzembe helyezése 1986. folyamán várható.

SZIKRAIONFORRÁSOS TÖMEGSPEKTROMETRIA

NYÁRY ISTVÁN, MATUS LAJOS, ÉS KÜNSTÁR MIHÁLY

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A szikraionforrásos tömegspektrium nagyérzékenységű, minden elemre kiterjedő analitikai módszer. A vizsgálandó mintából készített két elektród között nagyfrekvenciás nagyfeszültséggel szikrakisülést hozunk létre, mely porlasztja és egyben ionizálja az elektródok anyagát. A keletkezett ionokat elektromos és mágneses terek fajlagos tömegük szerint szétválasztják, és az így előálló tömegspektrum fotografikus vagy elektromos módszerekkel regisztrálható. A tömegspektrumból minőségi és mennyiségi analízis végezhető. Egyetlen felvételből a periódusos rendszer csaknem valamennyi eleme meghatározható.

A módszer főbb jellemzői:

- Kimutatási érzékenysége minden elemre \approx közel azonos, rutinelemzés esetén kb. $0,1-0,01 \mu\text{g/g}$ /ppm/, ez szükség esetén egy nagyságrenddel növelhető.
- Pontossága 10-40 rel.%, ezért elsősorban áttekintő elemzéseknél előnyös.
- A vizsgálatokhoz optimálisan 1-2 g anyagra van szükség. /Az elektródok kialakításához szükséges mennyiség./ Fém és elektromosan vezető szilárd anyagokból közvetlenül készítünk elektródokat, pormintákból grafitral keverve, préseléssel. Kis mintamennyiségnél az analízis 1-2 mg-ból is elvégezhető.
- Kémiai jellegű mintaelőkészítést nem igényel.
- Meghatározható az elemek izotópozsetétele is.
- Különleges eljárásokkal vizsgálható a felület néhány mikros rétege is.

A módszer érzékenységére jellemző, hogy 6N tisztaságú fémekben is rendszerint több mint 10 szennyező elem mutatható ki!

1986 folyamán a lézertes ionizáció lehetősége is rendelkezésre áll, ami az előzőekben említett elemzési paraméterek megtartása mellett előnyösebb felületanalitikai és lokális elemzéseket tesz lehetővé.

Az eddigi alkalmazásokból:

- Nagytisztaságu réz, aluminium, gallium, ólom, antimon, indium, tellur, stb.,
- félvezetőipari tisztaságu szilícium,
- fémüvegek,
- kristálynövesztésre használt nagytisztaságu fém-oxidok,
- nagytisztaságu vegyszerek,
- különböző eredetü vizek és
- elhamvasztott növényi minták
nyomszennyezőinek vizsgálata.
- Ritkaföldfémek meghatározása kis koncentrációju mintákban.

SQUID ANALITIKAI ALKALMAZÁSAI

MÉSZÁROS S., NOVÁK D., VAD K.

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51. 4001

A SQUID (szupravezető kvantum-interferométer) nagy érzékenysé-
gű mágneses fluxus detektor, melynek működése a szupravezető
gyűrűkben fellépő mágneses fluxus kvantáltságán és a Josephson-
átmenetek makroszkópikus kvantumtulajdonságain alapszik. A mé-
rendő mágneses fluxus (tér) hatására egy szupravezető állapot-
ban lévő, egy vagy két Josephson átmenetet tartalmazó gyűrű
kvantumállapotai változnak meg. Megfelelő mérőelektronikával
lineáris analóg magnetométer alakítható ki belőle, amivel bár-
milyen mágneses fluxussá konvertálható jel nagy pontossággal
mérhető. Egy SQUID érzékenysége a különböző mennyiségek mérése-
kor tipikusan az alábbi:

- mágneses fluxus $10^{-18} - 10^{-19}$ Wb,
- elektromos feszültség $10^{-12} - 10^{-14}$ V,
- mágneses momentum 10^{-12} Am²
- ohmikus ellenállás $10^{-11} - 10^{-12}$ ohm.

A műszer sávszélessége: 1÷100 kHz, a jelkövetési sebessége jel-
lemzően $10^3 - 10^5 \phi_0 / \text{sec}$ ($\phi_0 \approx 2 \cdot 10^{-15}$ Wb). A műszer működtetéséhez
folyékony hélium szükséges.

Az Atommagkutató Intézetben kifejlesztettünk egy SQUID alap-
műszert, amelynek analitikai alkalmazására két irányban adódik
lehetőség:

1. Maradékellenállás-mérés

Maradékellenállás-méréssel a nagy tisztaságú fémek alacsony
hőmérsékleti elektromos ellenállásából a minta integrális szenny-
yezőtartalmára tudunk következtetni. A tiszta fémeknek e mód-
szerrel történő minősítése - éppen az információ integrális
jellege miatt - széles körben használatos a fémek tisztításá-
nál és felhasználásánál.

Ismeretes, hogy a fémek ellenállását több elektronszórási
folyamat együttesen alakítja; így az ellenállás egyrészt az
elektronoknak a kristályrács hőrezgésein, másrészt a kristály-
rács tökéletes periódicitását sértő centrumokon (rácshibákon,
a minta felületén, szennyező atomokon) létrejövő szóródásából
ered. Ha a rácshibák járulékat megfelelő próbatest-készítéssel,
a fonon járulékot pedig a próbatestnek a folyékony hélium hő-
mérsékletére történő hűtése segítségével nagyságrendekkel le-
csökkentjük, akkor a mért ellenállás (maradékellenállás) jelzi a
szennyező elemek össz-koncentrációját.

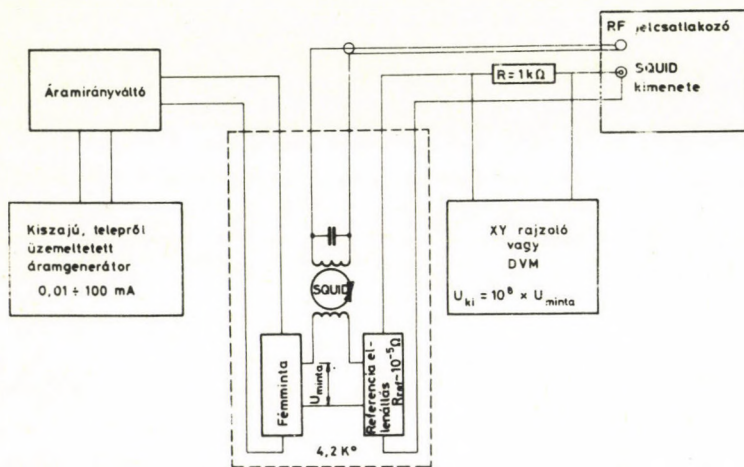
A módszer előnyei és korlátai egyaránt az integrális jellegéből fakadnak, vagyis abból, hogy a szennyezőelemek együttes hatását érzékeljük a maradékellenállás értékében. Az integrális jelleg miatt nincs mód arra, hogy egyes elemek jelenlétét külön-külön kimutassuk. Sőt, mivel az egyes szennyezőelemek eltérő módon növelik a minta ellenállását, a maradékellenállás értékéből a teljes szennyezőtartalmat is csak szélesebb koncentráció határok között lehet megadni, tapasztalati összefüggések segítségével behatárolni. Korlátozást jelent az is, hogy az ellenállás értékéhez csak a fémesen oldott állapotú elemek adnak járulékot, a felületi szennyezések, vagy a zárványok hatása elhanyagolható. Ugyanakkor viszont óriási előny, hogy a módszer igen nagy érzékenységgel rendelkezik. Segítségével a fémtisztítási folyamatok kisebb lépései, kisebb koncentrációváltozások is érzékenyen nyomonkövethetők és az érzékenység a legnagyobb fémtisztítási fokozatokban is érvényesül. Hiszen míg más analitikai eljárások az egyes szennyezőelemeket egyenként veszik célba és a kisebb koncentrációval jelenlévő elemek egy része mindenképp az illető módszer érzékenységi küszöbe alá esik, a maradékellenállásmérés e nyomszennyezők jelenlétét is kimutatja az együttes hatásuk révén. Az érzékenység mellett sok esetben előny, hogy a minta szennyezettségét - gyors és roncsolásmentes módon meghatározott - egyetlen adattal jellemezzük.

Jellemző adatként a fajlagos ellenállás értéke helyett célszerű a folyékony hélium hőmérsékletén, illetve szobahőmérsékleten mért ellenállások hányadosát (residual resistivity ratio: $RRR = R_{300K}/R_{4,2K}$ ill. $R^* = R_{4,2K}/R_{300K}$) használni. További kérdés a megfelelő mérési hőmérséklet: minél nagyobb tisztaságu a fém-minta, annál alacsonyabb hőmérsékleten hanyagolható el az ellenállás fonon járuléka a szennyezők okozta többletellenálláshoz képest. Hatkilences, vagy még nagyobb tisztasági fokú fém minták összehasonlító vizsgálata megoldható ugyan a folyékony hélium 4,2 K-es forráspontján, azonban - legalábbis esetenként - szükséges a maradékellenállás 0 K-re extrapolált értékének meghatározása 4,2 K alatti mérésekkel. A 0 K-re és a végtelen, "bulk" mintaméretre extrapolált ellenálláshányados már kizárólag a minta szennyezőtartalmát jellemzi.

Kísérletileg a folyékony hélium hőmérsékletén a lecsökkent fajlagos ellenállás miatt igen kicsi - jellemzően 10^{-7} - 10^{-11} ohm nagyságrendű - ellenállások mérését kell megoldani. Az ellenállásmérés - a szkin-effektus miatt - célszerűen csak egyenáramú módszerrel történhet. Az e célra alkalmas és a kereskedelemben hozzáférhető legérzékenyebb feszültségmérők (nanovoltmérők, kompenzátorok) érzékenysége nem jobb 10^{-8} - 10^{-9} V-nál. Ha a problémát kis átmérőjű és így nagyobb ellenállású próbatesteken végrehajtott méréssel akarjuk megkerülni, akkor az ellenállásban a felületi szórás részaránya lesz zavaróan nagy a szennyezők okozta többletellenálláshoz képest. Ha nagy mérőárammal végezzük az ellenállás meghatározást, akkor az áram miatti mágneses többletellenállás okoz problémát (esetenként még a hőfejlődés is). A nagyátmérőjű próbatesteken és a hőmérséklet függvényében 4,2 K alatt végrehajtott mérések különösen súlyos követelményt támasztanak a feszültségmérő érzékenységével szemben. Itt jut szerephez a SQUID feszültségmérő, amely 10^{-12} V-nál jobb érzékenységével lehetővé teszi, hogy 1÷100 mA mérőárammal határozzuk meg az ellenállást olyan próbatesteken, amelyek át-

mérője meghaladja az elektronok λ szabad uthosszát (λ a szóba-
jövő öt- hétkilences tisztaságu fémekben, 4,2 K körül centimé-
ter körüli nagyságig terjedhet).

Az ATOMKI-ban az elmúlt évtized folyamán nagy tisztaságu gal-
lium és aluminium vizsgálatára dolgoztunk ki maradékellenállás-
mérési módszereket és alkalmaztuk nagyszámu minta vizsgálatánál
a Magyar Aluminiumipari Tröszt (Ajakai Timföldgyár, ALUTERV- Fém-
ipari Kut. Int.) számára. Az egyszerűbb, összehasonlító mérések-
re szolgáló és a szokványos 10^{-8} V érzékenységu feszültségmérés-
re alapozott mérőkör mellett, a speciális vizsgálatokra SQUID
pikovoltmérőt fejlesztettünk ki (1. ábra). E műszerben a méren-
dő és a normál ellenálláson eső feszültségek különbsége hatására
fellépő áram mágneses terét érzékeli a SQUID-szenzor. A hibajel
hatására a SQUID mérőelektronika a normál ellenálláson mindad-
dig növeli az áramot, amíg a feszültségek egyenlővé nem válnak.
Pikovoltmérőnk 10^{-12} - 10^{-14} V érzékenység elérésére képes. Ez-
en belül a tényleges érzékenységet a potenciálvezetékeknek a
mérendő ellenállás felé mutatott ohmikus kontaktellenállása ha-
tározza meg. A műszer SQUID-érzékelőjét speciálisan a maradék-
ellenállás-mérés szempontjai szerint alakítottuk ki oly módon,
hogy a sorozatmérésekhez szükséges nagyszámu lehűtést elviselje
(Pribori i Technika, 1985, No6, 167-170)



1. ábra. SQUID-pikovoltmérő elvi elrendezése

A gallium maradékellenállás mérésénél sajátosság az alacsony
olvadáspont ($t_{o.p.} = 29,6^{\circ}\text{C}$) és a maximálisan mintegy hétszeres
ellenállás anizotrópia a különböző kristálytengelyek irányában;
mindez jellegzetes próbatestkészítési módszer kifejlesztését ki-
vánta meg. A kidolgozott mérő és próbatestkészítő eljárások se-
gítségével, különösen az ipari minősítő méréseken, tanulmányoz-
tuk gallium mintákban az anizotrópia-hatását a maradékellenállás-
hányados értékére. Felhasználva nagyszámu minta analízis és ma-
radékellenállás adatait, empirikus összefüggést kerestünk e két
mennyiség között, 2 mm-es és 6 mm-es próbatestátmérők esetén.
A próbatest-átmérő és a hőmérséklet függvényében végzett méré-
sekkel a legtisztább hazai előállítású gallium anyagok 0 K-re
extrapolált bulk maradékellenállás hányadosát határoztuk meg és
hasonlítottuk össze a külföldi gallium termékek jellemzőivel.

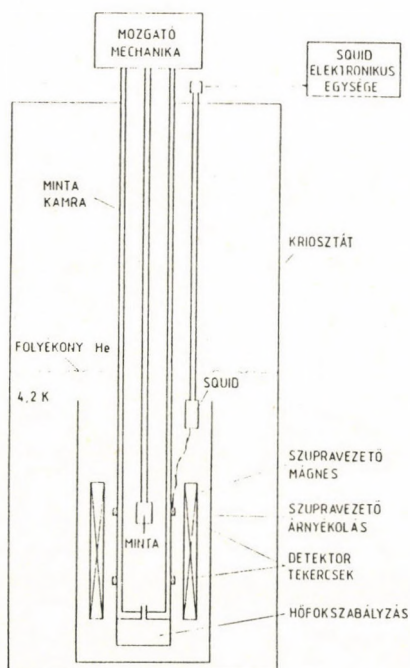
A SQUID-pikovoltmeternek az aluminium minták maradékellen-

állásmérésére való alkalmazása lehetővé tette nagyátmérőjű ($\phi 6-10$ mm), gyakorlatilag "bulk"-nak tekinthető minták vizsgálatát. A nagyátmérőjű öntött próbatesteken végzett mérésekkel elkerülhető volt a minták hengerlése, huzallá való feldolgozása és az ezzel járó elszennyeződése.

2. Szuszeptométer

A mágnesezettség mérése szintén szolgáltat analitikai és/vagy szerkezeti információkat. A SQUID-érzékelős mágnesezettségmérő (szuszeptométer) kis mágnesező tér mellett is nagy érzékenységet biztosít, ugyanakkor a jel frekvenciatartománya több kHz is lehet. Együttal lehetőséget ad a hagyományos NMR technikához képest komplementer NMR alkalmazására, ugyanis itt a rezonanciát nem az RF abszorpció megváltozásából, hanem a minta mágneses momentumának méréséből állapíthatjuk meg.

A SQUID-szuszeptométer elvi elrendezése a 2. ábrán látható.



2. ábra. SQUID-szuszeptométer elvi elrendezése.

A mintát megfelelő mechanika segítségével mozgatva a detektor-tekercek között, a kapott jel amplitudójából lehet következtetni a minta mágnesezettségére. Ilyen berendezés kifejlesztése intézetünkben folyamatban van.

SQUID-szuszeptométerek alkalmazására széleskörű lehetőségek vannak a szilárdtestfizika, kémia, biológia, geológia, régészet területén.

PÁSZTÁZÓ ELEKTRONMIKROSKÓP ÉS MIKROSZONDA

POGÁNY LAJOS

Központi Fizikai Kutató Intézet, 1525 Budapest, Pf.49.

A pásztázó elektronmikroszkóp (PEM) és az energiadiszperzív mikroszkop (EDX) vizsgálati módszerek a szilárdtest-elektron kölcsönhatáson alapulnak.

Nagyon vékony (50, illetve 100 Angström) átmérőjű elektronnyalábbal letapogatjuk a felületet és a kilépő szekunder elektronok, rugalmasan vagy rugalmatlanul szóródó elektronok, kilépő röntgenfotonok segítségével képezzük le a felületet.

A különböző kölcsönhatások segítségével a felületet jellemezni lehet:

- morfológiai megfigyelés 5, illetve 10 nm laterális felbontással,
- kémiai összetétel szerint (Na-tól U-ig detektálható) 10^{-14} - 10^{-15} g, illetve 0,1-0,01 súlyszázalék anyagmennyiség mintától függően 0,1-5 súly% pontosságig,
0,1-1 μm laterális felbontással
0,1-1 μm mélységbeli felbontással
- felületi sűrűség szerint 0,1 tömegszám 0,1-0,4 μm laterális felbontással
- felületi kristályszerkezet, illetve amorfitás kimutatása 10 nm - 400 nm mélységbeli 1-3 μm laterális felbontással
- felületi mágneses domainek kimutatása 0,4 μm laterális felbontással
- felületi elektromos potenciál 500 mV és 1 μm laterális felbontással

A fenti megfigyelések

- "in situ" mérésekkel (fűtés, hűtés, stb.) és
- dinamikus folyamatok megfigyelési lehetőségével egy mintán egy időben is alkalmazhatók.

A minták méretei 10 nm - 100 mm-ig terjedhetnek.

RÖNTGEN DIFFRAKCIÓS LABORATÓRIUM

ZSOLDOS LEHELNÉ

Központi Fizikai Kutató Intézet, 1525 Budapest, Pf.49.

Több, mint 20 esztendeje működik a KFKI-ban röntgendiffrakciós laboratórium, mely jelenleg a Mikroelektronikai Kutató Intézet keretébe tartozik, de az egész intézet anyagvizsgálati feladatait hivatott művelni. Így alakult ki a laboratórium felszereltsége is az idők folyamán, kapcsolódva a szilárdtestfizikai témákhoz. Nem minden a röntgensugárzást felhasználó anyagvizsgálati módszer található itt meg, hanem a diffrakciós módszerek közül a pordiffraktometria és az egykristályok reálstrukturájának vizsgálata (mely nem jelenti az egykristályok szerkezetének meghatározását).

Pordiffrakciós módszerek közül legnagyobb súllyal a *fázis-meghatározás* a feladatunk. Ez nem kémiai analitika, hanem az anyagban megtalálható kémiai fázisok, ezek arányai meghatározására szolgál. A kimutatható anyagmennyiség a vizsgált térfogat kis egészszámu százaléka. A vizsgálathoz néhány mg mintamennyiség elegendő (apróra törve vagy hordozó felületén levő vékonyréteg formájában). Ehhez rendelkezésünkre állnak porkamrák, Guinier kamra, vertikális diffraktométer magas- (1350°C -ig) és alacsony (cseppf. N_2 hőmérsékletig) hőmérsékletű feltétellel. A fázisanalízis jelenleg rendkívül időigényes "manufakturális" módon történik. Egy korszerű adatfeldolgozásu, számítógéppel vezérelt automatizált mérésösszeállítás, mely a nemzetközi adatbázis alapján gyors, kvantitatív analízist szolgáltat nagy mértékben segítené munkánkat.

Ehhez a témakörhöz tartozik az ugynevezett "*amorfitás*" vizsgálat is, mely azt jelenti, hogy megállapítjuk a vizsgálandó anyagmintáról, hogy az kristályos-e vagy röntgenamorf-e (szemcsemérete $1 \text{ \AA} - 10 \text{ \AA}$ nagyságrendű).

Pormintákon *rácsparaméter* meghatározásunk pontossága $\sim 5 \times 10^{-4} \text{ \AA}$; fázisanalízis közben $\sim 10^{-2} \text{ \AA}$.

A másik nagy tématerület, mely röntgenlaboratóriumunk feladatai közé tartozik az *egykristályok reálstrukturájának* vizsgálata. Ehhez tartozik első lépésként természetesen az *orientálás*, mely fotografikusan néhány tized fok pontosságú, számlálócsöves regisztrálással 5×10^{-3} fok pontosságú.

Az egykristályokban előforduló kristályhibák kimutatására szolgáló módszer a röntgentopográfia (felbontóképesség $\sim 10 \mu\text{m}$) melynek minden elrendezési típusának alkalmazására van lehetőségünk (Berg-Barett, Lang, 2 kristályos; reflexiós-transzmissz-

sziós elrendezésben). A módszer segítségével egyes diszlokációk, illetve csoportok feszültségtere mutatható ki, meghatározható a diszlokáció típusa, Burgers vektora, térbeli elhelyezkedése. Egykristályszeleteken nagy pontosságú (2×10^{-4} Å) rácsparaméter mérés technikáját is kidolgoztuk.

Tudunk egykristályszeleteken *görbületesi sugarat* mérni. Az egykristályszeleten történt röntgendiffrakció *reflexió*s görbéjének vizsgálata lehetővé teszi felületi epitaxiás réteg vastagságának mérését, a felületközeli rétegek mélységi deformáció-eloszlásának meghatározását és vékony felületi "roncsolt" réteg (pl. implantált réteg) profiljának mérését. Ehhez rendelkezésünkre áll egy 2 kristályos mérőrendszer, mely azonban ez utóbbi feladatokra csak mérsékelt pontosságot enged meg, ugyanis 1000 Å -nál vékonyabb felületi rétegek vizsgálata esetén a hőmérsékleti és diffúz szórás a mérni kívánt effektust zavarja. A pontosság növelhető egy 3 kristályos elrendezéssel.

DINAMIKUS NEUTRON-, GAMMA- ÉS RÖNTGEN RADIOGRÁFIAI
VIZSGÁLATI LEHETŐSÉGEK A KFKI-BAN

BALASKÓ MÁRTON

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A roncsolásmentes módszerek az anyagvizsgálatban elsőrendű fontosságúak. Ezen módszerek közé tartoznak a már klasszikusnak számító röntgen - és gamma - radiográfiai vizsgálatok, valamint a napjainkban mind jobban elterjedő neutronradiográfia.

A radiográfiai módszer lényege a következő: a sugárzás útjába helyezzük a tárgyat és a tárgy mögött megfelelő érzékelő segítségével láthatóvá tesszük az árnyképet. Az ilyen módon kapott kép információt tartalmaz a minta belsejéről az abban bekövetkezett szórás és abszorpció következtében.

A neutron radiográfia jól kiegészíti a röntgen és gamma radiográfiát, és teljesen új lehetőségeket is kínál olyan területeken, ahol a másik kettő nem alkalmazható. A röntgen- és gamma sugarak az elemek elektronhéjával lépnek kölcsönhatásba és a kölcsönhatás mértékére jellemző anyagi állandó- a tömeggyengítési együttható - az elemek tömegszámával arányosan változik. Így elsősorban a nehezebb elemek /fémek/ lesznek megfigyelhetők a röntgen- és gamma radiográfiai képeken, és a könnyű elemek, mint pl. a hidrogén alig hagy nyomot. A neutronok az atommaggal lépnek kölcsönhatásba és a neutron tömeggyengítési együttható a rendszámmal semmilyen egyértelmű összefüggést nem mutat. Néhány elem, mint pl. a hidrogén, bór, kadmium, gadolinium igen erősen gyengíti a neutronszórás intenzitását, míg más a technikai gyakorlatban használt fémek /vas, al, réz/ tömeggyengítési együtthatója egészen alacsony értékeket vesz föl.

A KFKI komplexitását kihasználva mind a három radiográfiai vizsgálati módszert meghonosítottuk.

A KFKI 4,6 MW-os VVR-SZM típusú kutatóreaktorának 5.számú vízszintes csatornájánál egyidejű neutron- és gamma radiográfiai megfigyeléseket biztosító mérőhelyet alakítottunk ki, felhasználva, hogy a reaktor egyidejű neutron - és gamma sugár forrás.

- A neutron és gamma-sugár nyaláb átmérője 150 mm
- A távvezérelhető mozgató mechanizmus lehetővé teszi a 25 kg-nál nem nehezebb 600x600x1500 mm³-nél nem nagyobb kiterjedésű tárgyak változtatható körülmények /forgatás, döntés/ közötti vizsgálatát.

A mérőhely kiválóan alkalmas hidrogén tartalmú folyadékok mozgásán alapuló készülékek /pl. üzemanyag fogyasztás-mérők/, valamint folyadékok áramlását biztosító eszközök /pl. elektromos működtetésű szelepek/ üzemközbeni tanulmányozására. A neutron radiográfiai kép információt szolgáltat a folyadékok áramlási körülményeiről, míg a gamma radiográfiai képen jól megfigyelhető az egyes fémből készült szerkezeti elemek mozgása.

A röntgen radiográfiai munkákat a KFKI Röntgen laboratóriumában lévő 10 kW teljesítményű forgóanódos röntgen készülékénél végezzük. Itt elsősorban kis kiterjedésű, csekély radiális vastagságú tárgyakra belső felépítését tanulmányozzuk.

A radiográfiai vizsgálatok során nyert árnyképeket nagyérzékenységű TV kamerába juttatjuk. - Így lehetőségünk van a dinamikus jelenségek nyomonkövetésére, valamint arra, hogy a radiográfiai képekkel egyidejűleg a vizsgált eszköz működését jellemző egyéb paraméterek /pl. üzemi nyomás, áramlási sebesség, hőmérséklet, üzemidő, teljesítményfelvétel....stb./ is megjelölhetők a képernyőn és későbbi kiértékeléshez videomagnetofonnal rögzíthetők.

SZILÁRDTESTEK MAG MÁGNESES REZONANCIÁJA (NMR)

PÓCSIK ISTVÁN

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

Elsősorban el kell határoljuk magunkat az NMR kémiai szerkezetkutatásra használt ún. nagyfelbontású NMR ágától. A nagyfelbontású NMR módszerrel unikális információkat lehet kapni az izotróp, kisviszkózitású folyadék fázisban lévő, vagy abban oldott anyagokról, azok szerkezetéről és térszerkezetéről.

A mi általunk művelt szélesjelű NMR a szilárd fázisú vagy nagyviszkózitású anyagok vizsgálatára alkalmas. Rendelkezésünkre áll egy BRUKER SXP-100-as készülék, amelynek a frekvenciáját /20-90 MHz/ és a mágneses terét /5-21 kOe/ egymástól függetlenül tudjuk beállítani. Ezen a módon a mágneses momentummal rendelkező magok széles csoportjának a vizsgálatára képesek vagyunk.

Unikális sajátossága a rendszernek a flexibilis impulzusgenerátor rendszer, amellyel szinte az irodalomban előforduló valamennyi impulzuskombinációt képesek vagyunk kiadni, és így a legkülönbözőbb relaxációs időket mérni. Ezek a relaxációs idők, mint T_1 , T_2 , $T_{1\rho}$, T_{1d} , stb. igen fontos jellemzői a szilárd fázisú anyagoknak. Laboratoriumunknak immár három évtizedes tapasztalati vannak a szilárdfázisú NMR területén. Mintegy 100 publikáció és az ezekre eddig érkezett 300 fölötti hivatkozás fémjelzi ennek a tudománymetriai mutatóit. Legrégbbieket a fémkutatással kapcsolatos eredményeink.

Módszereink igen hasznosnak bizonyultak a szerves rendszerek vizsgálatában is. A nagymolekulájú szerves anyagok kristályos fázisairól és azok dinamikai viselkedéséről igen informatívak a relaxációs idő mérések. Jól használhatóak ezek a relaxációs idők például a víztartalom meghatározására is. A víztartalom

függvényében igen sok szerves anyag változtatja a kristályszerkezetet, amelyek közül esetleg csak kevés növeszthető olyan méretű egykristállyá, amelyen a hagyományos szórési módszerekkel /Röntgen vagy neutron szórás/ érdemi mérések végezhetők.

Említésre méltóak a Chinoin ciklodextrin komplexein kapott eredmények, amelyek egyrészt a vizeztartalom mérésével technológiai jellegű információkat szolgáltatottak, másrészt a relaxációs mérések a komplex létét igazolták szilárd fázisban is, ami más módszerekkel megoldhatatlan volt.

A szerves rendszerek másik érdekes területe a biológiai anyagok vizsgálata. Ezek az eredmények lehetővé tették a biofizika egyik legfontosabb kérdésének, a szövetek vizeztartalmának vizsgálatát, a különböző vízfázisok azonosítását. Vákuumszáritással kombinált relaxációs idő mérési módszereket dolgoztunk ki ezen mérések további finomítására.

A bevezetőben megadott, általunk elérhető mágneses tér és frekvencia tartományon belül lévő magok listáját és főbb paramétereit az I. táblázatban adjuk meg.

I. T á b l á z a t

Különböző NMR magok jellemzői

Izotóp	Spin értéke	Természetes előfordulása /%/	Relatív érzékenység	Mágneses tér értéke 30 MHz-en /kOe/	Frekvencia 21.14kOe-n /MHz/
H ¹	1/2	99.98	1.000	7.04	90.00
Li ⁷	3/2	92.57	1.94	36.26	34.98
B ¹¹	3/2	81.17	1.60	21.96	28.87
C ¹³	1/2	1.108	0.251	28.02	22.63
F ¹⁹	1/2	100	0.941	7.49	84.67
Na ²³	3/2	100	1.32	26.64	23.81
Al ²⁷	5/2	100	3.04	27.04	23.45
Si ²⁹	1/2	4.70	0.199	35.47	17.88
P ³¹	1/2	100	0.405	17.40	36.43
Cu ⁶³	3/2	69.09	1.33	26.58	23.85
Cu ⁶⁵	3/2	30.91	1.42	24.81	25.56
Pt ¹⁹⁵	1/2	33.7	0.215	32.78	19.35

HAGYOMÁNYOS MÖSSBAUER-SPEKTROSKÓPIA

NAGY DÉNES LAJOS

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A Mössbauer-spektroszkópiával minden szilárd testről nyerhető analitikai információ, amely alkalmas rezonáns magot (legtöbbször ^{57}Fe vagy ^{119}Sn) tartalmaz. Hagyományos (transzmissziós, esetleg γ -szórási) változatában a módszer tömbi információt ad. Konverziós elektronokat detektálva a módszer felületérzékennyé válik; ezzel külön előadás foglalkozik.

A Mössbauer-spektroszkópia a mag helyén fellépő elektronsűrűségről, elektromos térgradiensről és hiperfinom vagy külső mágneses térről ad felvilágosítást. Elsősorban az elektronsűrűség, de a másik két mennyiség is jellemző az atom kémiai állapotára. Így szilárd fázisban, roncsolásmentesen, teljes biztonsággal megállapítható a rezonáns mag atomjának vegyértékállapota, sőt igen gyakran a fázisanalízis is elvégezhető, bár ehhez legtöbbször más módszerek (pl. röntgen-diffrakció) is szükségesek.

Transzmissziós geometriában a vizsgálatokhoz természetes izotópösszetételű vastartalmú anyagok esetében mintegy 5mg Fe/cm^2 felületi vastagságú minta szükséges; ez általában legfeljebb 100 mg anyagot jelent. γ -szórási mérésekhez erős forrásra van szükség. Ez a technika korróziós termékek fázisanalízisének jelentős, mert védő festékréteg alatti in situ vizsgálatokat tesz lehetővé.

A rutin analitikai feladatok általában szobahőmérsékleten végzett néhány órás mérésekkel megoldhatók. Bonyolultabb esetekben nem kerülhető el az alacsony (nitrogén- vagy hélium-) hőmérséklet, valamint esetleg a külső mágneses tér használata. Kályhás mérésekre (kb. 1000 K-ig) akkor van szükség, ha egy fázist karakterisztikus átalakulásai (termikus dekompozíció, mágneses fázisátalakulások) segítségével kell azonosítani.

Szerkezeti információk nyerése céljából előnyös lehet egykristályok használata. Szűkebb értelemben vett analitikai célokra ez nem szükséges. Kedvező esetben polikristályos mintáknál a texturáltság foka is meghatározható.

KONVERZIÓS ELEKTRON MÖSSBAUER SPEKTROSKÓPIAI MÓDSZER (CEMS)

FETZER CSABA

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

Mössbauer spektrumot kaphatunk a magrezonancia-abszorpciót követő reemissziós folyamatban keletkező elektronok detektálásával is. A ^{57}Fe Mössbauer atommag esetén főként 7.3 keV-es K-konverziós és 5.4 keV-es KLL Auger elektronok keletkeznek. Természetes izotópösszetételű vas minta esetén például az a maximális mélység, amelyből a K-konverziós és a KLL Auger elektron még kiszökhet 180 nm ill. 120 nm.

Ezért a konverziós elektron Mössbauer spektroszkópia /rövidítve CEMS/ kiváló módszert nyújt vékony felületi rétegek roncsolásmentes vizsgálatára.

Segítségével Mössbauer spektroszkópiai vizsgálatok végezhetők különböző körülmények között felületen képződött rétegek, tetszőleges hordozóra felvitt vékonyrétegek, filmek és monorétegek, továbbá fémek, félvezetők, szigetelők ion-implantált mintái esetén. Tanulmányozhatók amorf fémötvözetek mélységfüggő mágneses tulajdonságai, katalizátorok felületének kémiai, morfológiai jellemzői, oxidációs és korróziós folyamatok kinetikája. A módszer fontos szerephez jut az acéliparban is, ahol tanulmányozhatók az acélötvözetek fázisai és az acélon hidegmegmunkálással, cementálással, stb. létrehozott keménységi és feszültségi viszonyok, továbbá a korróziót gátló passzív filmek és ellenállóképességük.

Az elektronok detektálására jelenleg szoba hőmérsékleten üzemeltethető gázátáramlásos proporcionális számlálót használunk. Ezzel természetes izotópösszetételű vas, acél és vasoxid

minták esetén 1-2 nap mérési idő szükséges a megfelelő statisztikájú Mössbauer spektrum felvételéhez.

A proporcionális számláló üzemeltetési körülményeinek stabilizálásával jól definiált mérési feltételek érhetőek el. Így lehetőség nyílt arra, hogy a Mössbauer spektrum csúcsintenzitás arányai alapján felületi vékonyrétegek vastagságát meghatározzuk.

A CEMS módszer segítségével sikerült meghatároznunk rozsdamentes acélminták felületén különböző körülmények között képződött korróziós rétegek kémiai, sztöchiometriai összetételét és vastagságát.

Az elektronok keletkezési mélységük függvényében energiát veszítenek a minta felületére történő transzmissziójuk során. A K-konverziós elektronok különböző energiájú tartományainak detektálásával tehát mélységfüggő információhoz jutunk. Jó energiafelbontású elektron spektrométer alkalmazásával néhány nm-es mélységszelektivitás érhető el.

Az általunk használt proporcionális számláló esetén is sikerült elérni bizonyos fokú mélységszelektivitást ; a felülethez közelebb eső fázis csúcsintenzitásamegnő a mélyebben lévő fázis csúcsintenzitásához képest, amint az egyre nagyobb energiájú elektronokat detektáljuk.

Az így nyerhető mélységfüggő információk alapján meghatározható réteges fázisszerkezetet mutató minták esetén a fázisok mélység szerinti elhelyezkedésének sorrendje. Valamint lehetőség nyílik arra is, ^{hogy} a fázisok koncentrációjának mélység szerinti inhomogenitására következtethessünk.

REAKTOR NEUTRONAKTIVÁCIÓS ANALIZIS

RAUSCH HENRIK, ELEK ANTAL, SZIKLAINÉ LÁSZLÓ IBOLYA ÉS
SIMONITS ANDRÁS

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

Az analitikai módszer elve

Az eljárás az anyagnak neutronokkal történő besugárzása során végbemenő (n,γ) , (n,p) , (n,α) és $(n,2n)$ magreakciókat használja fel analitikai célra. A magreakciókban keletkező radioaktív izotópok az anyagot alkotó elemeket nyomjelzik, megteremtve ezzel szignifikáns mérési lehetőséget. Az izotópok által emittált radioaktív sugárzás energiája, intenzitása és felezési ideje jellemző paraméter, ennél fogva ezek mérésével kapunk az anyagról minőségi és mennyiségi analitikai információt.

A vizsgálathoz szükséges nagyintenzitású neutronfluxust $\sim 10^{11}-10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ atomreaktorok vagy gyorsítók /közvetett forrás/ szolgáltatják, ezért szükségszerűen ezek környezetében telepítendőek az NAA bázislaboratóriumok. Jelenleg az országban 3 bázislaboratórium üzemel:

- KFKI AEKI Kutatóreaktor, Budapest;
- BME Tanreaktor, Budapest;
- ATOMKI Ciklotron-gyorsító, Debrecen.

Az atomreaktorok neutronforrása heteroenergiás, folytonos eloszlású spektrum, melyben analitikai szempontból elsősorban a termikus és epitermikus neutronok jelentősek. Ebből következik, hogy egy reaktor-besugárzóhely "jóságát" a termikus neutronfluxus (Φ_t) és a fluxusviszony (Φ_t/Φ_e) jellemzi.

A KFKI kutatóreaktorának termikus neutronfluxusa /a rekonstrukció után/ várhatóan $10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ nagyságrendű, fluxusviszonya 18-32, vagyis meglehetősen "kemény" és ez némileg növelheti a zavaró reakciók hatását.

