ATO NEK ATO NKI KÖZLEMÉNYEK

22. kötet / 1. szám

310565

,07

ESCA SEMINAR OF SOCIALIST COUNTRIES



MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1980



22. kötet /1. szám

539

HU ISSN 0004-7155

ESCA SEMINAR OF SOCIALIST COUNTRIES

15-18 April, 1980

Debrecen

Hungary

ABSTRACTS



The Seminar is organized by the Institute of Nuclear Research of the Hung. Acad. of Sciences and supported by Roland Eötvös Physical Society, Hungary.

The matter is an offset reproduction of the authors' manuscripts. Collected by I. Kádár, Inst. of Nucl. Res. of the Hung. Acad. of Sci. H 4001, P.O. Box 51.

CONTENTS

0	P	E	Ν	I	N	G

D.	Berényi: Trends and goals of electron spectroscopy world-wide and in ATOMKI	5
EXI	PERIMENTAL TECHNIQUES	
J.	Kaczmarczyk, P. Wierzbowski: The cylindrical mirror analyser with step-change of radius	7
J.	Kaczmarczyk, L. Szczepinski: The properties of conical exponential mirror analyser	9
J.	Kaczmarczyk: The effect of elliptical deformations of cylinders on electron-optical parameters of CMA	11
J.	Kaczmarczyk, S. Pytkowski: The effect of conical deformations of cylinders on electron-optical parameters of CMA	13
Д.	Варга, Я. Вег: Новый электростатический анализатор для измерения энергетического и углового рас- пределения электронов	15
S.	Mróz: Self-made LEED-AES metallic camera and its application to the investigation of sulphur segregation to (110) nickel face	17
I.	<i>Cserny</i> , <i>D. Varga:</i> Ion sputtering apparatus for XPS applications -	19
L.	Kövér, D. Varga and Gy. Mórik: New X-ray source of ATOMKI ESA-11 spectrometer	20
ME	THODICAL PROBLEMS	
V	I. Nefedov, V.G. Yarzhemsky: Photoionization cross section and relative intensities in photoelectron HeI, HeII, Y Mζ and Zr Mζ	21
A.	Kövér, S. Ricz and B. Paripás: Efficiency calibration of a cylindrical mirror electron spectrometer	23

3

Page

J.	Végh, Á. Kövér, I. Cserny and I. Kádár: Data acquisition and evaluation software at ATOMKI electron spectrometer	2 5
APF	PLICATIONS	
Η.	J. Müssig, B. Adolphi: On the initial interaction of oxygen with the (100) stainless steel surface by AES and LEED	27
Ι.	Kádár, L. Kövér and I. Cserny: XPS measurement of oxide layers on stainless steel surfaces	29
Ζ.	Bastl, P. Mikusik: Photoemission studies of adsorbates on Mo (110)	31
Α.	Stoch, J. Stoch: An XPS study of Si-Ti-O system	33

Page

TRENDS AND GOALS OF ELECTRON SPECTROSCOPY WORLD-WIDE AND IN ATOMKI

D, BERÉNYI

Institute of Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen

1. Our way to ESCA-XPS in ATOMKI

In ATOMKI we have rather old traditions and results in magnetic beta-ray spectroscopy. About 6-8 years ago we started the work with the development of electrostatic electron spectrometers. At the same time, the field of basic interest of our group was changed step by step from studying some phenomena (electron capture, internal bremsstrahlung, internal conversion etc.) at radioactive decays to research inner shell ionization processes and in general, ion-atom collisions using the beams of the accelerators [1,2]. In the latter investigations X-ray detectors were used first but our main interest is to use electrostatic electron spectrometers at the accelerators.

In the course of the above investigations five electrostatic electron spectrometers have been constructed and are under construction in ATOMKI respectively. These instrumental techniques were suitable to carry out ESCA-XPS studies as well and we have been conducting such research first of all in collaboration with other institutions and enterprises (e.g. [3]).

During all of these studies a number of experiences were obtained in connection with design of electrostatic spectrometers and X-ray tubes, the magnetic shielding of them, the calibration of these spectrometers, the sample preparation and cleaning of their surfaces in XPS studies, the evaluation of XP spectra etc.

2. World-wide trends in the application of electron spectroscopy

Nowadays the photoelectron-spectroscopy (XPS,UPS) seems to be a mature method in the study of materials. In the field of surface analysis e.g. it is one of the most important methods.

The development was so stormy in the last years, that one cannot see even reviews on the whole field but only on special problems, sub-fields of the whole field of photoelectron spectroscopy.

As main trend can be regarded here the complex application of different methods e.g. UPS, XPS, AES, SIMS, LEED etc.

3. How to go further in our institute

We are starting now a basic program performed partly in this institute, partly in Dubna on heavy ion collisions with atoms measuring the electron spectra from the processes. A unique electrostatic spectrometer for this aim is under construction now in this Institute.

In parallel, however, we continue the research and development in the XPS field, first of all in collaboration with industrial enterprises on the basis of contracts.

References

[1]	D.	Berényi,	Atomki	Közl.,	18	(1976)) 113
-----	----	----------	--------	--------	----	--------	-------

[2] D. Berényi, Atomki Közl., 19 (1977) 143

[3] L. Kövér, Cs. Ujhelyi, D. Berényi, D. Varga, I. Kádár and A. Kövér, J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 14 (1978) 201

THE CYLINDRICAL MIRROR ANALYSER WITH STEP-CHANGE OF RADIUS

J. KACZMARCZYK, P. WIERZBOWSKI

Institute of Electron Technology, Technical University of Warsaw Koszykowa 75, 00-662 Warsaw, Poland

Among many types of electron/ion energy analysers the cylindrical mirror analyser (CMA) - schematically shown in Fig.1 - is most widely used. Its main advantages are high transmission ($T \approx 10\%$) and relatively high resolution ($R \leq 0,5\%$). From





the analysis of CMA operation it follows that further improvement of its properties is possible through increasing its order of focusing. In the present paper the method for improving the CMA-i.e. for increasing the number (from 3 to 5) of its free parameters is proposed. This is achieved by the use of the inner cylinder with step-change of radius [1, 2].

In the CMA with step-changing radius (Fig.2) the potential distribution in the analysis region is given - as in conventional CMA - by the following formula:

$$\phi = \phi_{a} \left[1 - \frac{1}{k} \ln r/a \right], \qquad (1)$$

$$k = \phi_0 / U \ln c/a$$
 (2)

The distance between the source and the image is: $L = (n_{a} + Ibn_{b} + I) a ctg \Theta, \qquad (3)$

where

 $n_{a} = 1 - r_{a}/a$, (4)

$$n_{b} = 1 - r_{f}/b$$
, (5)

$$Y = \frac{K}{\sqrt{-2}}, \qquad (6)$$

$$X = 2K \exp(K^2) \left[Erf(K) + Erf(\sqrt{K^2 - \ln b/a}) \right].$$
 (7)

$$K = \sqrt{k} \sin \theta , (\theta = \theta_0 - \Delta \theta , \Delta \theta \leq \infty) .$$
 (8)

7



Fig. 2

Thus it can be seen that the free parameters of the analyser are: $k, 9_0, n_a, n_b, b$. (9)

In the conventional analyser there are only three free parameters - the two first ones and

$$n = n_{a} + n_{b}$$
, $(b = a)$. (10)

Therefore the conventional analyser becomes the particular case of the analyser proposed here.

Thus the analyser described in the paper makes it possible to achieve as high as 5-th order of focusing or the lower order at arbitrarily chosen some parameters, e.g. the 2-nd order of focusing at

$$\mathbf{r}_{a} = \mathbf{r}_{i} = 0 \tag{11}$$

and at various entrance angle Θ_0 and the 3-rd one at (11) and fixed Θ_0 .

References

- [1] J.Kaczmarczyk: The Cylindrical Mirror Analyser [in Polish], (field with the Polish Patent Office).
- [2] J.Kaczmarczyk: The Cascade Cylindrical Mirror Analyser, Bull. Acad. Polon. Sci., Ser. Sci. Techn. 27 (1979), No 10.

THE PROPERTIES OF CONICAL EXPONENTIAL MIRROR ANALYSER

J, KACZMARCZYK, L, SZCZEPINSKI

Institute of Electron Technology, Technical University of Warsaw Koszykowa 75, 00-682 Warszawa, Poland

Among many types of electron/ion energy analysers the cylindrical mirror analyser (CMA) - schematically shown in Fig.1 is most widely used. Its main advantages are high transmission $(T \cong 10\%)$ and relatively high resolution $(R \le 0,5\%)$. From the analysis of CMA operation it follows that further improvement of its parameters is possible by increasing the order of focusing.



Fig. 1

In the present paper the method for improving CMA properties is proposed. By the use of conical-exponential shape of electrodes [1,2] it becomes possible to increase the number of free parameters from 3 to 5.

In the conical-exponential mirror analyser (CEMA) - presented in Fig.2 - the potential distribution in the analysis region is given by the following formula:

$$\phi = \phi_{a} \left[1 - \frac{1}{k} \ln(r/a_{0}) + \frac{z}{kh} \right]$$
(1)

$$k = \phi_a / U \ln(c_0 / a_0)$$
, (2)

$$h = \frac{z_2 - z_1}{\ln(a_2/a_1)},$$
 (3)

and (a, , z,) (a, , z,) are the coordinates of two freely chosen points on the surface of inner electrode.



The distance between source and image is - 2

$$L = \frac{1}{h} \left(\frac{aA}{2K} \right)^{+} \left(n_{a} + X \right) a \operatorname{ctg} \Theta + bn_{b} \operatorname{ctg} \vartheta$$
(4)
$$X = 2K \exp(K^{2}) \left[\operatorname{Erf}(K) + \operatorname{Exp}(\sqrt{K^{2} - \ln(b/a)}) \right]$$
(5)

where

=
$$2K \exp(K^2) \left[Erf(K) + Exp(\sqrt{K^2 - \ln(b/a)}) \right]$$
 (5)

$$\mathbf{K} = \sqrt{\mathbf{k}} \sin \theta , \quad (\theta = \theta_0 + \Delta \theta, \Delta \theta \leq \infty) \tag{6}$$

$$n_a = 1 - r_s/a$$
, $n_b = 1 - r_f/b$, (7)

$$\operatorname{ctg} \mathcal{V} = \left\{ \left[\mathbb{K}^2 \operatorname{ctg}^2 \Theta + \ln(b/a) \right] \right\}^{1/2}$$
 (8)

Thus it can be seen that in CEMA the independent variables are k, 0, n, n, h, whereas in CMA the independent variables are only the first two of the above and $n = n_a + n_b$

$$(h + \infty, a = b = a_0)$$
(9)

So the CMA is the particular case of CEMA (when h -> ...). Therefore CEMA makes it possible to achieve as high as the 5-th order of focusing or the lower one at some parameters arbi-trarily chosen. For example it is possible to achieve the 2-nd order of focusing for $r_s = r_i = 0$ (10)

and various angles Θ_0 or the 3-rd one for (10) and fixed Θ_0 .

References

- [1] J.Kaczmarczyk, S.Pytkowski, L.Szczepiński, The Mirror Analyser [in Polish], (filed with the Polish Patent Office).
- [2] J.Kaczmarczyk, S.Pytkowski, L.Szczepiński, The Conical Expo-nential Mirror Analyser, Bull.Acad., Polon.Sci., Ser.Sci. Techn., <u>27</u>, (1979) No 10.

THE EFFECT OF ELLIPTICAL DEFORMATIONS OF CYLINDERS ON ELECTRON-OPTICAL PARAMETERS OF CMA

J. KACZMARCZYK

Institute of Electron Technology, Technical University of Warsaw Koszykowa 75, 00-662 Warsaw, Poland

Among many types of electron/ion energy analysers the cylin-drical mirror analyser (CMA)- schematically shown in Fig.1 - is





the most commonly used. In the present paper the results of the analysis of the effect of slight eliptical deformation of electrodes in CMA on its electron-optical parameters are presented. In particular, when the foci of both ellipses-corresponding with the electrode cross-sections (Fig.2)- coincide, then, with



Fig. 2

11



The resulting from (10) deterioration of the resolution as a function of the normalized deformation \mathcal{E} is presented in Fig.3 for several different values of \ll .

THE EFFECT OF CONICAL DEFORMATIONS OF CYLINDERS ON ELECTRON-OPTICAL PARAMETERS OF CMA

J. KACZMARCZYK, S. PYTKOWSKI

Institute of Electron Technology, Technical University of Warsaw Koszykowa 75, 00-662 Warsaw, Poland

Among many types of electron/ion energy analysers the cylindrical mirror analyser (CMA) - schematically presented in Fig.1



Fig. 1

- is the most commonly used. In the present paper the results of the analysis of the effect of slight conical deformation of electrodes in CMA on its electron-optical parameters are presented. In particular (Fig. 2) if

 $a \operatorname{ctg} \beta = c \operatorname{ctg} \gamma$, $(\beta^{\ll 1})$, (1) then, with the accuracy of the first order smalls, the potential



Fig. 2



The change of the resolution as a function of angle of inclination β for several different ∞ is presented in Fig. 3. НОВЫЙ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗАТОР ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО И УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Д. Варга, Я. Вег

ATOMKI H-4001 Debrecen, Pf. 51. Hungary

Для изучения процессов атомных столкновений высоких энергий планирован новый электростатический анализатор (ESA-21) института ATOMHI. Анализатор ESA-21 предназначен для одновременного измерения углового и энергетического распределения вылетающих из газовой мищени электронов. Совместное применение сферичес-



Рис. 1. Схема одновременного измерения энергетического и углового распределения

кого и цилиндрического эеркал дает возможность измерить энергию электронов с разрешением ≤ 0.1 % в интервале энергий 0.1-15 кэв и угловое распределение через 15° в интервале 0°-180°. Принцип фокусировки показан на рис. 1. Параметры анализатора подобрались на основе вычисления траекторий электронов, движущихся в аксиальной плоскости. SELF-MADE LEED-AES METALLIC CAMERA AND ITS APPLICATION TO THE INVESTIGATION OF SULPHUR SEGREGATION TO /110/ NICKEL FACE

S. MRÓZ

Institute of Experimental Physics, University of Wrocław, ul. Cybulskiego 36, PL 50-205 Wrocław, Poland.

> Construction of the self-made metallic LEED-AES camera is described. Results of the investigation of the sulphur segregation to the /110/ nickel face and an influence of a hydrogen atmosphere on this segregation are presented.

The LEED-AES camera is the stainless steel chamber pumped out with a titanium ion pump PZK 100 and equipped with a glass window, simple sample manipulator ensuring rotation of a sample around one axis, electron gun together with retarding field analyser consisting of two stainless steel grids with high transparency, self-made titanium sublimation pump cooled with liquid nitrogen, self-made monopole mass filter, nude Bayard-Alpert gauge and dosing valve MD 6 /Vacuum Generators/.

It is possible to obtain the vacuum in the range of 10^{-9} Torr after 1 day of pumping with the PZK 100 pump including heating of the chamber up to 250° C. In order to obtain the vacuum in the range of 10^{-10} Torr it is necessary to use the titanium sublimation pump.

For obtaining AES spectra the ordinary measuring system is used with an electronic differentiation of a collector current. For compensation of the signal passing through a capacitance formed by the second grid and collector, an additional signal

17

from a Kelvin bridge is introduced to the preamplifier at such a phase and amplitude that the resulting signal with frequency ω is equal to zero when the electron gun is switched off.

Some results of the investigation of the sulphur segregation to the /110/ nickel face performed in this camera are presented below.

The sample was a nickel crystal of a purity 99.9% contaminated mainly with cobalt and copper. It was cleaned by resistive heating up to 1000°C and bombarding with potassium ions from a zeolite source. Heating was sufficient to remove all contaminants of the surface except sulphur. To remove sulphur the ion bombardment was necessary.

When the clean sample is heated in ultra-high vacuum sulphur appears on the surface owing to the segregation from a bulk. The velocity of the sulphur segregation increases remarkably when hydrogen is dosed to the chamber. The raise of the velocity of the sulphur segregation is proportional to hydrogen pressure. For a given hydrogen pressure this velocity increases rapidly with the sample temperature starting from about 600°C.

A mechanism of the influence of hydrogen on the sulphur segregation is not clear, but this influence is known for the sulphur segregation in palladium [1], molybdenum [2] and platinum and copper [3].

References

I.Szymerska and M.Lipski, J. Catal. <u>41</u> /1976/ 197.
 S.L. Bernasek and G.E. Staudt, J. Catal. <u>45</u> /1976/ 372.
 I. Szymerska and M. Lipski, J. Catal. <u>47</u> /1977/ 144.

ION SPUTTERING APPARATUS FOR XPS APPLICATIONS

I, CSERNY, D, VARGA

Institute of Nuclear Research of Hung. Acad. Sci., Debrecen

.A specimen preparation vessel with argon-ion sputtering facility has been constructed and fitted to our ESCA apparatus. Description of the spectrometer was published elsewhere. [1] The preparation vessel is equipped with the following units:

a) Ion-getter ultravacuum pump, type IGP-500 (TUNGSRAM, Budapest, Hungary). In order to improve the pumping speed for argon, we modified this pump. The best vacuum in the preparation chamber is about 8×10^{-7} Pa.

b) Argon-ion gun, type AG2 (Vacuum Generators, England). Energy range: 0 - 10 keV, ion current up to 100µA.

c) Specimen rotating unit which allows the argon-ion bombarding of samples at any angle of incidence. The sample in the spectrometer and that in the bombarding place may be exchanged without breaking the vacuum, using the specimen parking places of the rotatable disc.

d) NZ-850 (ATOMKI, Debrecen, Hungary) quadrupole mass spectrometer [2] which serves as a residual gas analyser in the range 1-300 a.m.u.

e) A fast entry air lock and a specimen transfer rod enable introduction or moving of specimens on a vacuum level 1.3×10-4 Pa.

The above introduced argon-ion sputtering facility has successfully been used nearly for a year for different tasks (i.e. specimen cleaning by presputtering and microsectioning for depth profiling). A typical removing rate for stainless steel samples is about 0.5 nm/min at 4 keV ion energy, 9µA/cm² current density and 45° angle of incidence.

References

- [1] D. Varga, I. Kádár, A. Kövér, L. Kövér and Gy. Mórik, Nuclear Instruments and Methods 154 (1978) 477-483 [2] I. Berecz, S. Bohátka, J. Gál and A. Paál, ATOMKI Köz-
- lemények 19 (1977) 123-134

NEW X-RAY SOURCE OF ATOMKI ESA-11 SPECTROMETER L. KÖVÉR, D. VARGA AND GY. MÓRIK

Institute of Nuclear Research, Debrecen, Hungary

A new Al Ka exciting source of 1 kW anode power was designed for XPS measurements on our double -pass electrostatic spectrometer [1]. The construction (Fig. 1.) enables the tube to work in different modes (anode at high positive or ground potential, respectively). Main features of the X-ray source are:



- a) cylindrical electron gun and anode demountable independently of each other
- b) separately pumped source housing covered by magnetic shielding and cooled by tap water
- c) direct anode cooling by distilled water circulation in closed circuit
- d) the flexible construction of the tube makes possible the modification of the irradiation geometry.

Fig. 1. The schematic cross section of the X-ray source.

Reference

[1] D. Varga, I. Kádár, A. Kövér, L. Kövér and Gy. Mórik, Nucl. Instrum. Meth. 154 (1978) 477.

PHOTOIONIZATION CROSS SECTIONS AND RELATIVE INTENSITIES IN PHOTOELECTRON SPECTRA HeI, HeII, Y MG AND Zr MG

V.I. NEFEDOV, V.G. YARZHEMSKY

N.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Moscow, USSR.

The photoionization cross sections of atomic subshells have been calculated within the randome phase approximation with exchange [1] from photoionization threshold up to 160 eV. The bound and continuum states wave functions were calculated in the Hartree-Fock approximation. The bound states were considered as average of configurations, the continuum ones being a result of action of dipole operator on these ground states. The strong influence of the more intensive transition $2p+\epsilon d$ on the less intensive one $2s+\epsilon p$ was found. The 2s photoionization cross section strongly decreases (5-20 times) compared with its Hartree-Fock value and has a minimum near





Fig. 1. Theoretical (lines) and experimental (points) [2] photoionization cross sections in CO_2

threshold. Making use of the theoretical atomic cross sections and literature data on coefficients MO LCAO the photoionization cross sections of molecular levels of N_2 ,CO,CO₂, N_2O , H_2O , C_2H_2 , C_2H_4 , C_3H_8 have been calculated in the U.Gelius approximation. The comparison of theoretical total and partial photoionization cross sections and the relative intensities in HeI, HeII, Y M α and Zr M α spectra with the experimental ones proves the reliability of our model. Fig. 1 shows the theoretical and experimental [2] partial photoionization cross sections in CO₂. The agreement of the theory with the experiment is quite satisfactory. The complete data of the present study will be published elswhere [3].

References

- [1] M.Ya. Amusia and N.A. Cherepkov, Case Stud. Atom. Phys. 5 (1975) 47.
- [2] T. Gustafsson and E.W. Plummer, Phys. Rev. A. 17 (1978) 175
 [3] V.G. Yarzhemsky, V.I. Nefedov, M.Ya. Amusia, N.A. Cherepkov, and L.V. Chernysheva, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. (in press).

EFFICIENCY CALIBRATION OF A CYLINDRICAL MIRROR ELECTRON SPECTROMETER

Á, KÖVÉR, S, RICZ AND B, PARIPÁS*

Institute of Nuclear Research of Hung. Acad. Sci.

One of the great problems of low energy (<20 keV) electron spectrometers is the difficulty of efficiency calibration. Here efficiency has a practical meaning i.e. the product of the solid angle and transmission of the spectrometer and of the efficiency of detector (channel electron multiplier).

The method used widely at higher energies in nuclear spectroscopy - i.e. calibration with standard radioactive sources is difficult to use in our energy region due to the serious problem of self-absorption of low energy electrons.

The experimental efficiency calibration procedure depends on the kind of target used in the measurement. There are direct methods measuring the intensity of monoenergetic electrons coming directly from an electron gun. In the case of cylindrical mirror analyser a very special type of electron gun would have to be built due to the special entrance geometry.

In the case of gas target a very comfortable way of calibration is based on the elastic electron scattering. Here the determination is based on the comparison of the well-known (theoretical and experimental) cross sections and the data measured by the spectrometer (error of the measured data taken from the literature are less than 10 %).

In the case of solid targets the difficulties of efficiency calibration are much higher due to the serious contamination and scattering problems.

In our laboratory we have a little single pass CMA used to measure the electrons emitted from ion-atom collisions on accelerator beam with a gas target. The knowledge of the spectrometer efficiency as a function of energy is necessary for evaluation of our spectra. For calibration we used homogeneous Ar gas target (3·10⁻³Pa) and an electron gun working in

*Present adress: State Public Health and Epidemical Station, Miskolc

the 150-3000 eV energy range. The calibration procedure used here is based on the elastic electron scattering method, mentioned above. We checked the homogeneity of the gas and the validity of the single collision condition. The ionisation gauge used to measure the pressure in the chamber was calibrated by the help of a McLoad manometer. Absolute and relative efficiency data were measured. (See Fig.1.)



Fig. 1. The efficiency data of our spectrometer in function of energy

DATA ACQUISITION AND EVALUATION SOFTWARE AT ATOMKI ELECTRON SPECTROMETER

J. VÉGH, Á. KÖVÉR, I. CSERNY AND I. KÁDÁR

ATOMKI H-4001 Debrecen, Pf. 51. Hungary

The ESA-11 electron spectrometer of ATOMKI [1] which is used nowadays for XPS work, can be controlled by a TPA-i 1001 (24k core of 12-bit words) minicomputer via CAMAC units. The measurements are very time-comsuming although only a negligible part of the total computer time is used to control the experiment (about 0.2 ms in each second). On the other hand, there is a lot of demands on computer time to perform spectrum evaluation, to do theoretical calculations etc. To fulfill these demands we needed a real-time system. As we had no magnetic storage device we decided to develop a special, realtime-like system and to base our system on a high-level, interpretative-style program, FOKAL, which (in certain respects) can be used as an operational system. The modified program supports certain real-time functions. To make our system flexible we divided the tasks to be solved into three groups.

The first group consists of the very basic tasks which were solved at assembly level of programming by the extension of the FOKAL program. They should make possible

- the handling of the CAMAC units used at the measurements in such a way that only the start and stop of the measurement cycle need the action of the high-level language program

- the use of the X-Y recorder and the CRT display units for the high-level language program

- the use of CAMAC units other than those mentioned above

- the use of the multiuser operational system RSX-11M running on the PDP-11/40 (80k core of 16-bit words) minicomputer of the institute via a software-organized connection between the two minis by assigning the teletype of the FOKAL to it

- the direct transfer of the experimental data between the TPA-i and PDP-11/40.

The second group contains tasks programmed in FOKAL language. These codes, mainly of preliminary spectrum processing, use intensively the possibilities provided by the tasks of the first group. Some examples:

- input/output of spectrum paper tapes

- simple procedures of data evaluation (addition, subtraction, transfer etc.)

- simple peak evaluation methods
- non-iterative peak fittings (Gaussian, Lorentzian)
- background fittings (straight-line, Kawarasaki-type)
- general least-squares fittings

- the possibility of asking for the above functions by a three-letter mnemonics

- high-level programming of the measurement (start, stop, inquire; organizing more than one cycle and/or energy region etc.)

- CRT-display and X-Y recorder high-level handling

- handling of CAMAC units not mentioned above and performing CAMAC instructions by high-level instructions

- different other jobs (theoretical calculations, evaluation of spectra of different origin) etc.

The third group contains essentially the tasks of the second one which take too much time on the TPA-i computer or need more memory than we have here. The programs (spectrum decomposition, theoretical calculations etc.) are written in FORTRAN IV.

Reference

[1] D. Varga, I. Kádár, A. Kövér, L. Kövér and Gy. Mórik, Nuclear Instruments and Methods 154 (1978) 477-483 ON THE INITIAL INTERACTION OF OXYGEN WITH THE (100) STAINLESS STEEL SURFACE STUDIED BY AES AND LEED

H.-J. MUSSIG and B. ADOLPHI

Technische Universität Dresden - Sektion Physik, DDR-8027 Dresden, Mommsenstrasse 13, GDR

The oxidation begins at room temperature with the formation of Cr_2O_3 . After this Fe_3O_4 covering the chromium oxide arises gradually. At 500°C Fe_3O_4 is destroyed, and a layer of chromium oxide increases. At 700°C the LEED pattern was observed to represent $Cr_2O_3(111)$, and at 750°C you can prove FeO(111) on that. Above 1000°C the oxide layer decomposes.

1. Experimental

By the analysis of the single crystal material the following composition in weight-% was found: 18.6 Cr, 10.6 Ni, 0.405 C, 0.003 S, 0.41 Si, 0.34 Mn, 0.013 P, 0.09 W, 0.02 Ti, 0.09 Ca, remainder Fe. It is a substitutional solid solution, its facecentred cubic unit cell having an edge length of 0.358 nm.

Steel constitutes a non-equilibrium system. This means that the surface composition is influenced by any sample treatment, as heating, ion-bombardment or gas adsorption, and that it is difficult to create identical surface states successively at one sample. But in no case any influence on the lattice structure by such changes has been observed by us. The in-situ preparation method used for the clean steel surface was described in /1/.The base pressure was 7 x 10⁻⁸Pa. The oxygen adsorption

The base pressure was 7 x 10 °Pa. The oxygen adsorption occurred at pressures between 7 x 10^{-7} Pa and 7 x 10^{-5} Pa.

2. Results

From the investigations with the aid of AES follows the conclusion that first chromium combines with oxygen to form a chromium oxide, due to its high degree of affinity for oxygen. This oxide does not show any crystal structure detectable by LEED up to temperatures of 700°C and therefore in the LEED pattern it causes only an increase of the background intensity. At temperatures between $750^{\circ}C$ and $950^{\circ}C$ we find $Cr_2O_3(111)$. Above $1000^{\circ}C$ the oxide decomposes, chromium evaporates out of the sample, and oxygen diffuses into the sample, at least partially.