A radioaktív sugárzás mérése

A gyakorlati méréstechnikában leggyakrabban a radioaktív sugárzás gamma-komponensének diszkrét energiavonalait mérjük gamma-spektrométer segítségével. A mérőrendszer összeállítása az 1. ábrán látható. A KFKI RNAA Laboratóriumának műszeres felszereltsége nem korszerű, de kielégítő. A laboratóriumban három független gamma-spektrométer üzemel, ezek közül kettő NIM-modulos Canberra erősítő és jelformáló elektronikai egységekből, valamint KFKI ICA-70 4k analizátorokból összeállított spektrométer, a harmadik KFKI CAMAC modulokból és ICA-70 analizátorból felépített spektrométer. A hozzájuk kapcsolt 1 db HP Ge és 2 db Ge/Li/ detektor és előerősítő ugyancsak Canberra gyártmányu. Mindhárom detektor felbontása 1,8-1,9 keV a ^{60}Co 1332 keV vonalára vonatkoztatva, hatásfokuk 13-15 %.

A méréseket egy KFKI TPA 11/48 számológép on-line vezérli és kiértékeli. A spektrumkiértékeléshez a SAMPO és HYPER-MET [1,2] programokat használjuk.

A vizsgálatok időtartama

Az esetenkénti mintaelőkészítéstől, a mintánként meghatározandó elemek számától és a keletkező radioaktív izotópok felezési idejétől függően 30 perc és néhány nap időintervallumban változhat. Ez egyuttal több mintából álló sorozatokra is vonatkozik.

A módszer kedvező tulajdonságai

- A módszer az időegység alatt elbomló radioaktív atomok számát méri, ennél fogva koncentráció-független. Ez nagymértékben egyszerűsíti a mérés standardizálását.
- A kémiai elemek $\sim 2/3$ -ad részének / $\sim 65-70$ elem/ nagyérzékenységgű analitikai meghatározására alkalmas. Az elemek kimuta-

tási határától /1. táblázat/ a 100 % összetételig terjedő tartományban lineáris.

- A mérés pontossága a radioaktív izotópoktól és a mátrixtól függően 1-10 %.
- A kimutatási határ felett előforduló minden elem egyidejűleg meghatározható, ill. kritikus elemekre kimutatási határ adható meg.
- Elsősorban térfogatanalitikai módszer, de speciális mérési eljárással felületi és mélységi elemeloszlások is mérhetők szilárd anyagrendszerekben.

Hátrányos szempontok

A szükségszerű nagyberendezések beruházása, valamint a sugárvédelmi feltételek biztosítása miatt a módszer költséges, a bázislaboratóriumok telepítési helyei ennél fogva behatároltak.

Javasolt analitikai alkalmazási területek

- Igen kis anyagmennyiségek /néhány µg/ elemi összetételének vizsgálata.
- Nagytisztaságu anyagok és anyagrendszerek szennyező elemeinek meghatározása.
- Sok alkotóelemes anyagok /kőzetek, ásványok/ összetételének és nyomelemeinek vizsgálata.
- Mikroelemek analizise biológiai szubsztanciákban.

A módszer gyakorlati alkalmazása

1. Nagytisztaságu anyagok szennyező elemeinek vizsgálata [3-6]

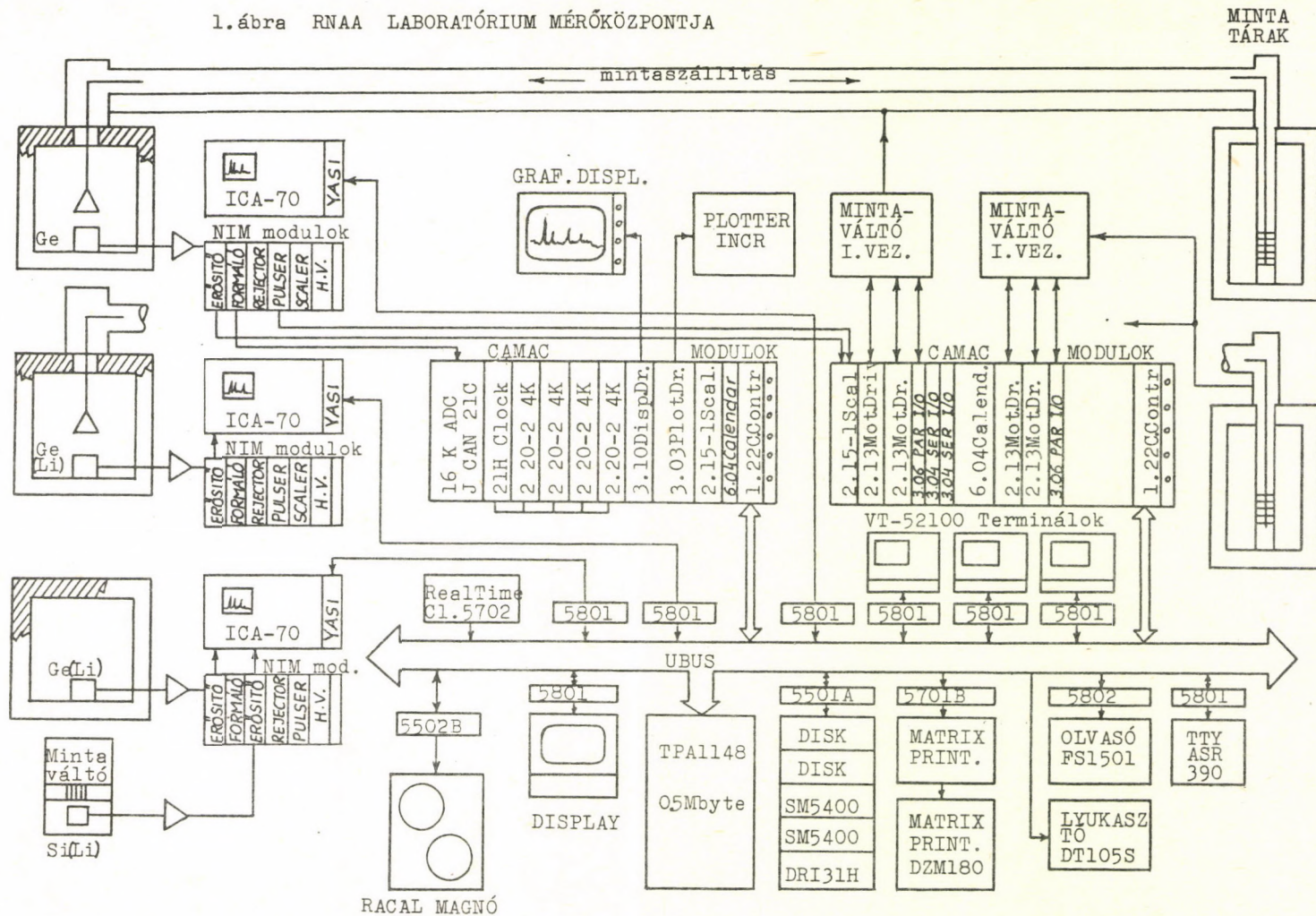
- Szilícium egykristály, szilícium-oxid, -nitrid, Si/Me vékonyrétegek
Me: Al, Ti, Mo
- B, Na, P, Cl, V, Ti, Mn, Fe, Co, Cu, Zn, Ga, As, Br, Mo, Ag, Ba, W, Au

- Szervetlen savak, sók
/HF, HNO₃, HCl, HN₄F, H₃PO₃/
 - Szerves oldószerek
/metanol, etanol, i-propanol,
toluol, xylol, triklór-etilén/
- Na, V, Mn, Fe, Co, Cu, Cr, Mg, Al
Zn, Sb, Ag, W, Au
- 25 szennyező elem figyelése
2. Vizanalízis [7]
- Nagytisztaságu viz
 - Erőművi hűtőviz
/atomerőmű primerkör/
- Al, Mg, Na, Cl, Ar, V, Mn, Cu, As,
Zn, Au
- Szerkezeti anyagok korróziós
termékei és radioaktív izo-
tópjai, V, Ti, Cr, Mn, Fe, Co, Ni,
Cu, Mo, Zr, Ag, W
3. Kőzetminták elemzése [8]
- Kerámia alapanyagok
/agyag, kőzetliszt/
elemzése
 - Hold-kőzet elemzés
- dunántuli geológiai rétegfu-
rások mintáinak összetétel-
és ritkaföldfémek eloszlásá-
nak vizsgálata. 25 elem mérése
- Összetétel-analízis, részvétel
nemzetközi körelemzésben
4. Biológiai minták [9-11]
- Endogén argirozisz tanul-
mányozása
 - Mikroelemek szerepe a
Wilson-kor és skizofréniás
megbetegedésekben
 - Mikroelemek eloszlásának
vizsgálata fűszerpaprika
növényben
 - Gyógyszerek hatásmechaniz-
musának vizsgálata
 - Kriminálisztikai célu vizs-
gálatok
- Ag mint toxikus elem eloszlá-
sának mérése, haj, bőr, köröm,
fogakban
- Cu és egyéb nyomelemek regio-
nális eloszlása agyszövetben,
szérumban és liquorban
- I, Mn, Zn, Rb, Co, Sc, Fe, Cl, Mg
meghatározása
- dibróm-dulcitol feldusulásának
mérése agytumor-szövetben,
Se szint mérése szérumban,
liquorban neuromuscularis
megbetegedések esetében
- Nyomelemek meghatározása
hajmintákban

I. táblázat. Néhány gyakoribb szennyező elem meghatározási érzékenysége nagy tisztaságu Si-ban, vízben, savakban és szerves oldószerekben

Elem	Meghatározási érzékenység* [ppb]	Elem	Meghatározási érzékenység** [ppb]
Al	1	Na	0,1
Mg	120	K	6
Cl	15	Sc	0,05
Ca	1300	Cr	3
Ti	80	Fe	470
V	3	Co	1
Mn	0,1	Cu	0,1
Cu	70	Zn	30
Ni	560	Ga	0,05
Sr	10	As	0,02
Cs	2	Br	0,04
Ba	5	Rb	13
Mo	130	Mo	8
		Ag	2
		Sb	0,02
		Ba	40
		La	0,03
		Ce	1
		Ta	0,4
		W	0,03
		Au	0,0008
		Hg	1
		U	0,2
*Besugárzás: 300 s Hűtés: 300 s			
**Besugárzás: 48 óra Hűtés: 24 óra			
Mérés:	2000 s		
F _G :	2 cm		
Np/min./:	100 imp		
Canberra Ge/Li/ η =	13,6 %		
Φ _t :	3.10 ¹³ cm ⁻² s ⁻¹		
Φ _t /Φ _e :	31		

1. ábra RNAA LABORATÓRIUM MÉRŐKÖZPONTJA



Hivatkozások

- [1] M.J. Koskelo, P.A. Aarnio, J.T. Routti: SAMPO 80, Mini-computer Program for Gamma Spectrum Analysis with Nuclide Identification. Helsinki University of Technology, Dept.of Technical Physics Report TKK-F-A427, 1980.
- [2] G.W. Phillips, K.W. Marlow, Program HYPERMET for automatic analysis of gamma-ray spectra, NRL Memorandum Report 3198, 1976.
- [3] E.W. Haas, M. Beuerle, R. Hofmann, J.Radioanal.and Nucl.Chem., Articles 82/1 /1984/ 7-32.
- [4] H. Rausch, J. Radioanal.Chem. 44 /1978/ 119.
- [5] Á. Balázs, L. Hermann, J. Gyulai, Phys.stat.sol /a/ 29 K105 /1975/
- [6] G. Nagygyörgy, H. Rausch, Proc. ESSDERC, 10-15 Sep. 1979, München, p.238.
- [7] J. Bogáncs, L. Maróthy, L. Bakos, R. Baranyai, A. Elek, H. Rausch, E. Szabó, J.Radioanal.and Nucl.Chem. 88/1 /1985/ 85-96.
- [8] Simonits A., Elek A., Kerámia-alapanyagok /agyag és kőzetliszt/ aktivációs analitikai vizsgálata. Tanulmány, KFKI AEKI, Budapest, 1983.
- [9] Sziklai L.I., Ördögh M., Patty I., Rácz P., Szabó E.: Some new data to the experimental investigation of argirosis.Proc.of the Second Int.Workshop on "Trace Element Analytical Chemistry in Medicine and Biology, Vol.2. pp.363-370, Neuherberg. Ed.: P. Brätter, P. Schramel, W.de Gruyter. Berlin-New York, 1983.
- [10] Ördögh M., Fazekas S., Horváth E., Óvári I., Pogány L., Sziklai L.I., Szabó E.: J.Radioanal.Chem. 79/1/ /1983/ 15-21.

[11] Sziklai L.I., Ördögh M., Bakos L., Szabó F.: Fűszerpap-
rika növényben jód és egyéb elemek meghatározása
Kutatási jelentés. 1981. /28 oldal/ AEKI Kémiai
Főosztály

NEUTRONGENERÁTOROS AKTIVÁCIÓS ELEMZÉS

ZEMPLÉNNÉ PAPP ÉVA

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A neutrongenerátoros aktivációs elemzésnél a vizsgálandó anyagot neutrongenerátor által termelt ~ 14 MeV-es neutronokkal sugározzuk be. A magreakciók során keletkezett radioaktív atomok által kibocsátott sugárzás mérésével kapunk minőségi és mennyiségi analitikai eredményeket.

A módszer főbb jellemzői:

- A vizsgált anyag elemi összetételének meghatározására alkalmas, ideértve bizonyos esetekben, a mátrixtól függően a mikro-mennyiségű komponensek kimutatását is. A kémiai kötéstől az eredmények nem függenek.
- A mintaelőkészítés egyszerű /27.5 mm átmérőjű, 7.5 mm vastag tárcsa készítése, vagy a minta elhelyezése ilyen méretű tokban/.
- A minta mennyisége néhány mg-tól 20-30 g-ig terjedhet.
- A mérés gyors és roncsolásmentes.
- A kimutatási határ: kb 20 elemre 10 μg
kb 60 elemre 100 μg
- Pontosság: ha a koncentráció $< 10 \mu\text{g/g}$ hiba $> 10\%$
 $> 10 \mu\text{g/g}$ " $< 10\%$
1% felett kb 1%
- A módszer alkalmas ipari technológiai folyamatba történő beépítésre, ellenőrzésre.

Neutrongenerátorral leggyakrabban meghatározott elemek:

Elem	Kimutatási határ / $\mu\text{g/g}$ /
Nitrogén	10
Oxigén	2
Fluor	5
Magnézium	15
Alumínium	1
Szilícium	0.5

Foszfor	1
Kálium	1
Vanádium	5
Vas	10
Réz	0.5
Ezüst	1
Bárium	6
Cérium	2
Arany	30

Eddigi legjelentősebb felhasználások:

- Fémek és ötvözeteik minőségének javítására, azok oxigéntartalmának, zárványösszetételének meghatározásán keresztül technológiai folyamatok ellenőrzésére.
- Szenek, erőművi és környezeti pernyék oxigén-, nitrogén-, szilícium-, alumínium- és vastartalmának meghatározása.
- Acélban cérium-adalék bekeverésének ellenőrzése.
- Üvegfémek foszfortartalmának mérése.
- Magasan ötvözött rozsdamentes acél szerkezeti anyagok börtartalmának meghatározása 1% körüli koncentráció tartományban.
- Motorolajok Ba tartalmának meghatározása

A módszer továbbfejlesztésének lehetőségei:

- Extrém rövid felezési idejű izotópok mérése / - gyorscsöpos-
ta, ciklikus aktiválás/
 - 14 MeV-es neutronokkal kiváltott magreakciókkal gerjesztett karakterisztikus röntgen sugárzás ill. alacsony gamma energiák mérése.
- ⇒ A módszer alkalmazási körének szélesítése.

A RUTHERFORD-VISSZASZÓRÁS, A RUGALMASAN MEGLÖKÖTT MAGOK
DETEKTÁLÁSA A CSATORNAHATÁS, VALAMINT MAGREAKCIÓK
ALKALMAZÁSA ANALITIKAI CÉLOKRA

MEZEI GÁBOR ÉS GYULAI JÓZSEF

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

Valamely vizsgálandó céltárgyat jól kollimált monoenergikus ionnyalábbal bombázva, s a rugalmas atommagütközésekben szóródott illetve meglökött ionokat jól meghatározott irányban energiaeloszlás szerint analizálva széleskörű ionformációkat nyerhetünk a céltárgyról. Eközben a kinetika ismert (rugalmas szórás) s a hatáskeresztmetszetek is jól ismertek (Rutherford szórás). A fentiek alapján a céltárgy atomi összetétele meghatározható. Kihhasználva azt, hogy vastag céltárgy mélyebb rétegeit vizsgálva a behatoló és a kilépő ionok ismert fékezőképességgel lassulnak, a céltárgy mélységbeli letapogatása egyetlen méréssel elvégezhető. Egykristályos minták esetén a beeső és/vagy a kilépő ionoknak a kristály könnyen átjárható irányai esetén fellépő csatornázódását felhasználva a kristályszerkezeti információk is elérhetővé válnak (a kristály beorientálása, a kristályhibák mélységbeli eloszlása, szennyező-atomok rácslokalizációja, stb.).

1) Rutherford visszaszórás és csatornahatás

Ha valamely szilárd céltárgyat 1-3 MeV energiájú ${}^4\text{He}^+$ (ritkábban ${}^1\text{H}^+$ vagy ${}^{14}\text{N}^+$) ionokkal bombázva és mérve a laboratóriumi

rendszerben 165 fok alatt szóródott részecskék energiaeoszlását, a következő információkhoz jutunk:

- Minél nagyobb tömegű atomról "pattan" vissza az ion, annál nagyobb az energiája. A szóródott ionok energiaskálája direkt módon tömegskálává transzformálható.

- Az ionok a felületről és 1-3 μm -ig terjedő mélységből szóródnak. A befelé és kifelé megtett úton az anyagi minőségtől függően fékeződnek. Kísérleti kutatások eredményeként a fékezőképesség paraméterek minden elemi és elegy céltárgyban kb. 5 % pontossággal ismertek. Összekötve ezt az előző ponttal, minden tömeg mellé egyuttal mélységskála rendelhető. A mélységfelbontás 5-15 nm.

- A módszer hitelesítés nélkül kvantitatív. A szóródás hatáskeresztmetszete Rutherford típusú, azaz ismert, így egy adott tömegről és mélységhől szóródott ionok intenzitása közvetlenül koncentrációskálává transzformálható. Mátrixeffektusok nincsenek.

A módszer főbb jellemzői szokásos kiépítésben: (2 MeV He⁺-ionokkal)

- Tömegérzékenység	1 a.m.u.	M=40-ig
	2-3 "	M=60-ig
	5 "	M 60-tól

(Hátrány tehát a gyenge tömegazonosítás nehéz elemeknél, ezért fontos kiegészítő módszer a karakterisztikus röntgengerjesztés ionokkal.)

- Detektálhatósági határok:

könnyű elemekre 1 monoréteg, 10^{15} atom/cm²,

nehéz elemekre 10^{-4} monréteg, 10^{11} atom/cm²

N^+ nyaláb nehéz elemekre 10^9 - 10^{11} atom/cm².

(Felületen lévő nehéz szennyezőkre ez a legérzékenyebb felület-analitikai módszer.)

- Hátrány, hogy a módszer jellege miatt nehéz mátrixban könnyű atomok kimutatása bizonyos esetekben lehetetlen. Ezért fontos kiegészítője a magreakciókon alapuló mikroanalízis. Ezzel az eljárással csaknem minden elem tetszőlegesen nehéz atomokból álló céltárgyban is mérhető. A KFKI-ban leggyakrabban egy speciális, a csoportunk által kvantitatívra tett és elterjesztett magreakciót alkalmazunk. E módszert a 3. pontban tárgyaljuk.

- Az analízis roncsolásmentes.

- Különleges előnye, hogy egykristályos céltárgyak esetén a visszaszórás összekapcsolható a csatornahatással. Ezzel további fontos információk szerezhetők:

a) Az idegen (szennyező) atomok lokalizálhatók az egykristályban. Egyszerűen eldönthető, vajon a szennyező szubsztitucionális szabályos intersticiális vagy véletlen helyeken ül. Fém egykristályoknál megkülönböztethetők a különféle intersticiális elhelyezkedések (tetraéderes, oktaéderes, stb.). Időigényesebb vizsgálatokkal kimérhető, hogy a szubsztituens atomok milyen egyensúlyi távolságban helyezkednek el a rácshelytől. (A módszer történetében a rácslokalizációs mérések voltak a legjelentősebbek.)

b) Csatornahatás fellépésénél tökéletes egykristályokban a szóráshozam kb. két nagyságrenddel csökken. E tény felhasználható kristályhibák (pl. ionimplantáció által előidézett szerkezeti károsodás) mélyságprofiljának felderítésére. Tökéletes egykristállyal történő egybevetés után viszonylag egyszerű módon leírható a kris-

tályhibák sűrűsége a mélység függvényében. A szilícium esetében az érzékenység 0.5 monoréteg. A módszer érzékeny egyes hibatípusokra és azok mélyléségi eloszlására is, de érzékenységi küszöbe miatt csak nagy koncentrációban. Szemben az elektronmikroszkóppal, nem igényel hosszadalmas és roncsoló mintaelőkészítést.

c) A csatornahatás könnyű elemekből álló vegyületek összetételének vizsgálatánál háttér-csökkentésre szolgál. A módszer 10-30 nm vastagságú SiO_2 , Si_3N_4 rétegek analizisére könnyen alkalmazható. A kémiai kötésekről nem ad információt.

d) Ultravákuum goniométerben a felület-szerkezet meghatározásának (relaxáció, adszorpció, felületi struktúra) kimutatásának is kvantitatív eszköze (a LEED-hez hasonlóan).

Az analizist rutinszerűen kb. 1 mm^2 nagyságú folton végezzük, ezért a minimális mintaméret $2-3 \text{ mm}^2$. A laterális felbontást ez korlátozza.

Mivel a mérés 10^{-5} Pa nagyságrendű vákuumban történik, nem vizsgálható a legtöbb biológiai és illóanyagokat tartalmazó minta.

2) ERD (Elastic Recoil Detection)

A gyorsítós technikák közül a legújabb az ERD. Ezzel a módszerrel H, D és T atomok mélységeloszlása kvantitatív módon feltérképezhető. A módszer alapötlete a következő. Hélium ionokkal bombázva a céltárgyat egyrészt maga az analizáló hélium ionok szóródnak, másrészt a $0.1-1 \mu\text{m}$ vastagságú felületi rétegből kilökik a héliumnál könnyebb adalék atomokat. A szórási szöget 20° és 35° között változtatjuk, a hélium ionok energiáját $2-3 \text{ MeV}$ között

tartjuk, a meglökött H és D atomokat felületi záróréteges detektorral gyűjtjük össze. A jelfeldolgozás a továbbiakban ugyanaz mint az RBS technikánál. A detektor elé olyan szűrőfóliát helyezünk, amely elegendően vastag ahhoz, hogy a szóródott hélium atomokat elnyelje, de elegendően vékony ahhoz, hogy a hidrogént és izotópjait a detektorba átengedje. Az ERD hatáskeresztmetszetek 0.5-3.5 MeV energiatartományban ismertek és erősen eltérnek a Rutherford hatáskeresztmetszettől. Az ERD spektrumok kiértékelése rutinszerű, hasonlít az RBS módszeréhez azzal az eltéréssel, hogy az ERD technikánál a fékezőképességet a He^+ mint beeső ion és H, D illetve T atomokkal számolunk a kijövő úton. Optimalizálva a geometriát a maximális mélység, amely az analízis során átfogható 3 MeV energiájú $^4\text{He}^+$ ionokkal kb. 1 μm . A detektálási küszöb deutériumra ~ 100 ppm vagy 10^{-14} atom/cm², hidrogénre ez egy nagyságrenddel rosszabb.

3) C, N és D analitika A(d,p)B típusú magreakciók alkalmazásával, valamint az $^{16}\text{O}(\text{He}^4, \text{He}^4)^{16}\text{O}$ rugalmas szórással

A (d,p) magreakciók energiahozama viszonylag magas, hozamuk elég nagy, ezért általában előnyösen alkalmazhatók analitikai célokra. A hatáskeresztmetszetek energiafüggése nem monoton ugyan, de nagy-érzékenységű mélységeloszlási vizsgálatok céljaira alkalmas keskeny rezonanciák nincsenek. A nagy energiahozam egyik előnyös következménye a különböző gerjesztett állapotokra történő átmenetek előfordulása, mely esetenként jó lehetőséget nyújthat a mátrix háttérétől való elkülönítésre.

Különösen előnyös a módszer 1-2 elemi rétegnyi vastagságú C, N vagy O meghatározására $Z \sim 15$ rendszámú hordozó felületén. 1-2 MeV-es bombázó energia esetén ugyanis a hordozó már nem, vagy csak alig gerjesztődik, míg a felületén lévő vékony réteg a reakció kinematikájának megfelelő diszkrét energiájú és a detektor felbontóképességével egyenlő félérték szélességű csúcsokat ad - általában messze fölülte a Rutherford visszaszórt deuteronok spektrumának.

A bombázó energia célszerűen a meghatározandó elem hatáskeresztmetszetének valamelyik maximuma, így összetett réteg esetén több különböző bombázó energián végzett mérés szükséges.

A módszer valójában más nehéz hordozóra felvitt alacsony rendszámú rétegek esetében is alkalmazható, de a mi gyakorlatunkban a C, N és O fordult eddig elő. Oxigén mennyiségi mérésére az $^{16}\text{O}(\text{He}^4, \text{He}^4)^{16}\text{O}$ rugalmas szórás is felhasználható. Ez a magreakció rezonancia típusú. Hatáskeresztmetszete $0.55 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$ a 3045 keV-es hélium nyálábra. A rezonancia félértékszélessége 10 keV. Ezzel a módszerrel szilíciumon már $7 \times 10^{14} \text{ atom/cm}^2$ oxigén könnyen mérhető. Nehezebb és vegyületfélvezetőkön ez a detektálási küszöb $1 \times 10^{16} \text{ atom/cm}^2$. Ez a detektálási határ az AES módszerrel egyenértékű és 17-szer kisebb mint a normál csatornahatásnál.

NEUTRONDIFFRAKCIÓ ÉS KISSZÖGŰ NEUTRONSZÓRÁS

CSER LÁSZLÓ, SVÁB ERZSÉBET ÉS ROSTA LÁSZLÓ

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A termikus neutronok specifikus tulajdonságai /izotóp-érzékenység, mágneses kölcsönhatás, rácsparaméterrel összemérhető hullámhossz, nagy áthatoló képesség/ rendkívül alkalmassá teszi a neutronszerkezetvizsgálatokat rendezett, amorf, olvadék állapotú ötvözetek, keverékek fázis analízisére, a technológiai folyamatok során lejátszódó fázisátalakulások vizsgálatára.

A nagy áthatoló képesség /néhány cm/ lehetővé teszi reális /ipari méretű/ objektumok roncsolásmentes szerkezetvizsgálatát. Példák erre: precipitációk kimutatása hegesztési varratokban: porkohászati, vagy kovácsolási eljárások hatásának kimutatása /pl. texturák kialakulása, ill. eltűnése/. Helyzetérzékeny detektorok segítségével a fenti folyamatok időbeli /nem túl gyors, néhány tíz másodpercnyi/ lefolyása is követhető.

A mágneses kölcsönhatás révén a mágneses anyagok szerkezete vizsgálható. Ez különösen fontos az utóbbi időben egyre jobban elterjedő nagy koercivitású, bonyolult szerkezetű ritkaföldfém alapú mágneses ötvözetek esetében, mivel a mikroszerkezet szinte "előírja" a makroszkópikus mágneses tulajdonságokat.

Az izotópperzékenység megkülönböztethetővé teszi a közeli rendszámú elemekből /pl. Fe, Ni/ álló ötvözetekben az egyes kristálytani helyekre beépült atomokat.

Amennyiben nem az atomi szerkezet a vizsgálatok fő célpontja, hanem valamely homogén tömbben keletkezett, az atomi távolságokat tiszter-ezerszer meghaladó méretű in-

homogenitás, akkor a kisszögű neutronszórás az adekvát módszer ezen inhomogenitások szerkezetének, alakjának egyáltalán mibenlétének tisztázására. Ilyen inhomogenitások pl: klaszterek, zárványok, domének, diszlokációk, sugárkárosodás okozta roncsolások, stb.

A fenti vizsgálatok természetesen nem a gyártás közbeni folytonos anyagvizsgálati kontrol eszközei, hanem az új anyagtechnológiák kidolgozásának nélkülözhetetlen segéd-eszközei. Ennek ellenére nem zárható ki - amennyiben erre igény jelentkezik - a sorozatgyártásban szurópróbaszerű alkalmazásuk sem.

FOTOAKUSZTIKUS ÉS HŐHULLÁMSPEKTROSKÓPIAI MÓDSZEREK AZ IZOTÓP INTÉZETBEN

LŐRINCZ ANDRÁS

MTA Izotóp Intézete

A fotoakusztika és a rokon hőhullámos spektroszkópiai és leképző módszerek iránti érdeklődés egyre nő. A Bell által 100(!) évvel ez-
előtt felfedezett és hamar el is felejtett mérési módszer reneszánszát
éli napjainkban. Kutatások folynak gáz, folyadék és szilárd halmazállá-
potú rendszereken és szinte hetente tudósítanak valamilyen új kísérleti
alkalmazásról. A módszer elve igen egyszerű: Szaggatott fényt - esetleg
elektron- vagy ionnyalábot- ejtve a vizsgálandó anyagra, az anyag periódikus
melegedését- hűlését idézzük elő. A periódikus hőmérsékletváltozás
akusztikus hullámokat kelt anyagban, és a továbbiakban vagy az akusztikus
hullámokat vagy a periódikus hőmérsékletváltozás által létrehozott
hőhullámokat detektáljuk közvetve vagy közvetlenül. A fény hullámhosszát
változtatva az anyag spektrális tulajdonságait vizsgálhatjuk. Változat-
lan gerjesztő nyalábbal fókuszálással és mintamozgatással leképező rend-
szert készíthetünk. Legegyszerűbben gáz környezetben, mikrofonnal és
fázisérzékeny erősítővel dolgozhatunk.

A fotoakusztikus effektus iránt megnyilvánuló nagy érdeklődés számos
okra vezethető vissza:

- erős fényforrások (ívlámpák, lézerek) ma már könnyen elérhetők,
- érzékeny hangdetektorok (mikrofonok, piezoelektromos, piroelek-
tromos érzékelők) jelentek meg
- a fotoakusztikus technika az egyik legérzékenyebb technikának bizonyult
gáz és szilárd anyagokra,
- a fotoakusztikának egyedülálló lehetőségei vannak, pl:
 - a./ átlátszatlan vagy por anyagok spektroszkópiája
 - b./ sugárzásmentes energiaátalakulási folyamatok tanulmányozása,
 - c./ in situ vizsgálatok (pl. biológiai mintákon)
 - d./ roncsolásmentes mélységbeni, felület alatti vizsgálatok (pl. doppel-
rétegek azonosítása)
 - e./ felületi és tömbi abszorpció szétválasztása.

Az Izotóp Intézetben egyrészt létrehoztunk egy fotoakusztikus spektrosz-
kópot, amely a közeli infravöröstől a közeli ibolyántúli tartományig hasz-
nálható.

A spektroszkóphoz különböző fotoakusztikus kamrák tartoznak, amelyekkel elsősorban porok, kerámiák mérhetők. A jelenleg folyó mérésekben LiF porokat tanulmányozunk.

Másrészt olyan mérési módszer fejlesztésén dolgozunk, amely roncsolásmentes, érintésmentes vákuumban is működőképes, de vákuumot feltétlenül nem igényel és mikrométeres felbontású. A módszer lényege az, hogy a mintáról visszaverődő szaggatott fénynyalábot használjuk "detektorként". A módszer egyszerűsített változatával felületi amorf rétegek átalakulásait szeretnénk tanulmányozni.

NAGYÉRZÉKENYSÉGŰ FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓS INFRAVÖRÖS SPEKTROSKÓPIA

MINK JÁNOS

MTA Izotóp Intézete

Az Intézetünkben üzemelő DIGILAB-FIS-20C gyors Fourier spektrométer kevesebb, mint 1 s alatt képes egy felvételt készíteni a teljes infravörös tartományról ($400-4000\text{ cm}^{-1}$). A felvételek gyorsasága lehetővé teszi, hogy több szinkép átlagolásával reális mérési idő alatt igen kis anyagmennyiséget illetve gyengén elnyelő mintákat azonosítsunk infravörös szinképük alapján vagy relative kis szerkezeti különbségeket érzékeljünk.

A módszer főbb jellemzői:

- Tekintettel arra, hogy az infravörös spektroszkópia molekularezgések és rácsrezgések mérésére alkalmas, a szinkép jellegét a molekulaszervezet, a kémiai kötések természete, a kristályszerkezet vagy a szilárdtest rendezettségi foka határozza meg.
- A módszer a minták roncsolásmentes vizsgálatát teszi lehetővé.
- Az infravörös tartományban (2,5-100 mikron) áteresztő anyagok transzmisszióban, az átlátszatlan minták pedig reflexióban (ill. multireflexióban) vagy emissziós technikával mérhetők.
- A "tisztá" anyagokból kimutatható anyagmennyiség 20-50 ng, de speciális technikával 1-5 ng anyag infravörös szinképe is felvehető.
- A módszernek nagy érzékenysége mellett fontos előnye, hogy nagymennyiségű anyagok mellett kis nyomnyi különbségek is detektálhatók speciális szinképi különbség képzéssel.
- A reflexiós és emissziós mérések előnyösen alkalmazhatók felületi vékonyrétegek, hibahelyek, szennyeződések, felületi diffúzió és felületi reakciók kimutatására, valamint felületen kemiszorbeált és fiziszorbeált anyagok azonosítására.

- Szinképeket 600-15 K hőmérséklettartományban tudunk felvenni. Az alacsony hőmérsékletű mérések szolgáltatnak értékes információt szilárdtestek rendezettségi fokáról, vagy nyomnyi szennyezettségükről.

Az eddigi alkalmazásokból

- Hordozós (Al_2O_3 , SiO_2 stb.) fém katalizátorokon adszorbeált anyagok szerkezetének, felülettel való kapcsolatának valamint katalitikus átalakulásainak vizsgálata.
- Fémoxidok (Fe_2O_3 , TiO_2 , Al_2O_3 , SiO_2 stb.) felületi klórozásának vizsgálata, a felületi reakciótermékek azonosítása.
- Kétfémes, nagydiszperzitású (Fe/Ru) hordozós katalizátorok keletkezési mechanizmusának vizsgálata karbonil-klaszterek hőbontásával.
- Fémek és különféle bevonatok vékony felületi rétegeinek emissziós spektroszkópiai vizsgálata.

A fenti alkalmazások szilárd minták felületén lejátszódó folyamatok tanulmányozását teszik lehetővé.

Berendezéseinkkel elvileg lehetőség van az alábbi mérések elvégzésére:

- Mikromennyiségű anyagok azonosítása (eddigi legkisebb, általunk mért anyagmennyiség 3 ng polimer minta volt).
- Infravörös tartományban jól áteresztő szilícium és germánium igen kis mennyiségű szennyezőinek vizsgálata. 10^{14} - 10^{18} atom/cm³ oxigén az infravörös szinkép alapján kimutatható. Egyéb szennyezők: szén, foszfor, bór, antimon, arzén, alumínium, gallium, indium jelenléte is detektálható 12 K hőmérsékleten, távoli infravörös tartományban.
- Szilícium epitaxiális rétegvastagságának mérése 10-35 mikron tartományban. (Ez a mérés az interferométer speciális átalakítását igényli.)

LÉZERES REZONANCIA MÓDSZEREK A KÉMIAI ANALIZISBEN

BAKOS JÓZSEF ÉS VÉRTES ÁKOS

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

Számos lézeres módszer már régen ismert a lézer előtti időkből. Ilyenek például a spektroszkópiának különböző klasszikus módszerei, pl. abszorpció (atom abszorpciós módszer) Raman spektroszkópia, stb. Természetesen azon túl, hogy ezek a klasszikus módszerek a lézer alkalmazásával tökéletesíthetők a lézer sugárzásának tulajdonságai lehetővé tették további újabb érzékeny spektroszkópiai módszerek megalkotását és alkalmazását pl. Koherens Anti Stokes Raman Spektroszkópia (CARS), lézer indukált fluoreszcencia (LIF) rezonancia ionizációs spektroszkópia (RIS).

Az utóbbi két módszer, azaz a LIF és a RIS különösen kitűnik érzékenységgel és szelektivitásával. Mindkét módszer első része azonos. A kiválasztott vizsgálni kívánt atomi részecskét (atom, molekula) a rá jellemző rezonancia sugárzással gerjesztjük lehetőleg a telítésig. (Ugyanannyi részecske van gerjesztett állapotban, mint alapállapotban.) Az alapállapotba visszatérő részecske rezonancia fluoreszcencia fényt sugároz, melyet detektálunk. A módszer szelektivitása a gerjesztő fény sávszélességétől, míg az érzékenysége a fénydetektálás érzékenységétől függ. Kedvező körülmények esetén néhány száz részecske már detektálható.

A LIF-módszernél érzékenyebb a rezonancia ionizációs spektroszkópia. Mint már említettük az első lépés azonos a LIF-vel. Rezonanciában gerjesztjük a részecskét. A gerjesztett állapotba jutó részecske a sugárzás erőssége miatt még további fénykvantumokat abszorbeál és ionizálódik. Az ion azután elektromos térrel gyorsítható és ~100 %-os határfokkal detektálható. Ez okozza a LIF-hez viszonyított jobb érzékenységét. Már egy atom is detektálható atmoszferikus háttér mellett. A módszer szelektivitása is fokozható a további kvantumok elnyelésénél is rezonanciát

hozva létre (két, illetve több frekvenciájú fény alkalmazásával). A módszer szelektivitása alkalmas izotópok szétválasztott detektálására is.

A lézersugár természetesen alkalmas az atomizálás folyamatára is és tömegspektrométerrel, illetve RIS módszerrel összekapcsolva szilárd testek felületéhez közeli térrészben összetétel vizsgálatot tesz lehetővé. Ez különös jelentőségre tesz szert mikroáramkörök alapanyagainak, illetve gyártási közbenső fázisban felületeknek összetétele vizsgálatánál.

A LIF és RIS módszer alkalmazásának területei természetesen messze-
menőleg nincsenek még feltárva. Számos jelenség (pl. atomizálás) vár
részletesebb vizsgálatra. Az azonban látható, hogy érzékenységben és
szelektivitásban kiugróan jó módszerekről van szó, amelyek alkalmazása
fejlődésének elején áll, eddig is egyedülálló eredményeket produkálva.

Jelenleg a RIS módszer különböző formáival 67 elem mutatható ki
különböző környezetben és négy elemet jelenleg ezen módszerrel nem lehet
vizsgálni. A módszer kontrasztja természetesen attól függ, hogy milyen
környezetben kell melyik elemet meghatározni. Az érzékenységre és a
kontrasztra egy jellemző példa, hogy a 100 torr nyomású P-10 gázban
(90 % Ar + 10 % CH₃) egy Cs atom meghatározható.

AZ ELLIPSZOMETRIA ALKALMAZÁSA VÉKONYRÉTEGEK MINŐSÍTÉSÉRE ÉS VIZSGÁLATÁRA

LOHNER TIVADAR, FRIED MIKLÓS ÉS JÁROLI ERIKA

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

Az ellipszometria alkalmazása során megmérjük és értelmezzük a minta felületére a merőlegestől eltérő irányból érkező polarizált fénysugár polarizációs állapota és a mintáról visszaverődő fénynyaláb polarizációs állapota közötti eltérést [1-4].

A polarizációs állapot megváltozásából a minta tulajdonságaira következtethetünk /komplex törésmutató, rétegvastagság/. A komplex törésmutató függ a minta összetételétől és számos esetben a szerkezeti tulajdonságaitól is.

A mikroelektronikai technológiában a gyártásközi ellenőrzés feladatai közé tartozik különféle dielektrikumrétegek vastagságának és törésmutatójának gyors, pontos, érintés- és roncsolásmentes mérése, erre általában az ellipszometriát használják. A kereskedelmi forgalomban beszerezhető manuális vagy automatikus, egy hullámhosszon működő ellipszométerek alkalmasak a dielektrikumrétegek vastagságának néhány tized nm pontossággal történő meghatározására. A módszer gyors: egy mérés időtartama manuális ellipszométerrel néhány perc, automatikus ellipszométerrel egy perctől néhány ezredmásodpercig terjed.

A módszer igen szélsőséges és változatos körülmények között is alkalmazható, pl vákuumban, atmoszferikus vagy nagy nyomáson, magas hőmérsékleten, alkalmas pl folyadék és szilárdtest között levő határfelület vizsgálatára, vékonyrétegleválasztási folyamatok in situ analízisére.

A spektroszkópiai ellipszometria alkalmazásával különféle vékonyrétegek és szilárdtest-felületek dielektromos függvényét lehet meghatározni több hullámhosszértéknél vagy egy hullámhossztartományban [5-9].

A KFKI-ban rendelkezésre álló manuális ellipszométer fényforrása He-Ne lézer / $\lambda = 632,8$ nm/, a beesési szög 45° és 90° között változtatható. A méréskiértékelési feladatokra adaptált és saját fejlesztésű számítógépprogramokat használunk.

Irodalomjegyzék

- [1] Azzam, R.M.A., Bashara, N.M.: Ellipsometry and polarized light North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1977.

- [2] Rzhanov, A.V., Svitashv, K.K.: Ellipsometric techniques to study surfaces and thin films. *Advances in Electronics and Electron Physics*, 49, pp. 1-84, Academic Press, New York, 1979.
- [3] Ádám, J.: Ellipsometry and its applications to surface studies. *Proceedings of the 2nd International Summer school on Vacuum Physics /Fonyód, 1974/* p 307.
- [4] Lohner T., Fried M., Jároli E.: Az ellipszometria alkalmazása vékonyrétegek minősítésére és vizsgálatára. *Finommechanika - Mikrotechnika* 24. évfolyam, 1985. ápr.-máj. 120.
- [5] Aspnes, D.E., Studna, A.A.: Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV. *Physical Review* B27 985-1009 /1983/
- [6] Kelso, S.M., Aspnes, D.E., Pollack, M.A., Nahory, R.E.: Optical properties of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ from 1.5 to 6.0 eV determined by spectroscopic ellipsometry. *Phys. Rev.*, B26,6669-6681 /1982/.
- [7] Barna, P.B., Bodó Z., Gergely G., Croce, P., Ádám J., Jakab P.: Ellipsometric and X-ray specular reflection studies on naturally grown overlayers on aluminium thin films. *Thin Solid Films*, 120, 249-256 /1984/.
- [8] Ghita, C., Ghita, L., Baltog, I., Constantinescu, M.: Spectro-ellipsometric investigation of PbI_2 single crystals. *Physica status solidi* b102, 111-115 /1980/.
- [9] McMarr, P.J., Vedam, K., Narayan, J.: Spectroscopic ellipsometry: A new tool for nondestructive depth profiling and characterization of interfaces *Journal of Applied Physics*, 59, 694-701, /1986/.

SZÁMITÓGÉPES POTENCIOMETRIÁS STRIPPING ANALIZIS

ELTER DÉNES

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A potenciometriás stripping analízis nagyérzékenységű elektroanalitikai módszer, mely elsősorban oldatok nehézfém szennyezőinek meghatározására alkalmas. A mérés két lépésből áll: a meghatározandó elemet leválasztjuk a munkaelektrodra /elődusítjuk/, majd az elektrolízis befejezése után az elektródról oxidálószerrel vagy redukálószerrel visszaoldjuk. A visszaoldás alatt mérjük az elektród potenciálváltozását az idő függvényében. A potenciál - idő görbe redox titrálási görbéhez hasonló, a kérdéses komponens oldatbeli koncentrációja arányos a két ekvivalencia pont között eltelt idővel. Oxidálószer használata esetén oxidatív, redukálószer használata esetén redukzív PSA módszerről beszélünk. A mérés és kiértékelés automatizált, áramló oldatokban történő analízisek elvégzésére is alkalmas.

A KFKI Kémiai Főosztályán összeállítottunk egy ilyen berendezést, a számítógépes adatgyűjtést, vezérlést és kiértékelést egy mikroprocesszoros CAMAC rendszerrel oldottuk meg.

A módszer főbb jellemzői:

- Analóg mérőberendezéssel kb. $1 \mu\text{g}/\text{dm}^3$, míg számítógépes adatgyűjtéssel kb. $1 \text{ ng}/\text{d}^3$ kimutatási határ érhető el.
- Az oxidatív PSA ez ideig főleg amalgámképző elemek ionjainak, így Zn^{2+} , Cd^{2+} , Pb^{2+} , Cu^{2+} , Tl^+ , Tl^{3+} és Bi^{3+} , illetve Hg^{2+} és As^{3+} meghatározására van kidolgozva. Indirekt uton megoldható más elemek, pl. Sc, Th és ritkaföldfémek meghatározása is. A redukatív PSA halogenidek (Cl^- , Br^- , I^-), szelenid, szulfid, ill. mangán meghatározására alkalmas.
- Jól mérhetők különféle oldatok, így természetes vizek, erőművi és reaktorvizek, gyümölcslevek, alkoholos italok, vér, vizelet, stb. fémszennyezői.
- A mérés időtartama néhány perc - a mintaelőkészítést nem számítva.

Mód van a felvett stripping görbe és differenciális görbéjének is display-n való kiíratására, eredeti sebességgel, vagy lelassítva történő kirajzoltatására, az adatok kinyomtatására, sornyomtatón vagy mágneslemezen történő tárolására.

Az eddigi alkalmazásokból:

- Természetes vizek,
- erőművi vizek és
- orvosi diagnosztikai célú minták nyomelemtartalmának meghatározása.

NAGYTÉRFOGATÚ VIZES OLDATOK TISZTASÁGÁNAK ÉS RADIOAKTIVITÁSÁNAK VIZSGÁLATA

ELEK ANTAL

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest, Pf. 49, 1525

A tudományos és műszaki élet számos területén jelentkeznek olyan analitikai igények, amelyek nagstérfogatu vizes oldatok radioaktív és inaktív szennyezőinek meghatározásával kapcsolatosak. Ilyen területnek tekinthetjük például az atomerőművi vízanalitikát vagy a mikroelektronikai vízminősítést. Mindkét esetben előfordulhat, hogy a fémes szennyezők meghatározását ppb alatti koncentrációtartományban kell végezni megfelelően jó pontossággal és reprodukálhatósággal.

Ezen feladatok megoldására analitikai kutatás-fejlesztési tevékenységünk során [1,2] a következő vizsgálati sémát dolgoztuk ki:

Előkonzentrálás: A mintaoldat szűrése

- membránszűrőn és/vagy
- ioncserélő szűrőn és/vagy
- más szűrőn át.

Membránszűrő vizsgálata: a/ részecskeanalízis és/vagy

b/ aktivitásmérés és/vagy

c/ neutronaktivációs analízis és/vagy

d/ más vizsgálat.

Ioncserélő szűrő vizsgálata: b/, c/ d/ ugyanaz.

A vizsgálati séma alkalmazását két példán mutatom be:

1/ Atomerőművi hőhordozó lebegő szennyezőinek vizsgálata.

A radioaktív hőhordozó 270 ml aliquotját 0,45 μ m prósuméretű, 47 mm átmérőjű Sartorius membránszűrőn szűrtük át. A felfogott lebegő részecskék aktivitását mérve bennük 980 ± 80 Bq Ag-110m

aktivitás volt. Ismételt aktiviálással a neutronaktivációs analízis [1] eredménye a következő /ng/ volt:

Cr-	1300	Au-	0,2	Sb-	200
Ag-	90 /korrigált/	Sc-	1,9		
Fe-	32000	Co-	10		

2/ KFKI kutató atomreaktora primerviz aktivitásának megoszlása lebegő-szilárd és oldat fázis között.

A primervizből 500 ml aliquotot egymásra helyezett membránszűrőkön, Gelmen Acropor SA kation- és SB anioncserélő szűrőkön át szűrtük és mértük a felfogott anyagok aktivitását [2]. Az aktivitások megoszlása /%/ a kiindulási primervizben mértekhez viszonyítva az alábbi táblázatban található.

Izotóp	Labegő+hiba		Kationcserélő+hiba		Anioncserélő+hiba	
Na-24	-		91	12	-	
Cr-51	2,0	0,7	-		93	12
Co-60	-		84	12	-	
Zr-95	67	15	-		-	
Nb-95	92	41	-		-	
Ru-103	60	11	-		-	
I-131	-		-		105	10
Ba-140	3,0	0,3	104	11	-	
Ce-141	29	4	15	3	5	1
Ce-144	23	5	26	6	4	1

Megjegyzés: - jelnél nem volt detektálás

Hivatkozások:

1. J. Bogáncs, L. Maróthy, L. Bakos, R. Baranyai, A. Elek, H. Rausch, Primary coolant circuit characterization related to starting up the WWER-440 unit, J. Radioanal. Nucl. Chem. 88/1 /1985/ 85-96
2. Elek A., Rausch H., Sziklai J-né, Korróziós minták analízise, OKKFT A/11-3 alprogram, Kutatási jelentés és Záró jelentés, 1985. október

CIKLOTRONRA ALAPOZOTT ANYAGVIZSGÁLATI LEHETŐSÉGEK

DITRÓI F., MAHUNKA I., TAKÁCS S.

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51. 4001

A debreceni ciklotron a mag- és atomfizikai alap kutatásokon kívül számos alkalmazási célra is felhasználható [1-2]. A gyakorlati alkalmazások fő területei a nukleáris analitika és kopásvizsgálat, az orvosi, mezőgazdasági és ipari célú izotópter-
melés, valamint a neutronforrás interdiszciplináris és terápiás felhasználása [2].

Anyagvizsgálati célú besugárzásokat két vízszintes és egy függőleges nyalábvégén végezhetünk töltött részecskékkel, valamint a másodlagos neutronforrások segítségével.

Az anyagvizsgálattal kapcsolatos módszereket két nagy csoportba oszthatjuk. Ezek a prompt és a késleltetett módszerek, amelyek abban különböznek egymástól, hogy prompt módszernél a keletkező sugárzást (röntgen-, gamma-, vagy részecske-sugárzás) a besugárzással egyidőben, míg a késleltetett módszernél a besugárzás után bizonyos idő elteltével detektáljuk. A prompt módszerek - amelyeket a ciklotron laboratóriumában is alkalmazni kívánunk - a PIXE (Particle Induced X-ray Emission), a PIGE (Particle Induced Gamma-ray Emission) és az RBS (Rutherford Backscattering). Az alkalmazni kívánt késleltetett módszerek közé tartozik a CPAA (Charged Particle Activation Analysis) és a NAA (Neutron Activation Analysis).

A PIXE módszer az ionizált atomok belső héjainak betöltődését kísérő karakterisztikus röntgensugárzás mérésén alapul. Nagyérzékenységű, roncsolásmentes módszer, amellyel egyszerre több elem is meghatározható. Energiatartományuk és stabilitásuk miatt a kis energiájú Van de Graaff generátorok alkalmasak a módszer művelésére, de hidrogén molekula-ionok gyorsítása esetén a ciklotronnal is kedvező érzékenység érhető el. A ciklotron magasabb energiája főként a levegőre kihozott nyalábon történő méréseknél jelent előnyt.

A PIGE módszer az atommagok gerjesztett állapotainak lebomlását kísérő, az adott izotópra jellemző gamma-sugárzás vizsgálatán alapul. A módszerrel egyszerre több elem is meghatározható roncsolásmentesen és megfelelő érzékenységgel.

Az RBS módszer a rugalmasan visszaszórt bombázó részecskék detektálásán alapul. A visszaszórt részecskék energiája a szóró atom tömegére jellemző. Roncsolásmentes módszer, néhány elemet lehet vele meghatározni egyszerre, és mélységi eloszlás mérésére is használható.

A CPAA a töltött részecskés besugárzás során keletkezett ra-

dioizotópok gamma-sugárzásának mérésén alapul. Sokelemes, nagy érzékenységű és roncsolásmentes módszer, de az érzékenység és a szelektivitás növelése érdekében kémiai szeparációt is szoktak alkalmazni. A módszerhez szükséges nyalábenergia és intenzitás értékek miatt a ciklotron különösen alkalmas a CPAA módszer alkalmazására. A bombázó részecske, az energia és a besugárzás utáni várakozási idő megfelelő megválasztásával egyes esetekben el lehet érni, hogy a gamma-mérés idejére a minta alapanyaga nem aktív, ami jelentős háttérnövekedést, s ezáltal érzékenység növekedést jelent.

Az NAA a neutron besugárzás során keletkezett radioaktív izotópok gamma-sugárzásának mérésén alapul. Szintén sokelemes módszer. Speciális esetekben kémiai szeparációval együtt is alkalmazzák. A ciklotron neutronforrások segítségével folytonos energiaspektrumú "gyors" neutronok állíthatók elő 3-9 MeV átlag-energiákkal és 10^{12} - 10^{13} neutron/s hozamokkal. A gyors neutronok megfelelő lassító közeggel termalizálhatók.

Az itt felsorolt nukleáris analitikai módszerek sok esetben érzékenyebbek a hagyományos kémiai módszereknél és jobban megfelelnek az adott feladat követelményeinek. A fenti módszerek jellemző adatai az I. táblázatban találhatóak.

I. Táblázat. Ciklotronra alapozott fontosabb nukleáris analitikai módszerek jellemzői

Módszer	Érzékenység	Vizsgálható elemek tartománya	Vizsgálható mélység	Besugárzás módja
PIXE	0.1-10 ppm	Z>13 elemek	felületi, 10-50 μm	vákuumban, v. levegőre kihozott nyalábon
PIGE	ppm	az elemek többsége	felületi, 10-1000 μm	vákuumban, v. levegőre kihozott nyalábon
RBS	ppm	könnyű mátrixban nehéz elemek	felületi, 10 μm	vákuumban
CPAA	ppb-ppm	az elemek többsége	felületi, 50-1000 μm	vákuumban, v. levegőn
NAA	ppm	az elemek többsége	nagy térfogat	levegőn

A táblázatban feltüntetett prompt módszerek alkalmazására egy komplex analitikai kamra készült, amelyben a különböző módszerek akár egyidejűleg is használhatók egymás kiegészítésére.

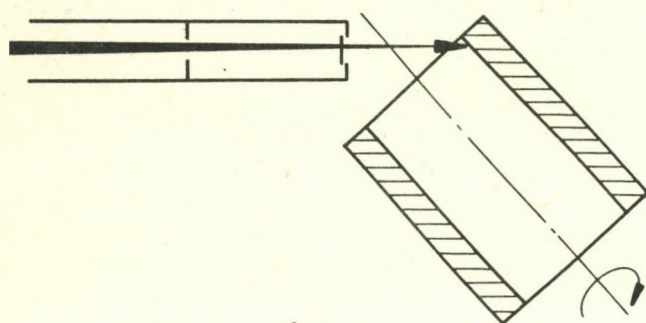
Az anyagvizsgálati alkalmazások csoportjába tartozó másik fontos felhasználási terület a vékonyréteg aktiváció, amely a

pásvizsgálata; vágó és forgácsoló szerszámok éleinek kopásvizsgálata; felületkezelési eljárások hatásosságának vizsgálata; valamint agresszív kémiai és szélsőséges hőmérsékleti környezetben működő alkatrészek korróziójának vizsgálata. Tipikus vizsgálati elrendezések láthatók az 1. ábrán. A módszer nagy előnye, hogy az alkatrész besugárzás után, a működési helyére beépítve, üzem közben is vizsgálható.

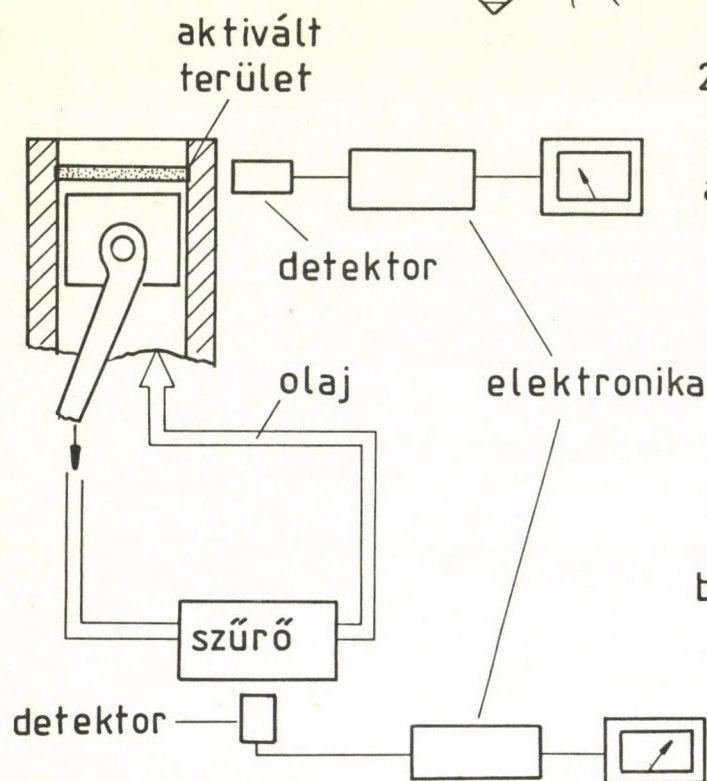
Hivatkozások

- [1] Ditrói F., Takács S., és Tárkányi F., ATOMKI Riport X/15 (1985)
- [2] Mahunka I., és Tárkányi F., Magyar Tudomány (közlés alatt)

kopás, a korróziós és az erózió vizsgálatát teszi lehetővé. A módszer menete a következő: a vizsgálandó minta felületének kiválasztott részeit a megfelelő típusu, energiájú és intenzitású töltött részecske nyalábbal besugározva a felület közelében vékony aktív réteg hozható létre. Ezután a vizsgálandó mintát üzemi körülmények közé helyezve, mérhető aktivitásának változása, vagy a kopás, korrózió, stb. következtében róla eltávozott aktivitás. Az aktivitás mélységi eloszlásának ismeretében az eltávozott anyag mennyisége, azaz a kopás pontosan meghatározható. Implantáció segítségével olyan anyagban is létrehozható vékony, aktív réteg, amely egyébként nem aktiválható.



1) Aktiválás



2) Mérés

a) aktivitás veszteség detektálása

b) összegyűjtött aktivitás mérése

1. ábra. Vékonyréteg aktivációs kopásvizsgálat lépései, és szokásos mérési elrendezései.

Acél és bronz ötvözetek, kerámiák, csiszoló anyagok, karbidok, műanyagok, gyémánt, oxidok és nitridek kopása vizsgálható a bennük lévő Fe, Ni, Cr, Cu, Al, Si, C, O, N, Ti, V stb. elemek aktiválása alapján. A módszer lehetséges felhasználási területei: járművek futófelületeinek, csuszó, surlódó alkatrészeinek ko-

AN AUTOMATIC LITHIUM DRIFTING APPARATUS FOR PREPARATION OF
Si(Li) X-RAY DETECTORS

Jenő Pálvölgyi

ATOMKI, H-4001 Debrecen, Pf. 51., Hungary

This paper presents the description of a lithium drifting apparatus controlling the process of 8 silicon crystals, at the same time. The crystals are drifted through completely and the process is terminated automatically. The impurity concentration of the accomplished Si(Li) X-ray detectors - showing the quality of the compensation - was determined by the measurement of the C-V characteristics.

1. The principles of the lithium drift

Compensation of boron impurity in silicon and germanium lattice by lithium ion drift for production of thick depletion layers is a well-known technique. It is based on the properties of lithium in silicon and germanium; it acts as a single charged interstitial donor with low ionisation energy and has small atomic radius compared to the lattice dimensions and high mobility. Between the lithium ions and the impurities of the lattice different interactions take place. The most important reaction is the compensation of the electrical activity of boron by formation of neutral immobile pairs of Li^+ donors and B^- acceptors while the secondary effects are: pairing between the lithium ions and the oxygen contained by the lattice and with vacancies as well as precipitation of lithium at nucleation centers (dislocations, vacancies and chemical impurities). The lithium ions form with the oxygen atoms LiO^+ or higher order Li_mO^{n+} complexes, decreasing the drift rate significantly because of the reduction of the lithium ion mobility. Reactions also take place between the lithium ions and boron ions in the vicinity of vacancies forming negatively charged complexes. By the precipitation of the excess lithium ions introduced into the lattice loose their electrical activity. The role of the nucleation centers is not cleared [1].

2. The performance of the lithium ion drift in silicon

The silicon crystal before lithium drift is prepared mechanically and lithium is evaporated onto the surface opposite to the frontside (which will be the entrance window), and diffused into the lattice. This layer is the source of the lithium ions during the drift. An ohmic contact is prepared onto the surface evaporated by lithium, while a p-n junction onto the frontside. The crystals during the lithium ion drift are biased in backward. On the influence of the high electric field the

lithium ions migrate interstitially through the lattice and form neutral complexes with the boron impurities. Increasing the lithium ion drift mobility the crystal is kept at elevated temperature (50-120°C). The width of the compensated layer (W) at t time is. $W = \sqrt{2u \mu_L t}$, where u is the applied voltage, μ_L the lithium ion mobility [2]. This relation shows, that the drift rate is independent on the resistivity, but increases with the temperature through μ_L . The applied temperature is limited by two factors: the surface breakdown and the presence of the thermally generated space charge causing imperfect compensation. Drifting a thick (5 mm) compensated layer is a very time consuming operation, it takes several month. The termination of the drift by the time, the compensated region reaches the frontside is very important. The charge collection for low X-ray energies in devices exhibiting an uncompensated layer at the frontside is poor, resulting tailed line shape. These detectors are unsuitable for X-ray spectrometry. The overdrift of the crystal causes pile up of the lithium ions at the frontside. Because of the large number of unknown factors influencing the drift rate the calculation of the drift time gives results with a large error, therefore experimental methods are used for detection of the completion of the drift.

3. Technique of the drifting apparatuses

Because of the long duration and the need of detection of the completion of the drift, groups fabricating detectors by lithium ion drift developed various methods. Some of the most original ideas are summarised below.

The first automatic drifting apparatus was developed by Goulding and Hansen [3]. The thickness of the uncompensated layer was measured by the resistance between the center golden spot and the outer ring evaporated onto the frontside of the crystal. When the compensated region reaches the frontside the cross-section of the uncompensated layer decreases and the resistance rises. The rise of the resistance results drop of the drift temperature decreasing the drift rate significantly. In the apparatus developed by Dearnealy [4] the beginning of the pile up of lithium ions was used for detection of the completion of the drift. The pile up of lithium ions causes transformation of the $n^+ - i - n$ structure resulting increase of the current flowing through the crystal.

The method developed by Schüler [5] uses the saturation of the photocurrent of a pulsed light source directed onto the frontside. The photocurrent rises as the compensated region advances and saturates when it reaches the frontside.

4. Si(Li) drifting apparatus developed in our laboratory

Figure 1, shows the simplified block diagram of the automatic Si(Li) drifting apparatus controlling the drift parameters and detects of the completion of the drift of 8 crystals at the same time.

Figure 2, is the detailed block diagram of one of the control units. Onto the frontside of the crystals p-n junction is prepared by the nickel layer. The completion of the drift is

detected by the rise of the current through the crystal caused by the beginning of the transformation of the $n^+ - i - p$ into a $n^+ - i - n$ structure. The crystals under drift are placed in small thermal capacitance furnaces having constant temperature ($\sim 80^\circ$) during the drift. The current flowing through the crystal has three components: the current of the lithium ions, the generation-recombination (GR) current and the device surface current. The current measured continuously increases slightly in function of the drifting time because of the GR component being proportional to the width of the compensated region. At the time when the compensated region reaches the frontside the pile up of lithium ions causes rapid increase of the current. This phenomena results deterioration of the compensation which has to be avoided. Detecting the exceeding of the current limit, preselected 50 % higher than the current flowing through the crystal before the completion of the drift, the drift rate is lowered by decreasing the current limit to 15 % causing lowering the furnace temperature. The drift is continued at the lower temperature (40°C) for 24-100 hours serving the correction of the imperfect compensation caused by the thermally generated space-charge at higher temperature. The completion of the drift is also checked by the plot of the reverse bias I-V characteristics of the crystals using an X-Y recorder and a single ramp generator of the high voltage power supply. The I-V characteristics shows the beginning of the formation of a $n^+ - i - n$ structure resulting forward biased junction at the frontside.

5. Determination of the impurity concentration

The impurity concentration $N = |N_{\text{donor}} - N_{\text{acceptor}}|$ profile of a semiconductor device can be calculated from the C-V characteristics using the relation: $N(w) = C^3 / (q\epsilon A^2 dC/dU)$, where w is the width of the depletion layer, q the electronic charge, ϵ the dielectric constant and A the area of the surface of the junction, while U is the applied reverse voltage plus the diffusion voltage. The C-V characteristics, of the accomplished Si(Li) detectors were measured in spectrometer configuration illustrated in figure 3. This method is based on the measurement of the peak position of long decay time (1000 μs) pulses which are fed through the detector. The capacitance of the detector, which consist of the detector bulk and surface capacitance plus the stray capacitance is calculated from the relation: $C = E / \bar{\epsilon} \cdot q / U_{\text{gen}}$, where E is the position of the peak (measured in eV) of the pulses with U_{gen} amplitude, ϵ is the energy required to produce one hole-electron pair. This method has the advantage of good relative sensitivity: 0.002 pF. The energy calibration of the system is performed by the 6.4 keV and 14.4 keV lines of the Co-57 source.

Figure 4, shows the number of the uncompensated ions (N) in function of the $1/C$ - which is proportional to the width of the depleted layer - of a Si(Li) detector drifted by the automatic drifting apparatus. The impurity concentration inside the detector is $\sim 7 \cdot 10^9 / \text{cm}^3$, while values between $4 \cdot 10^9 - 10^{10} / \text{cm}^3$ were observed for other detectors. Wiliems reported impurity

concentration for Si(Li) detectors made by the Simtech Ltd: $5 \cdot 10^{10}/\text{cm}^3$ [6], while Llacer for Si(Li) -s prepared in the Berkeley Laboratory: $5 \cdot 10^3/\text{cm}$ [7].

6. Acknowledgements

The author would like to thank Dr. J. Bacsó for suggesting the development and G. Kalinka for the helpful discussions as well as for preparation of silicon crystals for testing the apparatus.

References

1. Semiconductor Detectors ed. G. Bertolini, North Holland Publ. Comp. Amsterdam 1968. p.27.
2. F.S. Goulding, Nucl. Instr. Meth. 43 (1966) 1
3. F.S. Goulding, W.L. Hansen, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-11 No.3 (1964) 286.
4. G. Dearmealy, J.C. Lewis, Nucl. Instr. Meth. 25 (1964) 237
5. W.A. Schüller, Rev. Sci. Instr. Vol. 38, No.4 (1967) 539.
6. R.L. Williams, C.D. Wilburn, N.P. Harvey, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-13, No.1. (1966) 53.
7. J. Llacer, E.E. Haller, R.C. Cordi, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-24, No.1. (1977) 53.

Referee: K. Kiss

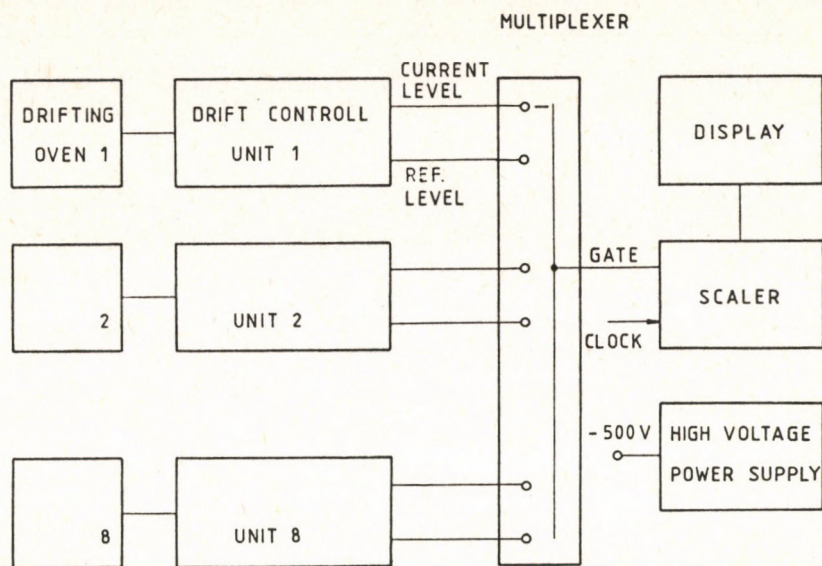


Figure 1. The simplified block diagram of the automatic drifting apparatus

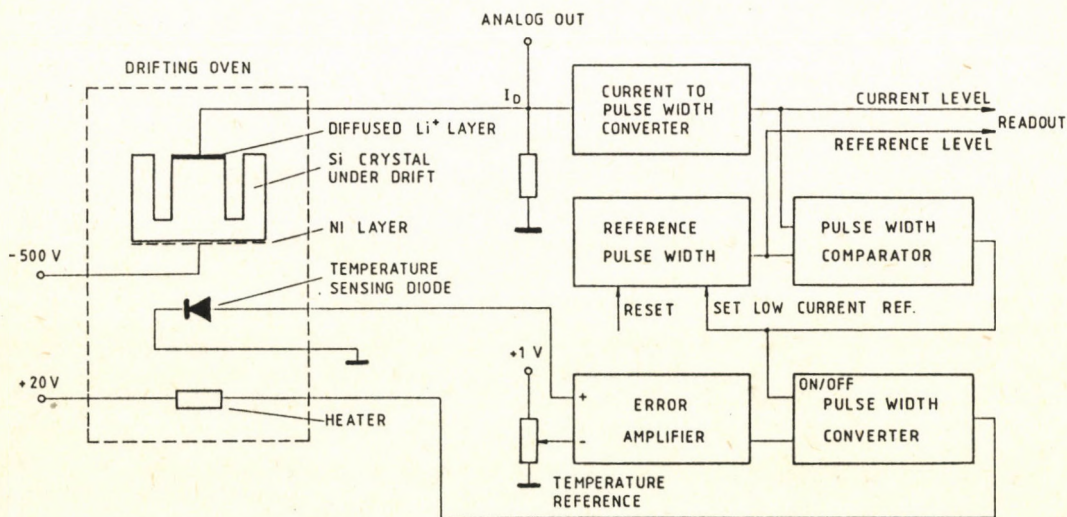


Figure 2. The block diagram of the control unit

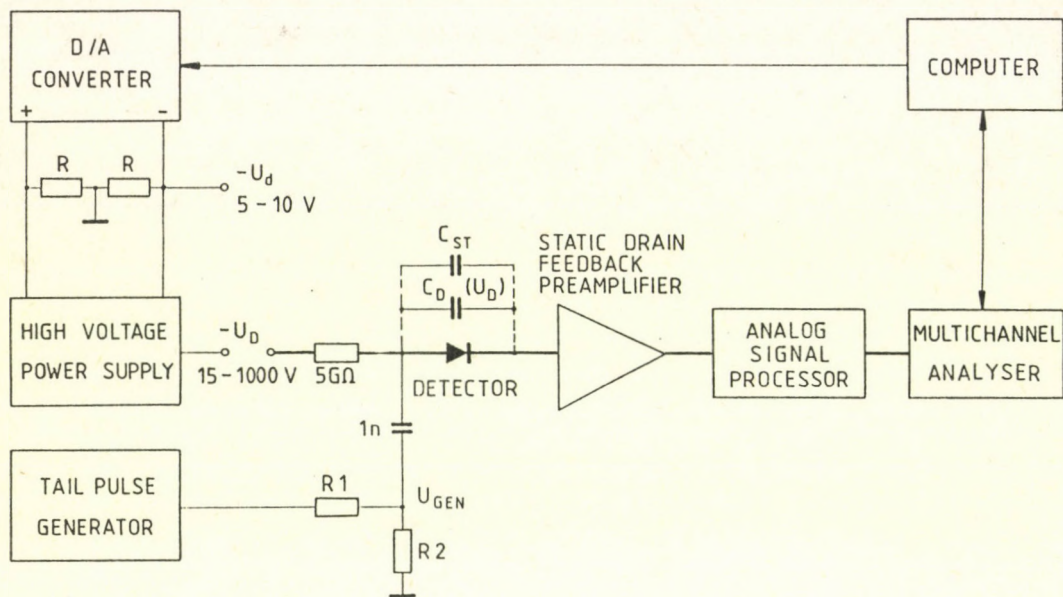


Figure 3. The block diagram of the C-V measurement arrangement

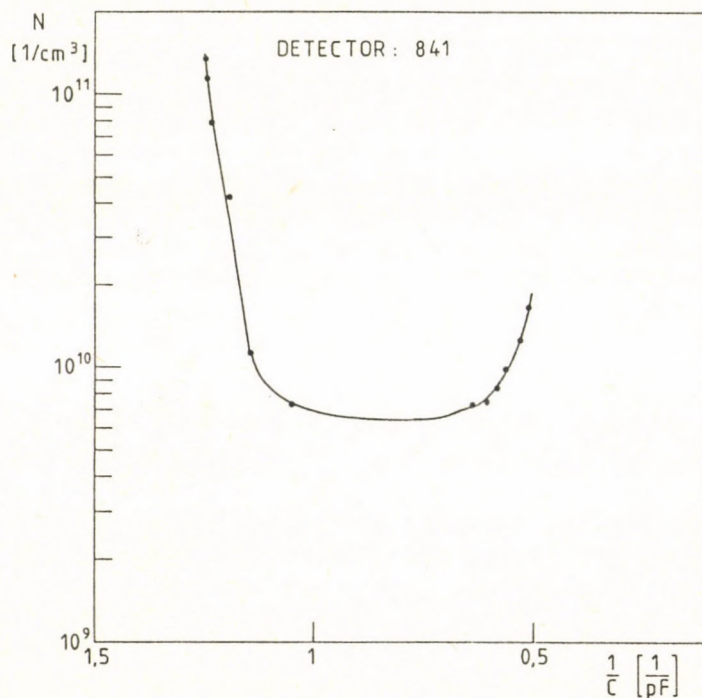


Figure 4. The impurity profile of a Si(Li) detector drifted by the automatic drifting apparatus

A SEMIAUTOMATIC NOISE MEASUREMENT ARRANGEMENT FOR SELECTION
OF FETs FOR HIGH ENERGY RESOLUTION Si(Li) SPECTROMETERS

Jenő Pálvölgyi

Institute for Nuclear Research of the Hungarian Academy of
Sciences, H-4001 Debrecen, Pf. 51, Hungary

The first stage of the charge sensitive preamplifier of the high energy resolution Si(Li) X-ray spectrometers is a cooled junction Field-Effect Transistor (FET) exhibiting low noise. In our laboratory commercial Texas Instruments 2N4416 type FETs are used for the first stage of static or pulsed drain feedback preamplifier. In order to eliminate the noise of the original header the chips are encapsulated and mounted into teflon blocks. A semiautomatic noise measurement arrangement has been developed using high impedance gate mode and time domain method for selection of FETs exhibiting low level of noise.

1. Introduction

The noise measurement of FETs for Si(Li) spectrometer application can be carried out in different configurations summarized in table 1. Using a linear amplifier for the separation of noise components based on their dependence on peaking time is a well known technique [1]. The low impedance AC grounded gate mode was used for studying series noise components of FETs [2], [3]. Llacer has analysed the advantages and the disadvantages of the frequency domain and time domain method [4]. He studied the f^α noise of FETs with a low noise test Si(Li) detector and an opto-feedback preamplifier, while with an AC grounded gate configuration the generation-recombination (GR) noise. In both cases he used a commercial narrow-band spectrum analyser [3]. Cox has developed an automatic universal measuring equipment for studying the noise of semiconductors in the range of 10 Hz - 100 kHz [5]. In our laboratory noise measurements have been carried out for selection of FETs for high energy resolution spectrometers using high impedance gate mode and time domain method. In order to eliminate the noise of the test Si(Li) detector, it was replaced by a cooled teflon capacitor (C_1) and a teflon resistor (R), as it is illustrated in figure 1. The Si(Li) detector leakage current was simulated with the current forced through the teflon resistance R. For the calibration of the system u amplitude, long decay time constant (1000 μ s) pulses were fed to the C_1 capacitor corresponding the energy of $E = u \cdot C_1 \bar{\epsilon} / q$, where $\bar{\epsilon}$ is the average energy necessary to produce one electron-hole pair, and q the electronic charge.