By the oxydation the surface becomes poor in non-bonded chromium. Therefore a further oxygen adsorption results in iron oxide formation. According to /2/ here the peak at low energy (44 eV) is a measure of the oxygen concentration. This peak also grows in the course of exposure, but even after 2000 L at 400°C it is smaller than the peak at 51 eV. Consequently, FeO or Fe₃O₄ should be present. We observe FeO in the LEED pattern at temperatures between 750°C and 1000°C. Then, with the {111} plane it lies on the {100} plane of steel. The splitting up of the 47 eV peak, however, has disappeared already at 500°C, i.e. at a temperature at which still no oxide can be observed in the LEED pattern. From this we may conclude that at the low temperatures Fe₃O₄ will orig-

inate. This oxide decomposes above 500°C, and then FeO will form.

Nickel at the third alloy component obviously does not participate in the oxidation.

Whereas the Auger spectra for the initial stage of oxidation indicate iron oxides as well as chromium oxides, from the LEED pattern it is hard to distinguish whether in addition to $\operatorname{Cr}_{2}O_{3}(111)$ also FeO(111) is present. Therefore, it is obvious to assume that iron-oxide and chromium-oxide islands of different size exist side by side.

3. Model

At the initial stage of oxidation, at room temperature a random chromium oxide in the form of islands, probably Cr_2O_3 , is formed. By the further oxygen adsorption Fe_3O_4 originates. Initially, obviously it is arranged as islands beside the chromium oxide; later it covers the chromium oxide, however. At 500°C Fe_3O_4 decomposes, and the chromium diffused onto the surface reacts with the oxygen, so that the chromium oxide layer becomes thicker. The surface becomes poorer in chemically non-bonded chromium in an even thicker region. From 700°C $Cr_2O_3(111)$ is observed in the LEED pattern, and from 750°C FeO(111) can be proved on it. Between 900°C and 1000°C both oxides are destroyed and oxygen is diffused into the sample. During the LEED investigations it was observed that on the oxide lamination of $Cr_2O_3(111)$ and FeO(111)

oxygen is adsorbed in a random way.

4. References

/1/ B. Adolphi, H.-J. Müssig and H. Schöpe, Kristall u. Technik 8 (1973) 10

/2/ W. Arabczyk and H.-J. Mdssig, Dissertation A und B, TU Dresden (DDR), 1977

XPS MEASUREMENT OF OXIDE LAYERS ON STAINLESS STEEL SURFACES

I, KÁDÁR, L, KÖVÉR, I, CSERNY

ATOMKI H-4001 Debrecen, Pf. 51. Hungary

The XPS method gives a good possibility for investigating the structure of the oxide layer formed on stainless steel surface, its thickness being small enough to enable the simultaneous measurement of the metal and the overlayer formed on it [1],[2], [3], [4].

We have investigated several commercial stainless steel samples in order to get information about their passive layers developed during production and storage.

XPS measurements were carried out by the help of the XPS instrument developed in our laboratory [5], equipped with a preparation chamber [6]. Samples were introduced into the spectrometer without any treatment, "as received". The uppermost layer of the sample was removed by argon ion etching in 0.5 nm steps. XP spectra of the important constituents of the alloy (Fe 2p, Cr 2p, Ni 2p, 0 ls and C ls) were taken at each step. The first step of etching was enough to remove most of the contamination, making possible the analysis of the oxide layer.

For evaluation of spectra we proceeded as follows: first of all the spectra were stripped of the discrete structure derived from the K $\alpha_{3,4}$ satellite lines. The method and data for Al K α were taken from [7]. Then the inelastic background was removed according to the method of Shirley [8], the fitting points being slightly above the high kinetic edge of the $2p_1$ and the $2p_{32}$ groups, respectively.

For decomposition of the backgroundless spectra Lorentzian peak shape has been chosen because of the relatively wide natural widths involved.

Since the ratio of different iron oxides is known to change in course of argon ion etching [9], we did not intend to get information about the amount of individual iron oxide components, but only about their sum. Therefore we decomposed the Fe $2p_{3/2}$ group into three peaks: one metal and two oxide lines (Fe³⁺ and Fe²⁺), and for further calculations used the sum of the intensities got for the two oxide lines. The Cr $2p_{3/2}$ group was decomposed into one metal and oxide (Cr³⁺) component.

Results presented on Fig. 1. were measured on a sample of 18/8 stainless steel containing 0.4 % Mo.



Fig. 1. Intensity ratios in function of the etch time (4 kV, 7μ A) a) Cr $2p_{3_2}$: Fe $2p_{3_2}$ metal, b) Cr $2p_{3_2}$: Fe $2p_{3_2}$ oxide, c) Cr $2p_{3_2}$: Fe $2p_{3_2}$ total intensity ratio.

The adopted background treatment and decomposition procedure works well in case of stainless steel spectra. The behaviour of the intensity ratios shown on Fig. 1. indicates a well pronounced chromium enrichment of the oxide layer.

This work was sponsored by the Enterprises for Power Station Investments, Budapest, Hungary.

References

[1] D. Briggs, in "Electron Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications", ed. by C. R. Brundle and A. D. Baker (Acad. Press. 1979), Vol. 3

- [2] S. Storp, R. Holm, Surface Sci. 68 (1977) 10
- [3] J. E. Castle, Surface Sci. 68 (1977) 583
- [4] J. E. Castle, C. R. Clayton, Corrosion Sci. 17 (1977) 7
- [5] D. Varga et al., Nucl. Instr. Meth. 154 (1978) 477
- [6] I. Cserny, D. Varga, Contribution to this Seminar
- [7] N. Beatham, A. F. Orchard, J. Electr. Spectr. 9 (1976) 129
 [8] D. A. Shirley, Phys. Rev. B 5 (1972) 4709
- [9] N. S. McIntyre, D. G. Zetaruk, Anal. Chem. 49 (1977) 1521

PHOTOEMISSION STUDIES OF ADSORBATES ON Mo(110)

Z. BASTL and P. MIKUŠÍK

J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, Czechoslovak Academy of Sciences, 118 40 Prague 1, Czechoslovakia

Photoelectron emission spectroscopies are well established experimental techniques capable of revealing the chemical and electronic nature of surfaces and chemisorbed molecules. The determination of the chemical nature of hydrocarbons on clean and modified transition metal surfaces is an important problem which, e.g. may provide a better understanding of fundamental processes in heterogeneous catalysis.

In this work we present some results of UV photoemission studies of ethylene, propylene and cyclopropane adsorbed at 300 K on Mo(110) surface. The determination of the molecular structure of surface complex is based upon a comparison of the ionization levels of the chemisorbed species with those observed for the free molecules of hydrocarbons.

The molybdenum substrate was cut from 5N nominal purity crystal ingot after it has been oriented by X-ray diffraction. Before mounting it was mechanically polished to a mirror finish, electropolished in NaOH solution and then spot-welded to Mo supporting wires. Crystal was cleaned by repeated electron bombardment heating in 10 μ Pa oxygen to 1700 K followed by flash heating to ~2000 K in vacuo until a reproducible clean surface spectrum was obtained. The work function of the clean crystal face calculated from the width of the energy distribution ($\phi = 5.0 \text{ eV}$) is in excellent agreement with the published value [1]. AES and XPS techniques were also applied to check the cleanliness of the surface. The cleaning procedure was repeated prior to all adsorption experiments. The present studies were carried out in an all-metal ultrahigh vacuum chamber capable of reaching base pressure ~10 nPa (VG ESCA 3 Mk II). All spectra were obtained using He I (21.2 eV) unpolarised radiation. The angle between collected electrons and the normal to substrate was kept constant and equal to 45°. The photoelectron spectra were accumulated in a multichannel analyser which was swept at 20 ms per channel. 64 sweeps over 30 V (511 channels) were used to get the spectra with sufficiently high signal to noise ratio. The total accumulation time was 11 min. The photoelectron energy analyser was operated in the FAT mode at 10 eV pass energy.

The UV spectra of clean surface can be interpreted [2] on the basis of recent density of states calculations taking into account contributions from surface states and extended band states. When bulk and surface state overlap, the bulk contribution cannot be separated from the surface contribution unless one or the other dominates the spectrum.

Low coverage of ethylene produces levels 10.4, 8.4, ~5.2, 2.8 and 2.05 eV below the Fermi energy. It may be concluded on the basis of comparison of the obtained spectra with gasphase spectra of ethylene and acetylene that the adsorption is accompanied by partial dehydrogenation of the ethylene molecules which results in acetylene-like surface species. This conclusion is corroborated by appearance of the peaks in the spectra 2.8 and 2.05 eV below the Fermi level which can be assigned to adsorbed hydrogen [3]. The relaxation shift of the adsorbate levels with respect to the gas-phase levels $E_r = \sim 3$ eV is very close to the 3.1 eV shift for ethylene on W(110) [4]. The so called bonding shift of Torbital is ~1.9 eV which is somewhat larger than the 1.4

eV shift for ethylene adsorbed on W(110) [4]. Propylene adsorption produces levels 10.7, 8.6, ~5.1 and 2.75 eV below the Fermi level. The UV spectra of surfaces with adsorbed cyclopropane do not differ substantially from the spectra of surfaces covered by adsorbed propylene. It follows from this result that the adsorption is accompanied by ring opening of cyclopropane molecule. Large exposures of cyclopropane are necessary to achieve measurable surface concentration of adsorbed cyclopropane which points to activated adsorption. It appears that the shifted gas-phase spectrum of methylacetylene corresponds to our data; $E_r = \sim 2.5 \text{ eV}$, $E_b = \sim 1.1 \text{ eV}$. This result agrees with our hypothesis proposing low activity of Mo(110) plane to dissociate intramolecular C - C bonds of cyclopropane [5].

Let us mention that the present experimental results do not allow to exclude the formation of allyl surface species or trimethylene biradicals in adsorption of cyclopropane. It is also possible and consistent with the experimental data that the C - C bond of propylene molecule is broken leading thus to the formation of acetylene-like surface complex and CH_X surface radical. The last suggestion seems to be supported by the fact that the average bond energy of single C - C bond is lower than that of C - H bond.

References

- 1 G.A. Haas and R.E. Thomas in the book:"Measurement of Physical Properties" (R.F. Bunshah ed.), Vol. VI.,
- Part 1., p.91. Interscience, New York 1972. P. Mikušík and Z. Bastl, to be published. Z. Bastl and P. Mikušík, unpublished results. [2] [3]
- 4 E.W. Plummer, B.J. Waclawski and T.V. Vorburger: "Photoelectron Spectra of the Decomposition of Ethylene
- on W(110)", Chem. Phys. Letters 28(1974)510. [5] Z. Bastl: "Work Function Studies of Cyclopropane Adsorption on Molybdenum", Coll. Czech. Chem. Commun. 43(1978)1665.

AN XPS STUDY OF SI-TI-O SYSTEM

A, STOCH, J, STOCH*

Institute of Material Science, School of Minning and Metallurgy 30-059 Kraków, Poland

*Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Acad.Sci., 30-239 Kraków, Poland

In the recent investigations of composed transition metal oxides has been found the distinct chemical shift of binding energies Ξ_B of electrons from atoms of a minority component dissolved in the foreign matrix. Glasses are proper materials for the continuation of the studies.

The samples were glasses obtained from silica gel [1]: pure (GG) and with the addition of 10 at $% \text{TiO}_2$, melted in oxidizing (TGO) and reducing (TGR) conditions. The XPS measurements has been performed with ESCA-3 VG spectrometer using Al Ka_{1,2} source. Gold was used as the internal standard (E_B= = 84.0 eV). Spectra were recorded a. "as received", b. after annealing at 373°K for 3 h, and c. after annealing at 773°K for 10 h. Also samples of quartz (Q) and titania (TIT) were examined for the comparison.

Si2p band was found to be symmetric, with an exception of TRG and TGO-c where shoulders appeared on the low E_B side. The peak positions were stable with E_B = 103.8±0.1 eV.

Si2s peaks were similar to Si2p, but in spectra obtained from vacuum/temperature treated surfaces, the satellite has been observed on the high E_B side. The main peak positions were stable with E_B = 154.81±0.09 eV.

Ti2p - well resolved doublet with E_B = 458.9 eV (TIT), 459.8 eV (TGR) and 460.9 eV (TGO).

Ols line - symmetric, E_B = 530.2 eV (TIT) and 533.28±0.07 eV for glasses.

Results of quantitative analysis show that the surface "as received" is enriched in oxygen, probably of water origin. But under vacuum/temperature treatment both quartz and glass surface can be reduced. This conclusion follows from changes in the shape of spectra and quantitative analysis data. Besides of the presence of shoulders on main peaks, the spectra from the reduced surface have energy loss peaks exclusively in Si2s band, distant by 5.7 eV (TGR), 8.0 eV (TGO) and 9.1 eV (Q). The later value is equal to the energy of interband transition in quartz [2]. It explains the character of losses.

The incorporation of Ti atoms to SiO₂ lattice increases $\rm E_B$ of Ti2p electrons by 1 eV (TGR) or 2 eV (TGO). It results from the flow of valence electrons out of Ti atoms. The decreasing of the energy gap following the reduction should be connected with the increase of bond lenghts and the increase of electronegativity and ionic character of lattice.

From independent quantitative determinations of reduced surfaces has been found practically the same O/Me ratio (1.8) and Me+4/Me+3 ratio (1.5). May be assumed that in such case not only Ti but also some Si atoms lower their valency and that the reduction is confine to the surface of clusters. Basing on our results, the cluster diameter has been estimated to be about 23 Å in good agreement with the literature data [3]. It may be also expected that almost all Ti atoms occupy positions at very surface of clusters.

References

[1] E. Görlich, E. Kuciel, C. Niesulowska, G. Sieminska and A. Stoch, Roczn. Chem., 50, 1673 (1976).

[2] D.L. Griscom, J. Non-Crystall. Solids. 24 155 (1977).

[3] T. Sakaimo, Proc. 10-th Internat. Congr. on Glass, Kyoto,

SOOMANTOS ATLOCAL

KONTVILRA

(1974) **184** 93.
Az ATOMKI Közlemények negyedévenként jelenik meg. Terjeszti az ATOMKI Könyvtára (Debrecen, Postafiók 51, 4001). Tudományos intézetek és könyvtárak kiadványaikért cserébe vagy ellenszolgáltatás nélkül is megrendelhetik. Kérésre egy-egy számot vagy különlenyomatot magánszemélyek is ingyen kaphatnak.

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 az ATOMKI nyomdájában

Törzsszám:11309 Debrecen, 1980/1 Példányszám: 530



ATONKI coofiliehur

TOM 22 / № 1



Volume 22/ Number 1

310565

ATOMKI⁷ Közlemények

22. kötet / 2. szám



MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1980

ATOMKI Közlemények

22. kötet / 2. szám

TARTALOMJEGYZÉK

SZALAY SÁNDOR AKADÉMIKUS KÖSZÖNTÉSE 70, SZÜLETÉS- NAPJA ALKALMÁBÓL	37
TUDOMÁNYOS KÖZLEMÉNYEK	47
Sztaricskai T.: Technikai megoldások nagyintenzitásu, szilárd targetes neutrongenerátoroknál	47
Cseh J.: Az atommagok egyszerü gerjesztései és a közbenső szerkezet	71
Cseh J.: Kutatás négy-nukleon korreláció után a ²⁸ Si-ban	79
Paripás B., Kövér Á. és Ricz S.: Elektronspektro- méter hatásfokának meghatározása	83
R. Džmuraň, Koltay E. és Nyakó B.: Nagyfeszültségü vizsgálatok C-9 és FX-26 üveggyürükből felépi- tett gyorsitócső elemeken	89
MÜHELYÜNKBÓL, LABORATÓRIUMUNKBÓL	97
<i>Cserny I.:</i> X-Y rajzoló programozott illesztése TPA-i – CAMAC rendszerhez	97
INTÉZETI HIREK	103

Oldal

539

HU ISSN 0004-7155

SZALAY SÁNDOR AKADÉMIKUS KÖSZÖNTÉSE 70. SZÜLETÉSNAPJA ALKALMÁBÓL

Szalay Sándor akadémikus, az ATOMKI alapitója és az ATOMKI Közlemények Szerkesztő Bizottságának elnöke 1979. október 4-én töltötte be 70. életévét. Ebből az alkalomból mind az ujságok, mind a szakfolyóiratok köszöntötték őt. Az ATOMKI Közlemények az október 10-én megrendezett zártkörü ünnepség ismertetésével csatlakozik a sajtóban megjelent megemlékezésekhez.

Az ünnepséget Berényi Dénes akadémikus bevezető szavai nyitották meg:

Kedves Professzor Ur! Kedves Vendégeink! Kedves Munkatársak! A születésnap általában családi ünnep. A családi körből csak akkor emelkedik ki, akkor válik "közüggyé", ha az ünnepelt olyan sokat, olyan jelentőset adott a társadalomnak, hogy a társadalom vezetői, illetve annak egyes intézményei, kollektivái ugy érzik, nem mehetnek el szó nélkül az évforduló mellett, az ünneplésben nekik is részt kell venniük.

Ez a mi mai ünnepélyünk is ilyen ünnep, amelyen a legrégibb tanitványokon, a legközelebbi munkatársakon kivül itt vannak köztünk a társadalom egyes szervezeteinek, intézményeinek vezetői, képviselői, elsősorban azon közösségekből, akiknek Szalay Sándor akadémikus életmüvéből sok jutott.

Kérem ezért mindenekelőtt Márta Ferenc akadémikust, az MTA főtitkárát, hogy köszöntő gondolatait mondja el.

Márta Ferenc a következőképpen köszöntötte az ünnepeltet:

Tisztelt Szalay Akadémikus!

Engedd meg, hogy 70. születésnapod alkalmából a Magyar Tudományos Akadémia vezetése nevében őszinte tisztelettel köszöntselek, és a magyar tudományos élet különböző fórumai részéről ebből az alkalomból kinyilvánitott tiszteletteljes üdvözletek mellé a magam személyes jókivánságaimat is hozzátehessem.

Gondolom, hogy számos külföldi és hazai intézmény, kolléga részéről történt és történő megemlékezés jóleső érzéssel tölt el, de talán nem tévedek, ha azt mondom, hogy ez a mai, 70. születésnapod tiszteletére rendezett szükebb körü összejövetel, amelyen a megye és város párt- és állami vezetése jelenlétében kollégáid, munkatársaid, tanitványaid köszöntenek, még kedvesebb számodra.

> MANYOS AKABER KÖNYVTÄRA

Ez a város, az egyetem, majd a kezdeményezésedre létrehozott és általad több, mint két évtizeden át irányitott intézet volt a szintere, mühelye több, mint négy évtizeden át eredményes és sikerekben gazdag munkásságodnak, iskolateremtő tevékenységednek.

Szalay akadémikus tudományos munkásságának részletes áttekintésére, eredményei jelentőségének méltatására, tudományos életutjának jellemzésére, a levonható tanulságok elemzésére és bemutatására egy rövid köszöntő keretében nincs lehetőség, de nem is érezném illetékesnek magamat ennek megtételére.

Ugy vélem azonban, hogy röviden ki kell térnem rá, mert Szalay akadémikus tudományos életutjának, alkotó egyéniségének, a problémák megoldásában megmutatkozó gondolkodásmódjának, alkalmazott munkastilusának megismerése és megismertetése feltétlenül hasznos a fiatal kutatónemzedék számára, de jelentős talán tudománytörténeti szempontból is, hiszen tudományos munkásságának időszaka azzal a korszakkal esik egybe, amikor a természettudományok terén általában, de különösen a fizikában hatalmas előrelépés következett be. Az az időszak ez, amikor a tudomány oly sok áttörő jelentőségü felfedezéssel, sokszor lélegzetelállitó eredménnyel lepte meg a világot, és mindezek az eredmények – a korábbiakhoz képest lényegesen rövidebb idő alatt találván meg helyüket a köznapi gyakorlatban – nem kis mértékben alakitották át mindennapi életünket is.

Sok szó esik napjainkban arról, hogy a tudományban bekövetkezett fejlődés mennyire megváltoztatta magának a tudományos kutatónak a magatartását, szerepét is.

Ez sok vonatkozásban igaz, és ennek a változásnak a jegyei egyértelmüen tapasztalhatók, sajnos sokszor téves következtetésekre is alapot adva a tudomány megitélését illetően.

A kutatásra forditott összegek a II. világháboru előtt a nemzeti jövedelmek ezrelékében voltak kifejezhetők – nem is tartották őket nyilván –, ma 2–9 %-ot tesznek ki. A kutatásban foglalkoztatottak száma nagymértékben megnőtt, intézetek, egyetemek sokasága jött létre; a kutatás foglalkozási ággá vált.

Az eszközigényesség megnőtt, a kutatás drágább lett, s akik a pénzt adták, vagy elosztása felett döntöttek, a támogatás megtérülését igyekeztek minél nagyobb mértékben biztositani. Igy kerültek be a tervezés, hasznosság, értékelés stb. kérdései a tudomány fellegvárába.

Kétségtelen a változás, de ma is mindenekelőtt az adottság, a képesség, tehetség az első; a megfelelő körülmények, hogy ezek kifejlődhessenek. Szalay akadémikus jó inditást kapott édesapjától, aki fizikatanár volt, tőle szerezte meg manuális készségét, kisérleti tapasztalatait, és végig kisérleti kutató maradt. Pályájának első, meghatározó állomásai: az Eötvös Kollégium, a kutatómunka Szent-Györgyi mellett, a lipcsei, majd a müncheni ösztöndij, a Rutherfordnál szerzett élmények és tapasztalatok. A lehetőségekkel persze élni is tudni kellett, s ez kemény, szivós munkát jelentett; ingyen nem adják az eredményt.

A kutatás kiindulási alapját, nélkülözhetetlen pillérét ma is a jó ötlet, a felismerőkészség, a megoldást elősegitő leleményesség képezi. Nagyon igaz ma is – amit Szalay akadémikus végig vallott –, hogy a probléma megoldásához mindenekelőtt az ötlet kell, majd az elgondolás ellenőrzéséhez és igazolásához a legalkalmasabb eszköz megválasztása. Ugyanakkor az igazán uj keresésénél a berendezést nagyrészt magának a kutatónak kell elő is állitania.

Rutherford egyszerü kis berendezésétől, amellyel az első mesterséges atommagátalakitást végrehajtotta, hosszu ut vezet a mai nagy gyorsitókig. De Rutherford alapvető magatartása, kisérletező megközelitése ma sem nélkülözhető.

Ami ma más, és lényeges változást jelent a néhány évtizeddel ezelőtti helyzethez képest, az a tudományos munka, az egyes kisérletek volumene, amely nagyfoku szervezettséget és megfelelő szervező munkát kiván. Az ürkutatási kisérletek pl. semmiképpen nem egy-két tudós egyéni ambicióját jelentik, amelyet ők önmagukban valóra tudnának váltani, hanem egy hatalmas tudományos és müszaki kollektiva összehangolt munkájáról van szó. És ebben a tudományos vezetőnek fontos, nem egyszer döntő szerepe van. Kapica ezt a szerepet a szinházi és filmrendezőéhez hasonlitja. A tudományos vezetőnek alkotónak kell lennie, nem adminisztrátornak. Ötleteinek megvalósitásához részben jól képzett és jól kiválogatott munkatársakra, részben megfelelő eszközökre, esetleg speciálisan az adott célra épitett berendezésekre van szüksége. Ezen tulmenően olyan légkört kell teremtenie, amely serkenti az uj gondolatokat, inspirálja a tehetséges munkatársakat. Ez utóbbi talán a legfontosabb adottsåg ma egy vezetőnél.

Szalay akadémikus jó példát mutatott az ilyen vezetői tevékenységet illetően: egyik fő gondja volt kezdettől fogva a munkatársak jó kiválasztása és nevelése, uj, megfelelő eszközök épitése. De Szalay Sándor másban is példát mutatott: a közös nyelv megtalálásában más tudományágak müvelőivel és a kutatási eredmények gyakorlati hasznositásában.

A magfizikai kutatások hazai meginditása: ez volt fiatalkori elhatározása, és ez hamarosan kiegészült interdiszciplináris és alkalmazott kutatásokkal, amelyek még ma is érdeklődésének középpontjában állnak.

Ő valóban már akkor törekedett a magfizikai eredmények és insztrumentális lehetőségek gyakorlati hasznositására, más tudományokban történő alkalmazására, amikor még nem volt divat, különösen hazánkban nem. Gondoljunk csak eredményeire a hazai uránkincs felderitésében a negyvenes évek második felében, majd utána az urándusulás törvényszerüségeinek tisztázására. Ezt követte ezen eredmények széleskörü kiterjesztése a mezőgazdaság területén. Hasonlóan kezdeményező volt Szalay Sándor a hazai orvosi izotópalkalmazásban, a magfizikai módszerek alkalmazásait illetően a régészeti kormeghatározásban és más területeken is.

Jó példát mutatott arra, hogy az uj keresése és az elért eredmények közkinccsé tétele a társadalom számára nem összeegyeztethetetlen. A tudományos közvélemény méltán ismerte el tevékenységét. 1953-ban akadémiai tagsággal, 1952-ben Kossuthdijjal, elmult évben pedig állami dijjal. Kivánom, hogy sokáig folytassa jó erőben tudományos munkás-

Kivánom, hogy sokáig folytassa jó erőben tudományos munkásságát, hiszen – az ő szavai szerint – "a természet számtalan ujdonsága vár még felfedezésre és értetmezésre".

Az MTA főtitkára után Tarján Imre akadémikus, az MTA Matematikai és Fizikai Osztálvának elnöke emelkedett szólásra:

Kedves Szalay Sándor Professzor! A Matematikai és Fizikai Tudományok Osztálya nevében köszöntöm Szalay Sándor akadémikust. Számomra különös megtiszteltetés és élmény, hogy ezt tehetem. Elnézést kérek a személyes megnyilatkozásokért, de csaknem fél évszázados kapcsolat - és ha nem veszi rossz néven Szalay Sándor – barátság füz össze bennünket, az Eötvös Kollégiumtól napjainkig. Különösen értékes volt számomra az a négy év, amit Gyulai Zoltán mellett együtt töltöttünk a Debreceni Egyetem Orvoskari Fizikai Intézetében. Az. idősebb kollegában a mindenkor segitőkész barátot ismertem meg. Ö volt a rangidős, az un. első tanársegéd, én gyakornok. Ő többéves külföldi és hazai tanulmányut tapasztalataival gazdagon került Gyulai tanszékére, én pedig kezdő diplomásként. Sokat tanultam Szalay Sándortól, s ezt az alkalmat használom fel arra, hogy nyilvánosság előtt is megköszönjem tanácsait és sok-sok segitségét.

Ama kevesek közé tartozom, akik ismerték az ifju Szalayt és ismerik egész eddigi pályafutását, az itthon és külföldön egyaránt elismert tudóst és nevelőt. Nem szakmai eredményeit kivánom most méltatni, erről olvashatunk a Magyar Fizikai Folyóirat nemrég megjelent ünnepi számában, hanem emberi vonásairól szeretnék néhány szót szólni. Szalay Sándort, a fizikust sokoldaluság, igényesség, fejlett kritikai érzék, segitő-készség jellemzi. Klasszikus kisérleti fizikusként indult el pályáján, ez is maradt mindvégig, de gazdag ismereteit és nagyszerü készségeit rendkivüli érzékkel tudta értékesiteni a legkülönbözőbb határterületeken is. Szalay Sándor, a magfizikus együttmüködött geológusokkal, orvosokkal, müszaki szakemberekkel, otthonosan mozog a kémiai módszerekben, az elektronikában is, és mindez széleskörü anyagismerettel, gyakorlati és müszaki érzékkel is ötvöződik. Eredményeinek tekintélyes része a fizika és a geokémia, majd a fizika és növényélettan összeházasitásából származik, de a biológia és az orvostudomány müvelése is érdeklődési köréhez tartozik, nem beszélve a fizikán belül a különböző területek közötti kapcsolatok szorosabbá füzéséről.