The working parameters of the FET under test (drain current, drain voltage input capacitance) were chosen close to the working

condition in Si(Li) spectrometer. Searching the optimum working parameters the drain current was trimmed between 3-9 mA, while the drain voltage was kept between 5-7 V. The value of C_i is 1.1 pF, corresponding the capacity of a grooved type 20 mm² area 5 mm thick Si(Li) detector. The noise components were separated by a semi-gaussian linear amplifier of 9 peaking time constants in the range of 0.46-80 μ s. Using least squares fit with the function: $FWHM^2 = A\tau_p + B/\tau_p + C + D(2E/\tau_p + \tau_p/2E)$ the parallel ($A\tau_p$), the series (B/τ_p), the $f^\alpha(C)$ and GR noise components were separated. In figure 2. the lower curve illustrates the $FWHM^2$ versus peaking time dependence of a FET measured by this method. More than 150 FETs have been tested. It has been found that the time domain method can be an efficient tool for selection of FETs, if the range of the peaking time constants is quite wide, and the microphonics is kept at low level by careful mount of the FET under test in the cryostat. For the automatic measurement of the $FWHM^2$ versus peaking time curves a filter amplifier with digital settling of CR-RC filters was developed.

2. The semiautomatic noise measurement system

Figure 1. is the block diagram of the automated noise measurement system. The semi-gaussian linear amplifier was replaced by a CR-RC amplifier with 27 peaking time constant settlings in the range of 0.8 μ s-217 μ s. The amplitude of the noise is measured after full-wave rectification and integration with time constant of 0.75 s using a 3 1/2 digit digital voltmeter (DVM) interfaced to the computer. The calibration of the system is carried out at 11 μ s peaking time constant in the same way described above. The line width ($FWHM_C$ [eV]) of the known "energy" pulses is measured by a multichannel analyser. After calibration the pulse generator is switched off and the RMS of the noise (U_C) is read out by the DVM. The FWHMs for the other peaking time constant settlings are calculated from the RMS noise readout and the factor of $FWHM_C/U_C$. In figure 2. the upper curve shown the $FWHM^2$ versus peaking time dependence of a FET measured by the automated system. The working parameters (drain current and drain voltage) were the same as in the case of the measurement by the linear amplifier. The difference between the two curves is because of the different noise indices of the semi-gaussian linear amplifier: $\langle N_{step}^2 \rangle = 0.98\tau_p$, $\langle N_{\Delta}^2 \rangle = 1.92/\tau_p$, $\langle N_f^2 \rangle = 6.81$ [6] and the CR-RC filter amplifier: $\langle N_{step}^2 \rangle = 1.85\tau_p$, $\langle N_{\Delta}^2 \rangle = 1.85/\tau_p$, $\langle N_f^2 \rangle = 7.39$.

3. The CR-RC filter amplifier

The block diagram of the CR-RC filter amplifier can be seen in figure 3. It consists of an input amplifier, a pole-zero compensated differentiator, a variable gain amplifier as well as an active integrator. Figure 4. shows the detailed schematic diagram of the differentiator, the integrator is realised in like manner. The 0.8-217 μ s peaking time range is divided to three parts, while the fine variation of the differentiation time constant is carried out by switching on some combination of $R_{21} \dots R_{24}$. The fine correction on the variation of gain and bandwidth errors is carried out by software.

4. Conclusions

A semiautomatic noise measurement system has been developed for selection of commercial encapsulated FETs for high energy resolution Si(Li) spectrometers. The noise measurements of the FETs are performed in a high impedance gate mode in time domain. The noise of the test Si(Li) detector is eliminated using a cooled teflon capacitor and a resistor. The test of the FETs are carried out with working condition close to the working parameters in Si(Li) spectrometers. The measurement of the FWHM² versus peaking time curves was automated using a computer controlled CR-RC filter amplifier. The calibration of the system is carried out by known amplitude tail pulses. The system is also suitable for measurement of noise of Si(Li) spectrometers with static drain-feedback or resistor-feedback preamplifier.

5. Acknowledgements

The author would like to thank G. Kalinka for his helpful discussions in the course of the work.

6. References

- [1] F.S. Goulding, Nucl. Instr. and Meth. 100, (1972) 493
- [2] V. Radeka, Int. Symp. on Nuclear Electronics, Versailles, France, (1968)
- [3] J. Llacer and D. Meier, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-24, No.1 (1977) 317
- [4] J. Llacer, IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-22, No.5 (1975) 2033
- [5] C.E. Cox, AERE Harwell, R 10642 (1982)
- [6] G. Kalinka, Phys. Doctor Thesis, 1980

Referee: K. Kiss

Table 1. Summary of the noise measurement configurations

GATE MODE	PREAMPLIFIER	FILTER	NOISE AMPLITUDE MEASUREMENT
Si(Li) test detector	charge sensitive	linear amplifier	multichannel analyser RMS voltmeter
Si(Li) replacement Increased input capacitor		narrow-band filters	RMS voltmeter
Increased input capacitor	voltage sensitive	narrow-band filters	RMS voltmeter

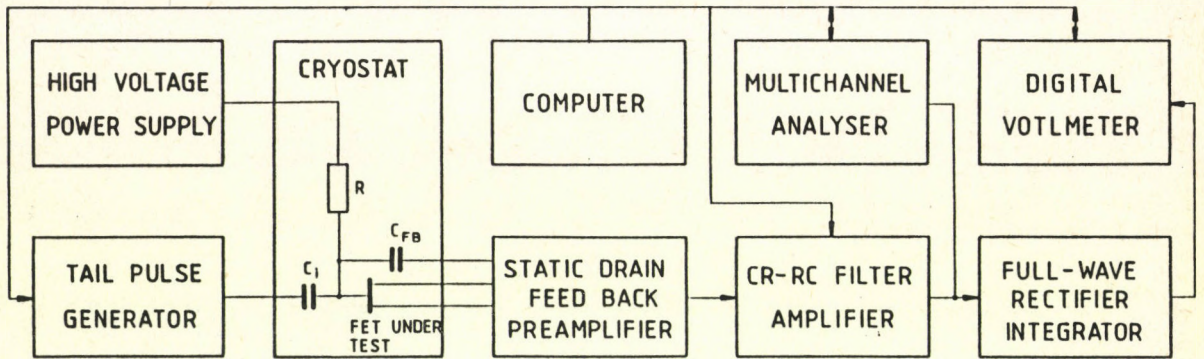


Figure 1. The schematic block diagram of the semiautomatic noise measurement configuration

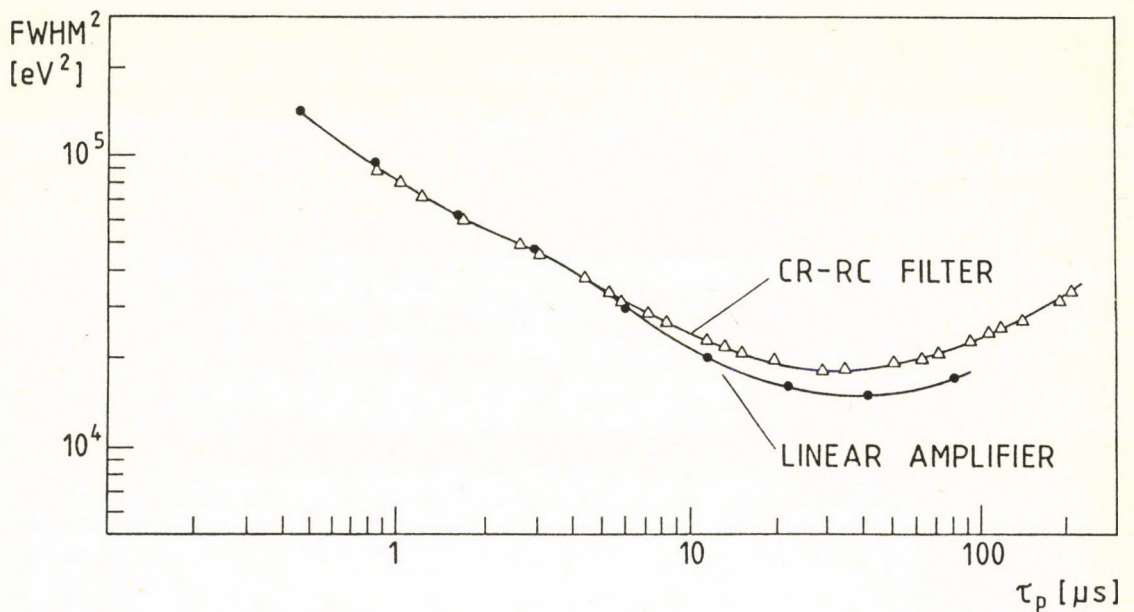


Figure 2. The FWHM^2 versus peaking time curves of a FET exhibiting low noise measured by a linear amplifier and by the noise measurement system illustrated in figure 1.

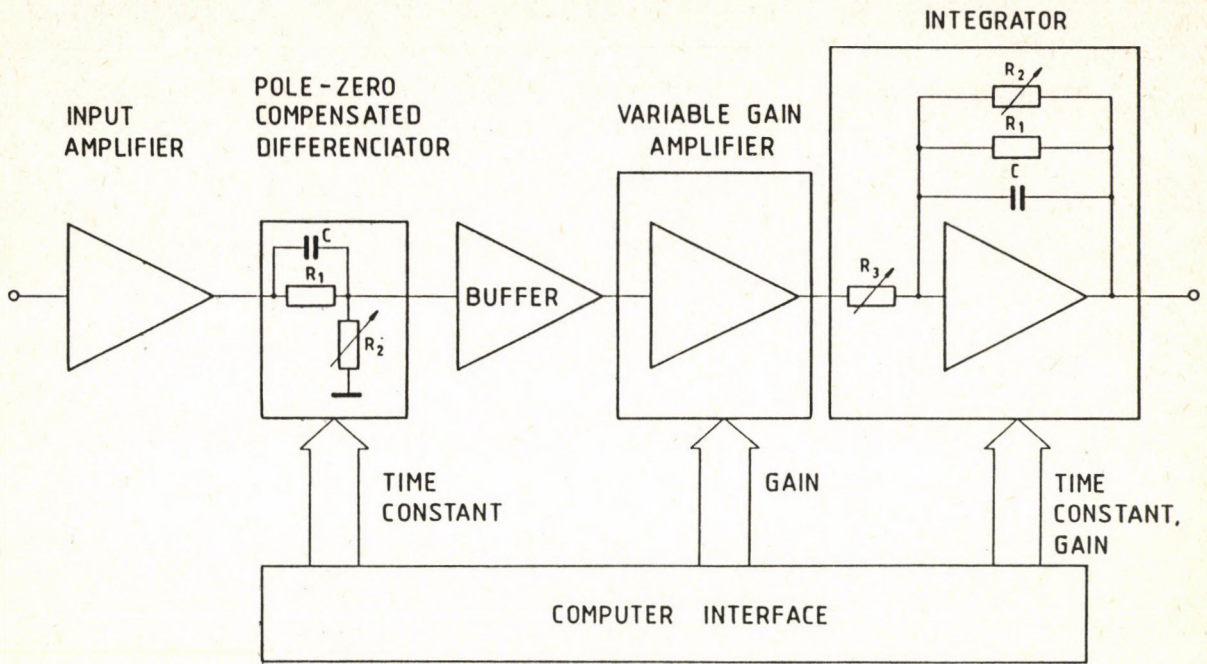


Figure 3. The block diagram of the CR-RC filter amplifier

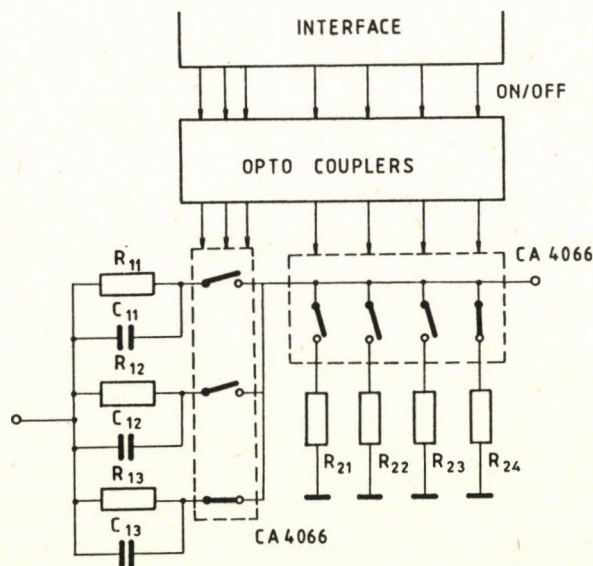


Figure 4. The detailed schematic diagram of the pole-zero compensated differentiator

Az ATOMKI KÖZLEMÉNYEK évenként több számban jelenik meg. Tudományos intézeteknek cserepéldányképpen vagy kérésükre díjtalanul megküldjük, kötelezettség nélkül. Magánszemélyeknek esetenkénti kérésére 1-1 számot vagy különlenyomatot szívesen küldünk. Ilyen irányú kéréseket az intézet könyvtárszolgálatához kell irányítani. /ATOMKI, 4001 Debrecen, Postafiók: 51./

Szerkesztő Bizottság: Szalay Sándor elnök, Lovas Rezső titkár, Berényi Dénes, Csikai Gyula, Gyarmati Borbála, Medveczky László.

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete

A kiadásért és szerkesztésért felelős
Dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója

Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában

Törzsszám: 65770

Debrecen, 1986. szeptember

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

Volume 28/ Number 3.

CONTENTS

- Anyagvizsgáló módszerek és műszerek. Szeminárium
(szerk.: Gyulai J., Máthé Gy.) 75
- J. Pálvölgyi: An automatic lithium drifting
apparatus for preparation of Si(Li) X-ray
detectors 163
- J. Pálvölgyi: A semiautomatic noise measurement
arrangement for selection of FETs for high
energy resolution Si(Li) spectrometers 169

310.565

IV. 9

ho

ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

28. kötet / 4. szám



MTA

ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1986

AIRBORN ACTIVITY AND DEPOSITION IN DEBRECEN
CAUSED BY THE CHERNOBYL ACCIDENTAL RELEASE

T. Kibédi, Á.Z. Kiss, E. Somorjai and I. Uray

MTA Atommagkutató Intézet, Debrecen, Pf. 51.

In our Institute the collection of air samples and the measurement of their radioactivity concentration was started on 29 April, 3 days after the beginning of the Chernobyl accidental release to the atmosphere and was continued during 8 weeks.

The samples were prepared by pumping air with a speed of 1.2 m³/h through a sampling device containing a filter paper of 50 mm diam. and a 5 cm thick layer of active carbon granulum behind it, for 12 hours at the beginning and for longer periods a few days later. The filter paper was expected to collect aerosols while carbon granulum was used to adsorb the gaseous components of the radioactivity. To measure deposition, grass samples were collected in the area of the institute not far from the pumping site.

The total activity of the samples was measured by a 7.5×7.5 cm well-type NaI(Tl) detector. A ¹³¹I source with known activity was used for the activity calibration and the ratio of the ¹³¹I.

The gamma-spectra were detected by using a HARSHAW 105 cm³ Ge(Li) detector with an energy resolution of 2.4 keV at E=1.33 MeV. Its efficiency was determined by a ²²⁶Ra source. For background reduction the detector was surrounded by a lead shield of 10 cm thickness. The samples were put at 0.5 cm to the front face of the detector. The measuring time varied between 1 and 10 hours depending on the activity of the sample. The detector pulses were amplified and sent into a data acquisition system composed of a 4k analyser and a computer and transferred for further evaluation into a PDP11/40 computer.

The activity determination of the radioactive isotopes in the spectra was based usually on one or two proper gamma-lines using the branching ratio data from ref. [1].

The results of the total activity measurements are collected in Fig. 1. Fig. 1a. shows the measured radio-activities in Bq/m³ of the filter paper (curve No.1.) and the absorbed gaseous components (mostly ¹³¹I) on the carbon granulum (curve No.2.) as well as their sum (curve No.3.). The arrows indicate the rainfalls during the period considered. Their lengths are proportional to the quantity of the precipitation (e.g. on 15 May it was 12 mm as measured by the Meteorological Station near to the Institute). In Fig.1b. the total specific

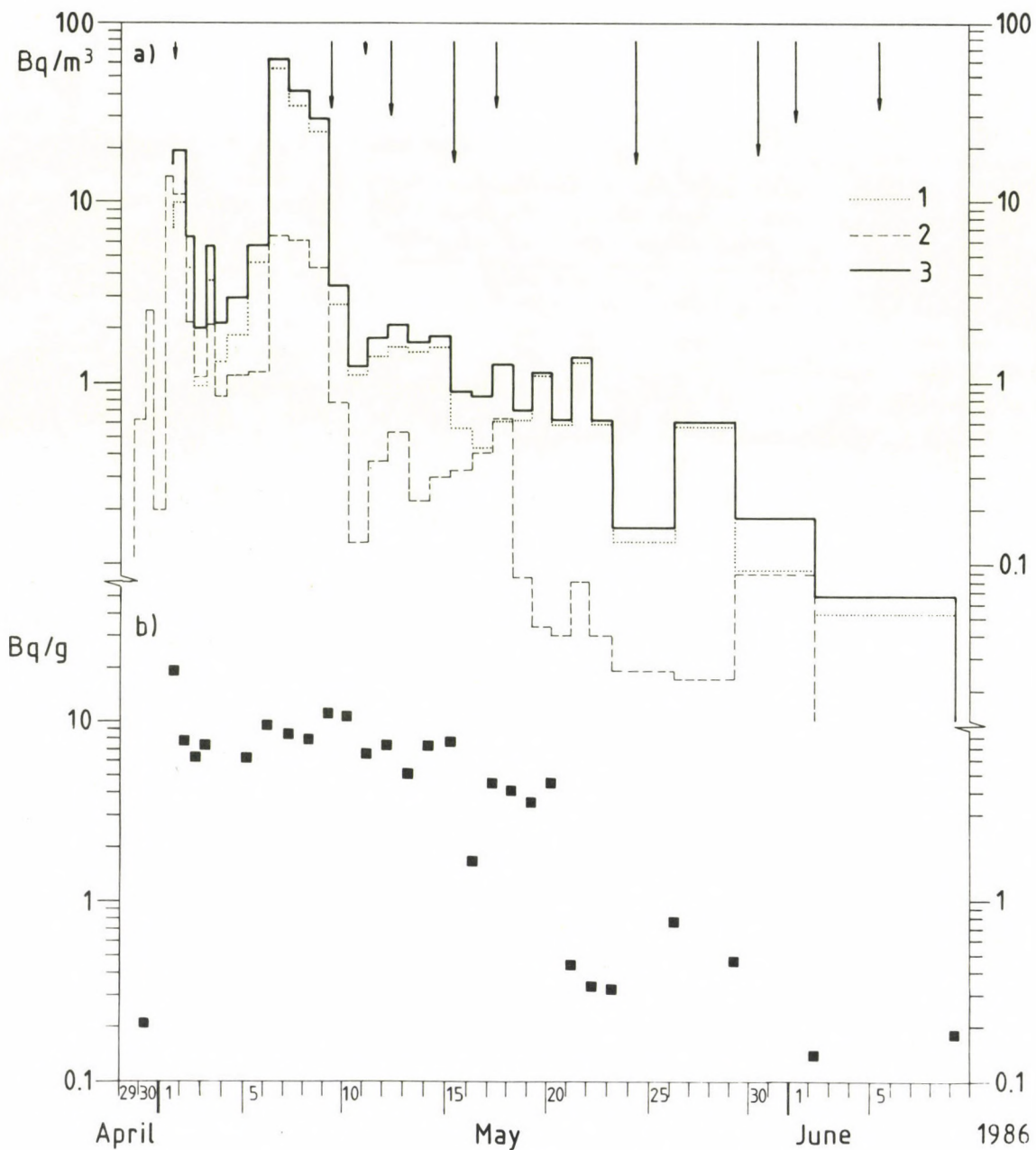


Fig.1. a, The total activities in units Bq/m^3 , observed during the period indicated, in aerosols and gaseous components. Curve 1: aerosol samples; Curve 2: carbon granulum; Curve 3: the sum of 1. and 2. The position and lengths of the arrows indicate date and quantity of rain respectively,

Fig.1. b, The total activity per mass unit of grass samples collected in the area of ATOMKI.

activities of the grass samples are indicated.

Several γ -spectra were measured and analysed and the specific activities were calculated from the comparison to a ^{137}Cs source with known activity.

As an example, the specific activities of two aerosol samples with the highest total activity in the first and second peaks in Fig. 1a. are presented in Table 1.

Table 1. Specific activities in filter samples collected at the first and second activity maximum (Fig. 1.).

Sample collection:		18h 1 May-07h 2 May	09h 6 May-07h 7 May
γ -spectr.measurement:		13h - 15h	14h - 15h
NUCLIDE	HALFLIFE	Spec. activity Bq/m ³	
		filter No. 5.	filter No. 14.
^{99}Mo - ^{99}Tc	2.75d	not measured	0.74
^{132}Te	3.26d	1.69	10.10
^{132}Te - ^{132}I	3.26d	1.97	5.27
^{127}Sb	3.88d	0.25	-
^{131}I	8.04d	2.57	11.97
$^{131\text{m}}\text{Xe}$	11.90d	-	-
^{140}Ba	12.75d	+	1.39
^{140}I α - ^{140}Ba	12.75d	0.32	0.85
^{136}Cs	13.16d	0.15	0.29
^{141}Ce	32.50d	-	0.45 *
$^{129\text{m}}\text{Te}$	33.6 d	1.28	6.31
^{103}Ru	39.35d	0.72	12.30
^{95}Zr	64.03d	0.10 *	0.69 *
^{95}Nb	34.98d	+	-
^{144}Ce	284.9 d	-	0.44 *
^{106}Ru	1.02y	0.19	1.84
^{134}Cs	2.07y	0.42	0.87
^{125}Sb	2.77y	-	0.15 *
^{137}Cs	30.14y	0.75	1.56

The activities indicated by stars were measured 83 days after the first measurement, when short-lived activities had already disappeared, and were calculated to the time of the first measurement. In the case of ^{95}Nb its existence was only proved (marked by the + sign). The estimated accuracy of the activities presented in Table 1 varies between 30-80 % depending on the statistics in the γ -spectra, it also includes the errors of the sampling and the efficiency calibration of the detector.

As it is clearly seen from Fig.1a. the first wave of radioactivity reached Debrecen around 29 April and increased to

its maximum on 1 May. This was followed by a second and stronger wave on 6 May. The radioactivity in the atmosphere was strongly reduced after the rainfall on 9 May.

The activity of the grass (Fig. 1b.) increased rapidly from 30 April to 1 May and stayed around this relatively high level for about 10 days, then started to decrease due to the radioactive decay of the shortlived isotopes on one hand and the washing out effect of the rains, on the other.

In the middle of October the filters in the air conditioning system of the cyclotron building here were changed after one year of operation. The measurement of samples prepared from the fibrous material of the used filters, gave us a possibility to compare their high activity, integrated during the whole period after the Chernobyl accident to that of our earlier samples.

Fig.2. shows the gamma-spectrum of a sample from the used filter material. Only the strongest identified gamma lines are labelled in the figure.

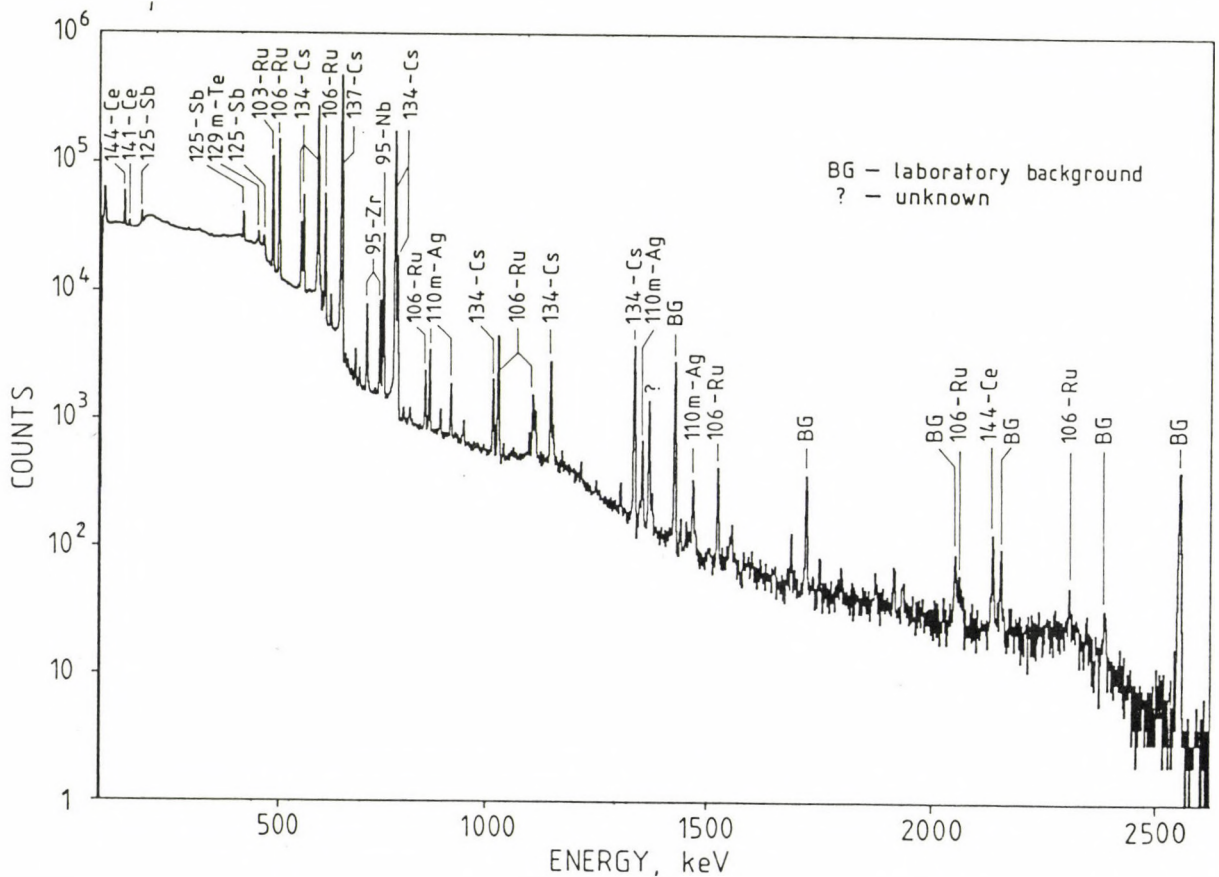


Fig.2. Gamma-ray spectrum of the cyclotron filter (fibrous) used for one a years period from October 1985.

In Table 2 the specific activities of a 10x10x20 cm³ piece from the cyclotron filter (in Bq) and that of the aerosol sample No.14 (in Bq/m³) are shown. The ratio (in percentage) of the activity of different radioactive nuclides are also given. It is surprising that the relatively short-lived ^{129m}Te activity is still present in the filter with a rather high percentage. Its presence was checked through the following gamma-lines and branchings: 459.6 keV(4.54%), 696.0(2.90) and 729.6(0.68). The 487.4(0.84) line is unresolved. This is the only sample in our case where the presence of ^{110m}Ag is clearly seen although its specific activity is rather small.

Table 2. The relative activities of different radioactive nuclides in the sample made from the filter in the air conditioning system of the cyclotron building and in the aerosol sample No. 14. The measurements were performed 193 days after the Chernobyl accident.

NUCLIDE	Cycl. filter		Aerosol sample No. 14.	
	Bq	%	Bq/m ³	%
¹⁴¹ Ce	66	0.2	-	-
^{129m} Te	1014	3.1	-	-
¹⁰³ Ru	1830	5.6	0.38	7.8
⁹⁵ Zr	310	1.0	0.06	1.2
⁹⁵ Nb	642	2.0	0.10	2.1
^{110m} Ag	98	0.3	-	-
¹⁴⁴ Ce	1950	5.9	0.28	5.8
¹⁰⁶ Ru	9670	29.6	1.57	32.3
¹³⁴ Cs	4989	15.3	0.73	15.0
¹²⁵ Sb	744	2.3	0.14	2.9
¹³⁷ Cs	11048	33.7	1.60	32.9
unknown	332	1.0	-	-
		100.00		100.00

Reference:

- [1] U. Reus, W. Westmeier: Catalog of Gamma Rays from Radioactive Decay. Atomic Data and Nuclear Data Tables 29(1983) N^o 1 and 2.

(Referee: E. Koltay)

RELATIVISZTIKUS KVANTUMMECHANIKA*

Sailer K.

KLTE Elméleti Fizikai Tanszék, Debrecen

Áttekintjük azokat a legfontosabb kvantummechanikai ismereteket, amelyek az atommagok és a maganyag relativisztikus tárgyalásához elengedhetetlenül szükségesek:

1. A Dirac-egyenlet
2. A Dirac-mátrixok
3. A Lorentz-szimmetria
4. A Dirac-hullámfüggvény valószínűségi értelmezése
5. A szabad részecskére vonatkozó Dirac-egyenlet megoldásai
6. A szabad részecske polarizációja
7. A nukleonra vonatkozó Dirac-egyenlet
8. A Dirac-egyenlet és az egyrészecske-kép
9. A lyukelmélet
10. A töltéskonjugálás
11. A CPT-szimmetria
12. Homogén, izotróp külső térben mozgó nukleon
13. Centrális erőterben mozgó nukleon
14. A Foldy-Wouthuysen-féle előállítás. A spin-pálya kölcsönhatás.

BEVEZETÉS

Az előadás anyagának megválasztásakor Serot és Walecka [1] összefoglaló cikkét fogadtam el irányadónak arra nézve, hogy mely kérdések tekinthetők a magfizika szempontjából különösen fontosnak. Az ily módon kiválasztott résztémákat igyekeztem olyan egységes keretbe foglalni, amely rávilágít a relativisztikus kvantummechanika sikereire és hiányosságaira. Az előadás anyagának leírásakor arra törekedtem, hogy az írott változatot egyetemi hallgatók is felhasználhassák tanulmányaik során kiegészítő jegyzetként.

Az 1-7. pontokban egy relativisztikus részecske kvantumelméletének Dirac által javasolt kiépítését kíséreljük meg. A 8. pontban rámutatunk, hogy ez az út járhatatlan, hiszen a Dirac-egyenlet nem értelmezhető következetesen mint egyetlen részecske mozgásegyenlete. A Dirac-egyenlet helyes értelmezése felé vezető úton fontos állomás volt Dirac lyukelmélete, amelynek maradandó érdeme, hogy megjósolta a pozitron létezését /ld. 9. pont/. A lyukelmélet elvezetett a töltéskonjugálási szimmetria felismeréséig és ahhoz az értelmezéshez, hogy a Dirac-

* Az 1986. szeptemberi Magfizikai Őszi Iskolán az ATOMKI-ben elhangzott előadás anyaga.

egyenlet egyszerre írja le a részecskéket és az antirészecskéket; erről szól a 10. pont. Eközben azonban menethetetlenül elveszett a Dirac-egyenlet megoldásának kvantummechanikai hullámfüggvény jelentése. Jelenlegi ismereteink szerint a kvantált fizikai rendszerek relativisztikus leírása csak a kvantumtérelmélet keretében lehetséges. Ennek elemeit az előadás második részében (egy későbbi cikkben) fogjuk áttekinteni. A kvantumtérelméleti leírás során a Dirac-egyenlet a megfelelő klasszikus térelmélet téregyenletének szerepét játssza. Olyan kvantálási eljárást fogunk majd követni, amelynek alkalmazása során szükségünk lesz a klasszikus téregyenletek megoldásainak teljes rendszerére. Ezért a 12. és a 13. pontban vázoljuk a nukleonokra vonatkozó Dirac-egyenlet megoldását néhány, a magfizika szempontjából fontos esetben. Az ismertett anyaghoz kapcsolódóan az olvasó további részleteket találhat a tankönyvekben [2-6].

1. A Dirac-egyenlet

A szabad részecskére vonatkozó Schrödinger-egyenlet relativisztikus általánosítását szeretnénk megkapni. Ezért az alábbi feltevéseket tesszük:

a/ Létezik a $\psi(\vec{x}, t)$ hullámfüggvény, amely teljesen meghatározza a részecske állapotát és annak időbeli fejlődését:

$$i\partial_t \psi = H\psi, \quad (1.1)$$

ahol H lineáris hermitikus operátor.

b/ A részecske E energiája, \vec{p} impulzusa és M nyugalmi tömege között fennáll az Einstein-féle összefüggés:

$$E^2 = M^2 + \vec{p}^2. \quad (1.2)$$

c/ Érvényes az

$$E \rightarrow H \rightarrow i\partial_t, \quad \vec{p} = -i\vec{\nabla} \quad (1.3)$$

megfeleltetés.

d/ A szabad részecske H Hamilton-operátora helytől független a rendszer eltolási invarianciája következtében és az impulzus-operátort lineárisan tartalmazza annak érdekében, hogy az (1.1) egyenlet Lorentz-kovariáns lehessen.

A c/ és d/ feltevések alapján a Hamilton-operátor

$$H = -i\alpha^j \nabla^j + \beta M \quad (1.4)$$

alaku, ahol α^j ($j=1,2,3$) és β "számok". Következésképpen az (1.1) egyenlet az

$$(i\partial_t + i\alpha^j \nabla^j - \beta M)\psi = 0 \quad (1.5)$$

alakot ölti. Ez a Dirac-egyenlet. A b/ és c/ feltevés értelmében az (1.5) egyenletből az

$$(-\partial_t^2 + \vec{\nabla}^2 - M^2)\psi = 0 \quad (1.6)$$

egyenletnek kell következni. Az (1.5) egyenletből (1.6) egyenlet akkor és csak akkor következik, ha az α^j , β "számok" jól meghatározott algebrai tulajdonságokkal rendelkeznek. Ennek belátása érdekében hassunk az (1.5) egyenletre balról az $(i\partial_t - i\vec{\alpha}\vec{\nabla} + \beta M)$ operátorral:

$$\begin{aligned} & (i\partial_t - i\alpha^j \nabla^j + \beta M)(i\partial_t + i\alpha^k \nabla^k - \beta M)\psi = \\ & = [-\partial_t^2 + (-i\alpha^j \nabla^j + \beta M)(i\alpha^k \nabla^k - \beta M)]\psi = \\ & = [-\partial_t^2 + \frac{1}{2}(\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j) \nabla^j \nabla^k + iM(\beta \alpha^j + \alpha^j \beta) \nabla^j - M^2 \beta^2] \psi. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Az (1.7) egyenlet akkor és csak akkor azonos az (1.6) egyenlettel, ha

$$\alpha^j \alpha^k + \alpha^k \alpha^j = 2\delta^{jk}, \quad \beta \alpha^j + \alpha^j \beta = 0, \quad \beta^2 = 1. \quad (1.8)$$

Az (1.8) követelmények közönséges számokkal nem elégíthetők ki, csak mátrixokkal, mégpedig legkevesebb 4×4 -es mátrixokkal:

$$\alpha^j = \rho^1 \tilde{\sigma}^j, \quad \beta = \rho^3, \quad (1.9)$$

ahol

$$\tilde{\sigma}^j = \sigma^j \otimes 1 = \begin{pmatrix} \sigma^j & 0 \\ 0 & \sigma^j \end{pmatrix}, \quad \rho^j = 1 \otimes \sigma^j. \quad (1.10)$$

Itt

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

a Pauli-mátrixok. Az α^j és β mátrixok önadjungáltak.

Mivel α^j és β 4×4 -es mátrixok, ezért a hullámfüggvénynek 4 komponense van: $\psi_\alpha(\vec{x}, t)$, $\alpha=1,2,3,4$. A helyzet analóg a klaszikus elektromágneses tér leírásával: a Maxwell-egyenletek is a térmennyiségekre vonatkozó lineáris, elsőrendű, csatolt parciális differenciálegyenletrendszer alkotnak, mint amilyenek a hullámfüggvény ψ_α komponenseire vonatkozó egyenletek; ugyanakkor valamennyi térmennyiségre független hullámeqyenlet érvényes, akárcsak a hullámfüggvény valamennyi ψ_α komponensére.

Az (1.6) Dirac-egyenlet a hullámfüggvény komponenseire az

$$(i\delta_{\alpha\beta} \partial_t + i\vec{\alpha}_{\alpha\beta} \vec{\nabla} - \beta_{\alpha\beta} M)\psi_\beta(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.12)$$

egyenletrendszerrel jelenti.

2. A Dirac-mátrixok

A Dirac-egyenletet Lorentz-kovariáns alakban szeretnénk felírni. Ennek érdekében bevezetjük a Minkowski-térben az $x^\mu = (t, \vec{x})$ ($\mu=0,1,2,3$) koordinátákat és a $(+1, -1, -1, -1)$ szignatúrájú $g^{\mu\nu}$ metrikus tenzort. Néhány hasznos jelölés:

$$\begin{aligned}
x_\mu &= g_{\mu\nu} x^\nu = (t, -\vec{x}), \\
\partial^0 &= \partial_0 = \partial_t, \quad \partial^j = \partial/\partial x_j = -\nabla^j, \quad \partial_j = \partial/\partial x^j = \nabla^j, \\
\hat{p}^\mu &= i\partial^\mu = (i\partial_t, -i\vec{\nabla}), \quad \hat{p}_\mu = i\partial_\mu = (i\partial_t, i\vec{\nabla}), \\
p x &= p_\mu x^\mu = g_{\mu\nu} p^\mu x^\nu = p^0 x^0 - \vec{p}\vec{x}
\end{aligned} \tag{2.1}$$

(bármely x^μ és p^μ négyesvektor esetén).
Vezessük be a

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^j = \beta\alpha^j \quad (j=1,2,3) \tag{2.2}$$

Dirac-mátrixokat. Segítségükkel a Dirac-egyenlet látszólag kovariáns alakot ölt:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - M)\psi = 0, \tag{2.3}$$

a Hamilton-operátor pedig

$$H = -i\gamma^0 \vec{\gamma} \vec{\nabla} + \gamma^0 M \tag{2.4}$$

alakra hozható.

Az (1.8) csererelációkból

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} \tag{2.5}$$

adódik.

A (2.5) csererelációkat kielégítő Dirac-mátrixok csak unitér-ekvivalencia erejéig vannak meghatározva. Mi a továbbiakban a (2.2) ábrázolást fogjuk használni. A Dirac-mátrixok unitér mátrixok és

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0. \tag{2.6}$$

A Dirac-mátrixokat további mátrixokkal kiegészítve egy bázist kapunk a 4×4 -es mátrixok terében:

$$1_D, \quad \gamma^\mu, \quad \sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu], \quad \gamma_5 = i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3, \quad D^\mu = \gamma^\mu \gamma_5. \tag{2.7}$$

A (2.7) mátrixok egy algebrát alkotnak, az un. hiperkomplex számok algebráját. Van der Waerden bebizonyította, hogy a (2.7) hiperkomplex számok algebrájának egyetlen véges-dimenziós irreducibilis ábrázolása van, s az négydimenziós.

A γ_5 mátrix néhány tulajdonsága:

$$\gamma_5 \text{ unitér, } (\gamma_5)^2 = 1_D, \tag{2.8}$$

$$\gamma_5 \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma_5 = 0, \quad [\gamma_5, \sigma^{\mu\nu}] = 0.$$

A (2.2) ábrázolásban

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^j \\ -\sigma^j & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.9}$$

3. A Lorentz-szimmetria

Tekintsük a Minkowski-tér azon (globális)

$$dx'^{\mu} = a^{\mu}_{\nu} dx^{\nu} \quad (3.1)$$

lineáris transzformációit, amelyek bármely két szomszédos tér-időpont távolságát változatlanul hagyják:

$$g_{\mu\nu} dx'^{\mu} dx'^{\nu} = g_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu}. \quad (3.2)$$

A (3.1) és (3.2) összefüggésekből

$$g_{\mu\nu} a^{\mu}_{\kappa} a^{\nu}_{\lambda} = g_{\kappa\lambda}, \quad (a^T)_{\kappa}^{\mu} g_{\mu\nu} a^{\nu}_{\lambda} = g_{\kappa\lambda} \quad (3.3)$$

adódik. A (3.3) összefüggések alapján

$$\det \underline{g} = \det (\underline{a}^T \underline{g} \underline{a}) = [\det (\underline{a})]^2 \det \underline{g}, \quad (3.4)$$

azaz

$$\det \underline{a} = \pm 1. \quad (3.5)$$

Másrészt ugyancsak (3.3) alapján

$$g_{00} = +1 = a^0_0 a^0_0 - a^i_0 a^i_0, \quad (3.6)$$

ahonnan

$$(a^0_0)^2 = 1 + a^i_0 a^i_0 \geq 1, \quad (3.7)$$

vagyis

$$a^0_0 \geq +1 \quad \text{vagy} \quad a^0_0 \leq -1 \quad (3.8)$$

lehet.

A (3.1) - (3.2) transzformációk csoportot alkotnak, ez a homogén Lorentz-transzformációk L csoportja. Az egységnyi determinánsu ($\det \underline{a} = +1$), ortochron ($a^0_0 \geq 1$) transzformációk az un. valódi Lorentz-transzformációk L_p alcsoportját alkotják. L_p egy hatparaméteres Lie-csoport. Az infinitezimális transzformációk

$$\underline{a} = 1 - i \delta\phi \underline{\vec{n}} - i \delta\psi \underline{\vec{K}} \underline{\vec{v}} \quad (3.9)$$

alakuak, és az $\underline{\vec{n}}$ egységvektor körüli $\delta\phi$ szögű térbeli elforgatást valamint a $\underline{\vec{v}}$ egységvektor irányában $\delta v = \delta\psi$ sebességgel mozgó inerciális vonatkoztatási rendszerre való áttérést ("boost") jelent. A valódi Lorentz-transzformációk 6 generátora az

$$[\underline{L}^j, \underline{L}^k] = i \epsilon^{jkl} \underline{L}^l, \quad [\underline{K}^j, \underline{K}^k] = -i \epsilon^{jkl} \underline{L}^l, \quad [\underline{L}^j, \underline{K}^k] = i \epsilon^{jkl} \underline{K}^l \quad (3.10)$$

csererelációknak tesz eleget. ($\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}$ a teljesen antiszimmetrikus harmadrendű tenzor.) A véges valódi Lorentz-transzformációk

$$\underline{a} = \exp(-i\phi \underline{L} \vec{n} - i\psi \underline{K} \vec{v}) \quad (3.11)$$

alakuak, ahol ϕ a térbeli elforgatás szöge és a \vec{v} irányban v sebességgel mozgó vonatkoztatási rendszerre való áttérést a ψ rapiditással jellemezzük ($v = th\psi$). Valamennyi paraméter zárt intervallumon belül változik a rapiditás kivételével, amelyre $0 \leq \psi < \infty$. Ezért L_p nem kompakt Lie-csoport.

Az L homogén Lorentz-csoport nem összefüggő csoport, ugyanis tartalmaz olyan transzformációkat, amelyek nem érhetőek el az egységelemből infinitezimális transzformációk egymásutáni alkalmazásával:

$$a/ \text{ tértükrözés: } \underline{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \det \underline{P} = -1, \quad P^0 \geq +1; \quad (3.12)$$

$$b/ \text{ időtükrözés: } \underline{T} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \det \underline{T} = -1, \quad T^0 \leq -1; \quad (3.13)$$

$$c/ \text{ inverzió: } \underline{R} = \underline{P} \underline{T} = \underline{T} \underline{P}, \quad \det \underline{R} = 1, \quad R^0 \leq -1. \quad (3.14)$$

A \underline{P} , \underline{T} és \underline{R} transzformációk bármelyikét a valódi Lorentz-transzformációkkal kombinálva nyerjük mindazokat a homogén Lorentz-transzformációkat, amelyek nincsenek benne az L_p alcsoportban.

Egy egyenletről akkor mondjuk, hogy Lorentz-kovariáns, ha az egyenlet két oldalán álló mennyiségek az L homogén Lorentz-csoport ugyanazon ábrázolásai szerint transzformálódnak. A fizikai rendszer Lorentz-szimmetriával rendelkezik, ha a rendszer H Hamilton-operátora felcserélhető az L_p alcsoport infinitezimális operátoraival, valamint a tértükrözés és az időtükrözés operátorával. Ilyenkor a hullámfüggvények a Lorentz-csoport véges-dimenziós, irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódnak. Ezek lehetnek egyértékű tenzorábrázolások vagy kétértékű spinorábrázolások.

A tenzorábrázolások közül a legalacsonyabb rendűek:

skalár	$\phi'(x') = \phi(x),$	
vektor	$A'_\mu(x') = a_\mu^\nu A_\nu(x),$	
tenzor	$F'_{\mu\nu}(x') = a_\mu^\kappa a_\nu^\lambda F_{\kappa\lambda}(x),$	
pszeudoskalár	$\phi'(x') = \phi(x) \det \underline{a},$	
pszeudovektor	$H'_\mu(x') = a_\mu^\nu H_\nu(x) \det \underline{a}.$	(3.15)

A (2.3) Dirac-egyenlet megoldását jelentő $\psi(x)$ hullámfüggvény a homogén Lorentz-csoport egy spinorábrázolását valósítja meg. Megmutatható ugyanis hogy minden \underline{a} Lorentz-transzformációhoz létezik olyan $\underline{S}(\underline{a})$ unitér mátrix, hogy a

$$\psi'(x') = \underline{S}(\underline{a}) \psi(x) \quad (3.16)$$

transzformált hullámfüggvény a (2.3) Dirac-egyenlettel azonos alakú

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - M)\psi'(x') = 0 \quad (3.17)$$

egyenletet elégíti ki; és az $\underline{S}(\underline{a})$ mátrix az \underline{a} transzformáció paramétereinek kétértékű függvénye. A Lorentz-transzformációk mátrixai ebben az ábrázolásban /a Dirac-mátrixok (2.9) ábrázolását használva/:

$$\begin{aligned} L_P: \quad \underline{S}^{\mu\nu}(\varphi) &= \exp(i\sigma^{\mu\nu}\varphi/2), \\ (\mu\nu) &= (12), (13), (23): \quad \text{szögű térbeli forgatás a 3, 2} \\ &\quad \text{ill. 1 tengely körül} \\ (\mu\nu) &= (01), (02), (03): \quad \text{"boost", } v = \tanh\varphi \\ P: \quad \underline{S}(\underline{P}) &= \pm\gamma^0, \\ T: \quad \underline{S}(\underline{T}) &= i\gamma^1\gamma^3\mathcal{K} \end{aligned} \quad (3.18)$$

(\mathcal{K} a komplex konjugálás operátora).

Vezessük be a $\psi(x)$ Dirac-spinor $\bar{\psi}(x)$ Dirac-adjungáltját:

$$\bar{\psi}(x) = \psi(x)^\dagger \gamma^0. \quad (3.19)$$

A hullámfüggvény Dirac-adjungáltjára vonatkozó egyenletet a (2.3) Dirac-egyenletből adjungálással,

$$-i\partial_\mu \psi^\dagger \gamma^{\mu\dagger} - \psi^\dagger M = 0 \quad (3.20)$$

és jobbról γ^0 mátrixszal való szorzással kapjuk:

$$i\partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu + M\bar{\psi} = 0. \quad (3.21)$$

(Felhasználtuk a (2.6) összefüggést.)

A Dirac-spinorok bilineáris kifejezései a tenzorábrázolások szerint transzformálódnak:

$$\begin{aligned} \bar{\psi}'(x') \psi'(x') &= \bar{\psi}(x) \psi(x) & - & \text{skalár} \\ \bar{\psi}'(x') \gamma_5 \psi'(x') &= \bar{\psi}(x) \gamma_5 \psi(x) \det \underline{a} & - & \text{pszeudoskalár} \\ \bar{\psi}'(x') \gamma^\mu \psi'(x') &= a^\mu_\nu \bar{\psi}(x) \gamma^\nu \psi(x) & - & \text{vektor} \\ \bar{\psi}'(x') \gamma_5 \gamma^\mu \psi'(x') &= a^\mu_\nu \bar{\psi}(x) \gamma_5 \gamma^\nu \psi(x) \det \underline{a} & - & \text{pszeudovektor} \\ \bar{\psi}'(x') \sigma^{\mu\nu} \psi'(x') &= a^\mu_\kappa a^\nu_\lambda \bar{\psi}(x) \sigma^{\kappa\lambda} \psi(x) & - & \text{másodrendű tenzor} \\ & & & \text{stb.} \end{aligned} \quad (3.22)$$

4. A Dirac-hullámfüggvény valószínűségi értelmezése

A (3.22) tulajdonságok alapján a

$$j^\mu(x) = \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x) = (\psi^\dagger(x) \psi(x), \psi^\dagger(x) \vec{\alpha} \psi(x)) \quad (4.1)$$

mennyiség négyesvektor. Megmutatjuk, hogy a $j^\mu(x)$ négyesvektorra kontinuitási egyenlet áll fenn. Szorozzuk meg a (2.3) egyenletet balról $\bar{\psi}$ -tal, a (3.20) egyenletet pedig jobbról ψ -vel és vonjuk ki a két egyenletet egymásból. Ekkor a

$$\partial_\mu j^\mu(x) = 0 \quad (4.2)$$

kontinuitási egyenletet kapjuk.

Mivel

$$\psi^\dagger \psi = \psi_\alpha^* \psi_\alpha \geq 0, \quad (4.3)$$

azért $j^\mu(x)$ tekinthető a valószínűségi áramsűrűség négyesvektorának, ha a hullámfüggvényeket a megmaradó találati valószínűség

$$\int j^0(x) d^3x = \int \psi^\dagger(x) \psi(x) d^3x = 1 \quad (4.4)$$

értékével normáljuk. A (4.4) normálási feltétel megengedett, mert a baloldalon Lorentz-skalár áll /egy négyesvektor időszerű komponensének és a térfogatelemnek a szorzata/, amely a (4.2) kontinuitási egyenletből következően megmaradó.

5. A szabad részecskére vonatkozó Dirac-egyenlet megoldásai

A szabad részecskére vonatkozó

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - M) \psi(x) = 0 \quad (5.1)$$

Dirac-egyenlet stacionárius megoldásait

$$\psi(x) = U(\vec{p}) \exp(-ipx) = U(\vec{p}) \exp(-iet + i\vec{p}\vec{x}) \quad (5.2)$$

alakban keressük. Ekkor az $U(\vec{p})$ Dirac-spinorra az

$$(\vec{\alpha}\vec{p} + \beta M) U(\vec{p}) = \epsilon U(\vec{p}) \quad (5.3)$$

egyenletet kapjuk. Az

$$U(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \chi(\vec{p}) \\ \phi(\vec{p}) \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

felbontás után az (5.3) egyenlet az

$$\begin{pmatrix} (M-\epsilon)1 & \vec{\sigma}\vec{p} \\ \vec{\sigma}\vec{p} & -(M+\epsilon)1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi(\vec{p}) \\ \phi(\vec{p}) \end{pmatrix} = 0 \quad (5.5)$$

alakot ölti. Az (5.5) egyenletnek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha

$$\det \begin{pmatrix} (M-\epsilon)1 & \vec{\sigma}\vec{p} \\ \vec{\sigma}\vec{p} & -(M+\epsilon)1 \end{pmatrix} = 0, \quad (5.6)$$

azaz

$$\det [-(M^2 - \epsilon^2) - (\vec{\sigma}\vec{p})^2] = (\epsilon^2 - \vec{p}^2 - M^2)^2 = 0, \quad (5.7)$$

ahonnan

$$\epsilon = \pm (M^2 + \vec{p}^2)^{1/2} = \pm E(\vec{p}) = E^{(\pm)}(\vec{p}). \quad (5.8)$$

A Dirac-egyenlet (5.2) alakú megoldását pozitív ill. negatív energiás /frekvenciás/ megoldásnak nevezzük, ha rendre $\epsilon (=E^{(+)}(\vec{p})) > 0$ ill. $\epsilon (=E^{(-)}(\vec{p})) < 0$. A szabad Dirac-egyenletnek egyaránt vannak pozitív és negatív frekvenciás megoldásai. Mivel az (5.6) egyenlet negyedfoku, így minden energiasajátérték kétszeresen elfajult. Az energia-sajátértékek impulzusfüggését az 1. ábra mutatja.

Keressük meg az (5.5) egyenlet pozitív és negatív energiás megoldásait:

Ha $\epsilon = E^{(+)}(\vec{p}) = +E(\vec{p})$, akkor

$$(M - E(\vec{p}))\chi(\vec{p}) + \vec{\sigma}\vec{p}\phi(\vec{p}) = 0, \quad (5.9)$$

$$\vec{\sigma}\vec{p}\chi(\vec{p}) - (M + E(\vec{p}))\phi(\vec{p}) = 0. \quad (5.10)$$

Mivel $M + E(\vec{p}) > 0$, így az (5.10) egyenletből

$$\phi(\vec{p}) = \frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{M + E(\vec{p})}\chi(\vec{p}) \quad (5.11)$$

adódik. Tehát az (5.5) egyenlet megoldása

$$U_{\epsilon > 0}(\vec{p}) = \omega(\vec{p}, \epsilon_r = +1) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \chi(\vec{p}) \\ \frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{M + E(\vec{p})}\chi(\vec{p}) \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

ahol $\chi(\vec{p})$ tetszőleges kétkomponensű spinor, \mathcal{N} normálási tényező és $\epsilon_r = \text{sgn } \epsilon$. Az (5.2) megoldás így

$$\psi_{\vec{p}}^{(+)}(x) = \exp(-iE(\vec{p})t + i\vec{p}\vec{x})\omega(\vec{p}, \epsilon_r = 1) = \exp(-i\epsilon_r p x)\omega(\vec{p}, \epsilon_r = 1) \quad (5.13)$$

alakba írható, ahol $p_0 = +E(\vec{p})$.

Ha $\epsilon = E^{(-)}(\vec{p}) = -E(\vec{p})$, akkor

$$(M + E(\vec{p}))\chi(\vec{p}) + \vec{\sigma}\vec{p}\phi(\vec{p}) = 0, \quad (5.14)$$

$$\vec{\sigma}\vec{p}\chi(\vec{p}) - (M - E(\vec{p}))\phi(\vec{p}) = 0. \quad (5.15)$$

Az (5.14) egyenletből

$$\chi(\vec{p}) = - \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{M + E(\vec{p})} \phi(\vec{p}) \quad (5.16)$$

adódik és így az (5.5) egyenlet megoldása

$$U_{\epsilon_r < 0}(\vec{p}) = \omega(\vec{p}, \epsilon_r = -1) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} - \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{M + E(\vec{p})} \phi(\vec{p}) \\ \phi(\vec{p}) \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

ahol $\phi(\vec{p})$ tetszőleges kétkomponensű spinor. Az (5.2) megoldás most

$$\psi_{-\vec{p}}^{(-)}(x) = \exp(iE(\vec{p})t - i\vec{p}\vec{x}) \omega(-\vec{p}, \epsilon_r = -1) = \exp(-i\epsilon_r p x) \omega(-\vec{p}, \epsilon_r = -1) \quad (5.18)$$

alakú, ahol $p_0 = +E(\vec{p})$.

Az elfajult állapotok jellemzésére bevezetjük a

$$\Lambda_s = \frac{1}{2} \sum \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \quad \left(\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \right) \quad (5.19)$$

helicitást /az impulzusnak a spin irányába mutató vetületét/. A helicitás operátor felcserélhető a Hamilton-operátorral és az impulzus-operátorral:

$$[\Lambda_s, H] = 0, \quad [\Lambda_s, \hat{p}] = 0, \quad (5.20)$$

ezért az (5.12) és az (5.17) állapotok alterében választhatunk helicitás-sajátállapotokból bázist:

$$\omega(\vec{p}, \epsilon_r = 1, \Lambda_s = \frac{1}{2}) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{M + E(\vec{p})} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \omega^1(\vec{p}), \quad (5.21)$$

$$\omega(\vec{p}, \epsilon_r = 1, \Lambda_s = -\frac{1}{2}) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{M + E(\vec{p})} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \omega^2(\vec{p}), \quad (5.22)$$

$$\omega(-\vec{p}, \epsilon_r = -1, \Lambda_s = \frac{1}{2}) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{M + E(\vec{p})} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \omega^3(\vec{p}), \quad (5.23)$$

$$\omega(-\vec{p}, \epsilon_r = -1, \Lambda_s = -\frac{1}{2}) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{M + E(\vec{p})} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \omega^4(\vec{p}). \quad (5.24)$$

Válasszuk a normálási tényezőt

$$\mathcal{N} = \left(\frac{M + E(\vec{p})}{2E(\vec{p})} \right)^{1/2} \quad (5.25)$$

alakban, akkor

$$\overline{\omega^{\tau}(\vec{p})}_{\alpha} \omega^{\tau'}(\vec{p})_{\alpha} = \frac{M}{E(\vec{p})} \delta^{\tau\tau'} \epsilon_{\tau}, \quad (5.26)$$

$$\omega^\tau(\vec{p}\epsilon_r)_\alpha^\dagger \omega^{\tau'}(\vec{p}\epsilon_r)_\alpha = \delta^{\tau\tau'}, \quad (5.27)$$

$$\sum_{\tau=1}^4 \omega^\tau(\vec{p}\epsilon_r)_\alpha \omega^\tau(\vec{p}\epsilon_r)_\beta^\dagger = \delta_{\alpha\beta}, \quad (5.28)$$

ahol

$$\epsilon_r = \begin{cases} +1, & \text{ha } r=1,2 \\ -1, & \text{ha } r=3,4 \end{cases}. \quad (5.29)$$

Képezve a Dirac-egyenlet

$$\psi_{\vec{p}}^\tau(x) = \omega^\tau(\vec{p}) \exp(-i\epsilon_r p x) \quad (\tau=1,2,3,4) \quad (5.30)$$

megoldásainak teljes rendszerét és visszahelyettesítve az (5.1) egyenletbe

$$(\gamma^\mu p_\mu - \epsilon_r M) \omega^\tau(\vec{p}) = 0 \quad (5.31)$$

adódik, ahonnan

$$\bar{\omega}^\tau(\vec{p}) (\gamma^\mu p_\mu - \epsilon_r M) = 0. \quad (5.32)$$

Az (5.30)-(5.32) egyenletekben $p_0 = +E(\vec{p})$.

6. A szabad részecske polarizációja

A helicitás nem Lorentz-kovariáns módon van definiálva, ezért célszerű a részecske polarizációjának fogalmát Lorentz-kovariáns módon bevezetni.

Ebből a célból induljunk ki abból, hogy a részecske nyugalmi rendszerében /RF=rest frame/ a Dirac-egyenlet megoldásai

$$\psi_0^\tau(x) = \omega^\tau(0) \exp(-i\epsilon_r M t), \quad (p_0 = E(\vec{p})) \quad (6.1)$$

ahol

$$\omega^1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega^2(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega^3(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega^4(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Vegyük észre, hogy a részecske saját nyugalmi rendszeréhez képest $-\vec{v}$ sebességgel mozgó inerciarendszerben a Dirac-egyenlet (5.30) megoldásaiban szereplő $\omega^\tau(\vec{p})$ spinorok a (6.2) spinorokból Lorentz-transzformációval képezhetők /ez a Lorentz-invariancia következménye/:

$$\underline{S}(-\vec{v}) \omega^\tau(0) = \exp\left(-\frac{\omega}{2} \vec{\alpha} \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|}\right) \omega^\tau(0) = \omega^\tau(\vec{p}), \quad (6.3)$$

ahol

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{E(\vec{p})}, \quad -\text{th} \frac{\omega}{2} = \frac{|\vec{p}|}{M + E(\vec{p})}. \quad (6.4)$$

Vezessük be továbbá a

$$\Lambda_{\epsilon_r}(p) = \frac{\epsilon_r \delta^\mu p_\mu + M}{2M} \quad (p_0 = E(\vec{p})) \quad (6.5)$$

operátort. Belátható, hogy a $\Lambda_+ = \Lambda_1$ ill. a $\Lambda_- = \Lambda_{-1}$ operátorok a pozitív ill. a negatív energiás állapotok projektorai, ui.

$$a/ \Lambda_{\epsilon_r}(p) \omega^\tau(\vec{p}) = \frac{\epsilon_r \delta^\mu p_\mu + M}{2M} \omega^\tau(\vec{p}) = \frac{\epsilon_r^2 M + M}{2M} \omega^\tau(\vec{p}) = \omega^\tau(\vec{p}). \quad (6.6)$$

Felhasználtuk az (5.31) egyenletet.

$$\begin{aligned} b/ \Lambda_{\epsilon_r}(p) \Lambda_{\epsilon_r'}(p) &= \frac{\epsilon_r \epsilon_r' p^2 + (\epsilon_r + \epsilon_r') M \delta^\mu p_\mu + M^2}{4M^2} = (1 + \epsilon_r \epsilon_r') \frac{M^2 + \epsilon_r M \delta^\mu p_\mu}{4M^2} = \\ &= \frac{1 + \epsilon_r \epsilon_r'}{2} \Lambda_{\epsilon_r}(p) = \Lambda_{\epsilon_r}(p) \delta_{\epsilon_r \epsilon_r'}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$c/ \Lambda_+(p) + \Lambda_-(p) = 1. \quad (6.8)$$

Legyen \vec{s} egységvektor a részecske nyugalmi rendszerében, amelyre a részecske spinjét vetítjük. Definíció szerint a polarizáció s^μ négyesvektorának azt a négyesvektort tekintjük, ami a nyugalmi rendszerben értelmezett

$$(s^\mu)_{RF} = (0, \vec{s}) \quad (6.9)$$

négyesvektorból Lorentz-transzformációval előáll egy tetszőleges inerciarendszerben:

$$s^\mu = a^\mu_\nu (s^\nu)_{RF}. \quad (6.10)$$

A részecske négyesimpulzusára

$$(p^\mu)_{RF} = (M, \vec{0}), \quad p^\mu = a^\mu_\nu (p^\nu)_{RF}. \quad (6.11)$$

Ekkor

$$s^\mu s_\mu = (s^\mu)_{RF} (s_\mu)_{RF} = -\vec{s}\vec{s} = -1, \quad (6.12)$$

$$p^\mu s_\mu = (p^\mu)_{RF} (s_\mu)_{RF} = 0. \quad (6.13)$$

Másrészt, ha s^μ egy (6.12) és (6.13) tulajdonságú négyesvektor, azaz $s^\mu s_\mu = -1$ és $p^\mu s_\mu = 0$, akkor

$$0 = (p^\mu)_{RF} (s_\mu)_{RF} = M (s_0)_{RF}, \quad \text{azaz } (s_0)_{RF} = 0, \quad (6.14)$$

vagyis $(s^\mu)_{RF}$ térszerű vektor. Továbbá ekkor

$$-1 = (s^\mu)_{RF} (s_\mu)_{RF} = \vec{s}(-\vec{s}), \quad \text{azaz } \vec{s}^2 = 1. \quad (6.15)$$

Ezek szerint bármely (6.12) és (6.13) tulajdonságu négyesvektor polarizációvektornak használható.

Vezessük be a

$$\Sigma(s) = \frac{1 \pm \gamma_5 \gamma^\mu s_\mu}{2} \quad (6.16)$$

projektorokat. A (6.16) operátorok csakugyan projektorok, hiszen

$$\Sigma(s) \Sigma(s) = \Sigma(s), \quad \Sigma(s) \Sigma(-s) = 0 \quad (6.17)$$

és az egységoperátor

$$\Sigma(s) + \Sigma(-s) = 1 \quad (6.18)$$

felbontását teszik lehetővé.

Az ω Dirac-spinorral leírt állapotot s^μ irányban polarizálnak nevezzük, ha

$$\Sigma(s) \omega = \omega. \quad (6.19)$$

Mivel

$$[H, \Sigma(s)] = 0, \quad [\Lambda_\pm(p), \Sigma(s)] = 0, \quad (6.20)$$

azért megadható a Dirac-egyenlet megoldásainak olyan $u(\vec{p}, s)$, $v(\vec{p}, s)$ ($s = \pm$) teljes rendszere, hogy

$$(\gamma^\mu p_\mu - M) u(\vec{p}, s) = 0, \quad \Lambda_+(p) u(\vec{p}, s) = u(\vec{p}, s), \quad \Sigma(s) u(\vec{p}, s) = u(\vec{p}, s), \quad (6.21)$$

$$(\gamma^\mu p_\mu + M) v(\vec{p}, s) = 0, \quad \Lambda_-(p) v(\vec{p}, s) = v(\vec{p}, s), \quad \Sigma(s) v(\vec{p}, s) = v(\vec{p}, s). \quad (6.22)$$

Ha $(s^\mu)_{\text{RF}} = (0, 0, 0, 1)$, akkor

$$\begin{aligned} \Sigma(s) \omega^1(0) &= \omega^1(0), & \Sigma(-s) \omega^1(0) &= 0, \\ \Sigma(s) \omega^2(0) &= 0, & \Sigma(-s) \omega^2(0) &= \omega^2(0), \\ \Sigma(s) \omega^3(0) &= 0, & \Sigma(-s) \omega^3(0) &= \omega^3(0), \\ \Sigma(s) \omega^4(0) &= \omega^4(0), & \Sigma(-s) \omega^4(0) &= 0. \end{aligned} \quad (6.23)$$

A (6.3) és (6.23) összefüggés valamint $[\Sigma(s), \underline{\Sigma}(-\vec{v})] = 0$ figyelembevételével

$$\begin{aligned} u(\vec{p}, s) &= \omega^1(\vec{p}), & v(\vec{p}, s) &= \omega^4(\vec{p}), \\ u(\vec{p}, -s) &= \omega^2(\vec{p}), & v(\vec{p}, -s) &= \omega^3(\vec{p}) \end{aligned} \quad (6.24)$$

adódik.

A Dirac-egyenlet (5.30) alakú megoldásai

$$\begin{aligned}
 \psi_{\vec{p}}^1(x) &= u(\vec{p}, s) \exp(-ipx) && \text{pozitív energiás, impulzusu, polarizációju,} \\
 \psi_{\vec{p}}^2(x) &= u(\vec{p}, -s) \exp(-ipx) && \text{pozitív energiás, impulzusu, polarizációju,} \\
 \psi_{-\vec{p}}^3(x) &= v(\vec{p}, -s) \exp(ipx) && \text{negatív energiás, impulzusu, polarizációju,} \\
 \psi_{-\vec{p}}^4(x) &= v(\vec{p}, s) \exp(ipx) && \text{negatív energiás, impulzusu, polarizációju,}
 \end{aligned}$$

(6.25)

állapotokat írnak le. A (6.25) állapotok ortonormált teljes rendszert alkotnak, ugyanis az (5.27) és az (5.28) összefüggések alapján:

$$\sum_{\alpha\beta} (u_{\alpha}(\vec{p}, s) u_{\beta}^{\dagger}(\vec{p}, s) + v_{\alpha}(-\vec{p}, s) v_{\beta}^{\dagger}(-\vec{p}, s)) = \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.26)$$

$$u_{\alpha}^{\dagger}(\vec{p}, s) u_{\alpha}(\vec{p}, s') = v_{\alpha}^{\dagger}(-\vec{p}, s) v_{\alpha}(-\vec{p}, s') = \delta_{ss'}, \quad (6.27)$$

$$u_{\alpha}^{\dagger}(\vec{p}, s) v_{\alpha}(-\vec{p}, s') = v_{\alpha}^{\dagger}(-\vec{p}, s) u_{\alpha}(\vec{p}, s') = 0.$$

Megjegyezzük még, hogy

$$\Lambda_{+}(\not{p}) = \frac{E(\vec{p})}{M} \sum_{\tau=1,2} \omega^{\tau}(\vec{p}) \bar{\omega}^{\tau}(\vec{p}) \quad \text{és} \quad \Lambda_{-}(\not{p}) = \frac{E(\vec{p})}{M} \sum_{\tau=3,4} \omega^{\tau}(\vec{p}) \bar{\omega}^{\tau}(\vec{p}). \quad (6.28)$$

7. A nukleonra vonatkozó Dirac-egyenlet

Az 1-6. pontban elmondottak bármely nem zérus tömegű, 1/2 spinű részecskére vonatkozhatnak, amelynek nincsenek további szabadsági fokai. A klasszikus példa az elektron.

A nukleonnak további belső szabadsági foka van, az izospin. A nukleon izospinjét tekintve kétállapotú rendszer:

$$\text{proton-állapot: } \zeta_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{neutron-állapot: } \zeta_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.1)$$

Az izospin-állapotok terén ható $t^j = \frac{1}{2} \tau^j$ ($j=1,2,3$) izospin-operátorok a 2x2-es unimoduláris unitér mátrixok SU(2) csoportjának generátorai:

$$[t^j, t^k] = i \varepsilon^{jkl} t^l, \quad [t^2, t^j] = 0 \quad (7.2)$$

/ τ^j a Pauli-mátrixokat jelöli. / Nyilvánvalóan

$$t^3 \zeta_{\uparrow} = \frac{1}{2} \zeta_{\uparrow}, \quad t^3 \zeta_{\downarrow} = -\frac{1}{2} \zeta_{\downarrow}. \quad (7.3)$$

A szabad nukleon Dirac-egyenlete

$$i \partial_{\mu} \psi(x) = H \psi(x), \quad H = (\vec{\alpha} \vec{p} + \beta M) \otimes 1_{\tau}, \quad (7.4)$$

ahol 1_{τ} a 2x2-es egységmátrixot jelöli. A nukleont leíró spinor nyolckomponensű: $\psi_{\alpha\mathcal{G}}$ ($\alpha=1,2,3$ a spinor-index és $\mathcal{G}=1,2$ az izospin-index).

Az izospin-szimmetria miatt

$$[H, t^i] = 0. \quad (7.5)$$

A Dirac-egyenlet síkhullámu megoldásai:

$$\psi_{\vec{p}}^{\tau}(x) = \omega^{\tau}(\vec{p}) \exp(-i\epsilon_{\tau} p x) \quad (\tau = 1, 2, \dots, 8) \quad (7.6)$$

alakúak, ahol

$$\epsilon_{\tau} = \begin{cases} +1, & \text{ha } \tau = 1, 2, 3, 4 \\ -1, & \text{ha } \tau = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (7.7)$$

és

$$\begin{aligned} \omega^1(\vec{p}) &= u(\vec{p}, s, \uparrow) = u(\vec{p}, s) \otimes \zeta_{\uparrow}, \\ \omega^2(\vec{p}) &= u(\vec{p}, s, \downarrow) = u(\vec{p}, s) \otimes \zeta_{\downarrow}, \\ \omega^3(\vec{p}) &= u(\vec{p}, -s, \uparrow) = u(\vec{p}, -s) \otimes \zeta_{\uparrow}, \\ \omega^4(\vec{p}) &= u(\vec{p}, -s, \downarrow) = u(\vec{p}, -s) \otimes \zeta_{\downarrow}, \\ \omega^5(\vec{p}) &= v(\vec{p}, s, \uparrow) = v(\vec{p}, s) \otimes \zeta_{\uparrow}, \\ \omega^6(\vec{p}) &= v(\vec{p}, s, \downarrow) = v(\vec{p}, s) \otimes \zeta_{\downarrow}, \\ \omega^7(\vec{p}) &= v(\vec{p}, -s, \uparrow) = v(\vec{p}, -s) \otimes \zeta_{\uparrow}, \\ \omega^8(\vec{p}) &= v(\vec{p}, -s, \downarrow) = v(\vec{p}, -s) \otimes \zeta_{\downarrow}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Az $E^{(\pm)}(\vec{p}) = \pm E(\vec{p})$ energiájú stacionárius állapotok most $2 \times 2 = 4$ -szeresen elfajultak.

8. A Dirac-egyenlet és az egyrészecske-kép

Az alábbiakban megmutatjuk, hogy a Dirac-egyenlet egyrészecske-egyenletként való értelmezése ellentmondásokra vezet.

Az elektronokra vonatkozó Dirac-egyenletnek van kontinuum sok negatív energiás megoldása, amelyek tetszőlegesen nagy negatív energiát is megengednek. Ha ezek az üres negatív energiájú nívók a természetben rendelkezésre állnának, akkor a mindig jelenlévő elektromágneses kölcsönhatás miatt az elektronok mind "lecsorognának" és a világ instabil lenne a sugárzással szemben. /Elméleti becslés szerint pl. a H-atom élettartama kisebb lenne mint 10^{-9} s./

A sugárzási katasztrófa elkerülhető, ha csak a pozitív energiás megoldásokat tekintjük fizikainak, és a valóságos részecskéket leíró hullámcsomagokat csak pozitív energiás megoldások szuperpozíciójának tekintjük. Ily módon néhány ellentmondástól megszabadulhatunk.

a/ A sebességoperátor bármely komponensének sajátértékei $\pm c$ -nek adódnak a Dirac-egyenletből és a sebességösszetevők nem kommutálnak egymással, ui.

$$\dot{\vec{x}} = \frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{x}, H] = \frac{c}{i\hbar} [\vec{x}, \vec{\alpha}\vec{p}] = c\vec{\alpha}. \quad (8.1)$$

Ugyanakkor, ha csak a pozitív energiás /vagy csak a negatív energiás/ állapotok alterére korlátozódunk, az

$$\frac{1}{2} (\Lambda_+ \dot{\vec{x}} \Lambda_+ + \Lambda_- \dot{\vec{x}} \Lambda_-) \quad (8.2)$$

operátor sajátértéke pozitív /negatív/ energiás síkhullámu állapotokban $\vec{\alpha}; c^2 \vec{p} / E(\vec{p})$.

b/ A helyzetvektor Heisenberg-operátorának várható értéke tetszőleges /pozitív és negatív frekvenciás komponenseket is tartalmazó/ hullámcsomagban nem teljesíti az Ehrenfest-tételt. Csakugyan

$$\langle \vec{x}(t) \rangle = \langle \vec{x}(0) \rangle + \langle \frac{c^2 \vec{p}}{H} \rangle t + \left\langle i \left(\vec{\alpha} - \frac{c \vec{p}}{H} \right) \frac{\hbar c}{2H} \exp\left(-\frac{2iH}{\hbar} t\right) \right\rangle, \quad (8.3)$$

ahol az első két tag a hullámcsomag egyenes vonalú egyenletes mozgását írja le, míg a harmadik tag gyorsan oszcilláló, reszkető mozgásnak /"Zitterbewegung"/ felel meg, amelynek frekvenciája elektron esetén $1/\tau_e \sim Mc^2/\hbar \sim 10^{20} \text{ s}^{-1}$ és proton esetén $1/\tau_p \sim 10^{23} \text{ s}^{-1}$ nagyságrendű. Ugyanakkor a reszkető mozgás nem lép fel, ha a hullámcsomag csak pozitív /csak negatív/ frekvenciás hullámok szuperpozíciója, vagyis az

$$\frac{1}{2} (\Lambda_+ \vec{x} \Lambda_+ + \Lambda_- \vec{x} \Lambda_-) \quad (8.4)$$

operátor várható értéke eleget tesz az Ehrenfest-tételnek.