Iskolateremtő tevékenységének alapvető vonásai közé tartozik az igényesség és a segitőkészség. A fiatalokkal hivatásszerüen foglalkozott és törődik ma is. A tanszék és az ATOMKI az az iskola, ahol már a tanitványok is mesterek, és nevelik az ujabb generációkat.

További alkotó tevékenységéhez az Osztály nevében és saját személyemben is sok erőt és ujabb sikereket kivánok.

Ezután Marx György akadémikus, az Eötvös Loránd Fizikai Társulat elnöke tolmácsolta a társulat jókivánságait.

Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, a magyar fizikusok nevében tanitványi tisztelettel és baráti szeretettel köszöntöm Szalay Sándort ezen az ünnepi évfordulón. A mi életünk nagy tudományos élménye az atommag feltárása, a magenergia történelmet befolyásoló tényezővé válása, napjainkban pedig az

atomerőmüvek hazánk gazdasági fejlődésében játszott kulcsszerepe. Elsőként és elsősorban Szalay Sándor tanitotta meg Magyarországot a magfizikára. Ő mutatott példát, kutató élete során sok-sok példát arra, hogy az atommag ismerete segithet köznapi gondjaink enyhitésében. Jó négy évtizeddel ezelőtt Magyarországról Szalay Sándor figyelt fel az atommag kihivására. Ő fogta azt először kézbe, kutatta annak szerkezetét. Bebizonyitotta, hogy a magfizika hazánkban eredményesen müvelhető. A bizonyiték sok tudományos eredmény, tanitványok sora, a debreceni egyetemi és akadémiai intézetek. Ritkán találkozik időben ilyen közel, tartalmilag ilyen harmonikusen a kiváncsi kutatás a mindennapos gondokra figyelő alkalmazással, mint a magfizikában, mint Szalay Sándor müködésében. Később Szalay Sándor ismerte fel, hazánkban ismét uttörőként, a fizikus lehetőségeit biológiai és földtudományi problémák megoldásában. Kutatási témáinak lenyügözően széles spektrumában nem egy nagy elme kiváncsi csapongását, hanem egy életmű következetes épitését, egy életpélda szép kiteljesítését tiszteljük. Azt tanu-sitja ez, hogy ismeretlen területeken milyen hatékony a módszer, milyen hatékony a fizikus megközelités: az empirikus valóság, az objektiv egzaktság, a törvények univerzalitása. Nekünk magyar fizikusoknak kötelességünk, hogy megkiséreljük valóra váltani, megpróbáljuk tovább adni mindazt, amire Szalay Sándor munkás életével tanári felelősségtudatával tanit bennünket.

A következő köszöntő Csikai Gyula akadémikus, a Kossuth Lajos Tudományegyetem rektorhelyettese, a Kisérleti Fizikai Tanszék vezetője volt. Ezt mondta:

A Kossuth Lajos Tudományegyetem rektora és Tanácsa nevében őszinte tisztelettel és szeretettel köszöntöm dr. Szalay Sándor akadémikust, az egyetem diszdoktorát és cimzetes professzorát 70. születésnapja alkalmából. Különös öröm számomra, hogy ennek a megtisztelő feladatnak nemcsak mint az egyetem hivatalos képviselője, hanem mint volt tanitványa és munkatársa tehetek eleget. Szeretném egyben felhasználni ezt az alkalmat arra is, hogy az általa 27 éven át vezetett Kisérleti Fizikai Tanszék minden dolgozójának szivből jövő köszöntését és jókivánságait tolmácsoljam, akik közül sokan Szalay-tanitványnak, a debreceni magfizikai iskola neveltjenek mondhatjak magukat. A Kossuth Lajos Tudományegyetem Tanácsa, amikor ez évben kezdeményezte Szalay professzor honoris causa doktorrá avatását, éppen azt a kiemelkedő oktató-nevelő és tudományos tevékenységet kivánta elismerni, amit mint az egyetem oktató tudósa 1936-tól 1967-ig főállásban, majd pedig cimzetes egyetemi tanárként végzett, a Kisérleti Fizikai Tanszéken. A fizika szin-te minden részét lefedő előadásainak, demonstrációs kisérleteinek, laboratóriumi gyakorlatainak anyagát a jelenlévő tanitványai jól ismerik, különben aligha kaptak volna diplomát. Tudományos iskolateremtő tevékenységének nem kizárólagos, de legeklatánsabb példája az ATOMKI létrejötte.

Most már nyilt titok mindnyájunk előtt, hogy tanitómesterünk 70. születésnapjának megünneplésére, jelenlegi és volt munkatársai, készültünk. Ennek során próbáltuk elemezni, hogy mi is volt Szalay Sándor ars poeticája.

Ö maga egyik tanitványának értékelésekor Balzac szamarát emlitette, szerencsére nem az egészet, csak a bőrét. Mivel mi nem találtunk ilyen frappáns hasonlatot, ezért én néhány, a fizika debreceni oktatásához kapcsolódó idézettel szeretném megközeliteni a választ.

A Debreceni Kollégium professzorának, Szilágyi Tönkő Mártonnak 1678-ban megjelent könyvéről és tanitási módszeréről a következők olvashatók: "Nagy jelentőségü dolgok voltak ezek abban az időben, mert szinte világszerte a dogmatikus módszer szerint tanitották a természettudományok alapelemeit. Ahol egy kis fizikát tanitottak, a tanulók fejébe egy-két mechanikai formulát és terjengős definiciókat, szimbólumokat plántáltak anélkül, hogy azok jelentését megértették volna, s ugyanakkor Debrecenben uj tanitási módszerrel kisérleti fizikát tanitottak." Szilágyi az elektromos és mágneses jelenségekről szólva a kisérleti és szemléltető eszközök hiányáról panaszkodik.

Hatvani István 100 évvel később, 1782-ben, annak ellenére, hogy a kollégium fizika szertára abban az időben országos viszonylatban az első helyen állt, a következőket irja: "Ambár a mult esztendő végén a V. Deputátiónak deklaráltam, hogy a fizikához tartozó instrumentumok majd mind elavultak, és a defektus miatt ezt a diszciplinát, sőt másokat is tanitani nem lehet: még sem vétetődött legkisebb instrumentum is."

Közel 200 évvel Hatvani után a jelen század második felében a debreceni fizika ujabb nagy egyénisége, Szalay Sándor a következőket irja:

"A debreceni egyetem Kisérleti Fizikai Intézetét 1935-ben Gyulai professzor siralmas állapotban vette át; akivel akkor kerültem munkatársi kapcsolatba. Az oktatás legelemibb feltételei is hiányoztak. Sok szivós munka kellett ahhoz, hogy különösebb felső anyagi támogatás nélkül, rövid egy-két éven belül az oktatás szinvonala megemelkedjék. Az intézetnek alig volt demonstrációs felszerelése, de a legkülönbözőbb összeszedett anyagokból rögtönzött kisérletekkel már az első hónapok után dusan volt teritve az előadó asztal. Igy rövidesen sikerült elérni azt, hogy az oktatás teljes mértékben kisérleti bemutatásokra támaszkodott."

Ezt a munkát, amelyet Szalay professzor 1940-től mint az intézet vezetője irányitott, a háboru visszavetette. A felszabadulás után népi demokráciánk kulturpolitikája merőben uj helyzetet teremtett számára, elősegitve, hogy a szertárak, laboratóriumok, eszközkészlete ugrásszerüen megnövekedjen, és jól képzett mesterekkel megerősitett mühelyek fejlődjenek fel, a régi ötletek valóra váljanak, és a tanitványokból iskola jöhessen létre.

Igen, Szalay Sándor tevékenysége egy uj korszakot jelent a debreceni fizika fejlődésében, ő maga ennek áldozta életét, bizonyitva, hogy a siker alapja a tehetség és a szorgalom, a dologi feltételek csak másodrangu szerepet játszanak, de nem elhanyagolhatóak. Szaktudománya iránt érzett szeretetéből és felelősségéből fakadt a következő megszivlelendő észrevétel:

"Hazánkban sulyos lemaradás pan a fizika oktatásának technikai feltételeiben, a fizikát még a hazai viszonyokhoz képest is nagyon elhanyagolták a felsőoktatásban. Megemlitem, hogy itt Debrecenben a fizikai intézetet 1923-ban egy árvaházi épületben helyezték el azzal, hogy 1932-ben fel fog épülni egy nagyméretű fizikai épület. Ez még máig sem épült fel, a tanszék azóta több, mint ötszörösére megnőtt oktatási feladattal küszködik."

Hatvani után 200 évet kellett várni, mig Szalay Sándor munkája révén a fizika ismét virágzásnak indult Debrecenben.

Nemcsak a tanitványai, de a hazai oktatás és kutatás felsőszintü irányitói is egyaránt felelősek azért, hogy a következő századok történetirói mit rögzitenek majd a debreceni fizikáról Szalayt követően.

Akkor, amikor megköszönöm a Kossuth Lajos Tudományegyetem rektora és Tanácsa, valamint volt tanszékének minden munkatársa nevében Szalay professzor önfeláldozó munkáját, kivánom, hogy jó egészségben, töretlen munkakedvvel, még sok-sok éven át tevékenykedjék közöttünk, és élvezze életpályájának gazdag gyümölcsét.

Kedves Professzorom!

Az egyetem csak szerény lehetőségeket tudott biztositani munkádhoz, amit ez az egyetlen szál virág is szimbolizál, de ebben a virágban benne van a természetnek mindazon titka, amit életed során kifürkészni próbáltál. Végül szeretném átnyujtani ezt a szerény ajándékot a Kisér-

Végül szeretném átnyujtani ezt a szerény ajándékot a Kisérleti Fizikai Tanszéken lévő volt tanitványaid köszönetének és nagyrabecsülésének jeleként, amely a hangtan egyik alkalmazását, az emberi érzelem világának kifejezését szolgálja.

Ekkor Csikai Gyula átadta a tanszéken dolgozó tanitványok ajándékát, egy hanglemezalbumot, majd Damjanovich Sándor, a Debreceni Orvostudományi Egyetem rektorhelyettese, a Biofizikai Intézet professzora vette át a szót:

Igen tisztelt Szalay Professzor Ur! Kedves Kollégák! Valamennyien jól ismerjük Szalay akadémikus nagyszerü életpályáját, igy talán nem is kivánna külön indoklást az, hogy a Debreceni Orvostudományi Egyetem rektora és Tanácsa miért formál jogot arra, hogy ezen ünnepi alkalomból rajtam keresztül külön köszöntse a hetven éves Szalay Sándort. Mégis szeretném kiemelni, hogy Szalay Sándor első professzori kinevezését. körülbelül negyven évvel ezelőtt egyetemünk elődjének, a Debreceni Tudományegyetem Orvosi Fakultásának orvosi fizika tankapta. Magfizikusként tartják számon, igy talán nem székére mindenki előtt ismert, hogy Szent-Györgyi Albert iskolájában a makromolekulák ultrahang hatására bekövetkező károsodását - par excellence biofizikai kutatás - ő mutatta ki először, és ezt a munkáját több, mint negyven év után napjainkban is alapcikként idézik. Az általa régebben elfoglalt tanszéket joggal és büszkén tekinti elődjének nemcsak a KLTE Kisérleti Fizikai Intézete, de a DOTE Biofizikai Intézete is. Orvosok nemzedékeit tanitotta a fizika szeretetére, és egységes természettudományos szemléletre.

Egyetemünk rektora és Tanácsa azzal bizott meg, hogy e szép évforduló alkalmából átnyujtsam az egyetem legmagasabb kitüntetését a PRO UNIVERSITATE EMLÉKÉRMET.

Kivánok Szalay professzornak további jó egészséget és eredményes alkotó tevékenységet.

Medveczky László kandidátus a tanitványok képviseletében köszöntötte föl Szalay akadémikust:

Külföldön és belföldön egyaránt elterjedt szokás, hogy tudományos iskolák tagjai hires és szeretett tanitómesterük arcképét nemcsak szivükbe zárva kivánják őrizni, hanem azt bronzba öntött formában is meg akarják örökiteni. Bennünket is ez a gondolat vezérelt, amikor 70. születésnapod alkalmából arcképedről plakettet formáltattunk Madarassy Walter Munkácsydijas érdemes szobrászművésszel.

Engedd meg, hogy amikor a plakettet neked legrégibb, de most is Debrecenben dolgozó tanitványaid és munkatársaid nevében átadom, azt néhány gondolat kiséretében tegyem.

A több, mint négy évtized alatt megismerhettem iskolaalapitó tevékenységed gyakorlatát és az azt megalapozó elveket is. Tapasztalhattam, hogy mindig a legfiatalabb kutatókkal foglalkoztál a legtöbbet. Sokszor még ennél is több időt szántál egy-egy hallgatóra. Ezt azért tetted, mert elved, hogy az oktatói, ill. kutatói utánpótlást még hallgató korban kell kiválasztani. Elsősorban a kezdőket kell segiteni. A tapasztaltak álljanak meg a saját lábukon. Ha erre képtelenek, akkor nem ütik meg azt a mértéket, amit munkatársaidtól elvártál. Gyakran figyelmeztetted tapasztaltabb munkatársaidat a fiatalokkal való rendszeres foglalkozásra, és azt elvártad tőlük.

Többször hallottuk véleményedet, amely szerint jó lenne, ha végzős hallgatók számára biztositani lehetne az oklevél megszerzése után két évet valamelyik egyetemi vagy kutatóintézetben folytatandó munkára. Ez idő alatt azonban nekik "meg kell mutatni az oroszlánkörmüket", és csak akkor jogosultak további kutatói munkakörre, ha azt bizonyitani tudják végzett munkájukkal. Magasra állitottad a szakmai alkalmasság mércéjét, mert véleményed szerint oktatásban, kutatásban egyaránt csak a világszinvonal lehet az elfogadható. Az intézeten kivül is ismeretes volt, hogy állandóan szelektáltál, és fiatalokat hoztál közénk.

Az intézetben kialakult szellem szerint szakmai problémákban nemcsak lehetett vitatkozni veled, de azt el is vártad. Nem sokra becsülted azokat, akiknek nem volt saját véleménye és kezdeményezése, hanem csak szolgailag várták az utasitásokat. Elveid szerint a vérbeli kutatót állandóan foglalkoztatják a témájával kapcsolatos kérdések, de nem helyes, ha érdeklődését csak szük területre korlátozza. A természet nem ismer szaktudományokat, ezért a természet titkait kutatók sem lehetnek szemellenzősök. Természetesen azokat sem kedvelted, akik olyan kérdésekkel akartak foglalkozni, amelyekhez felkészültségük még koránt sem volt elegendő. Rendszeresen figyelmeztettél bennünket, hogy az irodalomban olvastakat tekintélyelv alapján sahase fogadjuk el. A körültekintő, alapos kritika nélkülözhetetlen, és a döntés alapját csak a kisérleti tények képezhetik. Tanitómesteri tevékenységed jellemzésében mem törekszem teljességre, csupán pár karakterisztikus vonását kivántam emliteni.

Többször idézted szóban és irásban is Rutherford egyik mondatát, amely forditásodban igy hangzik: "Én mindig hiszek a természeti törvények egyszerüségében, mert magam is egyszerü ember vagyok." Ugy gondoljuk, ezt tekinthetjük ars poeticád megfogalmazásának, és ezért irtuk ezt a mondatot az arcképedet ábrázoló érem hátoldalára.

Ilyen gondolatokkal kisérve adom át e plakettet, és kivánok mindnyájunk nevében töretlen munkakedvet, további szép sikereket, eredményeket és ehhez kiváló jó egészséget a következő évtizedekben.

Végül a tanitványok ajándékának átadása után Berényi Dénes akadémikus, az ATOMKI igazgatója az intézet nevében mondott születésnapi köszöntőt:

Kedves Professzor Ur!

Bár az intézet vezetőségének és az intézet munkatársainak jókivánságait, meleg köszöntését adom át az intézet alapitójának, mégis – akaratlanul is – személyes emlékek jutnak eszembe a mai ünnepi alkalom kapcsán.

Látva a teli előadótermet, amely hasonlóan teli szokott lenni intézeti szemináriumaink alkalmával, visszaemlékszem a Kisérleti Fizikai Intézet régi professzori szobájára 1950 táján, ahol egy asztal körül jöttünk össze hatan-nyolcan hetenként, és tea mellett megbeszéltük a magfizikában világszerte elért legujabb eredményeket, és törtük a fejünket, hogy mit csináljunk a mi szerény lehetőségeink között.

Ott beszélt többek között arról is Professzor Ur, hogy milyen távlatok vannak a magfizika előtt, hogy hazánknak milyen nagy szüksége van az atomenergiára.

De az asztal körüli beszélgetésekben, a kerti kispadon vagy éppen a vacsoraasztalnál – mert megtörtént, hogyha éjfélighajnalig dolgozott az ember az intézetben, akkor a professzori családi asztal vendége volt vacsorára – arról is szó esett, hogy milyen felelősséggel tartozunk mi ennek az országnak és népnek. Igy maga Professzor Ur is a harmincas évek közepén, angliai tanulmányutja során kinnmaradhatott volna, hiszen hivták, de jellemtelen dolognak tartotta, hogy a gazdasági válságban sokat szenvedett magyar nép filléreiből kimegy tanulmányutra, és nem jön haza az ut tapasztalatait itthon kamatoztatni.

És ebbe a képbe nagyon jól beleillik az is - hadd emlitsem meg itt most ezt is -, hogy 1956. november 5-én reggel hogy hivta össze Professzor Ur az intézetet, éppen félig-meddig illegálisan hazaszökve Svédországból, és mondta el tapasztalatait, azzal, hogy itt az intézetben senki ne hőbörögjön, hanem dolgozzon, mert ez viszi előre a tudományt, és ez teremti meg az anyagi jólétet hazánkban. Ugyanakkor kitett egy irást a portára, hogy irja alá, aki becsületes munkával akar foglalkozni, és aki nem, az jobb is, ha elmegy hőbörögni az intézetből. Hát igy kezdődött az intézet, igy alakult ki Professzor Ur körül az a tudományos iskola, amelyen az ATOMKI is alapul. Az iskola és az intézet kialakulását a "szerves" fejlődés jellemzi. Az, hogy itt nem az volt soha a helyzet, hogy nagyszámu státushelyet kellett hirtelen feltölteni, hanem ellenkezőleg, annak az évenként végző 2-3 hallgatónak, akik rendszerint már valamilyen formában be is kapcsolódtak az intézet munkájába, kellett valahogyan biztositani az ittmaradást, azaz a munkalehetőséget.

Az iskola fő jellemzői pedig ugyanazok, amelyek Professzor Ur munkáját is jellemezték és jellemzik.

Ezek közül minden bizonnyal az első az a széles, a természet jelenségeire és nem a tudományágak határaira koncentrált látókör és munkamódszer, amelyik a magfizikától eljut az uránkutatásig, majd a geokémia törvényszerüségéig, végül a leggyakorlatibb konzekvenciákig: a nyomelemhiányban szenvedő növények levéltrágyázásáig. Kivülálló számára különös lehet ez az ut, de ez követi a természet logikáját egészen a gyakorlati alkalmazásokig, és ez az a szemlélet, amely nekünk hallgató korunktól a vérünkbe ivódott, kutatói magatartásunk elválaszthatatlan része lett.

A másik, ami Professzor Ur kutatásaira és iskolájára annyira jellemző: az a kisérleti tények előtérbe helyezése, a jelenségek megközelitésében az egyszerü empirikus módszerek keresése és ugyanakkor a lényeges megragadása. Ha Professzor Ur nem ilyen lett volna, ha várta volna, hogy mikor lesz elég az anyagi lehetőség elegáns kész müszerek megvásárlására, akkor ebből az intézetből, és ennek az intézetnek vitathatatlan eredményeiből nem lett volna semmi. Sőt Professzor Ur elvként vallja azt, hogy uttörő uj eredmények eléréséhez nem elsősorban a sok pénz, a drága kész berendezések kellenek, hanem az uj meglátásának képessége, a tehetség, az alkotó légkör és nem utolsó sorban az a képesség és elszántság, hogy uj módszereket és a jelenségek vizsgálatához illeszkedő uj berendezéseket dolgozzunk ki, illetőleg épitsünk fel.

Ezekkel a gondolatokkal nyujtom át Professzor Urnak az intézet szerény ajándékát, és kivánok további sok eredményes évet és jó egészséget.

Az ünnepség azzal zárult, hogy Berényi Dénes átadta Szalay Sándornak az ATOMKI ajándékát: a Szalay akadémikus sokoldalu munkásságát jelképesen ábrázoló domboritott réz disztálat, Prim Zoltán iparművész alkotását.

TUDOMÁNYOS KÖZLEMÉNYEK

TECHNIKAI MEGOLDÁSOK NAGYINTENZITÁSÚ, SZILÁRD TARGETES NEUTRONGENERÁTOROKNÁL***

SZTARICSKAI TIBOR

KLTE, Kisérleti Fizikai Tanszék, 4026, Debrecen, Bem tér 18/a.

 $A \ge 10^{12}$ n/s hozamu neutrongenerátorokat a fuziós anyagprogramon kivül a radioterápia és a neutronfizika egyéb alkalmazásai igényelnek. A nagyintenzitásu, szilárd targetes neutrongenerátorok tipikus felépitését, megoldásait vizsgáltuk az irodalomban közölt adatok alapján. Ezen megoldások tanulmányozása segitséget nyujt saját fejlesztésü, nagyintenzitásu neutrongenerátorunk épitéséhez.

TECHNICAL SOLUTIONS FOR HIGH INTENSITY SOLID TARGET NEUTRON GENERATORS. Neutron generators of $\geq 10^{12}$ n/s yield are required by the fusion material program, radiotherapy and other applications of neutron physics. The typical setting up and technical solutions were studied on the basis of the published data. A study of these solutions helps the construction of the high intensity neutron generator to be constructed in Debrecen.

ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРИЕМЫ ПРИ СИЛЬНОТОЧНЫХ НЕЙТРОННЫХ ГЕНЕРАТОРАХ С ТВЕРДОЙ МИШЕНЫО. Нейтронные генераторы с выходом нейтронов ≥ 10¹²н/сек нужны для исследований термоядерного материаловедения, нейтронной терапии и других задач нейтронной физики. Осмотрены типические сильноточные генераторы с твердой мишенью на основе литературных данных. Изучение технических приемов при этих генераторах помогает в разработке нашего сильноточного нейтронного генератора.

1. Bevezetés

A hetvenes évek eleje óta világszerte megnőtt az érdeklődés a ≥ 10¹²n/s hozamu 14 MeV-es neutrongenerátorok iránt. Ezek a berendezések a fuziós anyagprogramon kivül a neutron terápia, a magfizikai vizsgálatok és az aktivációs analizis szempontjából is jelentősek, valamint kisebb mértékben a neutronradiográfia és más fizika, ipari alkalmazások is igényelnék az ilyen hozamu gyorsneutron forrásokat.

*A munkát a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség ösztöndija támogatta. **Összefoglaló közlemény.

A legnagyobb igény a fuziós reaktor technológiájával kapcsolatos: a fuziós reaktorokban használt anyagok viselkedésének mind mikroszkópikus [1], mind makroszkópikus megismerése [2]. A mikroszkópikus magadatok pontosabb ismerete 14 MeV-nél nemcsak a fuziós program, hanem a magfizika szempontjából is érdekes. A lehetséges magadatok mintegy 30 %-a ismeretes megfelelő pontossággal, de általában az adatokban igen nagy szórás tapasztalható [3,4]. A fuziós program által igényelt pontosság megkivánja a nagyobb hozamu DT neutronforrásokat, különösen a gáz végtermékekkel járó magreakciók mérésénél. A legperspektivikusabbnak számitó DT égési ciklus a jövő fuziós reaktorában mintegy 10¹⁴ n s⁻¹·cm⁻² fluxussal fogja a reaktor vákuumedényének falát terhelni, s ez a fal térfogati és felületi károsodásához vezet [5]. A makroszkópikus anyagviselkedés modellezésére a jelenlegi nem 14 MeV-es gyorsneutron források - mint pl. gyors szaporitó reaktor - a széles neutron energiaspektrum miatt nem alkalmasak. A rozsdamentes acélban keletkezett hélium gáz mennyisége a kétféle neutronforrás esetében igen különböző: a gyors szaporitó reaktoroknál 0.1 ppm/dpa*, mig egy tokamak tipusu fuziós reaktornál mintegy 20 ppm/dpa a várható érték [6]. A sugárkárosodás vizsgálatára a fuziós technológia anyagprogramjában tehát 14 MeV-es neutronforrásra van szükség, amely a megfelelő méretü, néhány cm³ térfogatu mintákat >10¹⁴n cm⁻²s⁻¹ fluxussal képes besugározni, megvalósitva a fuziós reaktorok belső falának várható sugárterhelését, s lehetővé téve a neutronporlasztás plazmára [7] gyakorolt hatásának vizsgálatát.

A rákterápia a 10 MeV-nél nagyobb energiáju neutronforrásokat igényli [8], mivel az alacsonyabb energiáju neutronokkal végzett kezelés nem hatásosabb a szokásos 60Co vagy röntgen kezelésnél. A gyorsneutron terápiára vonatkozó kritériumok [9] a 10 MeV-nél nagyobb energiáju, jól kollimált, 1012 n/s.steradnál többet emittáló neutronforrásokat követelnek meg. Az energián és a hozamon kivül további megkötöttséget jelent a 100-125 cm-es forrás-daganat távolság s az, hogy a kezelés lehetőleg izocentrikus legyen, azaz a forrást mozgassuk a beteg körül. Az izocentrikus kezelés kritériuma miatt terápiás célokra elsősorban a zárt neutroncsövek jöhetnek számitásba. A neutron-terápia fellendülése a hipoxikus sejtek gyorsneutronokkal szemben tanusított relative kisebb ellenálló képességének felfedezése után következett be. Bár egyéb, neutront előállitó terápiás berendezéseket is használnak [10,11,12,13, 14], a legideálisabbak mégis a zárt, neutroncsöves terápiai egységek [15]. Neutroncsöves terápiás berendezések számos országban működnek, pl. Hollandiában, Nagy-Britanniában, a Német Szövetségi Köztársaságban, Svájcban, Szaud-Arábiában és az USA-ban [17].

A magfizika és alkalmazásainak témaköre a detektálási érzékenység növelése érdekében igényli a jelenleginél intenzivebb 14 MeV-es neutronforrásokat. Az alacsony hatáskeresztmetszetek értékeiben lévő nagy szórások miatt a fuziós célokra szánt hatáskeresztmetszetek nagy részét pontositani kell [4]. A gyorsneutron aktivációs analizis igényeit nagymértékben segitik a

*1 ppm/dpa=1ppm/ helyettesitett atom

nagy fluxusu DT neutrongenerátorok [18], hiszen alkalmazásukkal a nyomelem meghatározás érzékenysége és szelektivitása a reaktor-neutronokkal végzett aktivációs analizisével válik összemérhetővé. A neutrongenerátorok ilyen nagy intenzitás melletti pulzálhatósága és a prompt mérések igen széles uj horizontot nyithatnak az aktivációs analizisben. A neutronradiográfia nyeresége a nagyintenzitásu neutrongenerátorok révén triviális. Tipikus felhasználókat mutatunk be az l. ábrán.

A nagyáramu neutrongenerátorok, mint kisfeszültségü gyorsitók, jól felhasználhatók töltött részecske aktivációs analizisre, felületvizsgálatra, ionimplantációra, felületbevonásra. A nehéz ionokkal végezhető munkát a kisenergiáju tartományban a mag-asztrofizikai és szilárdtestfizikai kutatások is igénylik [19,20].



1. ábra. A nagyintenzitásu neutrongenerátorok tipikus alkalmazási területei.

2. A nagyintenzitásu neutrongenerátorok felépitése

A ~10¹²n/s hozamu neutrongenerátorok elvi felépitése - lásd a 2. ábrát - nem különbözik a kisebb hozamu egyszerübb neutrongenerátorokétól. Mint az egyenáramu gyorsitók általában, ionforrást, gyorsitócsövet, nyalábkezelő berendezéseket, targetet és kiszolgáló berendezésként nagyfeszültségű tápegységeket, vákuumrendszert és sugárvédelmi berendezéseket igényel.

NEUTRONGENERÁTOROK TIPIKUS FELÉPITÉSE



2. ábra. A neutrongenerátorok tipikus felépitése

A gyorsitók jelenlegi technikai szinvonalán a neutrongenerátorok intenzitás-növelésének legproblematikusabb pontja a target és hütése. Mivel a DT reakcióval termelt neutronok fajlagos hozama adott gyorsitó feszültség mellett a tricium targetben a neutronokat keltő deuteron nyaláb áramával arányosan nő, a nagyobb neutronhozam magasabb target disszipációt von maga után. A szilárd, okkludáltatott targetek esetében a target disszipáció növekedése miatt az okkludáló Ti, Zr, Sc, Er rétegből a tricium gyorsabban távozik, s a target élettartama rohamosan csökken [21]. Egy Ti $_{1.8}$ összetételű targetre vonatkozó fajlagos neutronhozam targetterheléstől való függését a 3. ábrán mutatjuk be a [22] alapján. A 3. ábra alapján s a jól ismert irodalmi értékekből [23] világosan látható, hogy egy 10¹²n/s-nál nagyobb hozamu 14 MeV-es neutrongenerátor várható targetdisszipációja 5-6 kW körüli érték a néhányszor 100 kV-os gyorsitó feszültség mellett. Ekkora disszipációnak megfelelő hütés a tricium megszökését biztositó 200 Cº alatti hőmérséklet mellett meglehetősen nehéz technikai probléma. A jelenlegi targethütési megoldások mellett 10¹²-10¹⁵n/s

A jelenlegi targethütési megoldások mellett 10¹²-10¹⁵n/s hozamu neutrongenerátorok valósithatók meg, de az utóbbi esetben a targetfolt mintegy 10-15 cm átmérőjü.

Összefoglalónkban főleg a nem zárt neutroncső jellegü, deuteron gyorsitó neutrongenerátorok tipikus megoldásait mutatjuk be, utalva azok épitési céljára s ismertetve néhány egyedi megoldást. Az 1. táblázatban a tipikus müködő és tervezett nagyintenzitásu szilárdtargetes neutrongenerátorok főbb adatait foglaltuk össze.



3. ábra. A szilárd T targetek neutron hozamának disszipáció függése [22].

3. Ionforrások

Nagyintenzitásu neutrongenerátoroknál 100-600 kV-os gyorsitó feszültségek mellett 10-200 mA-es ionáramokat biztositó ionforrásokat használnak. Bár a rádiófrekvenciás ionforrások kis áramok esetén javarészt atomionokat szolgáltatnak [24], néhány mA-es ionáram felett már ritkán alkalmazzák őket, mivel nagyobb ionáram esetén a falak szennyezettségéből eredően romlik az atomionarányuk s a kisüléses forrásokhoz viszonyitva teljesitmény igényük is igen nagy lesz [25]. A Marconi-Elliott-Avionics Q tipusu neutroncsövében alkalmazott 30 mA-es RF ionforrás [26] ritkaságnak számit, s alkalmazását a rövid élettartama [27] ellenére a cső egyszer használatos volta igazolja. A Penning-tipusu ionforrások nagyobb ionáramot adnak egyszerübb táplálás mellett, igy müködtetésük a zárt neutroncsövekben is előnyös. Penning-tipusu ionforrásokat használtak a korai Philips neutroncsövekben [28], a jelenlegi terápiás célu, 18 mA-es Philips neutroncsőben [26], valamint a különleges, hengeres Penning-ionforrással rendelkező Haefely-GFK neutroncsőben is [29,30].

A nagyintenzitásu, nem zárt vákuumrendszerü 14 MeV-es neutrongenerátorok leggyakrabban használt ionforrása a duoplazmatron, mivel ennek ionárama az igényeknek megfelelő intervallumban van. A von Ardenne által kifejlesztett duoplazmatron [31] az idők folyamán sok, de nem lényegbevágó változáson ment keresztül. [32,33]. Mint kereskedelemben kapható ionforrás (pl. HVEC DP-2, DP-30, DP-240, General Ionex 6258 stb.) könynyen hozzáférhető és jól alkalmazható a nagyáramu generátorokhoz [34]. Egy tipikus duoplazmatron felépitését a 4. ábrán mutatjuk be.



4. ábra. Egy tipikus duoplazmatron ionforrás [33].

Az intenziv neutrongenerátorokban használatos duoplazmatronok [35] általában elég nagy energiát fogyasztanak s a ritkán alkalmazott léghütés helyett általában viz, olaj vagy freon hütést igényelnek. Léghütéses a SAMES neutrongenerátoraiban használatos duoplazmatron, vizhütéses a HVEC DP-30 tipusu ionforrása, mig freonos hütőgépet igényel a General Ionex 6258 tipusu ionforrása. Mivel az ionforrások általában a nagyfeszültségü elektródán helyezkednek el, a szigetelési problémák elkerülésére a röntgencsöveknél szokásos olajhütést is felhasználják [36] . A duoplazmatronok hütésére szolgáló desztillált vizet zárt körben cirkuláltatják a nagyfeszültségü elektróda és a földpotenciálon lévő hőkicserélő között. A hőkicserélő vagy csapvizzel, vagy hütőgéppel müködik, ha a duoplazmatron disszipációja nagyobb hütést kiván.

A duoplazmatronok gázszabályzására palládiumos szelepet [37] vagy tüszelepet használnak [38]. A gázellátás távvezérlésére igen alkalmas nehézviz-elektrolizálót ismertetnek a [39] irodalomban. A von Ardenne által használt eredeti gázellátás is elektrolizálás utján történt [31]. Az előbbi elektrolizáló karakterisztikái és müködése alapján alkalmas a nagyintenzitásu neutrongenerátorok duoplazmatronjainak ellátására. Az elektrolizáló metszetét az 5. ábrán mutatjuk be. A gázellátás, illetve a duoplazmatronban létrejövő kisülés ellenőrzésére a duoplazmatronba beépitett vákuummérő fejek szolgálnak [40]. A rövid élettartamu katódokat és anód diafragmákat cserélhetőre képezik ki. A katódok élettartamát megnöveli a Ba, Th-oxidos



5. ábra. Nehézviz elektrolizáló duoplazmatronok D2 ellátására [39].

bevonat [38,40], mig az anódbetétek anyaga wolfram [33] vagy molibdén [40]. Az oxidkatódos megoldások a katód élettartamának növelésén tul a katódok véletlen fellevegőzéssel szembeni ellenállóképességet is növelik. A duopigatron [41] a duoplazmatronnál bizonyos szempontból előnyősebb ionforrás, s igen magas atomion arányt adhat. A SANDIA Laboratory INSTTF (Intensive Neutron Source Target Test Facility) elnevezésü neutrongenerátorában [12] felhasznált 200 mA-es duopigatron [42] 60% atomiont szolgáltat igen egyenletes nyalábprofil mellett (uniformitás).

A jó uniformitásu ionnyalábokat szolgáltató több fütőszálas ionforrások [43] hátránya az, hogy az üzemi nyomás nagyobb és csak impulzusüzemben dolgoznak. Ezen multiaperturás kivonóelektródával ellátott mágneses multipol ionforrásokat fuziós kisérletekben a toroidális plazma fütésére fejlesztették ki [44]. Ezek az ionforrások kiváló uniformitással rendelkeznek jó elektromos- és gáz hatásfok mellett. Az RTNS-II neutrongenerátor ionforrásaként [45] használt hasonló felépitésü multiaperturás kivonó rendszerü ionforrás 50% gázhatásfok mellett 70% atomiont ad. Mivel itt az ionforrásból kivett áram a kivonó rendszer apertura számától függ [46], az eredeti 1.5 A-es ionforrást kevesebb furattal a generátor 150 mA-es targetáramigényéhez igazitották. A forrás normalizált emittanciája a nyaláb középső részén 0.22 mradcm. Ezt az ionforrást, melyet szintén a fuziós kisérletekhez fejlesztettek ki, a 6. ábrán mutatjuk be. A SANDIA Laboratories-ban tervezett nagyfelületü (2000 cm²) szilárd targetes neutrongenerátorban [47], feladva a magfizikusok által kedvelt pontforrás kritériumát, egy neutrális injekcióra tervezett nagyfelületü ionforrás segitségével szándékoznak 4×10¹⁵n/s hozamot elérni 200 cm²-es keresztmetszetű nyalábbal.



6. ábra. Az RTNS-II. ionforrása [45].

Mivel ezek a nyalábok egyenlőre még nem állnak rendelkezésre, bár a MW-os nyalábok kidolgozása már sok helyen gyakorlatilag befejeződött, az ilyen neutrongenerátor megépitéséhez szükséges mágneses multipol ionforrások [44,48] kiegészitése 100-200 kV-os kivonó rendszerrel nagy intenzitással folyik. A SANDIA Laboratories-ben tervezett nagyfelületű neutronforráshoz alkalmas 40-50 A, 200 kV-os nyalábok néhány éven belül rendelkezésre fognak állni, s a nagy felület miatt a target hütése a 40-50 kW/cm² terhelés esetén sem lesz teljesen utópisztikus.

4. Az ionnyalábok gyorsitása

Mivel a nagyintenzitásu neutrongenerátorok nagyobb részt - magfizikus szemmel nézve - nem kimondottan monokromatikus neutronforrások céljaira készülnek, a targeteken kisebb nyalábátmérőre, pontszerü neutronforrásra is csak ritkán van szükség. A kisáramu neutrongenerátoroknál elterjedt 2-3 mm átmérőjü analizált atomion nyalábok egyrészt nehezebben állithatók elő a nyalábban fellépő erős tértöltés miatt, másrészt a target felületi disszipációjának növekedésével a target élettartama a titridek gyorsabb bomlása miatt még inkább lecsökkenne. A néhányszor 10 mA-es, 5-10 mm átmérőjü, s átlag 200 keV-es ionnyaláboknál már a tértöltés hatásokat nem lehet elhanyagolni, de pontosabb ismeretek hiányában számolni is nehéz velük [49]. Az ionoptikai problémák ugyan jóval egyszerübbek mint a nagyenergiáju gyorsitók injektorainak problémái [50], de az egyes generátorok igy is csak az óvatos becslések alapján tervezett megoldások eredményeit tükrözik. Az ionoptikai tervezés-nél általában a magasabb perveanciáknál szokásos megoldásokat választják, mintsem a tértöltés teljes elhanyagolását. A nyaláb gyorsitására használt gyorsitócsőnek általában a lehetőségekhez mérten rövid, nagy gradiensü csövet használnak. A saját fejlesztésű csövek általában egy réssel készülnek, s csak a gyorsitó előállitással foglalkozó nagy cégek megoldásai tartalmaznak homogén terü, több elektródás gyorsitócsöveket, amelyeket az előzőleg más célra kifejlesztett homogén terü gyorsitócsövek átalakitásával épitettek meg. Az RTNS-I esetében a HVEC ICT (szigetelt törzsű transzformátoros) nagyfeszültségü tápegységgel felszerelt 400 kV-os generátort alakitották át a gyorsitócső föld felőli elektródáinak rövidrezárásával [51]. Az NRPB-nél használt 600 kV-os gyorsitócső hat elektródás, kivül freon tulnyomással, az AID (régi nevén Tunzini-SAMES) sorozatgyártmánya, araldit szigeteléssel, egymásbanyuló elektródákkal, gumigyürüs tömitéssel. A Dynagen-IV gyorsitócsöve a Dynamitronoknál használatos gyorsitócső 18 elektródával s üveg szigeteléssel. Mind az AID, mind a Radiation Dynamics csöve olyan tányéros megoldásu, hogy az egymásba nyuló elektródák az araldit, illetve üveg szigetelőket leárnyékolják a szekunder elektronoktól és a kiszóródó ionoktól [52].

Az egy réses inhomogén terü gyorsitócsöves neutron generátorok [53,54,55,56] szigetelő gyürükből felépitett gyorsitócsövének falát a fenti megoldásokhoz hasonló elektródákkal védik. A térosztó elektródák áramát a szórt ionok és szekunder elektronok alkotják, igy a kisebb osztólánc áramot nagyobb ellenállásokkal vagy az ionforrás hütését is szolgáló alacsony vezetőképességü vizzel is meg lehet oldani [57]. Bizonyos esetekben az ioncserélt vizek, bár fajlagos vezetőképességük megegyezik a desztillált vizével [58], a nagyfeszültségen könynyebben disszociálnak, igy a duoplazmatronok hütésére és a gyorsitócső osztóláncaként használt vizet desztillálással készitik [59].

Az egy réses gyorsitócső tipikus példájaként a francia LANCELOT generátort [53,54] mutatjuk be a 7. ábrán. A 200 mAes, erősen tértöltéses nyaláb kezelése a föld felőli elektrodában elhelyezett mágneses lencsével és egy kvadrupol triplettel történik.

A több elektródás nagyáramu gyorsitócsövek kifejlesztésével kapcsolatban sok tapasztalat gyült össze a nagyenergiáju ciklikus gyorsitók injektorainál [60]. Amint azt már emlitettük, a multielektródás, homogénterü gyorsitócsövek általában különösebb fejlesztési problémát nem jelentenek, a kis gyorsitókat gyártó cégek katalógusaiból kiválaszthatók [62]. A Piercegeometriáju, injektorokban használatos gyorsitócsövekkel [63] egyenáramu ionnyalábok esetén kevés a tapasztalat, s a wisconsini egyetem differenciális gáztargetes neutrongenerátorán [14,57] kivül nem igen van példa használatára, bár Piercegeometriát széndékoznak használni a Los Alamos-i INS 300 kV-os 1.1 A-es tricium nyalábjának gyorsitására is [2,64]. A meg-



7. ábra. A LANCELOT generátor tipikus egy réses gyorsitócsővel [53, 54,102].

valósitás alatt álló RTNS-II gyorsitócsöve speciális felépitésü,több elektródás gyorsitócső 150 mA tervezett ionáramra [65,66]. A cső, a tértöltés okozta nyalábfeltágulás minimali-zálása érdekében, nagy gradiensü (17 kV/cm), s a tér homogenizálását a két szélső elektróda között elhelyezett molibdénből készült 10 cm átmérőjü diafragmákkal biztositják. A cső szerkezete természetesen védi a szigetelő falat a rákerülő töltésektől. A cső osztóláncát 5 mA-es áramra tervezték. A belső térgradiens és a külső 5 kV/cm-es térgradiens miatt a 8. ábrán látható megoldást alakitották ki. A nyaláb keresztmetszete a számitások szerint kedvezően alakul, s a 8.8 m-es target-ionforrás távolság ellenére sem fog a targeten 10 mm átmérőnél jobban feltágulni. A nyalábot a gyorsitás után három kvadrupól triplett segitségével fókuszálják. A nyalábtranszport számitások legbizonytalanabb pontja a tértöltés hatásának és a tértöltés neutralizációjának ismerete. Az impulzusüzemü injektorokkal végzett munka alapján várható [66], hogy a teljes neutralizáció mintegy 300µs alatt történik meg, s a nyalábvezetést ennek megfelelő távolságon belül ajánlatos elvégezni. A megfelelő számu hütött diafragma - bár a nyaláb áramát csökkenti - a kis nyaláb-átmérő érdekében szükséges alkotó elem a nagyáramu neutrongenerátoroknál.



8. ábra. Az RTNS-II. osztott teres gyorsitócsöve

A megfelelő targetélettartam elérése érdekében szükséges a nyaláb analizálása; ez kisebb ionáramok esetében rendszerint a gyorsitás után, nagyobb ionáramok esetében az ionforrás-fókuszlencse után történik. A 12 mA-es NRPB generátornál [67] a néhány mA-es Dź és Dż komponensek okozta melegedés nem okoz nagyobb problémát a gyorsitás utáni analizáló mágnes kamrájában, mig az RTNS-II [68] esetében az ionforrás utáni, a nagyfeszültségü elektródán lévő analizáló mágnes a gyorsitó csőbe csak az atomionokat engedi. A kivonás utáni energián a kettes és hármas molekulaionok disszipációja kisebb, a mágnes kisebb teret igényel, s a gyorsitócsövet is kisebb ionárammal terhelik.

5. A felhasznált szilárd targetek

A 14 MeV-es neutrongenerátoroknál, a nagyobb energiáju sztatikus gyorsitóknál szokásos molibdén ablakos gáztarget nem használható a bombázó nyaláb alacsony energiája miatt. Egy szuperszónikus gáztarget, mint igen nagy disszipációra alkalmas target, a legnagyobb hozamu intenziv neutron forrás [70, 71,72] terveiben szerepel. A különböző sebességü JET-ekkel végzett vizsgálatok kecsegtetőnek bizonyultak [73,74,75] egy 300-400 kW-os T+ nyalábra való adaptálásra, s a 80-as évek elejére várhatóan megszületik egy 10^{15} n/s hozamu, D₂ gáztargetes 14 MeV-es intenziv neutron generátor.

A szilárd targetek esetében a fentebbi teljesitményü nyalábokkal csak in-situ, azonnal ujrakészitett forgó targetek használata képzelhető el. Ilyen 300 kV-os 1-es konstrukcióra vonatkozó elképzelést,egy forgó, titán porlasztással állandóan megujitott felületü targetet ir le a [76,77] munka. A kevert deuteron-triton nyalábot több egyedi nyaláb multiaperturás gömbsüvegek közötti gyorsitásával és fokuszálásával juttatnák a forgó targetre [78].

A szilárd targetes megoldások jelenlegi csucsát az épités alatt álló RTNS-II jelenti a 75 kW/cm² fajlagos target terheléssel [65]. A szilárd targetek esetében még az egy nagyságrenddel kisebb terhelések sem oldhatók meg, csak forgó targetek segitségével.

A szilárd tricium targetek készitésére az ad lehetőséget, hogy a hidrogén izotópok a fémekkel intersticiális ötvözetet képeznek. A hidrogén a periódusos rendszer fémeinek nagy részével exotermikusan lép reakcióba, s stabil hidrideket képez. A palládium hidrogénabszorbciója és emittálása jól ismert je-, lenség [79], s a palládiumos hidrogénadagoló szelepek régóta használatosak a gyorsitók ionforrásainak gázellátására. A napjainkban használatos TiT targetek kifejlesztése az elmult 40 évben történt. A kezdeti szilárd tricium targetek készitésénél a triciumot tantál és cirkon hordozóban nyelették el [80], ahol a tricium és a fém atomok alig 1:1 -es arányát sikerült csak elérni. A jelenlegi targeteknél az egy fématomra eső hidrogén atomok száma 0.25 és 1.85 között változik, s egyre gyakrabban jelennek meg a földfém és ritkaföldfém tricium abszor-- mint pl. a Sc és az Er - a magasabb hőmérsékleten bensek való stabilitásuk következtében [81]. A zárt neutroncsövek esetében, például a Marconi Elliott Avionics Ltd Q csöve, erbiumtitrid targetet használnak, 200 kV-nál 30 mA-es targetárammal [82], s igy a terápia számára megbizható 170 órás élettartamu neutronforrást biztositottak.

Az ionnyaláb erősen felmelegiti a targetet, ennek következtében jelentős mennyiségü tricium szabadul fel, és igy a target élettartama korlátozott. A targetanyagok megválasztása egy adott technikai háttér mellett az okkludáltatáshoz előállitható hőmérséklettől, nyomástól függ. A három leggyakoribb tricium hordozó egyensulyi hidrogénnyomásának a hőmérséklettől való függését a [22] alapján a 9. ábrán mutatjuk be.



9. ábra. Néhány targetanyag egyensulyi hidrogén nyomásának hőmérséklet függése. Az ábra alapján világossá válik, mi a nagyintenzitásu neutrongenerátorok sarkalatos pontja szilárd targetek esetében. A pontszerű neutronforrás megvalósitása ionoptikailag sem egyszerü a néhányszor 10-100 mA-es targetáramok esetében. A szilárd targeteken disszipálódó teljesitmény a targetben elnyeletett triciumot felszabaditja: igy a szilárd targeteknél fellépő kisebb sugárveszély miatti előnyt a target rövidebb élettartama csökkenti. A targethütés megfelelő megoldásával, forgó targetek használatával a targetélettartam növelhető. A mind nagyobb neutronhozamok iránti igény a targethütési technika, s a targettartók állandó fejlesztésével járt. Az elmult években sok munka jelent meg a mind nagyobb terhelhetőségü, nem forgó targetszerelvényekkel [83] kapcsolatban is, melyek különleges vizhütésekkel [84], és a triciumnak a target hátoldala felőli folyamatos felfrissitésével [85] növelik a target élettartamát. A magasabb feszültségek (800 kV) esetében a vizáramlás sebességének növelésével 10 kW/cm² terhelésnél 20-30 órás stabil hozamot sikerült elérni [86].

A target terhelhetőség növelésének régi, jól bevált módszere a forgó target. Forgó target esetében a targetfelület egyegy pontját impulzusszerű terhelés éri, s a targetpont átmérőjének megfelelő szélességű körgyűrű felületét terheljűk egyetlen targetfolt helyett. Hasonló disszipációs problémák adódnak a röntgencsöveknél is, ahol a forgó anódos kivitel jól bevált és 100 kW/cm² terhelésig használják őket [87]. Bár a tricium targetek és a wolfram forgó anódok esetében a megengedhető hőmérsékletimpulzus nagysága erősen eltérő [23,88], a forgó anódos röntgencsövek anódhőmérséklet eloszlásának meghatározására bevezetett eljárások [89,90] jól használhatók a forgó triciumtarget hűtések számitásainál is. A hagyományos targeteket fejlesztik tovább [12] a SANDIA Laboratóriumban, ahol a 200 kW-os 200 mA-es gyorsitót épitették a magasabb hőállóságu Sc és Er targetek vizsgálata céljából.

A forgó targetek kiképezésében három tipikus target geometria alakult ki: a forgó korong, a gömbsüveg és a hengerpalást alaku triciumtarget. A korong alaku target felépitése igen egyszerü, a target maga a vizhütött hátlap korong külső gyürüjét alkotja, a hütésnél a hőáramlás radiális irányban történik. Az azonos élettartamhoz tartozó, különböző terhelhetőségü targethátlapok azonos átmérő mellett csak a hátlap anyagának vastagságában különböznek. A forgatás általában egyszerü tengelyen keresztül történik, s a gyorsitó vákuumrendszerét a külső atmoszférától ajaktömitések, Wilson zárak választják el. A Multivolt Ltd of Crawley forgó target hátlapjai [92,93,94] 3-8 kW/cm² terhelhetőségüek, s az átlag $11 \cdot 10^{12} - 19 \cdot 10^{12}$ Bq(= =300-500 Ci) teljes triciumaktivitás mellett 300 óra felezési élettartammal [91,94] rendelkeznek. Ezt analizálatlan, mind atom, mind molekula ionokat tartalmazó nyalábbal bombázva érik el. Ez az adat nem sokkal rosszabb a kis, 10-20 W/cm² terhelésü targetek élettartamánál [95], ami a hütés kielégitő voltát bizonyitja. Egy ilyen jellegü korong target metszetét mutatja be a 10. ábra. A vákuumtömités itt nem ajaktömitéssel történik, hanem mágneses folyadékkal, amely 6.104s-1 feletti fordulatszámot is lehetővé tesz. A kisebb fordulatszámok esetén a szokásos gumi tömitések elegendőnek bizonyulnak. Sugárvédel-



10. ábra. Forgó korong target mágneses vákuum tömitéssel

mi szempontokból a forgó hütött targethátlapon a kisáramu neutrongenerátoroknál használatos, 2.5 cm átmérőjü, olcsóbb targetek is elhelyezhetők [96].

A korong alaku targetek hátlapja vastag, a gömbsüveg alaku targeteké pedig vékony, s a vizhütés kivülről történik. Klaszszikusnak számitó ilyen target az RTNS-I targetje [97,98,99,51, 65,68,100], amelynek segitségével a Lawrance Livermoore Laboratory ICT generátorának 400 keV, 15 mA-es árama mellett 100 órás üzem alatt csak 15-20%-os hozam romlást kaptak [100]. A target átmérője 21 cm, ami kb. 10 m/s kerületi sebességnek felel meg 7.10⁴s⁻¹ esetén. A relative magasabb fordulatszámot az ügyesen megépitett forgó tömités [101] biztositja. A forgó target szerelvényének metszetét a [65] alapján a 11. ábrán mutatjuk be. A targetfelület teljes kihasználását a targetfej bólogató mozgásával a target felületén spirálisan mozgó nyaláb biztositja. Az RTNS-I-hez hasonlóan 50 cm-es átmérőjű targetet használ a francia LANCELOT generátor [53,54,102] is 160 keV-es 200 mA-es nyalábbal, de az RTNS-I 6 mm átmérőjü nyalábjával szemben jóval nagyobb (Ø=50 mm) nyalábátmérőt alkalmaz. A target hosszabb élettartama érdekében a LANCELOT generátorral kevert (deuterontriton) nyalábot gyorsitanak.



11. ábra. Az RTNS-I. gömbsüveg targetja [99,100].

A hengerpalást targetek [55,56] olyan belső vizhütéssel rendelkező targetek, melyeknél a TiT targetanyag egy henger palástjára van felhordva, s a forgatással itt is hasonló kerületi sebességet tudnak biztositani. Mivel a henger palástja csak vákuumban lehet, a minták forrás-távolsága nagy, a minta elhelyezése nehézkes, az ilyen targeteket elsősorban terápiás célokra érdemes használni. Az [56]-ban leirt targetnél olyan vastag TiT réteget használnak, mely jóval vastagabb a deuteronok hatótávolságánál az adott 300 keV-es energián. A müködés közben kiürült rétegeket forgás közben leporlasztják, s ily módon jelentős targetélettartam növekedést értek el.

Különleges légcsapágyat és vákuumtömitést dolgoztak ki az RTNS-II számára [65,99,103], amely biztositja a tervezett 1 cm átmérőjü, 400 keV 160 mA-es deuteron nyalábnál a megfelelő hütést. A target átmérője 50 cm, kiképzése különleges: a target hátsó részén kimart csatornák segitségével még jobb hütést biztositanak. Igen érdekes, vákuumban müködő alkáli ötvözet (NaK) hütést dolgoztak ki tárcsa targetek hütésére [104]. Bár az alkáli hütés-fütés igen jól kidolgozott az atomerőmüvek esetében, s a felhasznált Na_{0.5}K_{0.5} ötvözet rendkivül alacsony gőztenzióval, s kedvező fajhővel rendelkezik [105], a rendszer feltehetően mégsem váltotta be a hozzá füzött reményeket a viz magasabb fajhője és a hátlapként felhasznált anyagok alacsonyabb hővezetése miatt [106].