Hiába próbáljuk azonban kierőszakolni a Dirac-egyenlet értelmezését az egyrészecske-képben. Megmutatható ui., hogy egy lokalizált hullámcsomag, amely a $t=0$ pillanatban csak a pozitív energiás $\omega^1(0)$ állapotot tartalmazza,

$$\psi(\vec{x}, t=0) \sim \exp(-a|\vec{x}|^2) \omega^1(0) \quad (8.5)$$

($a > 0$ paraméter), úgy fejlődik az időben tovább, hogy megjelennek benne a negatív energiás $\omega^3(0)$ és $\omega^4(0)$ állapotok,

$$\psi(\vec{x}, t \neq 0) \sim c_1(x) \omega^1(0) + c_3(x) \omega^3(0) + c_4(x) \omega^4(0). \quad 8.6$$

Bele kell tehát törődnünk, hogy a Dirac-egyenlet nem értelmezhető úgy mint egyetlen részecske mozgásegyenlete.

9. A lyukelmélet

Azt gondolhatnánk, hogy mindaz, amit eddig a Dirac-egyenletről elmondtunk, fölösleges, hiszen az eredeti célt nem értük el, mert a Dirac-egyenlet nem tekinthető egy relativisztikus kvantált részecske mozgásegyenletének. Ennek ellenére a Dirac-egyenlet tanulmányozása elvezetett a lyukelméleten át a töltéskonjugálási szimmetria felismeréséhez és ahhoz a gondolathoz, hogy a részecskéket és az antirészecskéket egy végtelen szabadsági foku fizikai mező gerjesztéseinek kell te-

kinteni.

Diractól származik az a feltevés, hogy a fizikai vákuum nem üres, hanem benne az összes negatív energiás állapot be van töltve. A feltevés legfontosabb következményei az alábbiak:

a/ A Pauli-elv megakadályozza, hogy a pozitív energiás részecskék "lecsorogjanak" a negatív energiás állapotokba, s így nem következik be sugárzási katasztrófa.

b/ A részecskék száma nem marad meg. Egyrészt, lehetségesé válik külső sugárzás hatására a párkeltés, amikor egy negatív energiás állapot betöltöttsége megszűnik és egy pozitív energiás állapot betöltötté válik. Amíg a háborítatlan vákuum nem vehető észre, addig fizikai objektumként vevődik észre a betöltött pozitív energiás állapot, a részecske, ill. a be nem töltött negatív energiás állapot, a lyuk. Másrészt, egy részecske és egy lyuk kölcsönös megsemmisülése /annihiláció/ is bekövetkezhet, miközben a felszabaduló energia szétsugárzódik. Megjegyezzük, hogy a Heisenberg-féle határozatlansági elv megengedi, hogy $\nu \approx \hbar/mc^2$ ideig az "energiamegmaradás megsértésével" un. virtuális lyuk-részecske párok keletkezzenek.

c/ A lyuk egy alkalmas tulajdonságokkal felruházott "részecskével" azonosítható, amit antirészecskének nevezünk. Az antirészecskét jellemző fizikai mennyiségeket úgy találhatjuk ki, hogy a megmaradási törvényeket alkalmazzuk pl. a párkeltés folyamatára. Az elektromos töltés megmaradásából következően

$$0 = q + q_a \quad \Rightarrow \quad q_a = -q, \quad (9.1)$$

ahol q a részecske töltése, q_a pedig az antirészecskéé. Az impulzus- és az energia-megmaradás törvénye értelmében egyrészt: foton + negatív energiás \longrightarrow részecske "részecske"

$$\begin{aligned} \vec{k} + \vec{p} &= \vec{p}', \\ \omega + E^{(-)}(\vec{p}) &= E^{(+)}(\vec{p}'), \end{aligned} \quad (9.2)$$

másrészt: foton \longrightarrow antirészecske + részecske

$$\begin{aligned} \vec{k} &= \vec{p}_a + \vec{p}', \\ \omega &= E_a(\vec{p}_a) + E^{(+)}(\vec{p}'). \end{aligned} \quad (9.3)$$

Összehasonlítva a (9.2) és a (9.3) egyenleteket

$$\vec{p}_a = -\vec{p}, \quad E_a(\vec{p}_a) = E_a(-\vec{p}) = -E^{(-)}(\vec{p}) \quad (9.4)$$

adódik. Az antirészecske nyugalmi tömegére a (9.4) összefüggések felhasználásával a részecskéével azonos értéket kapunk:

$$M_a = (E_a^2(\vec{p}_a) - \vec{p}_a^2)^{1/2} = (E^{(-)2}(\vec{p}) - \vec{p}^2)^{1/2} = M. \quad (9.5)$$

Összegezve, a q töltésű, $-\vec{p}$ impulzusu és $E^{(-)}(-\vec{p}) = -E(\vec{p})$ energiájú be nem töltött állapot $q_a = -q$ töltésű, $\vec{p}_a = -\vec{p}$ impulzusu és $E_a = -E^{(-)}(\vec{p}) > 0$ energiájú antirészecskének felel meg. Az antirészecske nyugalmi tömege megegyezik a részecske

nyugalmi tömegével.

Dirac azon felismerését, hogy az elektronnak létezik az antirészecskeje, fényesen igazolta a pozitron felfedezése. A Dirac-feltevés azonban nem volt kielégítő, hiszen a betöltött negatív energiás állapotok tengere végtelen nagy energiát és töltést hordozna.

10. A töltéskonjugálás

A tapasztalat szerint minden feles spinű részecskének létezik az antirészecske párja, amelynek ugyanakkora nyugalmi tömege mint a részecskének, de ellentétes a töltése. A tömegnívók ilyen értelemben vett elfajulása a töltéskonjugálási szimmetria következménye.

Ha fennáll a töltéskonjugálási szimmetria, akkor létezik olyan C transzformáció, hogy a

$$[i\gamma^\mu (\partial_\mu - iqA_\mu) - M] \psi(x) = 0 \quad (10.1)$$

Dirac-egyenlet megoldásából képezett

$$\psi_c(x) = C \psi(x) \quad (10.2)$$

függvény a

$$[i\gamma^\mu (\partial_\mu + iqA_\mu) - M] \psi_c(x) = 0 \quad (10.3)$$

Dirac-egyenletnek tesz eleget. A (10.1) egyenlet egy q töltésű részecskére vonatkozik, a (10.3) egyenlet pedig egy $-q$ töltésű részecskére. $A_\mu(x)$ a külső elektromágneses tér vektorpotenciálja.

A töltéskonjugálás C operátorának explicit alakját könnyen kitalálhatjuk. A ∂_μ operátor és az iqA_μ kifejezés egymáshoz képesti előjelének megváltozását a komplex konjugálás \mathcal{K} művelete tudja biztosítani. Ezért a C operátort

$$C = u_c \mathcal{K} \quad (10.4)$$

alakban keressük, ahol u_c unitér operátor. Képezzük a (10.1) egyenlet komplex konjugáltját, majd $u_c^{-1} u_c$ alakban szurjunk be egy egységoperátort a hullámfüggvény elé és szorozzuk meg az egyenletet balról u_c -vel:

$$u_c [-i\gamma^{\mu*} (\partial_\mu + iqA_\mu) - M] u_c^{-1} \psi_c(x) = 0. \quad (10.5)$$

A (10.5) egyenlet a (10.3) alakot ölti, ha

$$\gamma^\mu = -u_c \gamma^{\mu*} u_c^{-1}. \quad (10.6)$$

A Dirac-mátrixok (2.9) ábrázolásában

$$u_c = i\gamma^2 \quad (10.7)$$

kielégíti a (10.6) egyenletet. Ekkor

$$\psi_c(x) = C \psi(x) = U_c \psi^*(x) \quad (10.8)$$

a $\psi(x)$ hullámfüggvény töltéskonjugáltja.

Bizonyíthatóak a töltéskonjugálás alábbi tulajdonságai:

$$C \psi_c(x) = \psi(x), \quad (10.9)$$

$$\langle \psi_c | H(-q) | \psi_c \rangle = - \langle \psi | H(q) | \psi \rangle, \quad (10.10)$$

$$\langle \psi_c | \hat{p} | \psi_c \rangle = - \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle, \quad (10.11)$$

$$\langle \psi_c | \hat{\alpha} | \psi_c \rangle = \langle \psi | \hat{\alpha} | \psi \rangle, \quad \langle \psi_c | \hat{\beta} | \psi_c \rangle = - \langle \psi | \hat{\beta} | \psi \rangle, \quad (10.12)$$

$$\psi_c^\dagger(x) \psi_c(x) = \psi^\dagger(x) \psi(x), \quad \psi_c^\dagger(x) \hat{\alpha} \psi_c(x) = \psi^\dagger(x) \hat{\alpha} \psi(x), \quad (10.13)$$

$$\langle \psi_c | \hat{\mathcal{H}} | \psi_c \rangle = - \langle \psi | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle, \quad (10.14)$$

ahol $\hat{\mathcal{H}}$ a részecske impulzusmomentumának operátora. A (10.10) - (10.14) összefüggésekből leolvashatjuk, hogy a (10.1) egyenlet negatív energiás, $-\vec{p}$ impulzusú megoldásainak töltéskonjugáltja a (10.3) Dirac-egyenlet pozitív energiás, \vec{p} impulzusú megoldása:

$$\psi_{c,\vec{p}}^{\tau'}(x) = C \psi_{-\vec{p}}^{\tau}(x). \quad (\tau = 3,4; \tau' = 1,2) \quad (10.15)$$

A (10.1) Dirac-egyenlet általános megoldása felírható

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(\sum_{\tau=1}^2 a(\vec{p}, \tau) \psi_{\vec{p}}^{\tau}(x) + \sum_{\tau=3}^4 b^*(\vec{p}, \tau) \psi_{\vec{p}}^{\tau}(x) \right) = \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(\sum_{\tau=1}^2 a(\vec{p}, \tau) \psi_{\vec{p}}^{\tau}(x) + \sum_{\tau'=1}^2 \tilde{b}(\vec{p}, \tau') C \psi_{c,\vec{p}}^{\tau'}(x) \right) \end{aligned} \quad (10.16)$$

alakban, ahol $a(\vec{p}, \tau)$ és $b^*(\vec{p}, \tau)$ tetszőleges komplex együtt-
hatók és

$$\tilde{b}(\vec{p}, \tau') = b^*(-\vec{p}, \tau'+2). \quad (\tau' = 1,2) \quad (10.17)$$

Fizikai jelentést a (10.1) és (10.3) egyenletek pozitív energiás megoldásainak tulajdonítunk: $\psi_{\vec{p}}^{\tau}(x)$ ($\tau=1,2$) részecskeállapotokat, $\psi_{c,\vec{p}}^{\tau}(x)$ ($\tau=1,2$) antirészecske állapotokat ír le. Mivel C antilineáris operátor, azért a Dirac-egyenlet (10.16) általános megoldása fizikai állapotok nemlineáris szuperpozíciója, s így nem rendelkezik a nem relativisztikus kvantummechanikában megszokott hullámfüggvény jelentéssel. A Dirac-egyenlet tehát elvesztette egyrészecske-egyenlet jellegét; egyszerre írja le a részecskéket és az antirészecskéket.

A vákuumállapotot úgy definiálhatjuk, mint az összes $\psi_{\vec{p}}^{\tau}(x)$ részecske-állapotokra és $\psi_{c,\vec{p}}^{\tau}(x)$ antirészecske-állapotokra ($\tau=1,2$) ortogonális ψ_0 állapotot:

$$\langle \psi_{\vec{p}}^{\tau} | \psi_0 \rangle = 0, \quad \langle \psi_{c,\vec{p}}^{\tau} | \psi_0 \rangle = 0. \quad (10.18)$$

A (10.18) tulajdonságu vákuumállapot (10.16) sorfejtésében valamennyi együtttható zérus; a vákuumállapot nem tartalmaz sem részecskét, sem antirészecskét. Nyilvánvalóan a vákuumállapot energiája és impulzusa zérus:

$$\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = 0, \quad \langle \psi_0 | \hat{P} | \psi_0 \rangle = 0. \quad (10.19)$$

A töltéskonjugálás segítségével a Dirac-egyenlet olyan értelmezéséhez jutottunk, amikor nem kell negatív energiás fizikai állapotokról és a Dirac-tengerről beszélnünk.

11. A CPT-szimmetria

A Dirac-egyenletnek a töltéskonjugálási szimmetrián túl vannak további diszkrét szimmetriái is.

A Dirac-egyenlet invariáns a tértükrözéssel szemben. Létezik olyan P unitér operátor, hogy az

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = (t, -\vec{x}), \quad \psi(x) \rightarrow \psi_P(x') = P\psi(x) = \psi_P(-\vec{x}, t) \quad (11.1)$$

transzformáció elvégzése után a

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - M) \psi(x) = 0 \quad (11.2)$$

Dirac-egyenletből a

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - M) \psi_P(x) = 0 \quad (11.3)$$

Dirac-egyenletet nyerjük. A Dirac-mátrixok (2.9) ábrázolásában

$$P = \pm \gamma^0. \quad (11.4)$$

A Dirac-egyenlet invariáns az időtükrözéssel szemben is, azaz létezik olyan T antiunitér operátor, hogy a

$$x_\mu \rightarrow x'_\mu = (-t, \vec{x}), \quad \psi(x) \rightarrow \psi_T(x') = T\psi(x) = \psi_T(\vec{x}, -t) \quad (11.5)$$

transzformáció elvégzése után a (11.2) egyenlet az

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - M) \psi_T(x') = 0 \quad (11.6)$$

alakot ölti. A Dirac-mátrixok (2.9) ábrázolásában

$$T = i\gamma^1 \gamma^3 \mathcal{K}. \quad (11.7)$$

Az elmondottakból következik, hogy a Dirac-egyenlet a C -, P -, T -transzformációk egymásutáni végrehajtásával szemben is invariáns, vagyis CPT-szimmetriával rendelkezik. Belátható továbbá, hogy

$$(CPT) \Lambda_{\epsilon_r}(p) (CPT)^{-1} = \Lambda_{\epsilon_r}(p'), \quad p'_\mu = (-p_0, -\vec{p}), \quad (11.8)$$

$$(CPT) \Sigma(s) (CPT)^{-1} = \Sigma(s'), \quad s'_\mu = -s_\mu. \quad (11.9)$$

Figyelembe véve a (11.8) és (11.9) összefüggéseket valamint azt a körülményt, hogy a CPT-transzformáció a hullámfüggvény argumentumát $(-\vec{x}, -t)$ -ről (\vec{x}, t) -re változtatja, látjuk, hogy egy negatív energiás, $-\vec{p}$ impulzusu és $-s$ polarizációju, "térben és időben visszafelé terjedő" /a hullámfüggvény argumentuma $(-\vec{x}, -t)$ / részecskét leíró hullámfüggvénynek a CPT-transzformáltja egy pozitív energiás, \vec{p} impulzusu és s polarizációju, "térben és időben előre terjedő" /a hullámfüggvény argumentuma (\vec{x}, t) / antirészecskét leíró hullámfüggvény. Mivel a Dirac-egyenlet CPT-invariáns, azért a fenti két hullámfüggvény ugyanazt a fizikai állapotot írja le, a pozitív energiás, \vec{p} impulzusu, s polarizációju antirészecskét.

A negatív energiás részecske-megoldások és a pozitív energiás antirészecske-megoldások fenti kapcsolatát a fizikai folyamatok diagram-nyelven történő leírása során tudjuk majd hasznosítani.

12. Homogén, izotróp külső térben mozgó nukleon

12.1 Izospin-független külső tér

Tegyük fel, hogy a nukleon a külső, homogén és izotróp V^μ vektortér és a ϕ skalártér hatása alatt mozog. A Dirac-egyenlet:

$$[\gamma^\mu (i\partial_\mu - g_v V_\mu) - (M - g_s \phi)] \psi = 0. \quad (12.1.1)$$

Itt g_v és g_s a nukleon azon "töltése", amelynek révén kölcsönhat rendre a vektortérrel és a skalártérrel. A külső tér izotrópiája azt jelenti, hogy

$$\vec{V} = 0, \quad (12.1.2)$$

a homogenitás miatt pedig

$$V^0 = \text{áll.} \quad \text{és} \quad \phi = \text{áll.} \quad (12.1.3)$$

A nukleon Hamilton-operátora

$$H = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta (M - g_s \phi) + g_v V^0 \quad (12.1.4)$$

felcserélhető az impulzus, a polarizáció és az izospin operátoraival:

$$[H, \hat{p}] = 0, \quad [H, \Sigma(s)] = 0, \quad [H, t^d] = 0. \quad (12.1.5)$$

Keressük az (E, \vec{p}, s, t_3) -sajátállapotokat

$$\psi = \exp(-ipx) U(\vec{p}) \quad (12.1.6)$$

alakban. Ekkor az $U(\vec{p})$ nyolckomponensű spinor az

$$(\gamma^\mu P_\mu - M^*) U(\vec{p}) = 0 \quad (12.1.7)$$

egyenletnek tesz eleget, ahol bevezettük a

$$P_\mu = p_\mu - g_v V_\mu, \quad M^* = M - g_s \phi \quad (12.1.8)$$

jelölést. Szorozzuk meg a (12.1.7) egyenletet balról a $(\gamma^\mu P_\mu + M^*)$ kifejezéssel; azonos átalakítás után

$$[P_\mu P^\mu - (M^*)^2] 1_D \otimes 1_\tau u(\vec{p}) = 0 \quad (12.1.9)$$

adódik. /Itt 1_D a Dirac-spinorokra ható 4x4-es egységmátrix, 1_τ az izospin-állapotok terében ható 2x2-es egységmátrix./ A (12.1.9) homogén lineáris egyenletrendszernek akkor és csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha

$$\det \{ [P_\mu P^\mu - (M^*)^2] 1_D \otimes 1_\tau \} = 0. \quad (12.1.10)$$

A (12.1.10) egyenlet gyökei

$$p_0 = g_v V^0 \pm E^*(\vec{p}) = E^{(\pm)}(\vec{p}), \quad (12.1.11)$$

ahol

$$E^*(\vec{p}) = [(M^*)^2 + \vec{p}^2]^{1/2}. \quad (12.1.12)$$

A homogén ϕ skalártér hatása olyan mintha a nukleon tömege változna meg, a homogén V^0 skalárpotenciál pedig a nukleon energiájának eltolódását okozza.

Vezessük be az antinukleon-energiákat:

$$\bar{E}^{(+)}(\vec{p}) = -E^{(-)}(\vec{p}) = -g_v V^0 + E^*(\vec{p}). \quad (12.1.13)$$

A nukleon- és az antinukleon-energiákat a 2. ábrán tüntettük fel az impulzus nagyságának $|\vec{p}|$ függvényében. Az energianívók eredetileg nyolcszoros elfajulását a homogén skalártér nem változtatja meg. Ugyanakkor a homogén skalárpotenciál a részecske- és antirészecske-energiák ellentétes irányu eltolódását eredményezi az energiaskálán és ezért a különvált részecske- és antirészecske-nívók csak négyszeresen elfajultak, ha $V^0 \neq 0$.

Vezessük be a (12.1.7) egyenlet $(\vec{p}, E^{(+)}(\vec{p}), \lambda)$ ill. $(-\vec{p}, E^{(-)}(\vec{p}), \lambda)$ sajátértékekhez tartozó $u(\vec{p}, \lambda)$ ill. $v(\vec{p}, \lambda)$ sajátmegoldásait; $\lambda = (s, t_3)$:

$$[\gamma^0 (E^{(+)}(\vec{p}) - g_v V^0) - \vec{\gamma} \vec{p} - M^*] u(\vec{p}, \lambda) = 0, \quad (12.1.14)$$

$$[\gamma^0 (E^{(-)}(\vec{p}) - g_v V^0) + \vec{\gamma} \vec{p} - M^*] v(\vec{p}, \lambda) = 0. \quad (12.1.15)$$

A (12.1.14) és (12.1.15) egyenleteket átrendezve az alábbi egyenleteket kapjuk:

$$(\vec{\alpha} \vec{p} + \beta M^*) u(\vec{p}, \lambda) = E^*(\vec{p}) u(\vec{p}, \lambda), \quad (12.1.16)$$

$$(\vec{\alpha} \vec{p} - \beta M^*) v(\vec{p}, \lambda) = E^*(\vec{p}) v(\vec{p}, \lambda). \quad (12.1.17)$$

Szorozzuk a (12.1.16) egyenletet balról $u^\dagger \beta$ -val, majd vegyük a (12.1.16) egyenlet adjungáltját és szorozzuk jobbról βu -val és végül adjuk össze az így nyert két egyenletet. A (12.1.17) egyenlettel is hasonlóan járva el, az u és v spinorok alábbi tulajdonságát kapjuk:

$$\bar{u}(\vec{p}, \lambda) u(\vec{p}, \lambda) = \frac{M^*}{E^*(\vec{p})} u^\dagger(\vec{p}, \lambda) u(\vec{p}, \lambda), \quad \bar{v}(\vec{p}, \lambda) v(\vec{p}, \lambda) = \frac{M^*}{E^*(\vec{p})} v^\dagger(\vec{p}, \lambda) v(\vec{p}, \lambda). \quad (12.1.18)$$

A továbbiakban a spinorokat úgy normáljuk, hogy

$$u^\dagger(\vec{p}, \lambda) u(\vec{p}, \lambda) = v^\dagger(\vec{p}, \lambda) v(\vec{p}, \lambda) = 1 \quad (12.1.19)$$

legyen.

A (12.1.1) egyenlet általános megoldása

$$\psi(x) = \sum_{\lambda=1}^4 \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left[A(\vec{p}, \lambda) u(\vec{p}, \lambda) e^{i\vec{p}\vec{x} - iE(\vec{p})t} + B^*(\vec{p}, \lambda) v(\vec{p}, \lambda) e^{-i\vec{p}\vec{x} - iE(\vec{p})t} \right] \quad (12.1.20)$$

alaku, ahol $A(\vec{p}, \lambda)$ és $B^*(\vec{p}, \lambda)$ tetszőleges komplex együtthatók.

12.2. Izospinfüggő külső tér

Tegyük fel, hogy a nukleonra a külső V^μ vektortéren és a ϕ skalártéren kívül még az A^μ vektorpotenciálu elektromágneses tér és a nukleon izospinjéhez csatolódó b^μ vektortér is hat, pontosabban, hogy a nukleon mozgásegyenlete

$$\left\{ \gamma^\mu \left[i\partial_\mu - g_v V_\mu - \frac{1}{2} g_\rho \tau_3 b_\mu - \frac{1}{2} e (1 + \tau_3) A_\mu \right] - (M - g_s \phi) \right\} \psi = 0 \quad (12.2.1)$$

alaku. Itt g_v , g_ρ , e és g_s a csatolási állandók /"töltések"/. A külső terek homogenitásának és izotrópiájának következtében

$$\vec{V} = \vec{A} = \vec{b} = 0, \quad V^0, A^0, b^0, \phi = \text{áll.} \quad (12.2.2)$$

A nukleon Hamilton-operátora

$$H = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta (M - g_s \phi) + \left(\frac{1}{2} e A^0 + g_v V^0 \right) + \frac{1}{2} \tau_3 (g_\rho b^0 + e A^0) \quad (12.2.3)$$

most is felcserélhető az impulzus, a polarizáció és az izospin operátoraival. Így most is az (E, \vec{p}, s, t_3) sajátállapotok teljes rendszerét keressük

$$\psi(x) = \exp(-ipx) U(\vec{p}) \quad (12.2.4)$$

alakban. A (12.2.4) feltevést behelyettesítve a (12.2.1) Dirac-egyenletbe, az $U(\vec{p})$ spinorra

$$\left(\gamma^\mu P_\mu - \frac{1}{2} e \gamma^\mu \tau_3 a_\mu - M^* \right) U(\vec{p}) = 0 \quad (12.2.5)$$

egyenlet adódik, ahol

$$P_\mu = p_\mu - g_v V_\mu - \frac{1}{2} e A_\mu, \quad e a_\mu = g_\rho b_\mu + e A_\mu, \quad M^* = M - g_s \phi. \quad (12.2.6)$$

Bevezetve továbbá a

$$\tilde{P}_\mu = P_\mu - \frac{1}{2} e \tau_3 a_\mu, \quad [\tilde{P}_\mu, \tilde{P}_\nu] = 0 \quad (12.2.7)$$

kommutáló mennyiségeket, a (12.2.6) egyenlet a szabad nukleon Dirac-egyenletével azonos alakot ölt:

$$(\gamma^\mu \tilde{P}_\mu - M^*) U(\vec{p}) = 0. \quad (12.2.8)$$

Szorozzuk meg a (12.2.8) egyenletet balról a $(\gamma^\mu \tilde{P}_\mu + M^*)$ kifejezéssel:

$$1_D \otimes [P_\mu P^\mu + \frac{1}{4} e^2 a_\mu a^\mu - (M^*)^2 - e \tau_3 a_\mu P^\mu] U(\vec{p}) = 0. \quad (12.2.9)$$

A (12.2.9) egyenlet izospin-szerkezetét tekintve $(x - y \tau_3) = 0$ alakú, ahol x és y valós számok. Felhasználva, hogy

$$(x + y \tau_3)(x - y \tau_3) = (x^2 - y^2) 1_\tau, \quad (12.2.10)$$

a (12.2.9) egyenletből az

$$\{ [P_\mu P^\mu + \frac{1}{4} e^2 a_\mu a^\mu - (M^*)^2]^2 - e^2 (a_\mu P^\mu)^2 \} 1_D \otimes 1_\tau U(\vec{p}) = 0 \quad (12.2.11)$$

egyenletet kapjuk. A (12.2.11) homogén lineáris egyenletrendszer nem triviális megoldásai létezésének szükséges és elégséges feltétele, hogy az egyenletrendszer determinánsa eltűnjön:

$$[P_\mu P^\mu + \frac{1}{4} e^2 a_\mu a^\mu - (M^*)^2]^2 - e^2 (a_\mu P^\mu)^2 = 0. \quad (12.2.12)$$

A (12.2.12) egyenlet gyökei

$$P_0 = \pm (E^*(\vec{p}) \pm \frac{1}{2} e a_0), \quad (12.2.13)$$

ahol a négy különböző, lehetséges előjelpárosítás négy különböző gyököt jelent, amelyek mindegyike a polarizáció szerint kétszeresen elfajult energianívót határoz meg:

$$E_{t_3 = \pm 1/2, s}^{(+)}(\vec{p}) = E^*(\vec{p}) \pm \frac{1}{2} e a_0 + g_V V_0 + \frac{1}{2} e A_0, \quad (12.2.14)$$

$$E_{t_3 = \pm 1/2, s}^{(-)}(\vec{p}) = -E^*(\vec{p}) \pm \frac{1}{2} e a_0 + g_V V_0 + \frac{1}{2} e A_0. \quad (12.2.15)$$

A megfelelő nukleon- és antinukleon-energianívók az alábbiak:

$$\text{proton: } E_{t_3 = 1/2}^{(+)}(\vec{p}) = E^*(\vec{p}) + g_V V_0 + \frac{1}{2} g_S b_0 + e A_0; \quad (12.2.16)$$

$$\text{neutron: } E_{t_3 = -1/2}^{(+)}(\vec{p}) = E^*(\vec{p}) + g_V V_0 - \frac{1}{2} g_S b_0; \quad (12.2.17)$$

$$\text{antiproton: } \bar{E}_{t_3 = +1/2}^{(+)}(\vec{p}) = E^*(\vec{p}) - g_V V_0 - \frac{1}{2} g_S b_0 - e A_0; \quad (12.2.18)$$

$$\text{antineutron: } \bar{E}_{t_3 = -1/2}^{(+)}(\vec{p}) = E^*(\vec{p}) - g_V V_0 + \frac{1}{2} g_S b_0. \quad (12.2.19)$$

13. Centrális erőterben mozgó nukleon

Vizsgáljuk a

$$\{i\gamma^\mu \partial_\mu - g_V \gamma^0 V_0(r) - \frac{1}{2} g_\rho \tau_3 \gamma^0 \rho_0(r) - \frac{1}{2} (1 + \tau_3) e \gamma^0 A_0(r) - (M - g_s \phi(r))\} \psi(x) = 0 \quad (13.1)$$

Dirac-egyenlettel leírt nukleon mozgását, ahol valamennyi erőter centrális. A (13.1) egyenlet stacionárius megoldása

$$\psi(x) = \varphi(\vec{x}) \exp(-iEt) \quad (13.2)$$

alaku, ahol a stacionárius állapot $\varphi(\vec{x})$ hullámfüggvénye a

$$H = -i\vec{\alpha}\vec{\nabla} + g_V V_0(r) + \frac{1}{2} g_\rho \tau_3 \rho_0(r) + \frac{1}{2} (1 + \tau_3) e A_0(r) + \beta(M - g_s \phi(r)) \quad (13.3)$$

Hamilton-operátor E energiasajátértékhez tartozó sajátfüggvénye.

Vezessük be a spin \vec{S} , a pályaimpulzusmomentum \vec{L} , és a teljes impulzusmomentum \vec{J} operátorát:

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \vec{\Sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \vec{L} = \vec{r} \times \hat{p}, \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}. \quad (13.4)$$

A centrális erőter forgásszimmetriája miatt

$$[H, \vec{J}^k] = [H, \vec{J}^2] = 0, \quad (k=1,2,3) \quad (13.5)$$

vagyis a \vec{J} teljes impulzusmomentum és annak m vetülete jó kvantumszámok. Ugyancsak mozgásállandó a nukleon spinje $/s = 1/2/$, hiszen

$$[H, \vec{S}^2] = 0. \quad (13.6)$$

A pályaimpulzusmomentum azonban nem megmaradó mennyiség:

$$[H, \vec{L}^2] \neq 0. \quad (13.7)$$

További megmaradó mennyiséget definiál a

$$K = \gamma^0 \left(\vec{\Sigma} \vec{J} - \frac{1}{2} \right) = \gamma^0 \left(\vec{\Sigma} \vec{L} + 1 \right) = \gamma^0 \left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \frac{1}{4} \right) \quad (13.8)$$

operátor, mert

$$[H, K] = 0. \quad (13.9)$$

Jelöljük a K operátor sajátértékeit $(-K)$ -val. K és \vec{J} egyidejűleg mérhető, mert

$$[K, \vec{J}^2] = 0. \quad (13.10)$$

Most megkeressük K sajátértékeit és sajátfüggvényeit. Keressük K és \vec{J}^2 közös sajátfüggvényeit

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} \quad (13.11)$$

alakban. Bevezetve a nagy- ill. a kiskomponensek alterén ható \vec{j} és \vec{l} operátorokat, a sajátérték-egyenlet

$$K\varphi = \begin{pmatrix} \vec{j}^2 - \vec{l}^2 + \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & -(\vec{j}^2 - \vec{l}^2 + \frac{1}{4}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [j(j+1) - \vec{l}^2 + \frac{1}{4}] \varphi_A \\ -[j(j+1) - \vec{l}^2 + \frac{1}{4}] \varphi_B \end{pmatrix} = -\kappa \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \varphi_B \end{pmatrix} \quad (13.12)$$

alaku. A (13.12) egyenletből rendezéssel kapjuk, hogy φ_A és φ_B is a pályaimpulzusmomentum négyzetének sajátfüggvénye, azonban különböző $l_A \neq l_B$ sajátértékekhez tartoznak:

$$\vec{l}^2 \varphi_A = [j(j+1) + \kappa + \frac{1}{4}] \varphi_A = l_A(l_A+1) \varphi_A, \quad (13.13)$$

$$\vec{l}^2 \varphi_B = [j(j+1) - \kappa + \frac{1}{4}] \varphi_B = l_B(l_B+1) \varphi_B. \quad (13.14)$$

Két lehetőség van:

l_A	l_B	κ	
$j + 1/2$	$j - 1/2$	$j + 1/2$	$(\kappa > 0)$
$j - 1/2$	$j + 1/2$	$-(j + 1/2)$	$(\kappa < 0)$

(13.15)

vagyis

$$l_A = \begin{cases} \kappa, & \text{ha } \kappa > 0 \\ -(\kappa + 1), & \text{ha } \kappa < 0. \end{cases} \quad (13.16)$$

A (13.15) és a (13.16) összefüggésekből következik, hogy a K operátor sajátértékei az egész számok:

$$-\kappa = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (13.17)$$

Definiáljuk az impulzusmomentum-összeadás szabályai szerint a $\Phi_{\kappa m}$ gömbi spinorokat:

$$\Phi_{\kappa m} = \sum_{m_l m_s} \langle l m_l \frac{1}{2} m_s | j m \rangle Y_{l m_l}(\theta, \phi) \chi_{\frac{1}{2} m_s}, \quad \text{ahol } l = \begin{cases} \kappa, & \text{ha } \kappa > 0 \\ -(\kappa + 1), & \text{ha } \kappa < 0. \end{cases} \quad (13.18)$$

Segítségükkel a (13.1) egyenletnek a fizikai mennyiségek $(H, K, \vec{F}^2, \vec{E}^2, t^2)$ teljes rendszerével jellemzett megoldásai

$$\varphi_{\kappa m j}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{i G_{\kappa m j}(\tau)}{r} \Phi_{\kappa m} \\ -\frac{F_{\kappa m j}(\tau)}{r} \Phi_{-\kappa m} \end{pmatrix} \otimes \zeta_j \quad (13.19)$$

alakuk, ahol n az energiasajátértékeket jelölő kvantumszám, ϑ pedig az izospin harmadik komponense. Természetesen a (13.19) függvényekből álló teljes rendszer általában tartalmaz pozitív energiás kötött és nem kötött állapotú hullámfüggvényeket, valamint nem kötött negatív energiás hullámfüggvényeket.

A (13.1) egyenlet megoldásait (13.19) alakban keresve és kihasználva a gömbi spinorok ortogonalitását, a $G_{n\kappa\vartheta}(\tau)$ és az $F_{n\kappa\vartheta}(\tau)$ radiális hullámfüggvényekre radiális egyenletek vezethetők le:

$$\frac{d}{d\tau} G_{n\kappa\vartheta} = -\frac{\kappa}{\tau} G_{n\kappa\vartheta} + \left[E + M - g_s \phi(\tau) - \left(g_v V_0(\tau) + \frac{\vartheta}{2} g_p b_0(\tau) + e \frac{1+\vartheta}{2} A_0(\tau) \right) \right] F_{n\kappa\vartheta}, \quad (13.20)$$

$$\frac{d}{d\tau} F_{n\kappa\vartheta} = \frac{\kappa}{\tau} F_{n\kappa\vartheta} - \left[E - M + g_s \phi(\tau) - \left(g_v V_0(\tau) + \frac{\vartheta}{2} g_p b_0(\tau) + e \frac{1+\vartheta}{2} A_0(\tau) \right) \right] G_{n\kappa\vartheta}. \quad (13.21)$$

14. A Foldy-Wouthuysen-féle előállítás. A spin-pálya kölcsönhatás

14.1. A szabad részecske esete

Az $U = \exp(iS)$ unitér transzformációval áttérhetünk olyan reprezentációra, amelyben a pozitív energiás állapotok hullámfüggvényeinek kiskomponense zérus, a negatív energiás állapotok hullámfüggvényeinek pedig a nagykomponense tűnik el:

$$\psi \rightarrow \phi = U\psi = \exp(iS)\psi, \quad H \rightarrow H_\phi = U H U^{-1}, \quad (14.1.1)$$

ahol

$$S = S^\dagger = -\frac{i}{2M} \beta \vec{\alpha} \vec{p} \omega\left(\frac{|\vec{p}|}{M}\right). \quad (14.1.2)$$

Az $\omega\left(\frac{|\vec{p}|}{M}\right)$ függvényt úgy határozzuk meg, hogy a transzformált H_ϕ Hamilton-operátorban tünjenek el az $\vec{\alpha}$ operátort páratlan hatványon tartalmazó tagok, amelyek "összekeverik" a hullámfüggvény kis- és nagykomponenseit:

$$\omega\left(\frac{|\vec{p}|}{M}\right) = \frac{M}{|\vec{p}|} \arctg \frac{|\vec{p}|}{M}. \quad (14.1.3)$$

Ekkor a Dirac-egyenlet Hamilton-operátora

$$H_\phi = \beta E(\vec{p}). \quad (14.1.4)$$

14.2. Nukleon külső térben

A külső térben mozgó nukleon (13.1) Hamilton-operátora

$$H = \beta M + \epsilon + \mathcal{O} \quad (14.2.1)$$

szerkezetű, ahol

e - páros /"even"/ operátor, amely nem keveri a kis- és nagykomponenseket,

o - páratlan /"odd"/ operátor, amely a kis- és a nagykomponenseket összekeveri.

Felhasználjuk a következőket:

- a/ o páros hatványai páros operátorok,
 b/ o páratlan hatványai páratlan operátorok,
 c/ $\beta o + o \beta = 0$, $\beta e - e \beta = 0$. (14.2.2)

Unitér transzformációval most is elérhetjük, hogy a Hamilton-operátorból $1/M$ szerinti tetszőleges rendben eltűnjenek a páratlan operátorok. Tegyük ezt meg $1/M^3$ rendben.
 Bevezetjük az

$$S = -\frac{i}{2M} \beta o \quad (14.2.3)$$

operátort, és végrehajtjuk a

$$\phi = \exp(iS) \psi, \quad H' = \exp(iS) H \exp(-iS) \quad (14.2.4)$$

transzformációt. Fejtsük sorba a H' operátort $1/M$ hatványai szerint:

$$\begin{aligned} H' &= \left(1 + \frac{iS}{1!} + \frac{i^2 S^2}{2!} + \dots\right) H \left(1 + \frac{-iS}{1!} + \frac{(-i)^2 S^2}{2!} + \dots\right) = \\ &= H + i[S, H] + \frac{i^2}{2!} [S, [S, H]] + \dots + \frac{i^n}{n!} \underbrace{[S, [S, \dots, [S, H] \dots]]}_{n\text{-szer}} + \dots \end{aligned} \quad (14.2.5)$$

/Az utóbbi egyenlőséget beláthatjuk, ha észrevesszük, hogy

$$H' = F(\lambda)|_{\lambda=1}, \quad \text{ahol } F(\lambda) = e^{i\lambda S} H e^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n F}{d\lambda^n} \Big|_{\lambda=0} \frac{\lambda^n}{n!}, \quad (14.2.6)$$

ui.

$$\frac{d^n F}{d\lambda^n} = e^{i\lambda S} i^n \underbrace{[S, [S, \dots, [S, H] \dots]]}_{n\text{-szer}} e^{-i\lambda S} \quad (14.2.7)$$

és így

$$H' = F(1) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} i^n \underbrace{[S, [S, \dots, [S, H] \dots]]}_{n\text{-szer}}. \quad (14.2.8)$$

Ezt akartuk belátni./

Figyelembe véve, hogy

$$\mathcal{O}(H) = M, \quad \mathcal{O}(\mathcal{O}) = \mathcal{O}(\epsilon) = 1, \quad \mathcal{O}(S) = 1/M, \quad (14.2.9)$$

a transzformált Hamilton-operátor $1/M^3$ renddel bezárólag

$$H' = H + i[S, H] - \frac{1}{2}[S, [S, H]] - \frac{i}{6}[S, [S, [S, H]]] + \\ + \frac{1}{24}[S, [S, [S, [S, \beta M]]]] + \mathcal{O}(1/M^4). \quad (14.2.10)$$

A (14.2.10) kifejezés szintén a (14.2.1) szerkezetet mutatja:

$$H' = \beta M + \epsilon' + \mathcal{O}', \quad (14.2.11)$$

ahol

$$\epsilon' = \beta \left(\frac{\mathcal{O}^2}{2M} - \frac{\mathcal{O}^4}{8M^3} \right) + \epsilon - \frac{1}{8M^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \epsilon]], \quad (14.2.12)$$

$$\mathcal{O}' = \frac{\beta}{2M} [\mathcal{O}, \epsilon] - \frac{\mathcal{O}^3}{3M^2}, \quad (14.2.13)$$

de a páratlan operátor magasabb rendű $1/M$ -ben, mint volt:

$$\mathcal{O}(\mathcal{O}') = 1/M. \quad (14.2.14)$$

Most újra végrehajtottunk egy az

$$S' = -\frac{i}{2M} \beta \mathcal{O}' = -\frac{i}{2M} \beta \left(\frac{\beta}{2M} [\mathcal{O}, \epsilon] - \frac{\mathcal{O}^3}{3M^2} \right) \quad (14.2.15)$$

operátor által definiált unitér transzformációt, amelynek az eredménye

$$H'' = e^{iS'} H' e^{-iS'} = \beta M + \epsilon'' + \mathcal{O}'', \quad (14.2.16)$$

ahol

$$\epsilon'' = \epsilon', \quad (14.2.17)$$

$$\mathcal{O}'' = \frac{\beta}{2M} \left[\frac{\beta}{2M} [\mathcal{O}, \epsilon] - \frac{\mathcal{O}^3}{3M^2}, \frac{\mathcal{O}^2}{2M} + \epsilon \right] + \mathcal{O}(1/M^4) \quad (14.2.18)$$

és

$$\mathcal{O}(\mathcal{O}'') = 1/M^2. \quad (14.2.19)$$

Még egyszer megismételve az eljárást az

$$S'' = -\frac{i}{2M} \beta \mathcal{O}'' \quad (14.2.20)$$

operátorral, olyan

$$H_\phi = H'' = e^{iS''} H'' e^{-iS''} = \beta M + \epsilon'' + \mathcal{O}(1/M^4) = \quad (14.2.21)$$

$$= \beta \left(M + \frac{\mathcal{O}^2}{2M} - \frac{\mathcal{O}^4}{8M^3} \right) + \epsilon - \frac{1}{8M^2} [\mathcal{O}, [\mathcal{O}, \epsilon]] + \mathcal{O}(1/M^4)$$

Hamilton-operátort kapunk, amelyben $1/M^3$ renddel bezárólag már nem lép fel páratlan operátor.

Felhasználjuk, hogy a külső térben mozgó nukleon esetében

$$\epsilon = -\beta g_s \phi + \left(\frac{1}{2} e A_0 + g_v V_0 \right) + \frac{1}{2} \tau_3 (g_\rho b_0 + e A_0), \quad (14.2.22)$$

$$\mathcal{O} = \vec{\alpha} \hat{\vec{p}}, \quad (14.2.23)$$

és

$$H_d = \beta \left[M - g_s \phi + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2M} - g_s \phi \frac{\partial}{\partial M} \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2M} - \frac{\hat{\vec{p}}^4}{8M^3} - i \frac{g_s}{2M^2} (\vec{\nabla} \phi) \hat{\vec{p}} - \frac{g_s}{8M^2} \Delta \phi + \vec{\Sigma} (\vec{\nabla} \phi \times \hat{\vec{p}}) \right] +$$

$$+ \left(\frac{1}{2} e A_0 + g_v V_0 \right) + \frac{1}{2} \tau_3 (g_\rho b_0 + e A_0) + \frac{1}{8M^2} \left[\left(\frac{1}{2} e \Delta A_0 + g_v \Delta V_0 \right) + \frac{1}{2} \tau_3 (g_\rho \Delta b_0 + e \Delta A_0) \right] +$$

$$+ \frac{1}{4M^2} \vec{\Sigma} \cdot \left\{ \left[\frac{1}{2} e \vec{\nabla} A_0 + g_v \vec{\nabla} V_0 + \frac{1}{2} \tau_3 (g_\rho \vec{\nabla} b_0 + e \vec{\nabla} A_0) \right] \times \hat{\vec{p}} \right\}. \quad (14.2.24)$$

Centrális erőterben a

$$\vec{\Sigma} \cdot (\vec{\nabla} f(r) \times \hat{\vec{p}}) = \frac{1}{r} \frac{df}{dr} \vec{\Sigma} (\vec{r} \times \hat{\vec{p}}) = \frac{2}{r} \frac{df}{dr} \vec{L} \vec{S} \quad (14.2.25)$$

tipusu tagok spin-pálya kölcsönhatást eredményeznek:

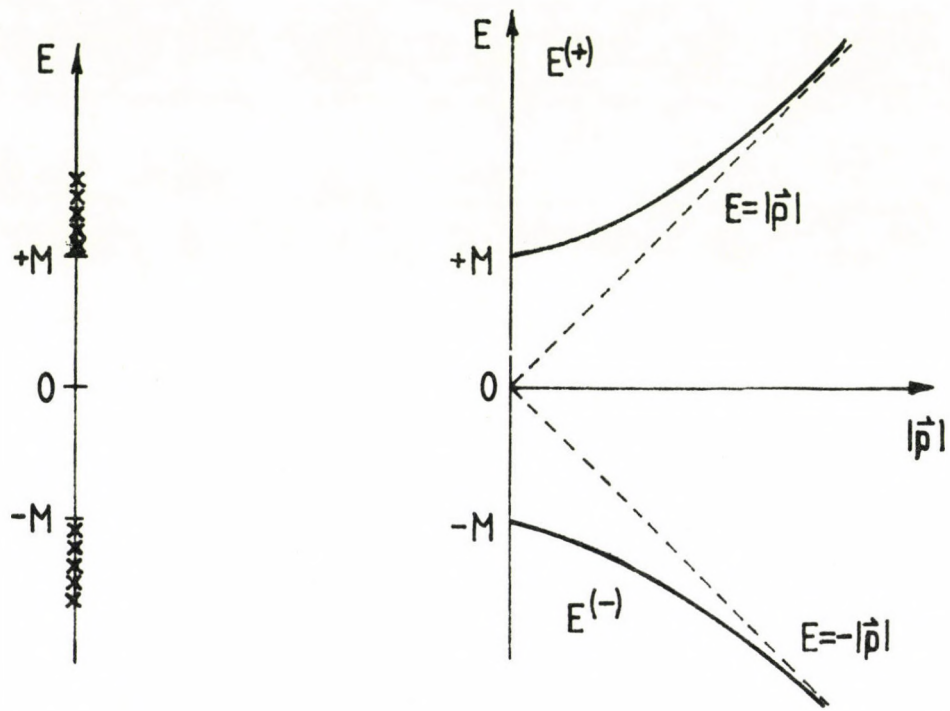
$$\frac{1}{2Mr^2} \left\{ \beta g_s \frac{d\phi}{dr} + \frac{1}{2} e \frac{dA_0}{dr} + g_v \frac{dV_0}{dr} + \frac{\tau_3}{2} \left(g_\rho \frac{db_0}{dr} + e \frac{dA_0}{dr} \right) \right\} \vec{L} \vec{S}. \quad (14.2.26)$$

A (14.2.26) kifejezésből látjuk, hogy a ϕ skalártér kivételével valamennyi külső tér azonos előjelű spin-pálya kölcsönhatást okoz a nukleonnak és az antinukleonnak, a skalártér viszont ellentétes előjelűt. Az A_0 és b_0 külső terek izospin-függő spin-pálya kölcsönhatást okoznak.

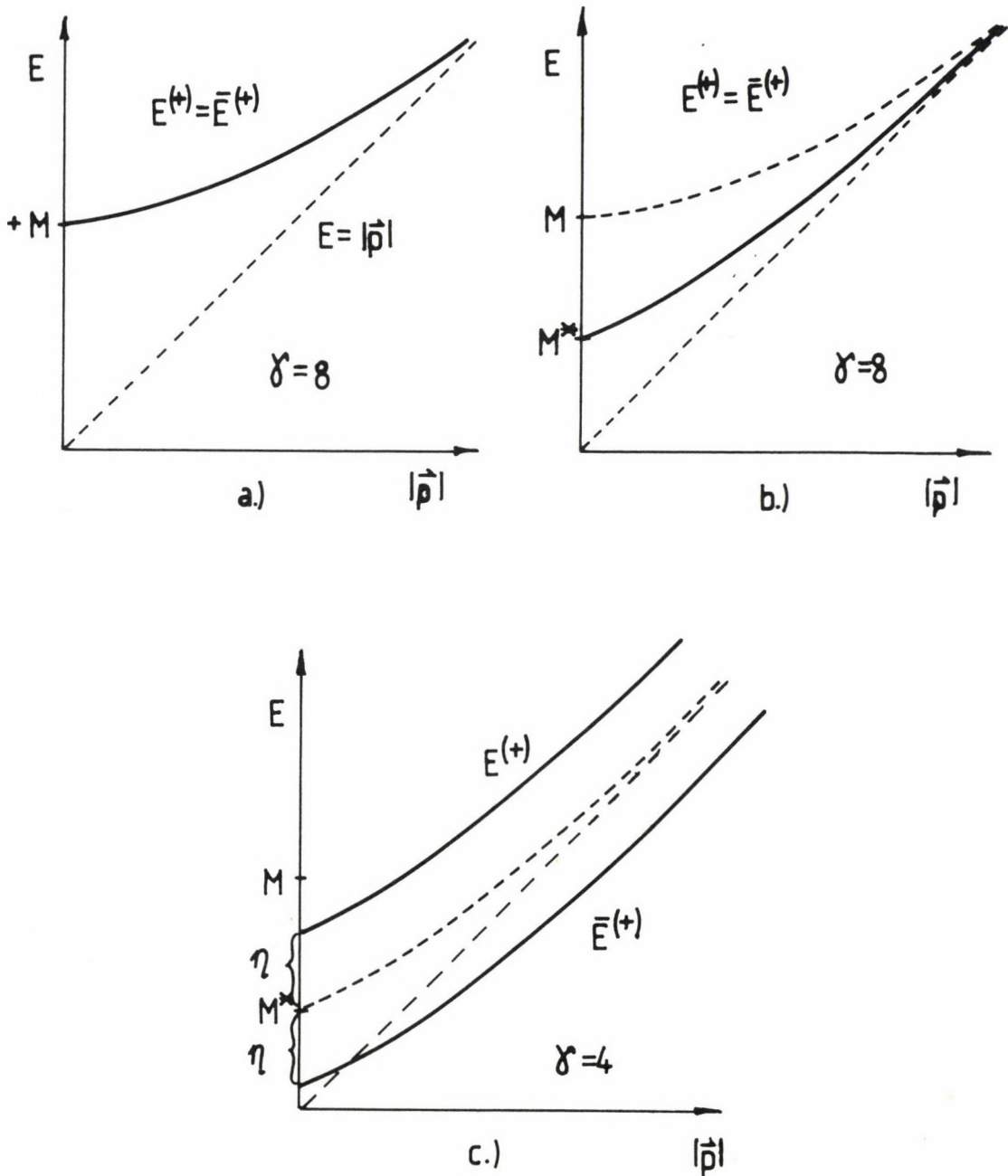
A nukleonok relativisztikus tárgyalásának egyik előnye, hogy automatikusan benne foglaltatik a leírásban az a spin-pálya kölcsönhatás, amelynek létét az atommag héjmodelljében külön fel kellett tételezni.

IRODALOM

1. B.D. SEROT, J.D. WALECKA, Adv. Nucl. Phys. 16, 1986, 1
2. P.A.M. DIRAC, The Principles of Quantum Mechanics, 1958, Clarendon Press, Oxford
3. W. GREINER, Theoretische Physik, B. 6, Relativistische Quantenmechanik, 1981, Verlag Harri Deutsch, Thun u. Frankfurt am Main
4. J.D. BJORKEN, S.D. DRELL, Relativistic Quantum Fields 1965, McGraw-Hill, New York
5. N.N. BOGOLYUBOV, D.V. SIRKOV, Vvedenie v teoriyu kvantovannuh polej, 1976, Nauka, Moszkva
6. A.I. AKHIEZER, V.B. BERESZTECKIJ, Kvantovaya elektrodinamika, 1969, Nauka, Moszkva



1. ábra Szabad részecske energia-sajátértékei az impulzus nagyságának függvényében



2. ábra Külső ϕ skalártér és V^0 skalárpotenciál hatása alatt mozgó nukleon és antinukleon energiája az impulzus nagyságának függvényében: a/ $V^0 = 0, \phi = 0$; b/ $V^0 = 0, \phi \neq 0$; c/ $V^0 \neq 0, \phi \neq 0$.
 / γ az energianívók elfajultságának foka, $M^* = M - g_s \phi$,
 $\eta = g_v V^0$./

RELATIVISZTIKUS KONTINUUMFIZIKA NEHÉZIONÜTKÖZÉSEK LEIRÁSÁRA*

Lukács Béla

Központi Fizikai Kutatóintézet, 1525 Budapest 114, Pf. 49.

I. A FELADAT

Nagyenergiájú nehézionütközések elméleti leírása nyilvánvalóan nem egyszerű feladat, mivel a maximális kompresszió táján az anyag eléggé exotikus állapotban van. Ugyanakkor a folyamat elméleti leírása meg nem kerülhető feladat, amit könnyű be látni. A számunkra érdekes és újszerű állapotok a maximális kompresszióhoz tartoznak, megfigyelni azonban csak a folyamat végén kiszabaduló részecskéket lehet. A két fázis közt a rendszer evolúciós folyamaton megy át, mely legalább az alábbi lényeges és nagyjából egyidejű lépésekből áll:

expanzió

hűlés

hadrokémiai átalakulások

késői termalizáció

valamint utolsó lépésként a kontinuum feltörése lényegében szabad részecskékké. Ennek következtében nincs mód arra, hogy a detektált végállapot adataiból közvetlen következtetéseket vonhassunk le a sűrű, forró komprimált állapotra; a közbülső folyamatokat is le kell írni. Továbbá nyilvánvaló, hogy nehézionütközés megfigyelésével a komprimált állapotra nézve csak akkor szerezhetünk lényegi információt, ha a fent említett folyamatok leírása legalább annyira megbízható, mint a komprimált állapotra vonatkozó addigi ismereteink. Sajnos, mint majd látjuk, a maximális kompressziókor fennállt exotikus körülmények az utána következő evolúciós folyamat leírásában is okoznak nehézségeket. Tökéletesen pontos vagy általánosan elfogadott modell nem is létezik egyelőre. Jelen előadás feladata a leírás-hoz rendelkezésünkre álló módszerek áttekintése, az esetleg szükséges továbbfejlesztés megjelölésével, és annak elemzése, mennyire bízhatunk az általában alkalmazott leírásban.

*Az 1986. szeptemberi Magfizikai Őszi Iskolán az ATOMKI-ben elhangzott előadás anyaga.

Már most előrebocsájtandó, hogy nem célszerű öncélúan az evolúciós folyamat maximális pontosságú leírására törekedni, akár a modell rendkívüli elbonyolítása árán is. Nagyon bonyolult leírás ugyanis technikai nehézségekre vezetne /pl. számos ismeretlen és ezért illesztendő paraméter megjelenése; igen komplikált, és ezért megbízhatatlan numerikus számítási séma; gyakorlatilag kielégíthetetlen számítógépidőigény; stb./. E technikai nehézségeket azután óhatatlanul elhanyagolásokkal kompenzálnók, csak hogy ez újabb elhanyagolások már ad hoc jellegűek, és ezért nem feltétlenül megértett tartalmúak lennének. Ez eshetőséggel szemben feltétlenül előnyben részesítendő gyakorlatilag használható és ismert fajtájú és mértékű elhanyagolásokat magában foglaló leírás alkalmazása.

Tapasztalatok szerint a technikai lehetőségek határain belül van a maximális kompresszió és a feltörés közti szakasz relativisztikus hidrodinamikával és termodinamikával történő leírása. Ezért e, különben is rendkívül gazdaságos, modellt tekintjük kiindulópontnak, és amennyiben elégtelennek bizonyul, úgy próbáljuk általánosítani, hogy alapvető szerkezete ne módosuljon.

Jelen előadásnak nem feladata a termodinamika szokásos formalizmusának ismertetése, mivel az Martinás Katalin előadásában megtörtént [1]; a továbbiakban a formalizmust ismertnek tekintjük, és explicit szükség esetén a fentemlített [1] előadásra utalunk. A II. fejezetben áttekintjük, milyen állapotokat kellene leírni a maximális kompresszió környékén, a III. fejezet a relativisztikus hidrodinamikához vezető utat elemzi. A IV. fejezetben megvizsgáljuk, mit sugall a vizsgált állapotokra a relativisztikus Boltzmann-egyenlet, míg az V-IX. fejezetekben az exotikus állapotok leírásához szükséges esetleges, a hidro+termodinamika struktúráját nem módosító kiterjesztéseket diszkutáljuk. A Függelék megjegyzéseket tartalmaz a fázisátmeneteknek a formalizmusba foglalására.

II. A KOMPRIMÁLT ÁLLAPOT JELLEMZŐI

Az expanziós szakasz leírására használandó módszert csak akkor tudjuk megítélni, ha annak kiinduló állapotát, azaz a maximális sűrűségű és hőmérsékletű komprimált állapotot ismerjük. Azonban nyilvánvalóan, ha azt ismernők, a további folyamatok leírására nem is volna szükség. E circulus vitiosusból azonban kitörhetünk annak felismerésével, hogy egy leírás alkalmazhatósága várhatóan csak a leírandó állapot jellemzőinek nagyságrendjétől függ, amelyet tudunk becsülni, illetőleg folyamodhatunk egyszerűbb modellekben végzett számításokhoz.

Tekintsünk U+U ütközést 2,1 GeV/nukleon gyorsítóenergián, mely ma a megbízható kísérleti lehetőségek felső határának tekinthető. Akkor a teljes átfedés az első érintkezés után $3,2 \cdot 10^{-23}$ s-mal áll be, mintegy 150 MeV hőmérsékleten, kb. 400 részecskével a reakcióterfogatban [2]. Ekkor az alakzat sugara kb. 5 fm, a centrális sűrűség $6n_0$ körül van [3], ami a periferián n_0 tájára esik le.

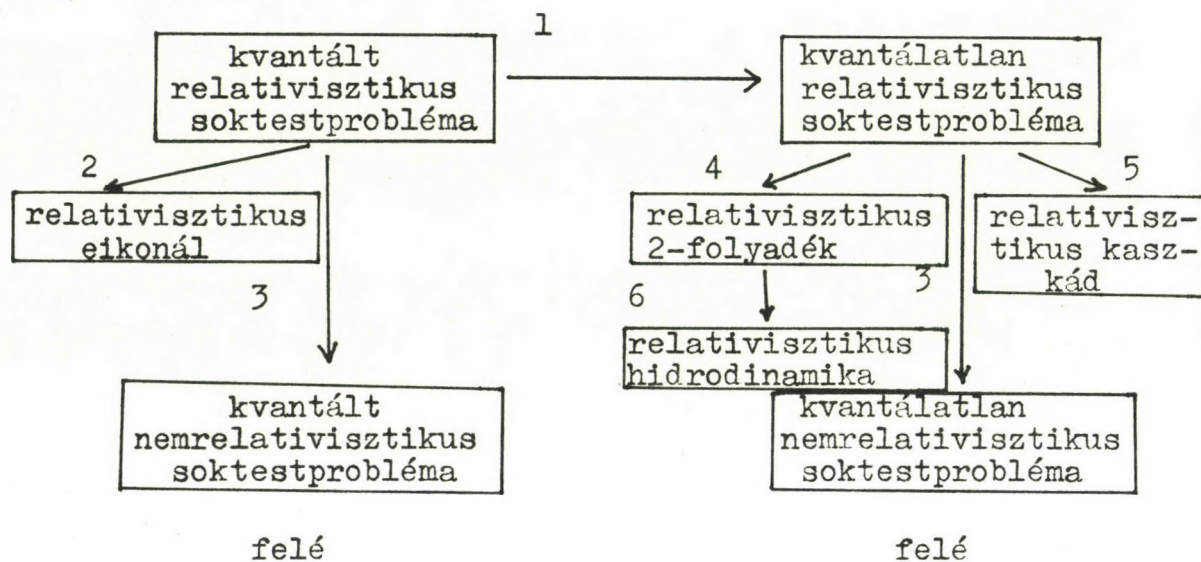
Ezen elsődleges adatokból a szokásos n-n hatáskeresztmetszeteket használva nagyságrendi becslésként az alábbiak adódnak:

Részecske két ütközése közti idő	$\tau_{ii} \sim 10^{-23}$ s
Szabad úthossz	$\lambda_f \sim 1$ fm
Kölcsönhatás hatótávolsága	$\lambda_h \sim 1$ fm
Homogén zóna mérete	$r_h \sim 1$ fm
Részecskeszám egy homogén cellában	$\Delta N \sim 4$

Fenti adatok már érzékeltetik a maximális kompressziónál fel lépő állapot exotikusságát. Az adatok részletes elemzése a későbbiek tárgya, de már látható, hogy sem a termikus, sem a lokális egyensúly léte nem magától értetődő, a kölcsönhatások részben térfogatiak, ami mind a termodinamika, mind a hidrodinamika formalizmusában zavart okozhat, a transzportfolyamatok erősek, és jelentős fluktuációk várhatóak. Ezért most törekednünk kell mennél kevesebb felesleges egyszerűsítő feltevés használatára, és így először az alapoktól indulva vezetjük le a hidrodinamika egyenleteit.

III. SOKTESTPROBLÉMÁTÓL A HIDRODINAMIKÁIG

Amsden, Harlow és Nix elemezte a kérdést [4], milyen feltételek szükségesek a hidrodinamika alkalmazhatóságához. Célunk az ő elemzésük továbbfejlesztése, de kiindulópontul a közelítések hierarchiájára vonatkozó sémájuk egy részét használjuk:



A számok az erősebb közelítés alkalmazásának /körülbelüli/ feltételeit jelölik, nevezetesen:

- 1: $\hbar/\sqrt{2mE}$ kicsiny /a rendszer karakterisztikus távolságaihoz képest/;
- 2: E nagy, a kölcsönhatás elég gyenge, a trajektóriák egyenesek;
- 3: E kicsi /a nyugalmi tömeghez képest/;
- 4: Sok szabadsági fok gerjed, és az ekvipartícióhoz elég idő van;
- 5: A kölcsönhatás eléggé gyenge;
- 6: E eléggé kicsi és a kölcsönhatások erősek.

A baloldali 3 és a legfelső jobboldali leírás tulajdonképpen még nem eléggé kidolgozott gyakorlati alkalmazásra [4].

E fejezetben célunk a relativisztikus hidrodinamika elérése, ezért a [4]-ben felsorolt feltételeket ugyan röviden elemezzük, de nem törekszünk annak valószínűsítésére, hogy az elérendő leírás ténylegesen rá is illik a nehézionütközések expanziós szakaszára.

Az 1 feltétel jól ismert, de nem teljesül nagyon jól. GeV nagyságrendű kinetikus energián /relativisztikus tartomány/ $\hbar/\sqrt{2mE} \sim 1$ fm, ami éppen akkora, mint a rendszer minden más karakterisztikus hossza is. Mindenesetre bizonyos kvantumos jelenségek standard módon átmenthetőek a hidrodinamikába és termodinamikába, mint azt pl. az ideális Fermi-gáz esete mutatja, így most továbbmegyünk.

A 4 feltételből a nagy részecskeszám a rendszerben megvan, ha a homogénnek tekinthető cellákban nem is /de ez a fluktuációk és a lokális egyensúly később tárgyalandó kérdéséhez tartozik/, a szabadsági fokok gerjedéséhez kellő energia rendelkezésre áll, az ekvipartícióhoz szükséges idő pedig akkora, hogy minden részecske 1-nél lényegesen többször ütközzön az energia elosztását biztosítandó. Ez utóbbi feltétel a termikus egyensúly megközelítését jelenti, amit majd vizsgálunk.

A 6 feltétel első fele látszólag ellentmond a relativisztikus szituációnak, aminek oka az, hogy a séma kidolgozásának idején még valószínűnek látszott, hogy relativisztikus ütközőenergiákon a közönséges hidrodinamika egyáltalán nem használható [3], [4]. Azóta a relativisztikus hidrodinamikai modellek sikere és pontosabb becslések [5] kidolgozása valószínűsítette, hogy a hidrodinamika kielégítő legalább 1 GeV/nukleon gyorsítóenergiáig. A pontos kritérium az, hogy az ütközés folyamán a lövedék longitudinális impulzusának le kell bomlania.

Most feltesszük, hogy a rendszer leírható relativisztikus hidrodinamikával; lássuk, hogyan történik ez.

A rendszerben van mérhető részecskeáram és energiimpulzustenzor. Feltesszük, hogy e mennyiségek céljainkhoz elegendően kicsiny térfogatokban még értelmezhetőek /ez néhány részecskét tartalmazó térfogatban még így van/, és elegendően sína függvényei a térkoordinátáknak /ez igaz, ha a hidrodinamika alkalmazható, amit az előbb feltettünk/. Technikai egyszerűség kedvéért csak egyetlen részecskekomponensre szorítkozunk; ez akkor értelemszerűen megmaradó.

Az n^i részecskeáramsűrűség és T^{ik} energiimpulzustenzor mérlegegyenleteket teljesít:

$$n^r{}_{;r} = 0 \quad (\text{III.1})$$

$$T^{ir}{}_{;r} = 0 \quad (\text{III.2})$$

ahol $;$ kovariáns deriváltat jelez /a formalizmust ld. pl. [6]-ban/, alul és felül egyaránt előforduló indexre automatikusan összegzés értendő. /III.1/ a fentiek szerint feltevés, de eléggé megalapozott, /III.2/ pedig az általános relativitáselméleten belül levezethető. E két egyenletet tehát elfogadhatjuk, bármilyen további evolúciós egyenlet használata már speciális feltevéseket igényelne.

T^{ik} bármely időszerű u^i egységvektor segítségével "3 dimenziós" mennyiségekre bontható az alábbi módon:

$$\begin{aligned} T^{ik} &= \varrho u^i u^k + q^i u^k + q^k u^i + p^{ik} \\ u^r u_r &= 1 \\ u_r q^r &= u_r p^{ir} = 0 \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

Az u^i sebességgel mozgó megfigyelő saját 3 dimenziós tere u^i -re merőleges tenzoriális mennyiségeket tartalmaz. Számára tehát ϱ az anyag energiasűrűsége, q^i egy energiafluxus, és p^{ik} térbeli feszültség. Ha a megfigyelő az anyaggal mozog együtt, akkor e mennyiségeknek a nemrelativisztikus kontinuummechanikában szokásos jelentésük van.

Definiálandó, mi az anyaggal együtt mozgás. Ha a részecskéket tekintjük az elsődlegeseeknek, akkor a részecskékkel kell együtt mozogni, azaz u^i olyan, hogy

$$n^i = n u^i \quad (\text{III.4})$$

Ez u^i normáltsága miatt egyben az n részecskesűrűséget is definiálja. /Több részecskekomponens esetén előfordulhat, hogy áramsűrűségeik nem párhuzamosak; ilyenkor u^i -t felvehetjük a legfontosabbhoz, és a többiekben diffúziós tagok lépnek fel. Mivel kellően erős kölcsönhatások e jelenséget eliminálják, most eme esettel nem foglalkozunk./ Ekkor /III.1/ az alábbi alakba írható:

$$\begin{aligned} \dot{n} + n u^r{}_{;r} &= 0 \\ \dot{n} &= u^r n_{,r} \end{aligned} \quad (\text{III.5})$$

ahol $;$ parciális deriváltat jelent /amely skalárra a kovariáns deriválttal egybeesik/. /III.2/ /III.3/ felhasználásával

szétírható u^i -ra merőleges és vele párhuzamos komponensekre:

$$\begin{aligned} \mathcal{G} u^i{}_{;r} u^r + (g^{ir} + u^i u^r) (q_r{}_{;s} u^s + q_r u^s{}_{;s} + q_r^s u_r{}_{;s} + p_r^s{}_{;s}) &= 0 \\ \dot{\mathcal{G}} + \mathcal{G} u^r{}_{;r} - q_r{}_{;s} u^r u^s + q^r{}_{;r} - p^{rs}{}_{;s} u_r &= 0 \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

Ezzel rendelkezésünkre áll az evolúciós egyenlet a sebességre, részecskeszámra és energiára. Mindazonáltal a /III.5-6/ egyenletrendszer még ténylegesen nem tudjuk megoldani, mert q_i és p^{ik} ismeretlen.

Hogy milyen információkra lenne szükség, azt legegyszerűbben egy speciális eseten lehet demonstrálni. Az ún. perfekt folyadék közelítés minden transzportfolyamatot elhanyagol, akár azért, mert a rendszerben nincsenek transzporttal kiegyenlítendő inhomogenitások, akár azért, mert a folyadék transzportegyütthatói /ld. később/ kicsinyek; e közelítésben

$$\begin{aligned} q^i &= 0 \\ p^{ik} &= P(g^{ik} + u^i u^k) \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

azaz a feszültségek izotrópák /a P tag szorzója kinematikai faktor az u^i -ra merőlegesség végett/. Ekkor /III.5/ természetesen változatlan, /III.6/ pedig egyszerűsödik:

$$(\dot{\mathcal{G}} + P) u^i{}_{;r} u^r + (g^{ir} + u^i u^r) P_{,r} = 0 \quad (\text{III.8})$$

$$\dot{\mathcal{G}} + (\mathcal{G} + P) u^r{}_{;r} = 0 \quad (\text{III.9})$$

Az első egyenlet a klasszikus Euler-egyenlet relativisztikus formája [7], tehát P a nyomás. Mindenesetre figyeljük meg, hogy a gyorsulás együtthatójában P is megjelent /az egész munkában olyan egységeket használunk a relativisztikus tárgyalásnak megfelelően, hogy $c=1$ /. Mármint maganyagra P nem hanyagolható el \mathcal{G} mellett, tehát a klasszikus egyenleteket még klasszikus sebességeken /energiákon/ sem kapjuk vissza. A második egyenlet az energiamérleg a várt alakban.

Most kiszámítjuk a folyadék entrópiaprodukcióját. Van egy s^i entrópiaáramvektor, amelynek divergenciája az entrópiaprodukció, mely utóbbi a II. Főtétel szerint nemnegatív. Transzporttagok hiányában s^i az alábbi módon bontható fel:

$$s^i = s u^i \quad (\text{III.10})$$

/entrópia térbeli áramához konduktív energiaáram is tartozna,

ami most /III.7/ szerint 0/. Egyszerű rendszerekben az s entrópiasűrűség csak a részecske- és energiasűrűségektől függ:

$$s = s(n, \varrho) \quad (\text{III.11})$$

és ekkor /III.5/ és /III.9/ miatt

$$0 \leq \dot{s} + su^R_{;r} = [s - ns_n - (\varrho + P)s_\varrho]u^R_{;r} \quad (\text{III.12})$$

/vessző nélküli alsó index jelöli termodinamikai mennyiségek termodinamikai mennyiségek szerinti deriváltjait/.

Mármost /III.12/ jobboldalán a zárójeles kifejezés tagjai, az eddig nem vizsgált P esetleges kivételével, csak n és ϱ függvénye, míg $u^R_{;r}$ előjele n és ϱ értékétől független. Ezért a zárójeles kifejezésnek egyenlőnek kell lennie $u^R_{;r}$ egy páratlan kifejezésével, pozitív együtthatóval. Mivel most minden transzporttagot elhanyagoltunk, nem várható irreverzibilis folyamat, tehát az entrópiaprodukciónak el kellene tűnnie, ahonnan

$$P = -\varrho + (s - ns_n)/s_\varrho \quad (\text{III.13})$$

De akkor $P = P(n, \varrho)$, azaz P is csak a termodinamikai változók függvénye. Ténylegesen /III.13/ ekvivalens az I. Főtétel differenciális alakjával [1], tehát

$$P = p \quad (\text{III.14})$$

azaz P egyenlő a termodinamikai nyomással.

Ha $p=p(n, \varrho)$ -t ismerjük, a /III.5,8-9/ evolúciós egyenletrendszer zárt. /III.13-14/ viszont mutatja, hogy e függvény az entrópiafüggvényből számítható. Következésképpen az evolúciós egyenletekből hiányzó információt a termodinamikából kell venni. Másrészt /III.12-14/ demonstrálja, hogy a termodinamika és hidrodinamika formalizmusa kompatibilis /amit egyelőre még csak perfekt folyadéokra láttunk/.

Most felhagyunk a perfekt folyadék közelítéssel, és feltesszük, hogy valamilyen értelemben mérsékelt transzporttagok vannak jelen:

$$\begin{aligned} q^i &= \text{tr} q^i \\ p^{ik} &= p(g^{ik} + u^i u^k) + \text{tr} p^{ik} \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

Ilyenkor az entrópiaáram nem feltétlenül párhuzamos a részecskeárammal, tehát

$$s^i = su^i + \xi^i \quad (III.16)$$

$$\xi^r u_r = 0$$

Mivel $s = s^r u_r$, s még mindig az együttmozgó megfigyelő érezte entrópiasűrűség. /III.15/-öt /III.6/-ba írva és /III.5/-öt is használva az előbbi módon kiszámítható az entrópiaprodukció, melynek nemnegativitásából most, figyelembe véve /III.13-14/-et is

$$\xi^r_{;r} - s_g (\text{tr}^q u_r; s^u + \text{tr}^q_{;r} + \text{tr}^p{}^{rs} u_r; s) \geq 0 \quad (III.17)$$

Mivel $q^r_{;r}$ előjele teljesen ismeretlen, a kifejezés szemidefinitivitásához ki kell esnie. Ez akkor lehetséges, ha

$$\xi^i = s_g q^i \quad (III.18)$$

ami meg is felel annak, hogy a nemkonvektív entrópiaáram nemkonvektív energiaárammal kapcsolatos. A maradék kifejezésből, bevezetve az

$$s_g = T^{-1} \quad (III.19)$$

jelölést [1],

$$\text{tr}^q{}^r (T_{,r} + T u_r; s^u) + T \text{tr}^p{}^{rs} u_r; s \leq 0 \quad (III.20)$$

Feltéve, hogy a különböző transzportfolyamatok külön-külön pozitív entrópiaprodukcióra vezetnek /egyszerű anyagok, [8]/, a /III.20/ egyenlőtlenség 3 paraméteres megoldással rendelkezik:

$$\text{tr}^q{}^i = -\kappa (g^{ir} + u^i u^r) (T_{,r} + T u_r; s^u)$$

$$\text{tr}^p{}^{ik} = -\eta (g^{ir} + u^i u^r) (g^{ks} + u^k u^s) (u_r; s + u_s; r) - \eta' (g^{ik} + u^i u^k) u^r_{;r} \quad (III.21)$$

ahol κ , η és $\eta' + 2\eta/3$ nemnegatív együttható, egyébként tetszőleges. Ha a transzportfolyamatok annyira mérsékeltek, hogy az ún. lokális egyensúly elve teljesül [1], [9], akkor az együtthatók csak a lokális termodinamikai változóktól $/n, g/$ függenek, egyébként függhetnének gradienseiktől, időderiváltaktól, és a sebességmezőtől is. Magasabbrendű tagok figyelembevételére ld. [10]-et /ahol a tárgyalás nem relativisztikus/.

Meghatározva a /III.21/-beli együtthatókat valamilyen ter-

modinamikai vagy statisztikus fizikai módszerrel, a /III.5-6/ egyenletrendszer megint zárttá vált, tehát a rendszer jellemző adatainak tekintett n és ρ mennyiségek evolúciója, valamint a rendszer expanziója nyomon követhető a maximális kompressziótól a feltörésig. A feltörési folyamatra még visszatérünk. A probléma csak az, hogy, mint előre jeleztük, a hidrodinamika alkalmazhatósága esetünkben, legalábbis itt ismertetett formájában, kétes. Nevezetesen:

- 1/ /III.15/ szerint feltettük, hogy transzporttagok nélkül a lokális állapot izotróp, ami egyenértékű a longitudinális momentum lebomlásával, mely utóbbiról viszont tudjuk, hogy relativisztikus ütközőenergiákon kétes.
- 2/ Feltettük, hogy a lokális állapot jellemzésére az n és ρ mennyiségek elegendők, ami termikus egyensúlyban igaz, de a teljes termalizáció esetünkben kétes.
- 3/ Feltettük, hogy a lokális állapotok sűrűségjellegű paraméterekkel /tehát gradiensek, stb./ nélkül jellemezhetők, ami a lokális egyensúly elve [1], [9], de a gradiensek nagyok és az inhomogenitások mérete a szabad úthossz rendjében van.
- 4/ Feltettük, hogy a lokális állapot átlagadatokkal jellemezhető, de a homogénnek tekintett cellákban a részecskeszám kicsiny.