6. Triciumkezelés, hozammérések, sugárvédelem

A nagyintenzitásu neutrongenerátorok szilárd triciumtarget-jeinek aktivitása a 3.7 · 10¹²-3.7 · 10¹³Bq(0.1-1 kCi) nagyságrendben mozog, s igy a tricium targetek tárolása, szerelése, cseréje önmagában is komoly sugárveszéllyel jár, mivel a targetek nyilt radioaktiv források. Mivel a felhasználók nagyrésze nem rendelkezik a targetek kezeléséhez szükséges felszerelésekkel [108,107], a 10¹²Bg aktivitásu használt targetek cseréjét sok esetben az okkludálást végző cégek vállalják. A neutronterápiás célokra használt forgó targeteket a kórházakban szerelvénnyel együtt vákuum alatt cserélik, s küldik a gyártó cégekhez triciumoztatásra, annak érdekében, hogy a kórházak szennyezését a minimális mértékre lehessen csökkenteni [96,110,109]. A nagy aktivitásu forgó targetekből a bombázó deuteronnyaláb hatására felszabaduló triciumgáz a gyorsitó vákuumrendszerébe kerül, s a vákuumszivattyukon keresztül az atmoszférába juthat. A kisebb áramu gyorsitók esetében (pl. RTNS-I) a felszabadult triciumot és az ionforrásból származó deutérium gázt iongetter szivattyukban kötik meg [51]. A nagy tricium felhasználásu rendszereknél, mint pl. egy differenciálisan szivattyuzott gáztarget [57] 10¹³Bg körüli aktivitásánál, vagy az RTNS-II tervezett évi mintegy 5.5.1015Bq felszabaditott triciumánál igen gondos tricium kezelésre, megkötés-re van szükség. Az RTNS-II esetében a triciumot a deutériummal együtt katalitikusan oxidálják, s a keletkező nehézvizet megfelelő módon megkötik. Az RTNS-II tervezett triciumcsapdáját a 12. ábrán mutatjuk be. A tricium megkötésére kisebb aktivi-



12. ábra. A targetből kilépő T₂ gázmegkötésére szolgáló rendszer [65].

tások esetén uránium csapdát alkalmaznak a rotációs szivattyuk kipufogó részénél, valamint szorpciós- és krioszivattyu rendszereket [65]. A nagyintenzitásu neutrongenerátorok hozammérése aktivációs módszerekkel, konverterfóliás szilárdtest nyomdetektorral [54], valamint legelterjedtebben ionizációs kamrákkal, hasadási kamrákkal [94] történik. A neutron terápiás kezelő egységeknél a kezelő fejbe beépitett hasadási kamrák által mért hozamok alapján adagolják a dózist. A mérés redundanciáját növelendően mind uránfóliás, mind neptunium fóliás hasadási kamrákat alkalmaznak egyidejüleg [111]. A szilárdtest nyomdetektoros mérések igen alkalmasak a nyaláb profiljának mérésére [54], és segitségükkel megfelelő pontossággal határozható meg a nyaláb helye is.

Egy folytonosan használt $\geq 10^{12}$ n/s hozamu neutrongenerátor évente integrálisan $10^{19}-10^{20}$ neutront termel, ami összevethető a lézerfuziós berendezések [112] és a tokamakok környékén [113] fellelhető évi neutron hozamokkal. Az intenziv neutrongenerátorok tehát valóban szolgálhatnak fuziós reaktorok sugárkárosodásának vizsgálatára [5]. A neutrongenerátorok a várható hozamok alapján megfelelő sugárvédelmi berendezéseket igényelnek. Ezeket a szükséges számitások alapján meg lehet tervezni [114]. A neutrongenerátorok helyiségeinek fala általában több méteres nehéz- és könnyübeton kombinációból épül. Pl. ha egy 10¹²n/s hozamu neutrongenerátort egy 6m x 6m alapterületü helyiségben helyeznek el, általában 2-2.5 m vastag sugárvédelmi betonfalat kap védelemként. Az alacsonyabb gamma háttér érdekében a közönséges beton helyett alkalmazott mészkőbeton különösen magfizikai méréseknél, valamint a neutron-terápiás be-rendezéseknél fontos [115]. A Christie Hospital and Holt Radium Institute-ban használt mészkőbeton sugárvédelem, amelyet a ∿ 10¹²n/s hozamu Marconi Elliott Avionics Ltd gyártmányu neutroncsöves HILLETRON terápiás egységhez épitettek, a közönséges betonhoz viszonyitva 4-5-ször kisebb gamma hátteret ad [116]. A Dynagen-IV. mint tipikus ≥ 10¹²n/s hozamu neutrongenerátor (Hamburg) sugárvédelmét a 13. ábrán mutatjuk be a gyártó cég katalógusa [117] alapján.

A targethütés közben felaktiválódott targetszerelvények, s a hütőviz felaktiválódott oxigénje különleges sugárvédelmi problémákat jelent. A zárt hütőkörben cirkuláltatott hütőviz segitségével a generátor hozama "on-stream" módszerrel folyamatosan monitorizálható. A nagy intenzitások következtében a generátor kikapcsolása után a target cseréje nem egyszerü dolog, hiszen igen komoly aktivitás marad a target szerelvényeiben. A terápiás egységekben [110,115] a péntek délutáni leállás után mintegy hatvan óra elteltével, hétfőn reggel cserélik a targetet, illetve a neutroncsövet, amikor az alkatrészek radioaktivitása már erősen lecsökken az egy hetes felaktiválás után. A folyamatos üzemben használatos LANCELOT [102] generátornál és az épités alatt álló RTNS-II esetében a target cseréje és a minta-váltás távirányitással, különleges targetszerelvény továbbitó kocsik segitségével történik a target igen erősen felaktivált környezete miatt [65].



13. ábra. Egy 10¹²n/s hozamu neutrongenerátor sugárvédelmi falainak elrendezése [117]

7. Vákuumrendszerek, tápegységek

A nagyáramu neutrongenerátorok nem igényelnek különleges, az ilyen generátorokra jellemző vákuumtechnikai alkatrészeket. A higanydiffuziós szivattyuktól a Roots-szivattyun át a turbomolekuláris szivattyuig szinte mindenféle szivattyu előfordul. A triciumveszély miatt hasznosak a krio- és getter szivattyuk, amivel a triciumot lekötik. A legjobb tulajdonságuak a turbomolekuláris szivattyuk, de magas áruk miatt csak kevés helyen használják őket. A legelterjedtebbek az olajdiffuziós szivatytyuk, mivel a szokásos duoplazmatronok 20-100 cm³ D₂ fogyasztásához szükséges 3000 l/perc-5000 l/perc szivóteljesitményü olajdiffuziós szivattyuk a kereskedelemben egyszerüen beszerezhetők. A target élettartamának növelése érdekében minden szükséges helyen folyékony nitrogénes csapdákat helyeznek el, a nyaláb mentén pedig a szükséges pontokon ujabb kiegészitő nagyvákuum szivattyukat használnak. A konkrét vákuumtechnikai kivitelezés generátorról-generátorra más és más.

A sok mA-es ionáramok gyorsitására szolgáló nagyfeszültségü tápegységek vagy kaszkád tipusu generátorok [96], vagy szigetelt törzsű transzformátoros [51] megoldásuak, vagy pedig párhuzamos táplálásu kaszkádok, Dynamitronok [117,118,119], amelyek felépitésében az 1973-as összefoglaló [20] óta lényeges változás nem történt. A fuziós technikában használatos kondenzátor teleptöltő berendezések [120] és a nagyteljesitményü röntgencső tápegységek [121] megfelelő szüréssel kiegészitve biztosithatják ezen generátorok nagyfeszültségü táplálását.

8. Összefoglalás

A gyorsitótechnika jelenlegi szintjén a $\geq 10^{12}$ n/s hozamu neutrongenerátorok megvalósitása még mindig nem teljesen problémamentes. A legkomolyabb problémát a targetek és hütésük [122], valamint az ionoptikának a tértöltések figyelembevételével való tervezése okozza. Jelenleg mintegy 15-20 körülire tehető a használatban lévő vagy épités alatt álló nagy intenzitásu neutron generátorok száma. A generátorok a fuziós anyagkutatáson tul neutron terápiás és magadatgyüjtési célokat is szolgálnak. Igen sokat nyer az aktivációs analizis is a nagy hozamu 14 MeV-es neutronforrások felhasználásával.

A legismertebb 10¹²n/s-nál nagyobb hozamu, szilárd targetet használó neutrongenerátorok főbb technikai paramétereit az I. táblázat adja meg. Remélhető, hogy a táblázatban szereplő hazai épitésü nagyintenzitásu neutrongenerátor 1981 végére üzemelni fog.

1. táblázat. Az ismertebb szilárd targetes 14 MeV-os nagyintenzitásu neutrongenerátorok

NEV	ÁLLAPOT	HOZAM n/s	NAGYFESZÜLTSÉG TARGETÁRAM	IONFORRÁS	GYORSITÓCSŐ	NYALÁB Ø	TARGET FAJTA	VÄKUUM	PELHASZNÁLÁS	IRODALOM
RTNS-I	él	6x1012	400kV/22mA	Duoplazm.	Homogrén	6 mm	TiT forgó gömbsüveg	olajdiff.	CTR, aktiválás,	[51,65,68,98, 99,97,100,101]
RINS-II	1979	4x1013	400kV/150mA	Multiapp. plazma	Négy rés	10 mm	TiT forgó gömbsüveg	Turbómol.	CTR, aktiválás, terápia	[2,65,101]
LANCELOT	él	6x1012	160kV/200mA	Duoplazm.	Egy rés	50 mm	TiT forgó gömbsüveg	Kriopumpa	CTR	[53,54,102]
Chalk River	él	4x1012	300kV/25mA	Duoplazm.	Egy rés	10 mm	TiT henger paláston	Hg diff.	CTR, aktivációs analizis	[55]
Lewis NASA	terv	> 1012	300kV 30mA	Duoplazm.	-	54 mm	TiT henger paláston	olajdiff.	terápia	[65]
SANDIA	terv	4x1015	200kV/40A	Multiapp. plazma	Egy rés	200 cm ²	ScDT forgó korongon	-	CTR	[22]
6'x6'	terv	∿ 10 ¹³	250kV/250mA	Duoplazm.	Egy rés	180x180cm ²	TiT álló gömbsüvegen	olajdiff.	Biológiai	[125]
NRPB	él	> 1012	600kV/10mA	Duoplazm.	Hamogén	6 mm	TiT forgó korongon	olajdiff.	magfizika, radiológia	[67]
DYNAGEN	él	3x1012	500kV/12mA	Duoplazm.	Hamogién	20 mm	TiT forgó korongo n	olajdiff.	terápia	[94 ,109,110, 117]
JAERI	1979	> 1012	400kV/20mA	Duoplazm.	Hamogén		TiT forgó korongon	turbómol.	CTR, aktiváció	[39,93]
AWRE	él	2.5x1012	300kV/12mA	Duoplazm.	Hamogén	6-10 mm	TiT forgó korongon	-		[92]
PUSAV	terv	> 1012	300kV/10mA	Duoplazm.	Homogién	10 mm	TiT forgó korongon	olajdiff.	aktiváció, mag- fizikai, TDF	[122,124]
NGU	terv	> 1012	250kV/15mA	Duoplazm.	Két rés	10 mm	TiT forgó korongon	olajdiff.	magfizika, ak- tiváció	[36,123]
INSTIF	él	> 1013	180kV/200mA	Duopigatron	Egy rés	16 mm		olajdiff.	target fejlesztés	[12,42]
KLTE	1981	> 1012	200kV/30mA	Duoplazm.	Egy rés	8 mm	TiT forgó korongon	olajdiff.	magfizika, akti- vációs analizis	-

Hivatkozások

Γ	1]	IAEA Advisory Group Meeting on Nuclear Data for Fusion Reactor Technology, Vienna, 11-15 December 1978
[2]	International Conference on Radiation Test Facilities for CTR Surface and Materials Program, Argonne National
C	3]	Laboratory, 15-18 July 1975, ANL-CTR-75-4 J. Csikai, Symposium on Fast Neutron Interactions and on the Problems of High Current Neutron Generators ATOMKI
[4]	D. J. Dudziak, Cross Section Sensitivity and Uncertainty
Γ	5]	T. Kammash, Fusion Reactor Physics, Principles and Technology, Ann Arbor Science, Ann Arbor, Michigan, 1975
	6] 7] 8] 9] 0]	 H. Ullmeier, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 1 R. Behrish, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 293 M. Catterall, Br.J. Radiology 49 (1976) 203 H. H. Barschall, American Scientist 64 (1976) 668 G. O. Hendry et al, Inst. J. Rad. Onc. Biol. Phys. 3 (1977) 367
[1	1]	J. D. Hepburn et al, Inst. J. Rad. Onc. Biol. Phys. 3 (1977) 368
[1	2]	F. M. Bacon, A. A. Riedel, IEEE Trans Nucl. Sci. NS-26 No.1 (1979) 1505
[1 [1 [1	3] 4] 5]	L. Cranberg, J. Rad. Onc. Biol. Phys. 3 (1977) 393 P. M. Deluca et al, Phys. Med. Biol. 23 (1978) 876 K. A. Schmidt, G. Reinhold, Int. J. Rad. Onc. Biol.
[1	6]	Phys. 3 (1977) 373 C. H. Gill, R. E. Jones, Int. J. Rad. Onc. Biol. Phys. 3 (1977) 401
[1	7]	H. H. Barshall, Intense Sources of Fast Neutrons An. Rev.
[1 [1 [2	8] 9] 0]	R. E. Wainerdi et al, J. Radioanal Chem. 37 (1977) 307 I. Enchevich, ATOMKI Közl. 18 (1976) 371 G. Pető, Izotóptechnika 16 (1973) 561
L2	1]	Neutronfizika, szerk.: Kiss D. es Quittner P., Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971
[2	2] 3]	J. C. Crawford, W. Bauer, ANL-CTR-75-4 (1975), 227 J. B. Marion, J. L. Fowler, Fast Neutron Physics, Part I. Interscience Publisher Inc., New York, 1960
[2 [2	4] 5]	Nagy J, Gombos P., Atomki Közl. 4 (1962) 4 A. A. Martin, G. A. G. Mosson, CULHAM Lab. NID (76) 13 (kézirat)
[2	6]	J. J. Broerse et al, Int. J. Rad. Onc. Biol. Phys. 3 (1977) 361
[2	7]	D. Green, D. Major, Christie Hospital and Holt Radium Institute, Manchester, személyes közlés
[2 [2 [3 [3	8] 9] 0] 1]	PHILIPS 18604 tip. neutroncső adatlap és kezelési utasitás Neutron Therapy Unit, Haefely, E-480 K. A. Schmidt, M. Dohrmann, Atomkernenergie 27 (1976) 159 M. von Ardenne, Experimentalle Technik der Physik 9
[3 [3	2] 3]	(1961) 227 G. Sidenius Nucl. Instr. Meth. 151 (1978) 349 O. B. Morgan et al, Rev. Sci. Instr. 38 (1967) 467
[34] Ion X Newsletter, Winter 1978, General Ionex Corp., Newburypoert [35] L. Vályi, Atom and Ion Sources, Akadémiai Kiadó, Budapest, John Wiley Sons, London, 1977 [36] G. Primenko, Kijevi Allami Egyetem, Személyes közlés [37] C. R. Emigh et al, Proc. Symp. on Ion Sources and Formation of Ion Beams, Brookhaven National Laboratory, 1971, 113 [38] S. Fukumoto et al, Proc. Symp. on Ion Sources and Formation of Ion Beams, Brookhaven National Laboratory, 1971, 121 [39] S. Bederka, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 441 [40] F. M. Bacon, Rev. Sci. Instr. 49 (1978) 427 [41] П. А. Демырханов и др.: Приб. Техн. Эксперимента 1964 (I.) 39 [42] F. M. Bacon et al, Rev. Sci. Instr. 49 (1978) 435 [43] R. W. Bickes et al, Rev. Sci, Instr. 49 (1978) 1513 [44] A. H. Goede et al, Development of Large Volume Magnetic Multipole, Ion Sources, in Int. Symp. on Heating in Toroidal Plasmas, Grenoble, 1978 [45] J. E. Osher, G. W. Hamilton, Proc. 2-nd Symp. on Ion sources and Form. of Ion Beams, Berkeley, California, 22-25 October, 1974, LBL-3399 [46] J. C. Davies et al, [2], 183 old. [47] J. C. Crawford, W. Bauer, [2] 227 [48] W. L. Stirling et al, Rev. Sci. Instr. 50 (1979) 102 [49] Nagy Gy, A. Szilágyi M, Bevezetés a tértöltésoptika elméletébe Akadémiai Kiadó, Budapest, 1967 [50] A. Passner et al, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-12 No.3 (1965) 912 [51] R. Booth, Proc. 2-nd Symp. on Ion Sources and Form. of Ion Beams, Berkeley, California 22-25 October, 1974 LBL-3399 [52] M. R. Cleland, P. Farrel, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-10 No.3 (1965) 227 [53] J. B. Hourst, M. Roche, [2], 208 [54] J. B. Hourst et al, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 19 [55] J. D. Hepburn et al, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-22 No.3 (1975) 1809 [56] D. L. Alger, R. Steinberg, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-20 No.1 (1973) 420 [57] P. M. Deluca et al, Proc. 2-nd Symp on Ion Sources and From Ion Beams Berkeley, California, 22-25 October, 1974 LBL-3399 [58] Handbuch der Elektrotechnik, Siemens Aktiengeselschaft, München, 1971 [59] J. Takács, Oxford University, személyes közlés [60] V. J. Kovarik et al, IEEE Tans Nucl. Sci. NS-18 No.3 (1971) 87 [61] G. M. Lee, C. D. Curtis, IEEE Trans Nucl. Sci. NS-14 No.3 (1967) 129 [62] Construiesez le vous méme, Accélétateur d'ions, SAMES (AID) katalógus, 1975 [63] D. W. Müller et al, Proc. on Linear Proton Acc. Conf. Los Alamos, 1972 La-5115 (1972) 378

[64]	E. Cort, Deuterium Flow Loop for a Supersionic Gas Target INS. LA-5849 (1975)
[65] [66]	R. Booth et al, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 25 L. R. Evans, D. J. Warner, IEEE Trans Nucl. Sci. NS-18
[67]	C. Harvey, National Radiological Protection Board, Harwell személyes közlés
[68]	R. C. Wolgast, IEEE Trans Nucl. Sci. NS-18 No.3 (1971) 699
[69] [70] [71]	D. Dale et al, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 127 D. D. Armstrong et al, [2], 261. old. M. C. Cline, C. R. Emigh, in First Topical Meeting on the Technology of Controlled Nuclear Fusion, 16-18,
[72] [73] [74] [75] [76] [77] [78]	 April. 1974. San Diego, California E. Cort, LA-5849-MS (1975) J. H. Deleeuw et al, ANL CTR-75-4 (1975) 315 J. H. de Leeuw et al, Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 119 P. C. Stangeby, V. Chatoorgoon, J. Energy 1 (1977) 387 P. Cloth et al, ANL-CTR-75-4, 243 P. Cloth et al, Atomki Közl. 18 (1976) 439 T. S. Green, G. A. G. Mosson, CLM(RR/II)] kézinat és
[79]	Atomki Közl. 18 (1976) D. P. Smith, Hydrogen in Metals, University of Chichago
[80] [81] [82]	Press, Chichago, 1948 R. Graves et al, Rev. Sci. Instr. 20 (1949) 579 D. G. Westlake, Physics Today 1978 32 Nov. R. C. Lawson, D. Porter, Second Report on the Performance of the Belvedere Hiletron, Belvedere Hospital, Glasgow, 1974 Report NTP/58
[83]	P. R. Hanley et al, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-14 No.3 (1967) 933
[84] [85]	J. Kas, D. Novak, Nucl. Instr. Meth. 99 (1972) 359 F. F. Haywood et al, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-18 No.3 (1971) 802
[86]	R. F. Seiler et al, IEEE Trans. Nucl. Sci, NS-14 No.3 (1967) 943
[87] [88]	H. G. Haubold, Garching, GSI-73-7(1973) 20 H. Dietz, E. Geldner, Siemens Forsch. Entwickl. Ber. 7 (1978) 18
[89]	W. Bauman et al, Siemens Forsch. Entwickl. Ber. 7 (1978) 111
[90]	W. Bauman et al, Siemens Forsch. Entwickl. Ber. 7 (1978) 239
[91]	D. D. Cossutta, Proc. of Sec. Oak Ridge Conf. on Use of Small Acc. in Teaching and Research. CONF-700322
[92] [93] [94]	Multivolt Ltd of Crawley, Target katalógus, series RTH D. D. Cosutta, Multivolt Ltd. of Crawley, Személyes közlés M. R. Cleeland, N. Wells, Radiation Dynamics Inc. New York, Technical Information Series TIS-74-2
[95] [96]	J. H. Omrod, Can. J. Phys. 52 (1974) 1971 NUKEM GmbH, Hanau, NSZK, Accelerator Target Catalog
[97] [98] [99]	R. Booth, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-14-No.3 (1967) 938 R. Booth, H. H. Barshall, Nucl. Instr. Meth. 99 (1972) 1 R. Booth et al, IEEE Trans Nucl. Sci. NS-20 No.1 (1973) 472

_	
[100]	R. Booth, Nucl. Instr. Meth. 120 (1974) 353
[101]	R. Booth, Nucl. Instr. Meth. 59 (1968) 131
[102]	J. B. Hourst, M. Roche, Second Int. Symp. on Neutron
	Induced Reactions, Smolenice, 25-29 June, 1979
[103]	R. Booth, C. M. Logan, Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 471
[104]	M. Roche, [2] 201
[105]	J. W. Mansteller, F. Tepper and S. J. Rodger, Alkali
	Metal Handling and System Operating Techniques, Gordon
	and Breach Science Publishers, New York, 1963
[106]	J. E. Parrott, A. D. Stuckers, Thermal Conductivity of
	Solids, Pion Limited, London, 1975
[107]	NUKEM GmbH, Hanau, NSZK, Tritium Monitors Cataloge,
	N - 753 - 4.6
[108]	NUKEM GmbH, Hanau, NSZK, Tritium Technology, N-753-4.1
[109]	M. R. Cleeland, B. P. Offerman, Nucl. Instr. Meth.145
	(1977) 41
[110]	AEG-RDI: Irradiation System, Katalógus, V22.
	48318/0676E
[111]	R. S. Forbes, Marconi Avionics Ltd., Neutron Division,
	személyes közlés.
[112]	M. E. Battat, D. J. Dudziak, 5-th Int. Conf. on Reactor
	Shielding, Knoxville, Tennessee, 18-25 April, 1977. 520
[113]	D. Gilai et al, 5-th Int. Conf. Reactor Shielding,
	Knoxville, Tennessee, 18-23 April, 1977, 64
[114]	American National Standard Guidelines on the Nuclear
	Analysis and Design of Concrete Radiation Shielding for
*	Nuclear Power Plants ANSI/ANS-6.4-1977 (N403)
[115]	D. Major, Christie Hospital and Holt Radium Institute,
-	Manchester, személyes közlés
[116]	D. Green, Christie Hospital and Holt Radium Institute,
-	Manchester, személyes közlés
[117]	Radiation Dynamics Inc., New York, Dynamitron II.
	Dynagen-IV Accelerator Catalogues
[118]	C. F. Mason, IEEE Trans, Nucl. Sci. NS-14 No.1
	(1967) 157
[119]	A. W. Haberl, A. Taylor, IEEE Trans, Nucl. Sci. NS-16
	No.3 (1969) 152
[120]	HAEFELEYY Charging Rectifiers, E 135.0 katalógus
[121]	HAEFELEY: Hochspannungsgleichrichter 220 kV-40 mA
	génkönvy
[122]	J. Pivarc: Symposium on Fast Neutron Interactions and
L J	on the Problems of High Current Neutron Generators.
	ATOMKI Közl. 18 (1976) 463
[123]	B. E. Leshchenko i dr., Symposium on Fast Neutron
	Interactions and on the Problems of High Current
	Neutron Generators ATOMKI Közl 18 (1976) 331
[12µ]	I Pivanc et al Second Int Symp on Neutron Induced
[127]	Reactions. Smolenice. 25-29 Kune. 1979
[125]	A. A. Fleischer et al. IEEE Trans, Nucl. Sci NS-12
[. 20]	(1965) No. 3 262.
	(1000) 1010 2021

Lektor: Koltay Ede



AZ ATOMMAGOK EGYSZERÜ GERJESZTÉSEI ÉS A KÖZBENSŐ SZERKEZET*

CSEH JÓZSEF

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51, 4001

A közbenső szerkezet egy szemléletes modelljének ismertetése után olyan jellegzetes példákat emlitünk az atommagok egyszerü gerjesztéseire, melyek jórészt közbenső szerkezetként jelentkeznek.

SIMPLE EXCITATIONS OF NUCLEI AND INTERMEDIATE STRUCTURE. After reviewing a simple model of intermediate structure, some characteristic examples are mentioned, for the simple excitations of nuclei, which manifest themselves mainly in intermediate structure.

ПРОСТЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ АТОМНЫХ ЯДЕР И ПРОМЕЖУТОЧНАЯ СТРУКТУРА. В статье описывается наглядная модель промежуточной структуры и приводятся характерные примеры для простого возбуждения, проявляющегося как промежуточная структура.

1. Bevezetés

Az atommagok egyszerű gerjesztéseit az jellemzi, bogy hullámfüggvényeik az észlelési csatornák egyikének hullámfüggvényével jelentős mértékben átfednek, vagy nagy csatolási mátrixelemet alkotnak velük. Ezek az állapotok rendszerint sajátállapotai egy H_o modell Hamilton-operátornak; szemléletes jelentésük van, s hullámfüggvényeik és mátrixelemeik könnyen számithatók. H_o hordozza a rendszer valódi Hamilton-operátorának legmarkánsabb jellemzőit.

Nagyon sok esetben az egyszerű gerjesztések nem a mag különálló állapotaiként jelennek meg, hanem felhasadnak; belekeverednek a mag egyéb szerkezetű, de azonos spin-paritásu állapotaiba. Ez utóbbiakat hivjuk háttérállapotoknak.

A magreakciók Bohr-féle közbensőmag-modellje olyan állapotokat feltételez, amelyekben a bombázó részecske által bevitt

*Összefoglaló közlemény.

energia sok nukleon között oszlik meg. Ilyenkor a folyamat statisztikus feltevések segitségével tárgyalható, a gerjesztési függvény sürün elhelyezkedő, keskeny rezonanciákat, azaz finomszerkezetet mutat. Bizonyos esetekben azonban a statisztikus modell jóslatától eltérő viselkedést tapasztalunk még olyan energia- és tömegszámtartományokban is, ahol a sok nivó jelenléte miatt a statisztikus feltételek teljesülését várnánk. Erre nézve kétféle körülmény szolgálhat magyarázattal: 1. A reakció rövidebb idő alatt megy végbe, mint ami az egyensuly kialakulásához szükséges. Ez a direkt reakciók esete. 2. A reakció során nagy sullyal gerjesztődik valamilyen egyszerü állapot; vagy más szóval: a rendszer az idő jelentős részét tölti ilyen egyszerű konfigurációban, miáltal tulságosan lassan közeledik az egyensuly felé. Emiatt egy korlátozott energiatartományban a statisztikus viselkedéstől eltérés mutatkozik. Az ilyen tipusu eltérést hivjuk közbenső szerkezetnek*. A közbenső szerkezet azonositásában sokszor lényeges segitséget jelent a később emlitendő összegszabály, és több nyitott csatorna esetén a bomlási szélességek közötti korreláció.

A kisérlet természetesen csak akkor képes felfedni az egyszerű állapot fragmentálódását, (vagy általában a gerjesztési függvény finomszerkezetét,) ha elegendően jó az energiafelbontás. Gyengébb energiafeloldással végzett mérés szélesebb rezonanciákat eredményez, vagyis a finomszerkezetnek a statisztikus viselkedéstől való eltéréseként definiált közbenső szerkezet alkalmas energiaátlagolás mellett a gerjesztési függvénynek enyhébb (un. közbenső) tagoltságaként jelentkezik. Jól szemlélteti ezt a rugalmas protonszórásban mutatkozó izobár analóg rezonanciák alább bemutatandó példája.

Ha a háttérállapotok sürüsége kicsi, akkor az egyszerű állapot felhasadása nem vezet közbenső szerkezet létrejöttéhez. Előfordulhat, hogy az erősség döntő részét csak néhány, egymáshoz közel elhelyezkedő állapot tartalmazza. Számos példát találunk erre mind küszöbenergia fölött lévő, mind a kötött állapotok körében.

Végül az is megeshet, hogy az egyszerű állapot tág energiatartományban egyenletesen oszlik szét. Ilyen esetben jelenléte egy-egy valódi magállapotban kevésbé meghatározó, kimutatása nehezebb.

2. Egyszerű modell a közbenső szerkezetre

Bontsuk egy kvantummechanikai rendszer H Hamilton-operátorát egy H_o modell Hamilton-operátor és egy H_{int} maradéktag összegére: H= H_o+H_{int}. Jelölje $|\psi_d \rangle$ H_o valamely sajátállapotát, azaz a rendszer egy speciális tulajdonságu állapotát csatolás hiányában, $|\phi_q \rangle$ pedig legyen valamilyen más tipusu állapotoknak az ezt körülvevő csoportja. A csatolás uj stacionárius állapotok létrejöttéhez vezet, melyek a

* A közbenső szerkezet elméletének ismertetése és a vele kapcsolatos alapvető publikációk jegyzéke az [1,2,3,4] munkákban található.

$$|\psi_{E_{v}}\rangle = a_{d}^{v}|\psi_{d}\rangle + \Sigma_{q}b_{q}^{v}|\phi_{q}\rangle$$

formába irhatók. Az energia-sajátértékeket az

$$E_{v} - E_{d} = \Sigma_{q} \frac{V_{q}^{2}}{E_{v} - \epsilon_{q}}$$

egyenlet határozza meg, ahol E_d és ε_q a ψ_d és a ϕ_q állapot energiája, V_a pedig a kölcsönhatás mátrixeleme:

$$q = \langle \psi_d | H_{int} | \phi_q \rangle$$
.

Az a^{v}_{A} amplitudó energiafüggése a következő:

$$(a_d^{\nu})^2 = \frac{1}{1 + \Sigma_q [V_q^2 / (E_v - \varepsilon_q)^2]}$$

A "léckerités" (picket-fence) modell feltevésével élve, mely szerint a háttérállapotok távolsága egy D állandó, mátrixelemeik egyenlőek: $V=V_q$, az $(a_d^V)^2$ -ek burkolója egy Lorentz-görbe: $\Gamma_{-}(D/2\pi)$

$$(a_{d}^{\nu})^{2} = \frac{f^{\Gamma} f^{(D/2\pi)}}{(E_{\nu} - E_{d})^{2} + (\Gamma/2)^{2}}$$

Itt

$$\Gamma^2 = 4V^2 + \Gamma_f^2 \text{ és } \Gamma_f = 2\pi V^2 / D .$$

A rendszer klasszikus analogonját egy központi oszcillátorhoz csatolt oszcillátorok együttese jelenti. A központi oszcillátort gerjesztve a csatolás révén gerjesztődik a rendszer normál módusainak teljes skálája.

A valódi állapotok Γ_{v} szélességei a léckerités modellben $(a_{d}^{v})^{2}$ -hez hasonló eloszlást mutatnak. Ha azonban az egyszerű állapot nem stacionárius, hanem Γ^{\uparrow} természetes szélességgel bomlik, akkor Γ_{v} -k eloszlása eltérhet a Lorentz-alaktól, hacsak nem teljesülnek az un. erős csatolás feltételei: $\Gamma^{\downarrow} >> \Gamma^{\uparrow}$, $\Gamma^{\uparrow} >> \Gamma_{v}$ és $\Gamma_{v} << D$. (Itt Γ^{\downarrow} az egyszerű állapotnak a bonyolult állapotokba való elbomlásához tartozó félértékszélessége, értéke némi közelités árán a Fermi-féle aranyszabállyal fejezhető ki:

$$\Gamma^{+} = \frac{2\pi}{D} V^2 \cdot)$$

Erős csatolás esetén érvényes a

$$2\pi \frac{\Gamma_{\nu}}{D} = \frac{\Gamma^{\downarrow}\Gamma^{\uparrow}}{(E_{\nu} - E_{d})^{2} + (\Gamma^{\downarrow}/2)^{2}}$$

összefüggés.

Belátható, hogy Γ_v -kre nézve összegszabály érvényes; több nyitott csatorna esetén pedig a különböző csatornákba való bomlás redukált szélességei között az egyszerű állapot megfelelő szélességei korrelációt teremtenek.

3.1. Az izobár analóg rezonanciák

Az izobár analóg rezonanciák esete az egyszerü gerjesztésre és a közbenső szerkezetre az egyik legjellemzőbb pálda. Az egyszerű állapot a (Z,N) mag kötött állapotának analogonja a (Z-1,N-1) magban, amit ugy nyerünk, hogy miközben egy neutront protonra cserélünk, a hullámfüggvény hely- és spinfüggése nem változik. Ezért a két állapot energiája között mindössze a Coulomb-eltolódás okozta különbség van. Ennek megfelelően a leányállapot gyakran a kontinuumba kerül, ahol a nagy nivósürüség miatt módjában áll sok részre hasadni. Ha most például rugalmas protonszórásban gerjesztjük ezt az állapotot, akkor meggyőződhetünk arról, amit a közbenső szerkezet és a kisérleti energiafeloldás viszonyáról a bevezetőben mondottunk. Egy keV nagyságrendü szélességgel rendelkező analóg rezonancián mérve közepes felbontással (néhány keV) egyetlen rezonancia látható, mig a 250 eV-os feloldással végzett mérés finomszerkezetet mutat. Könnyen megérthető a jelenség, ha szem előtt tartjuk az egyszerű és háttérállapotok keveredéséről mondottakat. A gerjesztési függvényen a növekvő energia irányába haladva a finomszerkezeti rezonanciák compound komponense - amplitudóját és fázisát tekintve - erősen fluktuál, mig az analóg állapotból eredő járulékuk szabályosan változik. Ez okozza, hogy a gyengébb kisérleti felbontás a komplex járulékot nagymértékben kiátlagolja, mig az analóg rezonancia alakját jól láthatóvá teszi.

Az izobár analóg rezonanciák kapcsán szembeötlő, hogy az egyszerű állapot teljes szétoszlását egy közelitőleg érvényes szimmetria megléte akadályozza meg. Ez az izospin szimmetria, ami csak a Coulomb-erő miatt sérül. A közbenső szerkezetek tanulmányozásának egyik inditéka éppen az, hogy segitségükkel információt nyerhetünk a magok szimmetriatulajdonságaira nézve.

3.2. Óriás multipól rezonanciák

Történetileg az első példát a közbenső szerkezetre az óriás dipól rezonanciák szolgáltatták. Nehéz magok (A>60) dipól rezonanciái egy vagy két csucsot hoznak létre a spektrumban, annak megfelelően, hogy a mag gömbszerü-e, vagy erősen deformált. Könnyü és közepes magokban azonban a rezonancia számos finomszerkezeti csucsra hasad. Az egyszerü állapot, az "óriás dipól állapot", a mag ψ_0 alapállapotából az elektromos dipól-sugárzás operátorával állitható elő:

$$|\Omega_{gd}\rangle = E1|\psi_0\rangle$$

A hidrodinamikai modell szerint az állapotnak igen szemléletes tartalma van: a nukleonoknak olyan kollektiv mozgását jelenti, melyben a neutronok és a protonok ellentétes fázisban dipólusan rezegnek. Az alapállapotra vezető elektromos dipól-átmenetek erősségét összegszabály korlátozza, melyet az $|\Omega_{gd}\rangle \rightarrow |\psi_0\rangle$ átmenet erőssége teljesen kimerit. Az $|\Omega_{gd}\rangle$ konfiguráció azonban

nem sajátállapota a teljes Hamilton-operátornak; a maradék kölcsönhatás összekeveri más konfigurációkkal, de csak az "óriás dipól állapotnak" egy korlátozott környezetében. Ha az egyedi compound rezonanciákat a kisérlet nem oldja fel, az óriásrezonancia széles pupként jelentkezik.

Más multipól rezonanciák hasonló módon vezetnek közbenső szerkezet kialakulására. Fokozatosan gyülnek a kisérleti bizonyitékok az óriás kvadrupól, oktupól, hexadekapól és monopól rezonanciák létére vonatkozóan.

3.3. Nehézion-rezonanciák

A ¹²C+¹²C szórásban mutatkozó rezonanciák 1960-ban történt felfedezése óta számos nehézion-reakció gerjesztési függvényében figyeltek meg oszcillációt [5]. (Az elmult évben a jelenségkör határa tovább tágult a nagyobb tömegszámok irányába.) Ennek a rezonanciaszerkezetnek a természete még nem tisztázott. A könnyü rendszerekkel kapcsolatban a legnagyobb sikert azok a modellek érték el, amelyek szerint a rezonanciák kvázimolekuláris állapotoknak felelnek meg. Ezek az állapotok ugy jönnek létre, hogy a két ütköző atommag összetapad, de – a reakció skáláján mérve – számottevő ideig nem olvad eggyé, csupán a fragmentumok kis energiáju belső gerjesztése következik be.

Sok esetben a gerjesztési függvény finomszerkezetet mutat, a compound állapotokkal való keveredés folytán. Más esetekben a finomszerkezet hiányára kézenfekvő magyarázatként kinálkozik a megfigyelt állapotoknak az yrast-vonalhoz való közelsége.

Feshbach és mások [6] javaslata nyomán a következőképpen kell tekintenünk a jelenséget. Az optikai rezonanciák által kijelölt energiaablakokban valamiképpen doorway-állapotok* alakulnak ki. Létrejöttük pontos mechanizmusát és az állapotok pontos természetét nem ismerjük. Nem is feltétlenül azonos tipusuak; egy jellemző példa az előbb emlitett modell, melyben a rugalmatlan csatorna csatolódása vezetett a doorway-állapotok megjelenéséhez. Michaud és Vogt [7] szerint más tipusu doorwayállapot alakul ki, melyet az egyik magnak clusterekre való szeparációja jellemez. Bármi legyen is azonban az alakrezonanciát fragmentáló csatolás, gyengének kell lennie, hiszen egyszerü állapotokat akkor lehet kimutatni, ha Г* kicsi. Ugyancsak a kisérleti megfigyelés szempontjából fontos az a tény, hogy a fragmentálódás által létrehozott több valódi állapot különböző csatornákba különböző valószinüségekkel bomolhat, a hullámfüggvény maradék részének milyenségétől függően.

*A doorway-állapot elnevezést különböző szerzők más és más értelemben használják. Itt azokat az egyszerű állapotokat tekintjük doorway-állapotoknak, amelyek a reakció ki- vagy bemenő csatornája által definiált egyrészecske-állapotoknál egy lépcsővel bonyolultabb gerjesztések. Ez a megfogalmazás általánositása az eredeti jelentésnek: a páros-páros magokon egy nukleonnal kiváltott reakció során az első "ütközés" által létrehozott 2 részecske-l lyuk állapotoknak.

A most vázolt alapállásból kiindulva Pocanic és Cindro félempirikus receptet adott a rezonanciajelenségek létének megjóslására [8]. Módszerük azt a korábbi felismerést teszi kvantitativabbá, mely szerint rezonanciákra olyan rendszerekben számithatunk amelyekben viszonylag kicsi az állapotsürüség. Azt az energiatartományt, amelyben az egyszerü állapot számottevő amplitudóval megtalálható, a $\Gamma^{+}=~2\pi V^{2}\rho$ szélesség határozza meg. Mint már emlitettük, az észlelés feltétele I⁴ kicsiny volta. V viselkedéséről keveset tudunk; a szerzők nézete szerint azonban a p(E,J) tényező játssza a döntő szerepet. Erre mutat a következő megfigyelés. Egy olyan koordinátarendszerben, melynek x tengelyére a J(J+1), y tengelyére az energia van felmérve, egyegy rendszer megtalált rezonanciái jól illeszthetők egy, a Fermi-gáz-modellből számitott $\rho(\mathbf{E},\mathbf{J})$ = állandó görbével. ρ igy meghatározott értékei a tömegszam függvényében exponenciális görbét rajzolnak ki. Az atommag azonban nem Fermi-gáz, figyelembe kell tehát venni a héjeffektusokat is. A Gilbert-Cameron formulával számolt nivósürüség az imént emlitett görbe alá esik azokra a rendszerekre vonatkozóan, amelyek mutatnak rezonanci-át; fölé kerül azokra vonatkozóan, amelyek nem. A néhány ismert példa az 24≤A≤32 tömegszámtartományban ezt az elhelyezkedést követi a többi magra nézve pedig ez a modell előrejelzése. A nehezebb magok felé extrapolálva az 36Ar és a 40Ca képében ujabb kisérleti példákat találunk [9,10], amelyek összhangban állnak a modell jóslatával.

3.4. Egyrészecske-állapotok

Az atommagok egyik legmeglepőbb tulajdonsága a héjmodell érvényessége: annak a feltételezésnek a helyessége, hogy a nukleonok egyrészecske-állapotokban helyezkednek el. Ezek az állapotok az összes többi nukleon által kialakitott átlagpotenciál diszkrét energianivói. A maradék kölcsönhatás természetesen összekeveri az egyrészecske-állapotokat, de nem azonos mértékben. Közülük azok, amelyek kevésbé oszlanak szét egyszerű gerjesztésnek minősülnek, és az adott körülményektől függően többé vagy kevésbé viselik a közbenső szerkezet jellemzőit is.

Mélyen a Fermi-szint alatt lévő betöltött nivók tanulmányozására kiütési (knock-out) reakció a legalkalmasabb, mig a Fermi-szint alatt közvetlenül elhelyezkedő állapotok a felcsipési (pick-up) reakció segitségével vizsgálhatók. Az alacsonyan fekvő betöltetlen egyrészecskepályák tanulmányozására a lefosztási (stripping) és a direkt befogási (capture) reakciók használhatók.

A nagyobb gerjesztési energia felé haladva a magok nivói sürüsödnek, szerkezetük bonyolódik; a héjmodell konfigurációinak keveredés fokozódik. Azonban még a szeparációs energia fölé gerjesztett nukleonok esetében sem mosódik el teljesen az egyrészecske-kép. Ezt mutatja például a homályosüveggömb-modell sikere. E modellel a rezonanciák redukált szélességeinek az alábbi eloszlása van összhangban:

$$\frac{\langle \gamma_{\lambda}^{2} \rangle}{\langle D \rangle} = \frac{\frac{1}{2\pi} \gamma_{sp}^{2} W_{p}}{(E_{\lambda} - E_{p})^{2} + \frac{1}{4} W_{p}^{2}}$$

Itt γ_{sp}^2 az egyrészecske-rezonancia redukált szélessége, E_p az energiája, W_p pedig az a tartomány, amelyen az egyrészecskeállapot szétoszlik. W_p = 2 W_o , ahol W_o az optikai potenciál képzetes része. <D> a nivók átlagos távolságát jelöli, $\langle \gamma_{\lambda}^2 \rangle$ pedig az egyrészecske állapot felhasadása révén létrejövő E_{λ} energiáju valódi rezonancianivók redukált szélességeinek átlaga. A $\langle \gamma_{\lambda}^2 \rangle /$ erősségfüggvényben maximumok és minimumok váltják egymást nemcsak az energia, hanem a tömegszám függvényében is, ha az átlagos redukált szélesség és nivótávolság hányadosát egy meghatározott E energia környezetében számitjuk ki. Az s és p hullámu neutronok erősségfüggvényére nézve pedig érdekes, és egymással csak részben egybehangzó eredményeket szolgáltattak az eddigi (p,n) és (p,p) vizsgálatok [11].

3.5. Alfa-molekulaállapotok

Egyes rugalmas és rugalmatlan α-szórási kisérletek analizise a kisérletben jelentkező magállapotok között olyan korrelációt mutatott, amely nem tudható be fluktuációnak. Az ezért a korrelációért felelős egyszerü állapot természetére nézve is születtek feltevések [12], aminek eredményeként a közbenső szerkezet tipusai közé be lehet sorolni egyes alfa-cluster állapotokat is.

Több, egymással versengő értelmezés létezik a rugalmas αszórásban bizonyos magoknál mutatkozó nagyszögü anomáliával kapcsolatban [13]. Elképzelhető, hogy ez a jelenségtipus is csatlakozni fog a közbenső szerkezetü állapotok táborához.

Számos – elsősorban rugalmas szórási és α -transzfer – mérés vezetett olyan rezonanciaállapotok megtalálásához, amelyek speciális α -szerkezettel rendelkeznek. Az ilyen tipusu gerjesztések azonositásában fontos szerep jut az egy- α -részecske-szélességeknek. Gyakran ezek az állapotok felhasadnak, de rendszerint kevés tagra. Összegezett redukált szélességeik sokszor a Wigner-határ jelentős részét teszik ki [14,15,16,17].

Köszönettel tartozom Lovas Rezsőnek a kézirat gondos átolvasásáért és értékes észrevételeiért.

Hivatkozások

[1]	H.	Feshbach	, Comr	nents	Nucl	, Part. Phys. 1	(1967) 40
[2]	С.	Mahaux,	Ann. 1	Rev. N	ucl.	Sci. 23 (1973)	193
Ī3Ī	Α.	Mekjian,	Advar	nces i	n Nu	21. Phys. 7 (197	3) 1
[4]	C.	Mahaux.	Proc.	Conf.	on	physics of mediu	m light nuclei,
	SZE	erk.: P.	Blasi	és R.	Α.	Ricci (Editrice	compositori,

Bologna, 1978) 365 o.

- [5] Cseh J, ATOMKI Közlemények 20 (1978) 329
- [6] H. Feshbach, Journal de Physique, Colloque C5-177 (1976)
 [7] G. Michaud és E. W. Vogt, Phys. Lett. 30B (1969) 85
 G. Michaud és E. W. Vogt, Phys. Rev. C5 (1972) 350
- [8] D. Pocanic és N. Cindro, J. Phys. G: Nucl. Phys. 5 (1979) L25
- [9] N. Cindro, J. D. Moses, N. Stein, M. Cates, D. M. Drake,
- D. L. Hanson, and J. W. Sunier, Phys. Lett. 84B (1979) 55
- [10] M. Paul, S. J. Sanders, J. Cseh, D. F. Geesman, W. Henning, D. G. Kovar, C. Olmer, and J. P. Schiffer, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 1310 S. J. Sanders, M. Paul, J. Cseh, D. F. Geesman, W. Henning,
 - D. G. Kovar, C. Olmer, and J. P. Schiffer, közlésre előkészitve
- [11] E. G. Bilpuch, A. M. Lane, G. E. Mitchell, and J. D. Moses, Physics Reports 28C (1976) 147
- [12] A. Budzanowski, Kernforschungsanlage Jülich Gmbh. Jül-Conf.-16 (Vol.2) 138 (1975)
- [13] K. Grotwski, Nukleonika 22 (1976) 257
- [14] H. T. Fortune, J. Phys. G: Nucl. Phys. 5 (1979) 381
- [15] H. R. Weller, Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 247
- [16] K. D. Artemov, V. Z. Goldberg, I. P. Petrov, V. P. Rudakov, I. N. Serikov, V. A. Timofeer, and P. R. Christensen, Nucl. Phys. A320 (1969) 479
- [17] J. Cseh, ATOMKI Közlemények 22 (1980) 77

Lektor: Kruppa András

SEARCH FOR FOUR-NUCLEON CORRELATION IN 28SI

J. CSEH

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

A group of O⁺ states in ²⁸Si near 13 MeV are reported. The fact that they are seen only in α scattering measurements is considered as an indication of the strong four-nucleon correlation in these states.

KUTATÁS NÉGY-NUKLEON KORRELÁCIÓ UTÁN A ²⁸Si-BAN. A ²⁸Si magban I3 MeV gerjesztési energia körül több O+ spin-paritásu állapotot találtunk. Azt a tényt, hogy ezek az állapotok csak α-szórásban mutatkoznak az erős négy-nukleon korreláció jelének tekintjük.

ПОИСК ЧЕТЫРЕХНУКЛОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ЯДРЕ ²⁸Si. В ²⁸Si найдена группа состояний со спином и четностью О+ вблизи энергии возбуждения 13 МэВ. Эти состояния наблюдались только в измерениях по α-рассеянию, и этот факт считается индикацией на существование сильной четырехнуклонной корреляйии в этих состояниях.

In the energy region where the Coulomb penetrability is not too low and the level density is not too high the elastic scattering of α particles is known as a useful tool in searching for four-nucleon correlation in nuclei. This gave the inspiration for the work presented in this paper.

The α elastic scattering experiments on ²⁴Mg target were performed with the beam of the 5 MeV Van de Graaff generator of ATOMKI. The differential cross sections measured at four backward angles were analysed with the one- and two-level formulae of the R-matrix theory [1]. There were three levels in the excitation functions with J^{π} = 0+ below E^{LAB}_{α} = 4.3 MeV [2]. Table 1 shows the resonance parameters.

The analysis of the data between 4.3 and 5 MeV is in progress. No other resonances of this spin and parity were found in earlier work either [3].

Table 1. The parameters of the 0+ resonances

$E_{\alpha}(MeV)$	$E_{\rm X}({\rm MeV})$	Γ(keV)	Γ_{α}/Γ	$\gamma^2_{\alpha}(\text{keV})$
3.496	12.982	1.4±0.2	1.0-0.1	23
3.565	13.041	3.2±0.3	1.0-0.09	44
3.792	13.235	3.0±0.3	0.97+0.03	23

The 0⁺ states were not detected in the (p,p), (p, γ) and (p, α) reactions [4,5,6], although channel effects do not exclude their appearance in proton reactions, where l=2 is needed to populate the 0⁺ levels. In this partial wave the penetrability is not too low, which is shown by the facts that (i) resonances were found at and below this energy region with l=2 [6,7] and (ii) the l=2 penetrability at $E_{\rm p}AB=1.5$ MeV ($E_{\rm X}$ = 13 MeV) is the same as that for l=1 at about $E_{\rm p}AB=$ = 1.1 MeV and really, resonances of considerable strengths were detected at lower energies [7]. In agreement with what was found in the p channel, the α partial width is equal (within error) to the total width in each case. The sum of the reduced widths amounts to about 20 percent of the Wigner limit.

These facts bring us to the conclusion that the reason why the 0⁺ resonances prefer the α channel to the p channel is the structure of these states; they are characterized by a strong correlation of the four nucleons to be emitted. If a simple excitation of this kind exists, as we suppose, then it is probably fragmented because of the coupling to the background states. So, the number of states that really can be found in a reaction depends largely on the level density of the



Fig. 1. The reduced α widths for the 0⁺ resonances. In the area striped search was performed for 0⁺ states.

background states. The formula of Gilbert and Cameron [8] predicts a density of 7/MeV of J = 0 states, which may give the explonation for the small number of fragments.

The centre of gravity, 13.08 MeV, of these 0⁺ states (fig. 1) coincides remarkably with the $\Delta E\{\frac{4}{7}, \frac{6}{6}\}_{1}$ = 13.43 MeV two-quartet intrashell excitation predicted by Satpathy, Schmid and Faessler [9]. This coincidence is not an evidence of course, for the identity of the two-quartet excitation with the states found by the experiment. To answer the question whether they correspond to each other or not ⁸Be transfer measurements on the one hand and widths extracted from the model on the other hand would be needed.

To sum up, the experiments performed show the existence of a simple excitation in ²⁸Si with strong four-nucleon correlation, although do not give further information about its detailed structure.

The inspiration and kind help of Drs. E. Koltay, E. Somorjai, and L. Végh in this work are gratefully acknowledged.

References

- [1] J. Cseh, thesis, Debrecen, 1976
- [2] E. Koltay, E. Somorjai, Z. Máté, L. Zolnai and J. Cseh, to be published
- [3] J. A. Weinman, L. Meyer Schützmeister, and L. L. Lee, Jr., Phys. Rev. 133 (1964) B590
- [4] A. Tveter, Nucl. Phys. A185 (1972) 433
- [5] J. W. Mass, E. Somorjai, H. D. Graber, C. A. Van den Wijngaart, G. Van der Leun, and P. M. Endt, Nucl. Phys. A301 (1978) 213
- [6] Hunyadi I., Koltay E. és Zolnai L.: ATOMKI Közlemények 17 (1975) 371
- [7] P. M. Endt, C. Van der Leun: Nucl. Phys. A214 (1973) p.1
- [8] A. Gilbert, A. G. W. Cameron: Can. Journal of Phys. 43 (1965) 1446
- [9] L. Satpathy, K. W. Schmid, and A. Faessler, Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 832



MEASUREMENT OF THE EFFICIENCY OF AN ELECTRON SPECTROMETER

B. PARIPÁS*, A. KÖVÉR AND S. RICZ

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

The efficiency of a cylindrical mirror electrostatic electron spectrometer was determined at 150-3000 eV energy region. Data were obtained from the comparison of the intensities of elastically scattered electrons measured on gas target [argon, homogeneous density, $2.4 \cdot 10^{-3}$ Pa($2 \cdot 10^{-5}$ torr)] and the values of the elastic scattering cross section taken from literature.

ELEKTRONSPEKTROMÉTER HATÁSFOKÁNAK MEGHATÁROZÁSA. Hengertükör tipusu elektrosztatikus elektronspektrométer hatásfokát határoztuk meg 150-3000 eV energiatartományban. Eredményeinket homogén eloszlásu gáztargeten [argon, 2.4•10⁻³Pa(2•10⁻⁵torr)] rugalmasan szóródott elektronok hozamának és az irodalmi hatáskeresztmetszet értékeknek az összehasonlitásából nyertük.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА. Была определена эффективность электронного спектрометра типа цилиндрического зеркала в области энергии 150-3000 эв. Данные были получены сравнением измеренных и литературных значений потока упругорассеянных электронов на газовой мишени [Ar, 2.4•10-³Pa(2.10-⁵ torr) при однородной плотности].

1. Introduction

The knowledge of the spectrometer detection efficiency in function of energy is necessary for the electron spectroscopic measurements. There are several method to carry out intensity calibration. For direct efficiency measurements in general an electron gun is applied of either the complete system [1] [2] [3] or certain part of it [4]. In the latter case the knowledge of the solid angle and the geometry of the electron paths are also necessary.

The indirect efficiency determination is also used [5] [6] [3] [7] [8]. In this case the efficiency determination is based on the comparison of the well-known (theoretical or experimental) cross sections and the measured data.

*Present adress: State Public Health and Epidemical Station, Miskolc

2. The Apparatus

The Nuclear Atomic Physics Group of ATOMKI has several cylindrical mirror electron spectrometers. We determined the efficiency of one of them which is used to measure the energy distribution of electrons ejected in ion-atom collisions. This is a conventional type axis to axis spectrometer. The schematic drawing of the apparatus is shown in Fig. 1.



Fig. 1. Scheme of the electron spectrometer

The effect of the earth and other disturbing magnetic field is reduced by a double magnetic shielding (μ -metal) around the analyser and by a single one around the other parts of the spectrometer.

The electrons are detected by a B419/BL type channel electron multiplier (CEM) manufactured by Mullard Ltd., England. Pulses from the CEM are formed by a charge sensitive preamplifier and collected by a multichannel analyser (TMC-400) working in multiscaler mode. The spectrometer is controlled by a control unit built in ATOMKI [9] [10].

Intensity of the primary beam is measured by a Faraday cup located at the spectrometer axis. In order to fix the geometrical conditions for the primary beam and to reduce the number of scattered particles it was necessary to use beam collimators fixed to the spectrometer. The axis of these collimators wereadjusted the axis of the spectrometer by a laser beam.