E problémák bármelyike egyedül is elegendő lehet a hidro+termodinamika alkalmazhatatlanságához, bár hangsúlyozandó, hogy az alkalmazás a jelen energiákon általában még jó eredményekhez vezet. Mindenesetre megmutatható, hogy a fenti 4 probléma bármelyike által jelzett irányba kiterjeszhető a hidro+termodinamika formalizmusa, amit a továbbiakban majd látunk is.

IV. A RELATIVISZTIKUS BOLTZMANN-EGYENLET

Kellően híg gázokra, mikor a részecskék ütközésének folyamata az ütközések közti τ_{ij} időnél sokkal kevesebbet igényel, és a hosszú hatótávolságú kölcsönhatások elhanyagolhatóak, a rendszer lokális állapota leírható egyetlen $f(p_i, x^k)$ impulzuseloszlással, melyet a Boltzmann-egyenlet

$$\left[p^r \frac{\partial}{\partial x^r} - \Gamma_{rs}^t p^r p^s \frac{\partial}{\partial p^t} \right] f(p_i, x^k) = C(f) \quad (\text{IV.1})$$

ahol a Γ_{rs}^t Christoffel-szimbólumra nézve ld. [6], a tag azért lép fel, mert a használt koordinátarendszer nem feltétlenül tehetetlenségi, pl. az együttmozgó rendszer a folyadék gyorsulása miatt nem az. $C(f)$ az ütközési integrál funkcionálja, melynek explicit alakját itt nem használjuk, függ a hatáskeresztmetszetektől és a részecske által követett kvantumstatisztikától [11].

$C(f)$ gyökhelyei /itt f_0 -lal jelölve/ a kvantumstatisztikától függenek, és megmaradási tételek okán egyetlen p_i -ben lineáris kombinációtól függhetnek [8]. Most elegendő Boltzmann-gázra szorítkozni, mikor

$$f_0(p_i) = D \exp\left[-(\alpha + \beta^r p_r)\right] \quad (\text{IV.2})$$

D a kvantumszámoktól és elemi állandóktól függ, és az esetleges x^i -függés az α és β^i együtthatókban lehet.

Tegyük fel, hogy f valamilyen értelemben valamely f_0 közelében van. Ekkor számos esetben alkalmazható az ún. relaxációs idő közelítés:

$$C(f) \simeq -\frac{1}{\tau} (f - f_0)(u_r p^r) \quad (\text{IV.3})$$

ahol a τ relaxációs idő τ_{ij} nagyságrendjében van, és f_0 adataitól függhet. A közelítés részleges elemzésétől eltekinünk.

Mármost f -hez többféle közelében lévő f_0 -t is rendelhetnénk; itt most az Eckart-féle illesztési feltételeket [8] használjuk, mely szerint f_0 és f ugyanazon n^i -t és ξ -t kell adjon. Innen

$$\beta^i = \beta u^i \quad (\text{IV.4})$$

és

$$\alpha = \mu/T \quad (\text{IV.5})$$

$$\beta = 1/T$$

a termodinamikai paraméterekkel kifejezve. Láthatjuk, hogy f_0 -t két termodinamikai paraméter és u^i meghatározza. Annak feltétele tehát, hogy vizsgált rendszerünk állapota ezen lokális mennyiségekkel jellemezhető legyen, $f=f_0$.

Mármost belátható, hogy f_0 általában nem megoldása /IV.1/-nek. Nevezetesen, /IV.2-5/-öt /IV.1/-be helyettesítve kapjuk, hogy az egyenlet csak akkor elégül ki, ha μ és T független x^i -től, és u^i tehetetlenségi mozgáshoz tartozik. /Ehhez az adódó tagok különböző p_i függéseit kell szétválogatni./ A lokális paraméterekkel jellemezhető egyetlen állapot tehát a triviális globális egyensúly.

Ez persze nem jelenti azt, hogy a lokális egyensúly hipotézise ne volna használható; /IV.1/ részletes tanulmányozása mutatja, hogy vannak olyan állapotok, mikor a transzporttagok elsőrendűen kicsinyek, az entrópiasűrűség pedig az egyensúlytól csak másodrendben tér el [8]. Mindazonáltal esetünkben a gradiensek nem kicsinyek, tehát a lokális egyensúly elve csak óvatossággal alkalmazható.

V. PSZEUDOTHERMODINAMIKA

Tegyük fel, hogy csak a III. fejezet 2/ problémája áll fenn. Ekkor megmutatható, hogy a termikus egyensúlytól való eltérés miatt új paraméterek is szükségesek a lokális állapot leírásához, de ezek besorolhatóak a termodinamikai extenzívek közé. A módszer részletes leírására itt nincs tér, de az megtalálható [12]-ben és [13]-ban.

Az eljárás elve a következő. Tegyük fel, hogy a nemtermikus állapotunk még izotróp és közel van f_0 -hoz. Akkor egy alkalmas $\{\varphi_\alpha(p_i)\}$ bázison kifejezhető:

$$f = f_0 [1 + a^\alpha(x^i) \varphi_\alpha(p_k)] \quad (V.1)$$

Ezt /IV.1/-be írva az a^α extra paraméterek evolúcióját a Boltzmann-egyenlet meghatározná. Most csonkítsuk le a $\{\varphi_\alpha(p)\}$ bázist végesre, és vezessük be f -nek a bázis maradék tagjaival azonos számú momentumát. /Hogy ezeket a gyakorlatban hogyan kell bevezetni, azzal most itt nem foglalkozunk./ E momentumokra a Boltzmann-egyenletből valamiféle evolúciós egyenletek adódnak, amelyek alakja a nemrelativisztikus esetben mindig, a relativisztikus esetben pedig általában az egyensúlyi n és g paraméterek megfelelő függvényeivel való szorzás után kapott z^r mennyiségekre az alábbivá tehető:

$$\dot{z}^\Gamma + z^\Gamma u^\Gamma_{;r} = \xi^\Gamma \quad (V.2)$$

ahol a nagy görög felső index az extra momentumokat számozza. A ξ^Γ forrástág a konstrukció módja miatt az n, ϱ, z^Γ sűrűségek-től és a sebességmező deriváltjaitól függhet.

Az /V.2/ alak elérését csak a nemrelativisztikus Boltzmann-egyenletből kiindulva demonstráljuk. Annak alakja:

$$(\partial_t + m^{-1}(\underline{p}\nabla)) f(\underline{p}, \underline{x}, t) = -(f-f_0)/\tau \quad (V.3)$$

Tekintsük az alábbi momentumot:

$$b^{(2s)} = \int f(\underline{p}-\underline{\bar{p}})^{2s} d^3p \quad (V.4)$$

ahol $\underline{\bar{p}}$ az átlagimpulzus. Az egyensúlyi $b_{eq}^{(2s)}$ értéket a Boltzmann-eloszlásból számíthatjuk:

$$b_{eq}^{(2s)} = n(4m\varrho/3n)^s s! (2s-1)!! / (2s)!! \quad (V.5)$$

/V.3/-at $(\underline{p}-\underline{\bar{p}})^{2s}$ -nel szorozva és integrálva kapjuk

$$\begin{aligned} (\partial_t + (\underline{v}\nabla)) b^{(2s)} + (1+2s/3)(\nabla\underline{v}) b^{(2s)} = \\ = -\frac{1}{\tau} (b^{(2s)} - b_{eq}^{(2s)}) \end{aligned} \quad (V.6)$$

feltéve, hogy f csak $\underline{p}-\underline{\bar{p}}$ abszolút értékétől függ, ami a feltételezett izotrópia. Mármost n az alábbi evolúciós egyenletet teljesíti:

$$(\partial_t + (\underline{v}\nabla)) n = -n(\nabla\underline{v}) \quad (V.7)$$

Ezt összevetve /V.6/-tal látható, hogy a

$$c^{(2s)} = n^{-2s/3} b^{(2s)} \quad (V.8)$$

mennyiség /V.2/ típusú egyenletet teljesít. Célszerű ebből le választani egyensúlyi értékét, és akkor

$$z = c^{(2s)} - c_{eq}^{(2s)} \quad (V.9)$$

Mármost a rendszer entrópiájának sűrűsége a Boltzmann-féle H-függvény negatívja, mivel annak van a megfelelő pozitív produkciós tulajdonsága [11]. Esetünkben

$$H = - \int f \ln f d^3p \quad (V.10)$$

relativisztikus esetre ld. [8] vagy [12]. Mivel az /V.1/-ben szereplő a paraméterek egyértelmű összefüggésben vannak a z^Γ momentumokkal, és az integrálás után $H=H(n, \varrho, a^\Gamma)$, kapjuk:

$$s = s(n, \varrho, z^{\Gamma}) \quad (V.11)$$

azaz kaptunk egy entrópiasűrűséget n, ϱ és valamilyen extra sűrűségek függvényében, épp úgy, mint amikor a rendszer termodinamikai állapotát kettőnél több sűrűség jellemzi. Most újra kiszámíthatjuk az entrópiaprodukciónak evolúciós egyenletei rendelkezésre állnak; mikor z^{Γ} evolúciós egyenlete /V.2/ alakú, a /III.12/-nél követett módon eljárva

$$0 \leq s^{\Gamma}_{;r} = [s - s_{\varrho}(\varrho + P) - s_n n - s_{z^{\Gamma}} z^{\Gamma}] u^{\Gamma}_{;r} + s_{z^{\Gamma}} \xi^{\Gamma} \quad (V.12)$$

Ismét $u^{\Gamma}_{;r}$ előjele indefinit, tehát a zárójeles tagnak el kell tűnnie, tehát P a /III.13/ új paraméterek megjelenésére általánosított alakjának megfelelő termodinamikai nyomás.

Látszólag valóban a termodinamika formalizmusán belül maradtunk; megmutatható [13], hogy a z^{Γ} -k térfogati integráljai extenzívek szerepét játsszák, és az S entrópia ezek homogén lineáris függvénye. Ugyanakkor a régi és új extenzív paraméterek szerepe nem teljesen egyenrangú. Nevezetesen egyensúlyban az igazi extenzívek értéke tetszőleges, míg a Z^{Γ} -k eltűnnek, továbbá /V.12/ mutatja, hogy a Z^{Γ} -k produkciójához irreverzibilitás járul. Részletesebb vizsgálat azt mutatja, hogy a leírás nem a termodinamika posztulátumait teljesíti, pl. azok Callen-féle formájában [1], [14], hanem egy azokhoz hasonló posztulátumrendszert:

Def. 1: Extenzívek azok, melyek a rendszer méretével arányosak, mérlegegyenleteket teljesítenek, és jellemzik a rendszer egyensúlyi állapotait; jelölésük X^{Γ} .

Def. 2: Pszeudoextenzívek azok, melyek a rendszer méretével arányosak, mérlegegyenleteket teljesítenek, és egyensúlyi értékük 0; jelölésük X^{Γ} .

Pos. 1: Makroszkópikus /pszeudotermodinamikai/ rendszereknek vannak olyan állapotai, melyek makroszkópiusan teljesen jellemezhetőek egy véges /=legfeljebb megszámlálhatóan végtelen/ $\{X^{\Gamma}, X^{\Gamma}\}$ halmazzal.

Pos. 2: Bármely pszeudotermodinamikai rendszerhez van P eka-entrópia, mely X^{Γ} és X^{Γ} homogén lineáris függvénye.

Pos. 3: A

$$\lim_{X^\Gamma \rightarrow 0} P(X^I, X^\Gamma) = P_0(X^I) \quad (V.13)$$

határérték létezik.

Pos. 4: P_0 differenciálható, az energiával monoton nő, és

$$\lim_{\partial P_0 / \partial E \rightarrow \infty} P_0 = 0 \quad (V.14)$$

Pos. 5:

$$\lim_{E \rightarrow \infty} \partial P / \partial X^\Gamma = 0 \quad (V.15)$$

Pos. 6: P -nek az X^Γ -k szerinti második deriváltjainak mátrixa negatív definit.

/A részletekre ld. [12]./

Mivel e posztulátumrendszernek a Callen-féléhez való hasonlósága szembeötlő, az e fejezetben ismerttetett leírást pszeudotermodinamikának nevezzük; ez a termodinamikai formalizmus egy kiterjesztése olyan irányba, mikor a termikus egyensúlyt a rendszer még nem érte el, vagy az a neminerciális folyás miatt kezd felborulni. A formalizmus szerkezete teljesen termodinamikai, egyenletei a hidrodinamikával továbbra is kompatibilisak, és használata csak egyszerű mennyiségi többletet jelent a változóknban.

Természetesen a véges X^Γ halmaz csak akkor jó közelítés, ha extra információ áll rendelkezésre arról pl. hogy a rendszer a termikus egyensúlytól merrefelé tér el. Ilyen információ számos esetben elérhető, mert pl. ismerjük a kezdeti, nemtermikus eloszlást. Megjegyzendő, hogy e formalizmus a sztatikus rendszerek egyensúlyhoz tartásának tanulmányozásánál használatos momentum módszerek /ld. pl. [15]/ általánosítása folyás esetére.

VI. KITERJESZTETT TERMODINAMIKA

Most tegyük fel, hogy a III. fejezet végén említett problémák közül csak 3/ áll fenn, azaz az anyagban a jellemző mennyiségek gradiensei nagyok ahhoz, hogy a lokális egyensúly jó

közelítés lehessen. Ilyen esetekben az entrópiában meg kell jelenjen valamilyen térbeli nemegyensúlyra jellemző tag, pl. az ún. hullámközelítésben [16]

$$S = S_0 - M_{IK} j^I j^K \quad (\text{VI.1})$$

ahol j^I az extenzív áramsűrűség, és M_{IK} az ún. kinetikus mátrix.

Mármost eljárhatunk a pszeudotermodinamika módjára is, csak extra momentumok helyett az eredetiek $/n$ és $g/$ gradiensait bevezetve új változókként; akkor s azoktól is fog függeni. Ezt sugallja az, hogy inhomogén /nemegyensúlyi/ rendszer entrópiája kiszámítható, és természetesen az átlagsűrűségek mellett az inhomogenitásoktól is függ. Legegyszerűbb esetként tekintsünk egy V térfogatot x^I átlagsűrűségekkel, úgy, hogy a térfogat egyik felében a sűrűségek értéke $x^I + \delta^I$, a másikban értelemszerűen $x^I - \delta^I$. Akkor

$$\begin{aligned} S = S_1 + S_2 &= \frac{1}{2} V (s(x^I + \delta^I) + s(x^I - \delta^I)) = \\ &= S_0 - \frac{1}{2} V g_{IK}(x^L) \delta^I \delta^K + \theta(\delta^3) \end{aligned} \quad (\text{VI.2})$$

ahol

$$g_{IK} = - \partial^2 s / \partial x^I \partial x^K \quad (\text{VI.3})$$

[1]. Ha tehát ismerjük az inhomogenitás elrendeződését, a rendszer entrópiája kiszámítható a lokális egyensúly hipotézisének használata nélkül is. Mindenesetre az ilyen formalizmusok hidrodinamikával való kompatibilitása nincs még megvizsgálva, és kidolgozottságuk nem vethető össze a lokális egyensúlyt feltételező ún. nemegyensúlyi termodinamikáéval.

VII. FLUKTUÁCIÓK

Tegyük fel, hogy a III. fejezet végén jelzett problémákból csak 4/ áll fenn: a vizsgált résztérfogatok túl kicsinyek. Ekkor nagy fluktuációkat várunk, de a fluktuációk kiszámítására szolgáló képletekben nincs általános megegyezés a kvadratikus tagokon túl. Ezért e képletek kiterjesztendőek.

A kvadratikus közelítésben

$$\langle \delta x^I \delta x^K \rangle = \frac{1}{\bar{V}} g^{IK} \quad (\text{VII.1})$$

ahol \bar{V} a vizsgált részrendszer térfogata, és g^{IK} a /VI.3/-ban definiált mátrix inverze. E közelítés levezetéséhez csak az veendő figyelembe, hogy S az állapot valószínűségének logaritmus, tehát az egész rendszerre $p \sim e^S$, és a teljes S a VI. fejezetben mutatott módon számítandó az egész rendszerre, csak most a két térfogat $V - \bar{V}$ és \bar{V} [17]. A kérdés az, mi a képletben elhanyagolt, $1/\bar{V}$ -ben magasabbrendű tagok alakja.

A válaszhoz először figyeljük meg, hogy S kvadratikus kifejtése a fluktuációk valószínűségeloszlására többváltozós korrelált Gauss-eloszlást ad [17], melynek átlaga \bar{x}^I , inverz szórás mátrixa pedig $\bar{V} g_{IK}(\bar{x}^I)$. Mármost ezen eloszlás a Dirac-delta kezdőfeltételhez tartozó megoldása a következő formálisan evolúciós alakú egyenletnek:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} p = g^{RS}(\bar{x}^I) \frac{\partial^2}{\partial x^R \partial x^S} p \quad (\text{VII.2})$$

ahol

$$\tau = 1/\bar{V} \quad (\text{VII.3})$$

Mármost ezen egyenletben nyilván nem kielégítő az, hogy g_{IK} az átlagsűrűségeknél vétetik; nagy fluktuációk esetén onnan távol kerülünk, és nem képzelhető el, hogy a közbülső állapotok hatása ne érződjék. Másrészt, g_{IK} -t x^I -nél véve az

$$\int p x^I d^N x = \bar{x}^I \quad (\text{VII.4})$$

megmaradási tételekből adódó feltétel sérül.

Megmutatható, hogy az egyetlen τ -ban elsőrendű, termodinamikai változók szerinti deriváltakban másodrendű, lineáris és /VII.4/-et őrző egyenlet az alábbi:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} p = (g^{RS} p)_{,RS} \quad (\text{VII.5})$$

[18]. Ezen egyenlet relevanciáját alátámasztja az alábbi tény. A termodinamikai állapottérben a távolságokat a fluktuációk átlagos nagyságával mint skálával mérve az infinitezimális távolságnégyzetre egységnyi térfogatban, /VII.1/ miatt

$$ds^2 = g_{IK} dx^I dx^K \quad (\text{VII.6})$$

tehát g_{IK} metrikus tenzor szerepét játssza. Az így definiált távolságnak statisztikus értelme van [19]; egyébként g_{IK} -t metrikus tenzorként, eme statisztikus értelmezés nélkül, Ruppeiner javasolta [20]. Mármost ennek megfelelően az állapotteret Riemann-térnek tekintve /VII.5/ kovariáns formába írható, és így az x^I extenzív sűrűségek helyett tetszőleges változóban a fluktuációs eloszlás meghatározható. /VII.5/ alakja tehát kompatibilis a termodinamikai állapotter Riemann-szerkezetével.

Ezek után τ növelésével kis rendszerek fluktuációs eloszlásai is meghatározhatóak. Ezzel most részleteiben nem foglalkozunk, de /VII.5/ segítségével meghatározzuk a /VII.1/-ben elhagyott \bar{V}^{-2} tagot. Kapjuk [21]:

$$\langle \delta x^I \delta x^K \rangle = \tau g^{IK} + \frac{1}{2} \tau^2 g^{IK}{}_{,RS} g^{RS} + o(\tau^3) \quad (\text{VII.7})$$

A második tag inkompatibilis a Gauss-eloszlással, ezért azt jelzi, hogy a vizsgált részrendszer nem áll sok korrelálatlan alrendszerből. Ezért azon \bar{V} , ahol a második tag már az elsővel összemérhető, a rendszer korrelációs térfogata.

Ideális Boltzmann-gáznak egyetlen korrelációs térfogata van, a fajtérfogat nagyságrendjében [21]. Van der Waals gáznak van egy másik is, a részecskékhez rendelt merev taszító-gömbök nagyságrendjében [22]. Megfordítva, bizonyítható, hogy egy második, nagyjából sűrűség- és hőmérsékletfüggetlen korrelációs térfogat léte az állapotegyenletben első közelítésben van der Waals-korrekcióra vezet, aminek nukleon-deuteron keverékeknél komoly szerepe lehet [23].

VIII. ANIZOTRÓPIA

Maradt a III. fejezet végén jelzett 1/ probléma, hogy nagyenergiájú ütközésekben a differenciális hatáskeresztmetszetek előrecsúcsosodása miatt az impulzuseloszlás anizotrópiája várható. Ez kétségtelenül igaz, de ilyen anizotróp impulzuseloszlású állapotok kontinuummechanikai tárgyalása le-

hetséges, sőt pl. a Walecka-féle átlagmezőelméletbe is beépíthető [24], [25]. Ez kivezet a hidrodinamika keretéből, mert p^{ik} még transzporttagok nélkül is anizotróp.

Az anizotróp állapotok kontinuummechanikájával a termodinamika kompatibilissá tehető, ha bevezetünk az anizotrópiát jellemző extenzíveket, pl. az impulzusdiszperziót. Az erre vonatkozó munkálatok azonban még publikálatlanok [26]. A kontinuummechanikai egyenletek közül p^{ik} kifejezése az izotróp esetnél nem lényegesen komplikáltabb szerkezetű, és kezelhető marad, ha feltesszük, hogy az impulzuseloszlás azonos valószínűségű felületei ellipszoidok [24], [25].

IX. KUMULATIV ÉS EGYÉB PROBLÉMÁK

Láttuk tehát, hogy a termo+hidrodinamika formalizmusa a III. fejezetben jelzett 4 probléma bármelyike által jelzett irányba kiterjeszthető. A nehézionütközés komprimált sűrű és forró állapotában mind a 4 jelentkezik. A 4 kiterjesztés egyidejű alkalmazása technikailag minden bizonnyal igen bonyolult lenne, de az, hogy 2,1 GeV/nukleon ütközőenergiáig általában még a standard formalizmus is kielégítő, arra mutat, hogy egyelőre nem kell aggódnunk kumulatív nehézségek fellépése miatt.

További problémát okozhat, hogy a belső erők hatótávolsága már összemérhető a rendszernek a vizsgálat közben tekintett részeivel. Ilyenkor ezen erőket már térfogati erőknek kellene tekintenünk, ami ellentétes mind a hidrodinamika, mind a termodinamika formalizmusával.

Szükség esetén a hidrodinamika egyenleteibe mindig bevezethetőek külső erők; a belsőket ilyeneknek tekinthetjük, ha önkonzisztens módon határozzuk meg őket. A termodinamikával a probléma komolyabb, mivel egyik részrendszerből a másikba ható térfogati erők az entrópia additivitását, és így homogén linearitását veszélyeztetik, ami a termodinamikai formalizmusban központi jelentőségű [1]. Ha az ilyen erők csak az energiát módosítják, a belső energia termodinamikai definíciójának kiválasztásakor [1] levonhatóak. A Walecka-féle átlag-

mezőelméletben [27] e probléma formálisan nem lép fel, mivel ott a nukleonok nem egymással, hanem az /általuk keltett/ egyéb külső mezőkkel hatnak kölcsön. Ezért nem kizárt, hogy ilyen alapon még hatótávolságon belül is működő termodinamika építhető fel.

X. A FELTÖRÉS

Az előző fejezetekben megmutattuk, hogy relativisztikus hidro+termodinamikával, vagy e leírások /legalább részben már létező/ kiterjesztéseivel eljuthatunk megbízható módon a maximális kompresszió állapotától a kontinuum feltöréséig. A feltörési folyamat /mely során a kontinuum szabad részecskékre esik szét, melyek valamilyen módon öröklék termikus sebességüket is/ azonban szintén leírandó, és nem triviális.

Elvben a IV. fejezetben tárgyalt relativisztikus Boltzmann-egyenlet kínálja a megoldást. Láttuk, hogy f nem maradhat f_0 közelében, ha a folyadék mozgása nem inerciális. Mivel a tágulás gyorsuló, fellép egy f -et f_0 -tól távolító tag. Ugyanakkor az ütközési integrál f_0 felé húz, a /IV.3/ relaxációs közelítésben világosan látható módon. Mivel tágulás közben τ nő, valamikor e két tag összemérhető lesz, és f elkezd f_0 -tól távolodni. Mikor már τ nagyon nagy, szabad részecskéink vannak; a végállapot $f(p_i)$ a folyamat végigkövetésével számítható volna.

A gyakorlatban általában elegendő a feltörés folyamatát egyetlen alkalmasan megválasztott pillanatba összehúzni [28] és ott a részecskék termikus és folyási sebességeit összegezni; mindazonáltal néha szükség lehet a folyamat nyomon követésére, pl. folytonos párolgást [29] feltéve.

XI. KONKLÚZIÓ

A fentiekben érveket soroltunk fel arra, hogy a termo+hidrodinamika formalizmusa vagy elegendő, vagy kiterjeszhető ahhoz, hogy tárgyalni tudja nehézionütközési folyamatban

a maximális kompressziótól a feltörésig vezető evolúciós folyamatot. A kiterjesztett formalizmus tényleges alkalmazására a tapasztalat és az elméleti jóslatok összevetése szerint 2,1 GeV/nukleon ütközőenergiáig még nem is volt szükség.

Nagyobb energiákon a III. fejezet végén jelzett problémák komoly formában várhatóak. Legalább az anizotrópia figyelembevételére már vannak példák, egyedi magokkal, első közelítésben független, második közelítésben külső súrlódási típusú erőkkkel kölcsönható kétfolyadék-modellben [3], [5], vagy az anizotróp egyetlen kontinuum [24], [25] segítségével. Elvileg mindenképpen a második kép választandó, amittől természetesen egy megfelelően kidolgozott kétfolyadék-modell is lehet jó közelítés. Amire figyelemmel kell lennünk, az az, hogy a rendszer térben nem választható ketté, impulzustérbeli két része közt a kölcsönhatás erős /mindenben, kivéve a longitudinális impulzus lebomlását/, ezért T^{ik} sem vágható egyértelműen ketté, és így két mozgásegyenlet feltevésmentes levezetése nem lehetséges. Hasonlóan, problémák lesznek az entrópia kettéválasztásában. /Természetesen, mikor a két vagy több folyadék térben többé-kevésbé szétválak, mint pl. termalizáció előtt [2], a többfolyadékkép elvileg is megnyugtató./

Egyetlen probléma maradt, a fázisátmenet, mely esetünkben csaknem biztosan nukleon-kvark fázisátmenet. Magának a fázisátmenetnek a figyelembevételre technikai kérdés /a rehadronizációs folyamaté nem/, így a kérdés a Függelékre marad.

Az előadásban nem volt tér a tetszőleges koordinátarendszerben alkalmazható relativisztikus kinematikai formalizmus részleteire. Ezek megtalálhatóak pl. [30], [31]-ben.

FÜGGELÉK: NUKLEON \leftrightarrow KVARK FÁZISÁTMENET

Zárt rendszerben az entrópia az extenzívek rögzített értékei melletti maximumát veszi fel egyensúlyban [1]. Innen adódik, hogy az entrópia első deriváltjai /az extenzívek szerint, vagyis az intenzívek/ térben homogének [1]. Az extenzív sűrűségek homogenitása innen viszont csak akkor vezethető le, ha ξ_{IK} mindenütt pozitív definit; ha nem, az intenzívek külön-

böző sűrűségeknél is felvehetnek azonos értékeket, és ilyenkor az anyag ilyen különböző állapotú darabjai egyensúlyban vannak. Ez a fázisegyensúly; egyszerű rendszerekre 3 ilyen feltételünk van:

$$\begin{aligned} T_1 &= T_2 \\ P_1 &= P_2 \\ \mu_1 &= \mu_2 \end{aligned} \quad (\text{F.1})$$

Mivel ez 3 egyenlet a 4 $(n_1, n_2, \rho_1, \rho_2)$ mennyiségre, a fázisegyensúly egy vonal mentén teljesül. A rendszer véges ideig e vonalon mozog, és ott a sűrűségek

$$\rho = \frac{1}{n_2 - n_1} [(n_2 - n) \rho_1 + (n - n_1) \rho_2] \quad (\text{F.2})$$

módra képzett átlagok. Ezt T^{ik} -ba írva, és n^i -t az átlaggal azonosítva kapjuk újra a mozgásegyenleteket, n és ρ evolúciós egyenleteit; a hiányzó 3 egyenletet /F.1/ adja [31]. Ha a fázisok egyensúlya nem teljes /pl. túlhűlés/, /F.1/ megfelelő dinamikai egyenletekkel helyettesítendő [32].

A módszer lényege tehát az, hogy T^{ik} termodinamikai szerkezete az 1 és 2 fázisú tartományban különbözik, de kinematikai szerkezete azonos, a teljes folyamat közben megvannak az evolúciós egyenletek. Ezért az $n \rightarrow q$ fázisátmenet számítása egyértelmű feladat. De a $q \rightarrow n$ átmeneté nem, mivel ugyanazon kvarkkészlet különböző hadronokat is felépíthet. Ilyenkor a rehadronizációs folyamat külön, kémiai reakciók módjára, számítandó [33].

IRODALOM

- [1] Martinás Katalin előadása ugyanezen iskolán
- [2] I. Montvay és J. Zimányi, Nucl. Phys. A346, 490 /1979/
- [3] A. A. Amsden, A. S. Goldhaber, F. H. Harlow és J. R. Nix, Phys. Rev. C17, 2080 /1978/
- [4] A. A. Amsden, F. H. Harlow és J. R. Nix, Phys. Rev. C15, 2059 /1977/
- [5] Yu. B. Ivanov, I. N. Mishustin és L. M. Satarov, Nucl. Phys. A433, 713 /1985/
- [6] L. D. Landau és E. M. Lifsic, Elméleti fizika II. Tankönyv-Kiadó, 1976.

- [7] L. D. Landau és E. M. Lifsic, Elméleti fizika VI. Tankönyvkiadó, 1980.
- [8] J. Ehlers, Survey of General Relativity Theory, in: Relativity, Astrophysics and Cosmology, ed. W. Israel, D. Reidel, 1973
- [9] Fényes I., Modern fizikai kisenciklopédia. Gondolat, 1971.
- [10] H. Grad, Principles of the Kinetic Theory of Gases, in: Encyclopedia of Physics XII, ed. S. Flügge, Springer, 1958
- [11] L. D. Landau és E. M. Lifsic, Elméleti fizika X. Tankönyvkiadó, 1984.
- [12] B. Lukács, K. Martinás és T. Pacher, Astron. Nachr. 307, 171 /1986/
- [13] B. Lukács és K. Martinás, Annln. Phys. /nyomdában/
- [14] B. H. Callen, Thermodynamics. J. Wiley, N. Y. 1960
- [15] M. Krook és T. T. Wu, Phys. Rev. Lett. 36, 1107 /1976/
- [16] I. Gyarmati, J. Non-Eq. Thermodyn. 2, 233 /1977/
- [17] L. D. Landau és E. M. Lifsic, Elméleti fizika V. Tankönyvkiadó, 1981.
- [18] L. Diósi és B. Lukács, Phys. Rev. A31, 3415 /1985/
- [19] L. Diósi, G. Forgács, B. Lukács és H. L. Fritsch, Phys. Rev. A29, 3343 /1984/
- [20] G. Ruppeiner, Phys. Rev. A20, 1608 /1979/
- [21] L. Diósi és B. Lukács, Phys. Lett. 112A, 13 /1985/
- [22] L. Diósi és B. Lukács, J. Chem. Phys. 84, 5081 /1986/
- [23] H. W. Barz, T. S. Biró, B. Lukács and J. Zimányi, KFKI-1986-19
- [24] I. Lovas, Nucl. Phys. A367, 509 /1981/
- [25] I. Lovas, Gy. Wolf és N. L. Balazs, KFKI-1986-53
- [26] H. W. Barz, B. Kämpfer, B. Lukács, K. Martinás és Gy. Wolf, publikálatlan
- [27] J. D. Walecka, Phys. Lett. 59B, 109 /1975/
- [28] J. P. Bondorf, S. I. A. Garpman és J. Zimányi, Nucl. Phys. A296, 320 /1978/
- [29] N. L. Balazs, J. P. Bondorf, B. Lukács és J. Zimányi, Nucl. Phys. A415, 530 /1984/
- [30] B. Lukács, KFKI-1978-82
- [31] B. Lukács és B. Kämpfer, Acta Phys. Hung. 61, /nyomdában/
- [32] L. P. Csernai és B. Lukács, Phys. Lett. 132B, 295 /1983/
- [33] T. S. Biró és J. Zimányi, Nucl. Phys. A395, 525 /1983/

Az ATOMKI KÖZLEMÉNYEK évenként több számban jelenik meg. Tudományos intézeteknek cserepéldányképpen vagy kérésükre díjtalanul megküldjük, kötelezettség nélkül. Magánszemélyeknek esetenkénti kérésére 1-1 számot vagy különlenyomatot szívesen küldünk. Ilyen irán-nyu kéréseket az intézet könyvtárszolgálatához kell irányítani. /ATOMKI, 4001 Debrecen, Postafiók: 51./

Szerkesztő Bizottság: Szalay Sándor elnök, Lovas Rezső titkár, Berényi Dénes, Csikai Gyula, Gyarmati Borbála, Medveczky László.

Kiadja a
Magyar Tudományos Akadémia
Atommagkutató Intézete

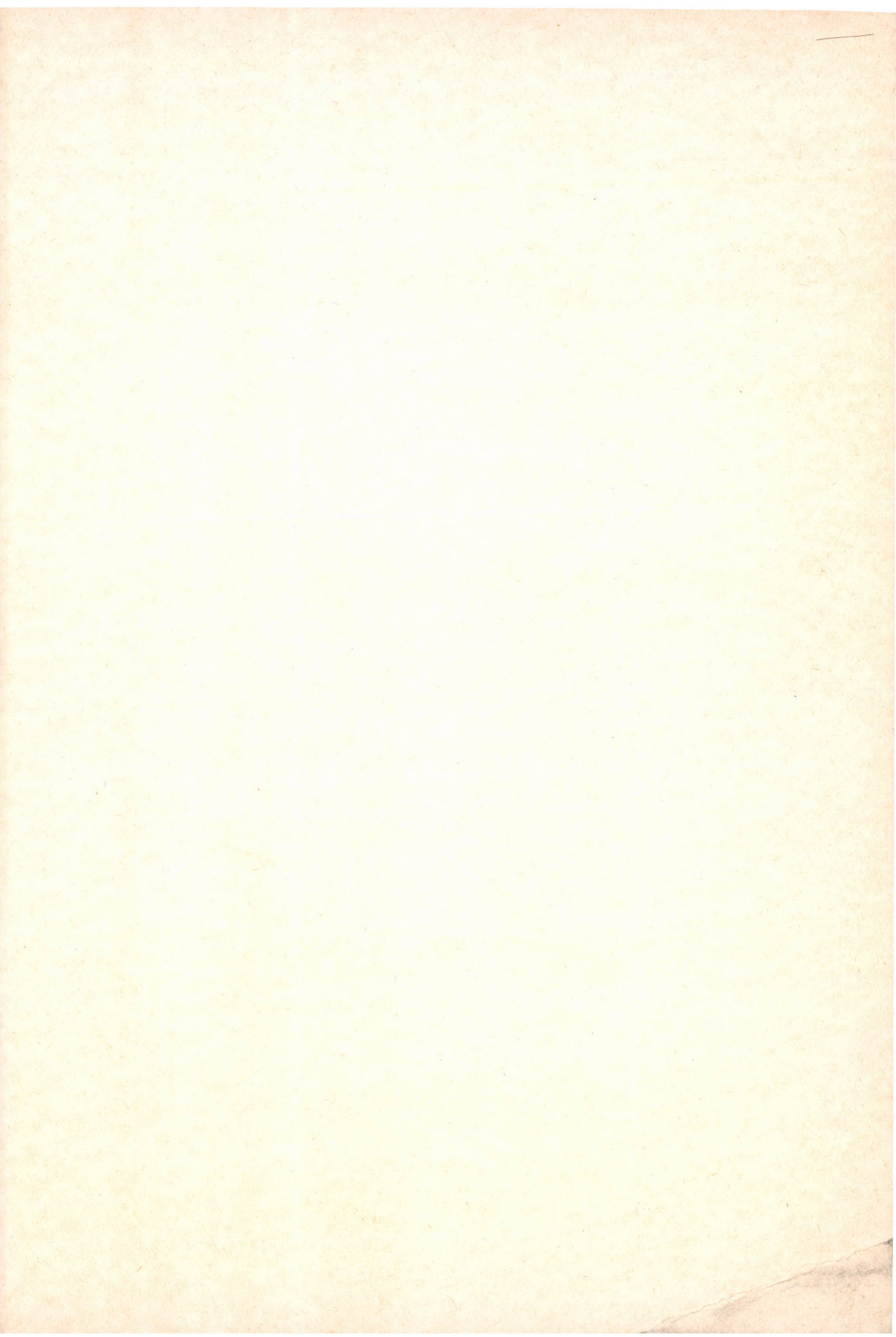
A kiadásért és szerkesztésért felelős
Dr. Berényi Dénes, az intézet igazgatója

Készült a Kinizsi Szakszövetkezet
Nyomdájában

Törzsszám: 65.1771

Debrecen, 1986. december

KÖNYVTÁR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA



ATOMKI KÖZLEMÉNYEK

Volume 28/ Number 4

CONTENTS

T. Kibédi, A.Z. Kiss, E. Somorjai, I. Uray: Airborn Activity and deposition in Debrecen caused by the Chernobyl accidental release	175
Sailer K.: Relativisztikus kvantummechanika	181
Lukács B.: Relativisztikus kontinuumfizika nehéz ion ütközések leírása	215