3. The Method of Calibration

In the case of monoenergetic particles the efficiency of the electron spectrometers can be defined as follows. Due to the spectrometer energy spread the detected monoenergetic electron beam of energy E_0 has a certain energy distribution. For monoenergetic electrons the efficiency η of the analyser-detector system is

$$n = \frac{I_d(E_o)}{I_o(E_o)}$$

(1)

where $I_d(E_0)$ is the intensity of electrons at the maximum of the measured peak and $I_0(E_0)$ is the electron intensity entering the entrance of the analyser. In the case of some processes which produce monoenergetic electrons (elastic scattering, Auger effect, etc.) the cross section differential in observation angle 0 (ADCS) is calculated according to the following equation [8][11][12]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Theta) = \frac{I_d(E_o)}{J_o\eta dSn}$$
(2)

where n is the number of target atoms in unit volume, J_0 is the intensity of primary beam, and dS is an integral of the effective solid angle subtended by the analyser and the primary particle path length observed within this solid angle. Further on the product η dS is referred to as spectrometer efficiency, because the knowledge of this integral quantity is entirely sufficient.

In the case of continuous electron spectra the η dS value is also usable, because the connection between the double differential cross section (DDCS) and the measured parameters is [5][12][6][13][2][4]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} (0,E) = \frac{I_d(E)}{J_o n\eta dS dE_{eff}}$$
(3)

where dE_{eff} is the effective energy spread of the monoenergetic electrons passing through the spectrometer.

4. Measurements

Our efficiency calibration is based on the elastic scattering of monoenergetic electrons on homogeneous argon gas target. The pressure of the residual gas in the chamber without target gas inlet was 10^{-4} Pa. During the measurement the pressure of the target gas was $2.4 \cdot 10^{-3}$ Pa. The monoenergetic electrons - having energy spread within 0.2 eV - were produced by an electron gun. The energy range of our measurement was 150-3000 eV, according to the working range of our electron gun. [14].

The pressure of the Ar gas was measured by an ionisation manometer (measuring gauge IM22). It was calibrated by the help of a McLoad manometer. Due to the difficulties of the low pressure measurement by a McLoad manometer the uncertainty of the absolute pressure calibration is rather high, 20 %.

In order to minimize the pressure gradient of the target gas in the vacuum chamber the Ar gas was let into the chamber from the direction of the diffusion pump. For checking the homogenity of gas we placed an other ionisation gauge to the target place and measured the difference between the two manometers. On the basis of this difference the pressure data were corrected [12].

Equation (2) is valid only for single collision conditions. A more general equation is [12][13][4]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} (0) = \frac{I_{d}e}{apx_{2}}$$

$$J_{o}e \qquad \eta dSn$$

(4)

where p is the pressure in the chamber, a is a coefficient, x_1 and x_2 are the path lengths of electrons measured from the target point to the CEM and to the Faraday cup, respectively.

We found that in the low pressure range, where the calibration was carried out, the single collision condition is valid within 3 %.

5. Characteristic of the spectrometer

Fig. 2. shows the scattered electron spectrum measured by our spectrometer at 300 eV primary electron energy on Ar gas.



Fig. 2. The spectrum of scattered electrons emitted from homogeneous Ar gas target bombarded by 300 eV electrons.

The energy calibration curve of the spectrometer can be seen in Fig. 3. The slope of the fitted straight line is c=0.562 V/eV.



Fig. 3. The energy-voltage calibration curve of the spectrometer

Fig. 4. shows the FWHM values as a function of energy. From this curve the resolution of the spectrometer is $\Delta E/E = 1.46 \cdot 10^{-2}$.



Fig. 4. The resolution (FWHM) of the spectrometer as a function of the electron energy.

The data of spectrometer efficiency (ndS) as a function of energy were calculated according to eq. 2. The ADCS values $[d\sigma/d\Omega(\theta)]$ taken from [11], were interpolated to the case of our spectrometer (θ = 42.3°). The number of the target atoms was determined by the help of the following equation:

$$n\left[\frac{1}{cm^3}\right] = 1.287 \cdot 10^{21} \frac{p}{T} \left[\frac{Pa}{K}\right].$$

The results are shown in Fig. 5. The error of the data is 6 % disregarding the absolute pressure determination, but 30 % taking into account it.



Fig. 5. The efficiency (ndS) as a function of energy

6. Summary

The above described simple method seems to be very useful for determination of the relative efficiency of electron spectrometers as a function of energy in the case of gas target, but suitable for absolute calibration, too.

References

[1] R. K. Cacak, T. Jorgensen, Phys. Rev. A2 (1970) 1322
[2] N. Stolterfoht, Z. Phys. 248 (1971) 81
[3] N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, B. Aagard, E. Boving and B. Fastrup, Phys. Rev. A12 (1975) 1313
[4] L. H. Toburen, Phys. Rev. A3 (1971) 216
[5] D. J. Lynch, L. H. Toburen and W. E. Wilson, J. Chem. Phys. 64 (1976) 2616
[6] M. E. Rudd, L. H. Toburen and N. Stolterfoht, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 18 (1976) 413
[7] J. F. Williams, B. A. Willis, J. Phys. B8 (1975) 1670
[8] J. F. Williams, A. Crowe, J. Phys. B 8 (1975) 2233
[9] Kádár I., Kövér A. Mérés és Automatika XXIV. (1976) 67
[10] D. Varga, I. Kádár, A. Kövér, L. Kövér and Gy. Mórik, Nucl. Instr. Meth. 154 (1978) 477
[11] R. H. J. Jansen, F. J. de Heer, H. J. Luyken, B. van Wingerden and H. J. Blaauw, J. Phys. B 9 (1975) 185
[12] Paripás B., Diploma work, Inst. of Nucl. Res. of Hung. Acad. Sci., Debrecen (1979)

- [13] N. Stolterfoht, HMI-B 104 (1971)
- [14] Cserny I., unpublished

Referee: Gy. Szabó

HIGH VOLTAGE TESTS OF ACCELERATION TUBE MODULES CONSTRUCTED FROM C-9 AND FX-26 GLASS INSULATOR RINGS

R. DŽMURAŇ

Nuclear Research Institute of the Czechoslovakian Academy of Sciences, 250 68 Řež u Prahy, Czechoslovakia

and

E, KOLTAY and B, NYAKÓ

ATOMKI H-4001 Debrecen, Pf. 51. Hungary

As shown by electrical breakdown tests on FX-26 glass rings this new material developed by the Karcag Glass Factory can be well used in producing insulator rings for high voltage acceleration tubes.

NAGYFESZÜLTSÉGÜ VIZSGÁLATOK C-9 ÉS FX-26 ÜVEGGYÜRÜKBŐL FEL-ÉPITETT GYORSITÓCSŐ ELEMEKEN. FX-26 anyagu üveg szigetelő gyürükön végzett elektromos átütési mérések arra az eredményre vezettek, hogy a Karcagi Üveggyár uj üvege előnyősen használható nagyfeszültségü gyorsitócsövek gyártására.

ВЫСОКОВОЛЬТНЫЕ ИСПЫТАНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ УСКОРИТЕЛЬНОЙ ТРУБКИ, ПОСТРОЕННЫХ ИЗ СТЕКЛЯННЫХ КОЛЕЦ С-9 и FX-26. Электрические испытания стеклянных изоляционных колец из материала FX-26 показывают, что новое стекло Стеклянного завода в Карцаге может быть хорошо использовано для производства высоковольтных ускорительных трубок.

1. Introduction

In earlier papers [1,2] high voltage performance data have been given on acceleration tube modules composed of C-9 glass rings of the Karcag Glass Factory (Hungary). The results were obtained in high voltage tests performed in the Nuclear Research Institute of the Czecho-Slovakian Academy of Sciences at Rež. Experiences obtained with C-9 tubes of a 5 MV Van de Graaff accelerator during more than ten thousand hours of operation have been summarized in [3].

Better melting and press-forming properties of a new borosilicate glass material of the same factory with code FX-26 called our attention to the possibility of its application in producing acceleration tubes. In a series of high voltage tests aiming at a direct comparison of C-9 and FX-26 glass rings the two sorts of glass turned out to be equally well fitted for withstanding the working conditions of Van de Graaff acceleration tubes. Easier production of rings of high mechanical homogeneity and slightly better electrical properties makes FX-26 preferable to C-9. We plan to check long term properties of FX-26 insulator rings in test runs of actual tubes to be built of the new insulating material.

2. Test tube sections

In the present measurements short tube sections shown in Fig. 1. have been tested electrically.



Fig. 1. Tube module used in electrical tests

The same construction was used throughout our earlier high voltage tests aiming at the selection of proper insulation material for an acceleration tube to be installed at the 5 MV Van de Graaff generator of the Institute [3]. In that series of measurements [1] [2] C-9 glass turned out to be applicable as material of tube insulating elements owing to its high voltage threshold for insulation current and stability against electro-erosion. A complete tube of this configuration and its alternative version with 32 mm inner opening diameter both built of C-9 insulators have been succesfully applied in a Van de Graaff generator of 1 MV rated voltage [4] up to 1.5 MV with maximum field strength of nearly 1.9 MV/m.

3. Experimental

Similarly to the earlier measurements the present high voltage tests were also performed in the Nuclear Research Institute of the Czecho-Slovakian Academy of Sciences where one of the authors (R.D.) had developed a testing bench for measuring dielectric strength up to a voltage of about 200 kV in gaps of acceleration tube sections pumped down inside and pressurized outside in a pressure vessel. The details of the experimental technique and evaluation procedure has been given elsewhere [5]. The schematic diagram of the measuring system is shown in Fig. 2.



Fig. 2. Schematic diagram of the measuring system

High D.C. voltage is generated by a SAMES K 600.4 electrostatic generator. The maximum test voltage is limited to the above mentioned 200 kV by the construction of the high voltage bushing of the measuring vessel. Test voltage is measured by a current meter connected to a calibrated resistor chain and continuously plotted as a function of time by a recorder. The voltage is selected manually at the control desk of the generator. A breakdown sensing device is also contained which in the event of a breakdown occuring in the gap to be tested reduces voltage to zero and subsequently restores it to its original value. The sensitivity of this circuit - i.e. the intensity of the breakdown current necessary for its activating - can be easily adjusted by selecting a proper distance between the sensor and the high tension cable of the generator. The current loading the gap during breakdowns is kept at a low level in order to avoid the forming of breakdown tracks at the electrodes and on the insulator surfaces.

The number of sparks and the intensity of the total current through the gap at a given gap voltage were used as values characterizing the voltage holding properties of the tube element. The number of sparks was counted by the spark counter. Total current was measured by a logarithmic μ A-meter and continuously plotted as a function of time by a recorder of logarithmic scale. Current fluctuations make the quantitative evaluation of meter readings a bit difficult, therefore a current integrator measuring the time integral of the current was applied in series to the current meter. Total charge was indicated by the calibrated charge counter of the integrator circuit.

When putting a given voltage on the gap to be tested surface currents and a series of microdischarges will occur due to impurities and mechanical imperfections of the surfaces of electrodes and insulator rings. The electrical discharges result in the slow cleaning up of the surfaces. As a consequence the number of microdischarges and the current will decrease to a level which is characteristic to the insulating material and to the geometrical configuration of the gap already free of impurities (conditioning). Therefore the measurements consisted of periods of conditioning the gap to a given voltage and those of measuring voltage-current characteristics of conditioned gaps. Use was made of two different methods of conditioning referred to as step by step (sbs) and semiautomatic (sau) methods, respectively.

In the step by step case the tube gap was subjected to voltage differences increased in 10 kV steps according to the time schedule shown in the first part of Fig. 3. The lengths of periods at each voltage were chosen long enough for a complete conditioning of the gap. The proceeding of the conditioning can be checked continuously by the current meters and the discharge counter. Measurements of characteristics were performed after conditioning up to 100, 120 and 140 kV in the form of taking current as a function of voltage difference across the gap changed in 10 kV steps at a speed of 1 step/min.

In the semiautomatic case the output voltage of the generator was set to 120 kV at once. The sensitivity of the breakdown sensing device was enhanced to a level where the discharges occuring during conditioning make voltage switch-off and restoration active. Consequently, conditioning will start at a higher voltage and will be continued during a series of automatic switch-on and switch-off steps the frequency of which will decrease with the proceeding of the conditioning. The effectiveness of the conditioning steps can be influenced by selecting the proper sensitivity of the breakdown sensing device. The voltage of the generator can be increased as time proceeds. The actual voltage tests can be performed by taking characteristics on the conditioned gap as in the former case. The time schedule of our semiautomatic measurements is shown in the second part of Fig. 3.



Fig. 3. Time schedules of the measurements for step by step (sbs) and semiautomatic (sau) case of conditioning.

4. Measurements and conclusion

Measurements were performed by using step by step and semiautomatic methods alternatively on C-9 and FX-26 gaps. For both materials three gaps were tested independently. In Fig. 4. the results of two measurements are shown. In the first part of the figure the results of measurements are shown in which one of the C-9 gaps called as sample 1 was tested by the step by step method. The maximum conditioning voltage used in this experiment was 150 kV, the characteristics were taken up to 100 kV, 120 kV and 140 kV as conditioning proceeded. The lack of any peak in the corresponding intervals of the current record indicates that the gap was conditioned safely up to 140 kV. In the second part of the figure results of a semiautomatic conditioning procedure followed by characteristic measurements are shown for an FX-26 gap called as sample 3. The maximum applied voltage during conditioning amounted to 180 kV, in the characteristic measurable current appeared at 150 kV only.

Numerical data are given in Table 1 for a complete series of step by step measurements on a C-9 gap (sample no.1.) as well as for FX-26 samples no.2 and no.3 conditioned by step by step and semiautomatic ways, respectively.





1.7	21		6	2	٦.
-	<u> </u>	~		-	

				C 0 1	N D	ITI	ON	ING	3							
	C - 9								FX - 26							
Voltage kV	Time Sample min no.		sbs or sau	Numb of spar	er ks	Avara curre i µA	ge nt	Tim	ne Sam n	ple o.	sbs or sau	Nu	mber of arks n	A	i µA	ige ent
10 20 30 40 50 60 70 80 90 100	5 5 5 10 10 10 15 15 30	1	sbs	0 0 0 0 0 0 0 0 1 2 6		0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0		5 5 5 10 10 10 10 15 30	2		sbs		0 0 0 0 0 0 0 0 2 2		0 0 0 0 0 0 1.4	
0-100	9	see in '	CHARA	CTERIS	TICS	5"		9	see	in "(CHARA	CTER	ISTIC	CS"		
110 120	30 30	l sbs 10 31		0.03 0.45	6	30 30			sbs	xs 2 1		Ι	0.68 0.84			
0-120	11	see in "	CHARA	CTERIS	TICS	5"		11	see	in "(CHARA	CTER	ISTI	CS"		
120 125 130 135 140 145 150 155 160 170 180	- 30 - 30 - 16 - -	1	sbs	- 103 186 191 - -		- 7.04 7.22 2.08 - -		15 5 25 25 10 10 15 15 3	3	3		sau				
0-140/170	14	see in '	CHARA	CTERIS	TICS	5"		17	see	in "(HARA	CTER	ISTIC	CS"		
	I			СН	A R	ACT	ER	IST	ICS							
			с -	9					FX - 26							
Voltage kV	tage Time Sample sbs gap previously W min no. or conditioned up t				sly up t	0	Sample no.	sbs or sau		gap condi	p previous ditioned up			sly up to		
				100 k	V]	120 kV 14		kV			100	kV	120	kV	180	kV
				n	1	n 1	n	1			n	1	n	1	n	1
10 20 30 40 50 60 70 80 90 100 110 120 130 140		l	sbs	000000000000000000000000000000000000000		0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0			2	sbs			00000000000	00000000000000000	000000000000000000000000000000000000000	000000000000000000000000000000000000000
150 160 170	1 1 1			-	-				3	sau		-	-		011	2.3 5.8 0.4

Special care has been taken of the cleanness of anticorona rings on the tube electrodes. We learned however from visual observation that part of the current and breakdown measured are due to surface imperfections of the rings, the glass insulators themselves are able to withstand higher voltages than those indicated here.

As far as the current data of sample 3 are concerned, we believe that the decrease of the current with increasing voltage indicated the shortness of the conditioning period in this special series of experiment.

The evaluation of the measurements presented above leads to the conclusion that the optimum voltage limit of the gap defined in [2] amounts to

 $V_{opt} \sim 140 \text{ kV}.$

Consequently, taking mechanical properties also into account glas FX-26 is preferable to C-9 as material of insulator element in acceleration tubes of electrostatic accelerators. We plan to test their long term properties in actual use of tubes built of FX-26.

References

- [1] I. Berecz, A. Kiss, E. Koltay, I. Papp, A. Szalay and R. Džmuraň: Revue de Physique Appliquee 12 (1977) 1511
- [2] I. Berecz, A. Kiss, E. Koltay, I. Papp, A. Szalay és
 R. Dźmurań: ATOMKI Közlemények 19 (1977) 379
- [3] E. Koltay, A. Szalay: ATOMKI Közlemények 16 (1974) 181
- [4] Bácskay Gy., Berecz I., Bódizs D., Kiss A., Koltay E., Papp I., Schadek J., Somorjai E., Szabó Gy. és Szalay S.: ATOMKI Közlemények 11 (1969) 125
- [5] R. Džmuraň: Report UJV 2262-A (1969)

Referee: A. Valek

MŰHELYÜNKBŐL, LABORATÓRIUMUNKBÓL

X-Y RAJZOLÓ PROGRAMOZOTT ILLESZTÉSE TPA-i - CAMAC RENDSZERHEZ

CSERNY ISTVÁN

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51.

Egy X-Y rajzoló CAMAC egységekkel történő vezérlését és FOKAL nyelvü programozását ismertetjük.

PROGRAMMED INTERFACING OF AN X-Y RECORDER TO THE TPA-i -CAMAC SYSTEM. The paper describes the controlling of an X-Y recorder via CAMAC modules and its programming in FOKAL language.

ПРОГРАММНОЕ УПРАВЛЕНИЕ X-Y РЕКОРДЕРА В СИСТЕМЕ ТРА-I - САМАС В работе описывается управление X-Y рекордера с помощью устройств в стандарте КАМАК.

1. Bevezetés

Egy MOSELEY gyártmányu, 2D-2 tipusu X-Y rajzolót [1] illesztettünk TPA-i - CAMAC mérőrendszerhez. A CAMAC modulokon keresztül programozottan vezérelhető rajzoló felhasználható spektrumok kirajzoltatására, skálarajzolásra és egyéb rajzolási feladatok megoldására. A kapott ábrák felhasználhatók grafikus kiértékeléshez, demonstrációs célokra.

2. A rajzoló vezérlése

A rajzoló egy CAM 3.03 plottervezérlőhöz csatlakozik [2]. Az eltérő szabványu jelek illesztéséhez szükségessé vált a rajzoló nulldetektorának [3] módositása. Az áramkör a szokványostól eltérő elemeket nem tartalmaz, igy ismertetésétől eltekintünk. A rajzoló X és Y bemenete a CAM 3.03 modul 10 bites digitál-analóg átalakitóira csatlakozik, igy a felbontás mindkét irányban 1024. A hasznos rajzfelület 38 x 25 cm. A rajzolás pontosságát az X-Y rajzoló paraméterei szabják meg. (pontosság = 0.2 %, nonlinearitás = 3 %). A rajzolás menete a következő: (l. ábra).



1. ábra A rajzolás vezérlése és az időzitési viszonyok vázlata

A PEN CONTROL kimenetről kapott L logikai szint engedélyezi a nulldetektor müködését. A STEP kimeneten megjelenő pozitiv impulzus a nulldetektor SEEK bemenetére jutva elindit egy rajzolási ciklust. Ennek során a toll az X és Y jeleknek megfelelő pozicióba áll be, majd megtörténik a toll letevése (ha előzőleg fölemelt állapotban volt). A tollbeállás és letevés befejeztével egy PLOT COMPLETED impulzus értesiti a számitógépet a rajzolási ciklus végéről. Ekkor küldhető a következő adat a rajzoló felé. A nulldetektor üzemmódkapcsolójának állásától függően a toll letett állapotban marad, (LINE MODE), vagy ismét felemelődik (POINT MODE). LINE üzemmódban a toll felemelése az ENABLE bemenetre kapcsolt H logikai szinttel történhet. Figyelembevéve, hogy az egyes pontok kirajzolása eltérő időt vehet igénybe (ha a toll különböző hosszuságu lépését irjuk elő), időt takarithatunk meg a PLOT COMPLETED impulzus felhasználásával, ahhoz az esethez képest, amikor fix késleltetési idő szabja meg a rajzolás sebességét. Mivel a CAM 3.03 nem rendelkezik megfelelő bemenettel, jelenleg egy CAM 2.05 bemenő regiszter GATE bemenetét használjuk a visszajelzéshez [4]. A későbbiek során egy interrupt kérő modul egyik bemenetét fogjuk használni, hasonló módon.

3. A rajzoló programozása

Egy uj függvényt illesztettünk a FOKAL 1971 KE interpreterbe [5], igy FOKAL programokkal vezérelhető a rajzolás. Most folyik egy több szolgáltatást nyujtó FOKAL változat tesztelése, amelybe szintén beépitettük a rajzoló vezérlését végző függvényt. [6].

A FDIS(X,Y) függvényhivás hatására a rajzoló az X és Y koordinátákkal megadott pontba mozgatja a tollat, és leteszi, ha fent volt.

A FDIS(X) függvényhivás hatására a rajzoló felemeli a tollat, egyidejüleg a CAM 3.03 X regiszterébe beiródik X uj értéke.

Mindkét esetben az argumentumok 0-tól 1023-ig terjedő egész számok lehetnek, ellenkező esetben egészre csonkitva és modulo 1024 lesznek figyelembevéve.

Jóllehet a fönti függvényhivások ismételt alkalmazásával tetszés szerinti rajzolási feladat megoldható – az adott pontossággal – mégsem célszerü, hogy minden elemi rajzutasitás kiadásáról a felhasználónak kelljen gondoskodnia. Ahhoz, hogy a rajzoló a számitógép hatékony perifériája legyen, az ismétlődő részfeladatok elvégzésére alkalmas alapsoftware-rel is el kell látni. Erre a célra egy FOKAL nyelvü szubrutincsomagot készitettünk [7] alapján. A szubrutinokra – csupán a szemléletesség kedvéért – szimbolikus nevekkel hivatkozunk. LOCATE – Papirfelosztás és vonatkoztatási pont (origó) kijelőlése. Segitségével a papirra több kisebb ábrát is készithetünk. (2. ábra)



2. ábra Rozsdamentes acél fotoelektron spektrumai, a spektrum rajzoló programmal kirajzoltatva. A vizszintes skála a kötési energia eV-ben, mig a függőleges skálán az impulzusszám látható.

a., Fe 2p1/2, 2p3/2

b., C ls

c., Cr 2p1/2, 2p3/2

d., Attekintő spektrum

PLOTT - Tollmozgatás a megadott pontbe, egy programkapcsolótól függően fölemelt vagy letett tollal. NORMA - Használatával a memóriában tárolt adatsorhoz automatikusan határozhatjuk meg az Y irányu normálófaktort. (X normálófaktorát az adatok száma határozza meg). NUMBER - Számkiirató rutin. Tetszés szerinti nem negativ egész számokat irathatunk ki vele, kb. 3 mm magasságu számjegyekkel. SCALE - Automatikus skálarajzolásnál külön algoritmus szükséges ahhoz, hogy a beosztások kerek értékekhez essenek, és a lépésköz - a könnyü leolvashatóságot szem előtt tartva - alkalmasan legyen megválasztva. A gyakorlatban jól bevált az 1, 2, 5, 10 stb. osztásköz, mig a 3, 4, 6, stb. részre osztás nehezen kezelhető skálát eredményez. A SCALE rutin az ábrázolás határértékeiből (E1 ill. E2) kiszámolja a skála kezdőértékét és az osztásközt, (DO ill. D) a fenti szempontokat figyelembevéve. Az eljárás a következő: A skálázandó távolságot két tényezőre bontjuk:

abs/E2-E1/ = MT * EX

ahol 1 ≤ MT < 10, EX = 10ⁿ, n egész szám A skála osztásköze, MT értékétől függően:

> D = EX ha MT > 6 D = EX/2 ha MT > 3 D = EX/5 ha MT > 1.5 D = EX/10 ha MT \geq 1

A skála kezdőértékét a következő FOKAL kifejezéssel számithatjuk:

SET DO=D*FITR(E1/D+0.999)

AXIS - Keretet és számozással ellátott skálát rajzol a 2. ábrán látható módon. Meg kell adni részére mindkét skálához a kezdő és végértékeket.

SPHIST - A memóriában tárolt adatsorról vagy annak egy részletéről hisztogramot készit. Az oszlopok szélességét ugy választja meg a program, hogy a rendelkezésre álló szélességet teljesen kitöltse az ábra.

A szubrutinok részletes dokumentációja a belőlük összeállitott és az alábbiakban bemutatott rajzolóprogram listájában megtalálható.

4. Eredmények, tapasztalatok

Az ismertetett szubrutinokból összeállitott spektrumrajzoló program számára bemenő adatként meg kell adni az energiaskála két paraméterét, a papirfelosztást, a kiválasztott szektor számát, továbbá a kirajzolandó spektrumot leiró paramétereket (memória kezdőcim, kezdő és végpont csatornaszáma). A program négyszeri futtatásával kapott eredmény a 2. ábrán látható. Megfigyelhetjük, hogy az egyes programok rajzoltatásánál eltérő papirfelosztást is előirhatunk.

Ezt a programot - kisebb módositásokkal - közel két éve használjuk eredményesen.

A rajzoló nagy tullövéséből (pl. 50 mm-es elmozdulásnál 5 %) és a szervorendszer működéséből következően csak akkor kapunk megfelelő minőségü rajzot, ha a tollat megfelelően kis lépésekben mozgatjuk. A PLOTT szubrutin automatikusan gondoskodik erről.

A spektrumrajzoló program listáját és kezelési utasitását a szerző az érdeklődők rendelkezésére bocsátja.

Hivatkozások

- [1] Operating and Maintenance Manual for 2D-2 AUTOGRAPH
- (F. L. Moseley Co., Pasadena, California)
- [2] CAM 3.03 plottervezérlő gépkönyv, (KFKI-MSZKI, Budapest)
 [3] Operating and Maintenance Manual for G-2B nulldetector
- (F. L. Moseley Co., Pasadena, California)
- [4] CAM 2.05 párhuzamos bemenőregiszter gépkönyv (KFKI-MSZKI, Bp.)
- [5] FOKAL kézikönyv, (KFKI-MSZKI, Budapest)
- [6] Végh J., Kövér Á., és Cserny I.: Közlés előkészületben
 [7] Székely V., Benkő T.-né: Karakterisztikák- diagramok- nomogramok (Müszaki Könyvkiadó, Budapest, 1975)

Lektor: Lőkös Sándor


INTÉZETI HIREK

Az ATOMKI alapitásának 25. évfordulóját bensőséges házi ünnepségen ünnepelték meg az intézet dolgozói 1979. junius 29-én.

Az ünnepségen sor került a 25, 20 és 10 éves törzsgárdajutalmak kiosztására, valamint az évforduló alkalmából még 1978-ban meghirdetett belföldi és nemzetközi jubileumi pályázatok eredményhirdetésére.

Az intézet dolgozói közül 25 éves törzsgárda-jutalmat 19 fő kapott, mig 20 éves törzsgárda-jutalomban 3 fő, 10 éves törzsgárda-jutalomban 13 fő részesült.

Belföldi pályázatot az intézet két kategóriában hirdetett: diplomamunkás-szakdolgozatos kategóriában és tanári kategóriában. A diplomamunkás-szakdolgozatos kategóriában megosztott első dijjal jutalmazta az intézet Batta Gyula fizikust és Debreczeni Imréné középiskolai tanárt; megosztott második dijjal pedig Simig László fizikust és Szmola Ernő fizikust. A tanári kategóriában megosztott első dijat nyert dr. Ménes András és dr. Nagy Mihály, második dijat Boros Dezső.

A nemzetközi pályázatot az ATOMKI szocialista országok fiatal kutatói részére hirdette meg. A beérkezett pályázatok közül I. dijat nyert: A.I. Sljahtyer szovjet kutató (Leningrád) II. dijat nyert: H. Reinhardt NDK-beli kutató (Rossendorf)

III. dijat nyert: W.A. Kaminski lengyel kutató (Lublin). [A pályázatok eredményhirdetése - részletes indokolással megjelent az ATOMKI Közlemények 23/3.1979. számában (281-288)].

Az Országos Atomenergia Bizottság, az MTA Magfizikai Albizottsága és az ATOMKI rendezésében 1979. nov. 23-án az ATOMKIben müszaki-tudományos tanácskozás volt a "Gyorsitók népgazdasági alkalmazása" tárgykörben. A tanácskozáson elsősorban ipari, ipari kutatóintézeti szakemberek és intézetünk kutatói tartottak előadást. A tanácskozás egyik fő célja a Debrecenben létesitendő ciklotron laboratórium kutatási tevékenységének előkészitése, az ilyen irányu érdeklődés, ill. igények felmérése volt.

A Debreceni Orvostudományi Egyetem és az MTA Atommag Kutató Intézete 1979. nov. 30-án közös tudományos ülést rendezett. Az ülésen a DOTE és az ATOMKI közös kutatásairól hangzottak el előadások.

Az ATOMKI-ben létesitendő *ciklotron* beruházási programját az MTA Főtitkára 1979. szeptember 12-én jóváhagyta, ennek alapján egyrészről a TECHSNABEXPORT és a NIIEFA, másrészről az AKADIMPORT és az ATOMKI megbizottainak jelenlétében a ciklotron szállitási szerződése aláirásra került 1979. szeptember 24-én.

1979. február 16-án látogatást tett az ATOMKI-ben Kállai Gyula az MSZMP Központi Bizottságának tagja, a Hazafias Népfront Országos Tanácsának elnöke.

Junius 6-án látogatott az ATOMKI-be *Sarlós István* az MSZMP Központi Bizottságának tagja, a Hazafias Népfront Országos Tanácsának főtitkára. A látogatás alkalmából az intézet igazgatója tájékoztatta a vendéget az ATOMKI-ben folyó kutatásokról és a tervekről.

Augusztus 17-én *Győri Imre*, az MSZMP Központi Bizottságának tagja, a Központi Bizottság titkára látogatott az ATOMKI-be.

Február 28-án a Központi Fizikai Kutató Intézet vezetői tettek látogatást az ATOMKI-ben: Szabó Ferenc főigazgató, a müszaki tudományok doktora, Szegő Károly, Szlávik Ferenc és Hegedüs János igazgatók, továbbá Hegedüs János PB titkár. A vendégeket az MTA részéről Sándory Mihály, az MTA Természettudományi I. Főosztályának vezetője és Jeszenszki Ferenc osztályvezető is elkisérte.

Az ipari kutatóintézetekkel és ipari vállalatokkal tovább épültek az intézet kapcsolatai. A kapcsolatteremtésben fontos szerepet töltenek be a kölcsönös látogatások.

A Dohányipari Kutató Intézet vezetői április 24-én, a Magyar Gördülőcsapágy Müvek müszaki vezérigazgatóhelyettese és vezető munkatársai május 4-én tettek látogatást az ATOMKI-ben.

A Fémipari Kutató Intézet (Bp) vezetői junius l-én látogattak az ATOMKI-be.

1979. február 16-én a Kossuth Lajos Tudományegyetem ünnepi nyilvános tanácsülést tartott. Az ülésen az egyetem diszdoktorává avatták dr. Szalay Sándor akadémikust, cimzetes egyetemi tanárt, az ATOMKI volt igazgatóját, jelenleg tudományos tanácsadóját.

Dr. Szalay Sándor akadémikus, az intézet tudományos tanácsadója 70 éves születésnapja alkalmából a Debreceni Orvostudományi Egyetemtől az egyetem legnagyobb kitüntetését, a "Pro Universitate" érmet kapta.

Dr. Szalay Sándor 70 éves születésnapjáról az ATOMKI-ben ünnepségen emlékeztek meg, amelyek részt vettek Márta Ferenc akadémikus, a Magyar Tudományos Akadémia főtitkára, Tarján Imre, az MTA Matematikai és Fizikai Tudományok Osztályának elnöke, Csikai Gyula, a Kossuth Lajos Tudományegyetem reaktorhelyettese, Damjanovich Sándor a Debreceni Orvostudományi Egyetem rektorhelyettese, Marx György az Eötvös Loránd Fizikai Társulat elnöke, Magyar József, a megyei pártbizottság titkára, dr. Szabó Imre, a megyei tanács elnöke, dr. Postás Sándor a debreceni városi pártbizottság első titkára, dr. Tikász Elek a debreceni városi tanács elnökhelyettese, az intézet munkatársai, volt tanitványok és barátok. Hazánk felszabadulásának 31. évfordulója alkalmából a Magyar Népköztársaság Elnöki Tanácsa az intézet alapitó tagjai közül kiemelkedő munkájuk elismeréséül

dr. Kovács Gyula gazdasági igazgatóhelyettesnek a munkaérdemrend arany fokozata,

dr. Berecz István tudományos munkatársnak a

munkaérdemrend ezüst fokozata,

dr. Máthé György tudományos főmunkatársnak a

munkaérdemrend bronz fokozata kitüntetést adományozta.

A Magyar Tudományos Akadémia főtitkára "kiváló munkáért" kitüntetésben részesitette az intézet 25 éves törzsgárda tagjai közül:

Dustyincza Ferenc hivatalsegéd Kovách Ádámné főelőadó és Sári Kálmán csoportvezető munkatársakat.

A Magyar Tudományos Akadémia főtitkára *főtitkári dicséret*ben és pénzjutalomban részesítette az intézet alapitó tagjai közül:

dr. Medveczky László tud. főmunkatársat,

dr. Bornemisza Györgyné tud. munkatársat és

dr. Ujhelyi Csaba tud. munkatársat.

A Magyar Tudományos Akadémia 1979. évi akadémiai dijjal tüntette ki dr. Medveczky László tud. főmunkatársat és dr. Somogyi György tud. osztályvezetőt a nukleáris nyomdetektorok módszerének továbbfejlesztésére és interdiszciplináris, valamint népgazdasági alkalmazásaira vonatkozóan az utóbbi években elért kiemelkedő eredményeikért.

A Magyar Tudományos Akadémia főtitkára

dr. Bibok Györgynek,

- dr. Gál Jánosnak
- dr. Lakatos Tamásnak,
- dr. Máthé Györgynek
- dr. Sámsoni Zoltánnak és
- dr. Szalay Sándornak

a "kiváló feltaláló" kitüntetés arany fokozatát,

Jeney Sándornak

a kiváló ujitó kitüntetés bronz fokozatát adományozta.

Az 1979. évi ATOMKI-dijak ugyancsak hazánk felszabadulásának évfordulója alkalmából kerültek kiosztásra.

Az 1979. évi ATOMKI intézeti dijat dr. Szalay Sándor akadémikus nyerte el, tudományos iskolateremtő és intézetalapitó tevékenységének, valamint kiemelkedő tudományos eredményeinek elismeréseként.

Az 1979. évi ATOMKI interdiszciplináris dijat dr. Bacsó József tud. munkatárs kapta a Si(Li) röntgenspektrométer kifejlesztéséért, a REA módszer hazai elterjesztéséért és munkatársaival, valamint más intézményekkel együttmüködésben elért interdiszciplináris eredményeiért. Az 1979. évi ATOMKI oktatási dijat dr. Gyarmati Borbálának itélte az intézet vezetősége az intézetben, valamint a Kossuth Lajos Tudományegyetemen végzett több, mint két évtizedes nevelői, oktató tevékenységéért.

Dr. Bacsó József tud. munkatársat az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Bródy Imre dijával, dr. Kiss Árpád tudományos munkatársat pedig Selényi Pál dijjal tüntették ki.

Dr. Fényes Tibor tud. osztályvezető, a fizikai tudományok doktora részére a Kossuth Lajos Tudományegyetem javaslatára az Oktatásügyi Miniszter a "cimzetes egyetemi tanári" cimet adományozta.

Tudományok kandidátusa fokozatot az 1979-es év folyamán az Intézetben 2 fő szerzett, további 1 fő benyujtotta kandidátusi értekezését.

Egyetemi doktori cimet az év folyamán az intézet fiatal kutatói közül 3 fő szerzett.

1978/79 tanévben az ATOMKI-ban szerződéses megbizással dolgozó fizikatanárok kutatási eredményeinek elismeréseként az MTA Természettudományi I. Főosztálya

Németh Gyula Varga László és Szántó Sándor tanárokat pénzjutalomban részesitette.

Az 1979. évi "alkotó ifjuság" pályázat eredménye az alábbi:

Kutatói kategóriában az I. dijat és az ezzel járó 3000,-Ft pénzjutalmat Langer Gábor tud. segédmunkatárs nyerte el. Megosztott II. dijat és 2000,-Ft pénzjutalmat kapott Árváné Sós Erzsébet, valamint Sarkadi László tud. segédmunkatárs.

Mérnök-technikus kategóriában az I. dijat és az ezzel járó 3000,-Ft pénzjutalmat Diós Zoltán mérnök munkája nyerte, a II. dijat és 2000,-Ft pénzjutalmat pedig Kiss László mérnök kapta.

Szakmunkás kategóriában az I. dijat és az azzal járó 3000.-Ft pénzjutalmat *ifj. Szabó Béla* szakmunkás nyerte.

Az MTA által kiirt "alkotó ifjuság" pályázaton kutatói kategóriában *Kövér László* tud. s.munkatárs pályadijat nyert, egyben elnyerte az Akadémia által alapitott ifjusági dijat is.

Az Intézet Igazgató Tanácsa az év folyamán két alkalommal ült össze. Kibővitett ülésein ifjuságpolitikai kérdésekkel, továbbá az ATOMKI nemzetközi kapcsolataival, a nemzetközi tud. együttmüködés kérdéseivel foglalkozott.

Az ATOMKI Osztályvezetői Értekezlete 1979 folyamán is rendszeresen – általában havonta egy alkalommal – ülésezett. Az Osztályvezetői Értekezlet megvitatta az ATOMKI 1979. évi kutatási programját, értékelte az intézet két osztályának, a Nukleáris Elektronikai Osztálynak és a Müszaki Osztálynak az 1978. évi termékelőállitó tevékenységét. Az Osztályvezetői Értekezleteken az alábbi kutatási egységek tevékenysége került részletes megvitatásra:

- Vákuumfizikai és Kvadrupol Tömegspektrometriai Csoport

- Hideglaboratórium
- Röntgenemissziós Analitikai Csoport
- GeokronológiaI.
- Geokronológia II.
- Müszaki Osztály.

A februári Osztályvezetői Értekezleten a gazdasági igazgatóhelyettes számolt be az intézet 1978. évi gazdálkodásáról és tájékoztatást adott a gazdálkodás 1979. évi kereteiről és feltételeiről.

1979 májusában az intézet igazgatójának döntése alapján létrejött az ATOMKI *Közmüvelődési Bizottsága*. A Bizottság tagjai az intézet sajtófelelőse, oktatási felelőse és e felelősök helyettesei, az intézeti tudományos titkár, továbbá a szakszervezet és a KISZ képviselője. A bizottság elnöke dr. Medveczky László tud. főmunkatárs, helyettese dr. Vatai Endre tud. főmunkatárs. A Bizottság feladata a közmüvelődési, sajtó és oktatási feladatok ellátása, e területek összefogása és az emlitett területeken jelentkező aktuális problémák folyamatos megoldása.

979. márciusában az intézet KISZ Bizottságának titkárává Hertelendi Ede tudományos segédmunkatársat választották meg.

1979. folyamán az ATOMKI-ben 109 külföldi vendéget, illetve külföldi látogatócsoportot fogadtunk.

Az idelátogató vendégek közül név szerint az alábbiakat emlitjük meg:

N.M. Szinyov, a Szovjetunió Allami Atomenergia Bizottságának elnökhelyettese,

A.A. Vasziljev, a Szovjetunió Allami Atomenergia Bizottságának főosztályvezetője,

I.V. Petrjanov kutató intézeti osztályvezető.

A szovjet vendégek a Debrecenben rendezett Atomenergetikai tudományos ülésszakon vettek részt 1979. okt. 2-án és ezt követően látogatást tettek az ATOMKI-ben.

A.I. Barisnyikov és

E.L. Jadrovszkij tudományos főmunkatársak,

N.N. Titarenko tud. munkatárs szovjet vendégek, mindhárman a Fizikai Energetikai Intézet (Obnyinszk) munkatársai, a két intézet közötti együttmüködés keretében 12 napot töltöttek az ATOMKI-ben.

Dr. J.D. Lawson neves angol fizikus professzor, a Rutherford Laboratory (Chilton) vezető munkatársa látogatást tett és előadást tartott az intézetben.

A laoszi Oktatási Minisztérium háromtagu delegációja félnapos látogatást tett az intézetben aug. 21-én.

Dr. Bister Mantti finn professzor és

dr. Anttila Asko finn tud. munkatárs a helsinki Müszaki

Egyetem munkatársai együttmöködés előkészitő tárgyalás és diszkusszió folytatása céljából egy-egy hetet töltöttek az ATOMKIben.

Prof. V. Mercea román fizikus professzor (Institute for Isotopic and Molecular Technology, Cluj-Napoca) néhány napos látogatást tett és előadást tartott az ATOMKI-ben.

Bolgár pártküldöttség látogatása az ATOMKI-ben, I. Milucsev, a Bolgár Kommunista Párt KB. osztályvezetőjének vezetésével 1979. május 9-én.

1979 folyamán az intézet kutatói és mérnökei összesen 100 alkalommal utaztak külföldre, konferenciákon, kongresszusokon vagy tudományos tanácsülésen való részvétel, illetve tanulmányut, tudományos együttmüködés keretében hosszabb-rövidebb tanulmányok, kutatómunka folytatása vagy tapasztalatcsere céljából.

Hosszabb külföldi munkavállaláson a Szovjetunióban tartózkodott az év folyamán Végh László tud. munkatárs, aki 1978 februárjában kezdte meg munkáját a dubnai Egyesitett Atommagkutató Intézetben. Ugyanitt munkavállalásának harmadik évét kezdte meg Tárkányi Ferenc tudományos munkatárs. Eredetileg mindketten 2 éves munkavállalásra mentek ki, most két-két éves hosszabitást kértek és kaptak.

Dr. Fényes Tibor tud. osztályvezető 1979. szept. 1-től 5 hónapos munkavállalásra utazott az USA-ba, ahol a Kentuckyi Egyetem Fizikai és Asztronómiai Karán dolgozott.

Dr. Lovas Rezső tud. munkatárs akadémiai egyezményes tanulmányuton három hónapot töltött Angliában az Oxfordi Egyetem Magfizikai Laboratóriumában és a Tudományos Kutatási Tanács Daresburyi Laboratóriumában.

Kalinka Gábor tud. segédmunkatárs akadémiai egyezményes tanulmányuton Leningrádban, a Szovjet Tud. Akadémia Magfizikai Intézetében (Gatcsina) dolgozott 1979 április-májusban egy hónapot.

Dr. Kovács Zoltán tud. segédmunkatárs a dubnai Egyesitett Atommagkutató Intézetben töltött munkavállalással két hónapot.

Cserny István tud. segédmunkatárs akadémiai egyezményes tanulmányuton a Csehszlovák Tud. Akadémia Magkutató Intézetében (Prága-Rez) egy hónapig dolgozott közös kutatásokon.

Dr. Valek Aladár tud. főmunkatárs egyhónapos egyezményes tanulmányuton volt Finnországban, ahol a Turkui Egyetem Fizikai Tanszékén dolgozott.

Az ATOMKI az alábbi külföldi intézményekkel áll szorosabb együttmüködésben:

az Egyesitett Atommagkutató Intézet, Dubna, ahova a fentieken kivül 7 munkatársunk utazott néhányhetes tanulmányutra, mig onnan 4 vendég érkezett,

a Fizikai Energetikai Intézet, Obnyinszk ahol egy munkatársunk töltött két hetet, mig onnan 6 vendég érkezett az ATOMKI-be,

a Központi Magfizikai Kutató Intézet, Rossendorf, ahol három munkatársunk dolgozott egy, ill. két hetet, onnan ide 2 vendég jött l ill 2 hétre, a Csehszlovák Tud. Akadémia Magkutató Intézete (Prága, Rez) ahol az intézet négy munkatársa dolgozott 2-2 hetet, mig onnan 6 munkatárs töltött 1-2 hetet az ATOMKI-ben, a Varsói Egyetem Fizikai Intézete, Varsó, ahol négy munka-

a Varsói Egyetem Fizikai Intézete, Varsó, ahol négy munkatársunk volt egy-két hetes tanulmányuton, onnan pedig 2 vendég érkezett az ATOMKI-be.

Az intézeten belüli szakmai továbbképzés fontos fórumát jelentik az intézeti szemináriumok, amelyeket 1979-ben is rendszeresen megtartottunk,az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Magfizikai Szakcsoportjával közös rendezésben. Az általában hetente egy alkalommal elhangzott előadásokat az ATOMKI kutatóin kivül esetenként felkért belföldi vagy külföldi vendégelőadók tartották.

Az előadásokat szakmai vita követte.

1979. év folyamán referálódélutánokon az alábbi előadások hangzottak el:

- január 18. Langer Gábor: "Folyadékok gáztartalmának mérésével kapcsolatos vizsgálatok".
- január 25. Berényi Dénes: "Az ATOMKI közmüvelődési feladatai".
- február l. *Tóth Endréné és Somogyi György:* "A nyomfestéses detektálási technika kifejlesztésének tapasz-talatai".
- február l. Szőkefalvi-Nagy Zoltán (KFKI): "Analitikai vizsgálatok töltött részecskékkel keltett reakciók segitségével". (Beszámoló belgiumi tanulmányutról.)
- február 15. *Székely Géza:* "Vita az intézeti számitógépek hatékony felhasználásáról".
- február 22. *Szántó Lajos* (MTA Tudományszervezési Csoport) "Tudománypolitikánk időszerü kérdései".
- február 23. Shaker M.M. Al-Jobori (Iraqi Atomic Energy Comission, Bagdad): "Determination of chemical composition of crude oils using nuclear methods".
- március 7. Bacsó J., Kis-Varga Miklós, Kovács P., Kalinka G., Mórik Gy.: "Sárgarézelemző berendezés (fejlesztés, üzemi tapasztalatok).
- március 15. Sarkadi László: "Nehézion-bombázással létrehozott röntgensugárzás tulajdonságainak vizsgálata Van de Graaff generátoron".
- március 22. Kövér Ákos: "Beszámoló az aarhusi (Dánia) tanulmányutról".
- március 29. Kovách Ádám: "Rb-Sr kormeghatározások az Alpok keleti nyulványain".

április 5. *Medveczky László*: "A neutrondozimetria problémái".

április 12.	<i>Kellermann Lászlóné és Szabó József</i> (KLTE):"A DIGIGRAF 1008 rajzgép és alkalmazásai".
április 19.	<i>Árva Ernőné:</i> "A Mecsek hegység és környéke mag- más és metaform kőzeteinek K-Ar módszeres vizs- gálata".
április 26	<i>Zimányi József</i> (KFKI): "Ideghálózatok önszer- vezésének egy matematikai modellje".
május 3.	Lovas Rezső: "Beszámoló az angliai tanulmány- utról".
május 10.	Dajkó Gábor:"Eredmények és tervek az elektroké- miai nyommaratási technika fejlesztésével és alkalmazásával kapcsolatban".
május 17.	Arvay Zoltán, Kibédi Tibor, László Sándor: "In-beam konverziós elektron spektrum mérések szupravezető mágneses spektrométerrel".
május 24.	Gulyás János, Krasznahorkay Attila, Dombrádi
••	Zsolt: A ¹⁰⁰ Tc, ⁹⁶ Nb és ⁹⁴ Nb atommagok szerkeze- tének vizsgálata".
május 31.	J.B. Lawson: (Rutherford Laboratórium, Anglia) Beam-particle Interactions
junius 4.	<i>Sulik Béla:</i> "Holtidő okozta mérési hibák csök- kentése nukleáris elektronikai mérőrendszerek- ben."
junius 7.	<i>Schlenk Bálint:</i> "Az alapkutatás és szerződéses munkák viszonya az ATOMKI-ban."
junius 14.	Paál András és Molnár József: "Mágneses tömeg- spektrométer mikroszámitógépes mérésvezérlő és kiértékelő rendszere kálium-argon kormeghatá- rozási célokra."
junius 18.	M.S. Antony: "Time of Flight Spectrometer Using Micro Channel Plates".
junius 21.	<i>Nyakó Barna:</i> "Mérési és kiértékelési problémák Doppler-hatáson alapuló magfizikai vizsgálatok- ban."
szeptember	B. Dr. Takács Jenő (Oxfordi Egyetem Magfizikai Labor): "Folyamatban lévő kutatások az oxfordi Van de Graaff generátornál és a fejlesztéssel kapcsolatos tervek."
szeptember	6. <i>Berecz István</i> :"Vákuumtechnikai eszközök és be- rendezések fejlesztése." (kandidátusi érteke- zés házi vitája)
szeptember .	Doc. 0. Gzowski (Technical University of Gdansk) "Oxide Glasses and Their Application to Electron Detecting (channel electron multiplier devices)

szeptember 20. Professor H. Aiginger, (Atominstitut der Österreichischen Universitäten, Accelerator Dept. Wien): "Experimental Activities at the Accelerators of the Atominstitut der Österreichischen Hochshulen." szeptember 27. Dr. K. Richter (Zentralinstitut für physikalische Chemie, Berlin, DDR): "Quantitative XPS Measurements". október 11. Koltay E: "Ion mikronyalábok és analitikai alkalmazásaik." Bibok György, Paál András: "Beszámoló a 16. Európai Ciklotron fejlesztési találkozóról". Dr. D. Decowski (Varsói Egyetem): Mechanism of október 18. "Direct Nucleon Capture". október 25. Pálinkás József: "Elektronbombázással kiváltott belsőhéj ionizációs vizsgálatok a 60-600 keV energia tartományban" (egyetemi doktori diszszertáció) Varga Dezső: "Insztrumentális kutatások és fejnovember 1. lesztések mag- és elektronspektroszkópiai vizsgálatokra." (kandidátusi értekezés házi vitája) Pócsik György: "A gyenge és elektromágneses november 8. kölcsönhatások egyesitett elméletének kisérleti helyzete (semleges gyenge áramok) (ELTE). Prof. C. Rolfs: "Magreakció-kutatások a münsteri november 21. egyetemen." november 29. Prof. V. Mercea, (Institute of Isotopic and Molecular Technology, Cluj-Napoca). "Investigations in the Field of Atomic and Molecular Collisions." Kiss Dezső, (KFKI): "Attekintés a dubnai EAI december 6. tevékenységéről." Bornemisza Györgyné: "A ciklotron néhány feldecember 10. használási területének áttekintése, irodalmi felmérés alapján." december 18. Székely Géza: "Tapasztalatok és tervek a PDP 11/40 adatkoncentrátorának üzemeltetésével kapcsolatban."

Összeállitotta: Kovách Ádámné

Az ATOMKI Közlemények negyedévenként jelenik meg. Terjeszti az ATOMKI Könyvtára (Debrecen, Postafiók 51, 4001). Tudományos intézetek és könyvtárak kiadványaikért cserébe vagy ellenszolgáltatás nélkül is megrendelhetik. Kérésre egy-egy számot vagy különlenyomatot magánszemélyek is ingyen kaphatnak.

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 az ATOMKI nyomdájában

Törzsszám: 11313 Debrecen, 1980/2 Példányszám: 440

MACYAR MANYOS AKADOM KONYVIARA

ATO M KI сообщения

TOM 22 / №2

СОДЕРЖАНИЕ

	стр
ПОЗДРАВЛЕНИЕ АНАДЕМИНА ШАНДОРА САЛАИ ПО СЛУЧАЮ ЕГО СЕМИДЕСЯТИЛЕТИЯ	37
НАУЧНЫЕ СООБЩЕНИЯ	47
Т. Старичкаи: Технические приемы при сильноточных нейтронных генераторах с твердой мишенью	47
 Й. Чех: Простые возбуждения атомных ядер и промежу- точная структура 	71
Й. Чех: Поиск четырехнуклонных корреляций в ядре ²⁸ Si	79
Б. Парипаш, А. Невер и Ш. Риц: Определение эффек- тивности электронного спектрометра	83
Р. Джмурань, Э. Нолтаи и Б. Ньако: Высоковольтные испытания элементов ускорительной трубки, пост- роенных из стеклянных колец С-9 и FX-26	89
ПО МАСТЕРСНИМ И ЛАБОРАТОРИЯМ	97
И. Черни: Программное управление X-Y рекордера в системе TPA-i - CAMAC	97
ИНСТИТУТСНИЕ ИЗВЕСТИЯ	103

ATOMKI BULLETIN

Volume 22/ Number 2

CONTENTS

1

CONGRATULATIONS ON THE OCCASION OF THE SEVENTIETH BIRTHDAY OF ACADEMICIAN SÁNDOR SZALAY	37
SCIENTIFIC PAPERS	47
T. Sztaricskai: Technical solutions for high intensity solid target neutron generators	47
J. Cseh: Simple excitations of nuclei and intermedi- ate structure	71
J. Cseh: Search for four-nucleon correlation in 28Si	79
B. Paripás, Á. Kövér and S. Ricz: Measurement of the efficiency of an electron spectrometer	83
R. Džmuraň, E. Koltay and B. Nyakó: High voltage tests of acceleration tube modules constructed from C-9 and FX-26 glass insulator rings	89
FROM OUR WORKSHOP AND LABORATORY	97
I. Cserny: Programmed interfacing of an X-Y recorder to the TPA-i-CAMAC system	97
NEWS OF THE INSTITUTE	103

ATO MKI **KÖZLEM ÉNYEK**

22. kötet /3. szám

TARTALOMJEGYZÉK

TUDOMÁNYOS KÖZLEMÉNYEK

Oldal

112

	110
Török I.: Neutronok keltése kompakt ciklotron segit- ségével és a keltett neutronok néhány lehetséges alkalmazása	113
Sailer K., V. K. Tartakovszkij: A ¹² C(p,2p) ¹¹ B reak- ció leirása közepes energiáju bombázó protonok esetén	131
W. A. Kamiński: Coulomb-energiák az uj kvázi- részecske-szkémában az f _{7/2} héjra vonatkozó példákkal.	141
Koltay E., Mórik Gy., Szabó Gy.: Tervtanulmány egy nagyáramu neutrongenerátor gyorsitócsövének és nyalábvezető rendszerének tervezéséhez	155
Jámbor A., Partényi Z., Ravasz-Baranyai L., Solti G., Balogh K.: Dunántuli bazaltos kőzetek K/Ar kormeghatározása	173
Széky-Fuz V., Balogh K., Szakál S.: A Tokaji-hegy- ség intermedier és bázisos vulkánosságának kora és időtartama a K/Ar vizsgálatok tükrében	191
ΜὕΗΕLΥŬΝΚΒŐL, LABORATÓRIUMUNKBÓL	203
Dombrádi Zs.: Nivóséma épitő program	203
Molnár J.: CAMAC REAL-TIME perifériák, CAM 2.04-81 SCALER TIMER modul	211
TUDOMÁNYOS ÉS ISMERETTERJESZTŐ ELÓADÁSOK, ISMERETTERJESZTŐ KÖZLEMENYEK, ATOMKI, 1979	221

539

HU ISSN 0004-7155

310565 *

ATO M KI KÖZLEMÉNYEK

22. kötet / 3. szám



MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1980

ATOMKI Közlemények 22 (1980) 113-129

TUDOMÁNYOS KÖZLEMÉNYEK

NEUTRON PRODUCTION BY COMPACT CYCLOTRONS AND SOME POSSIBLE APPLICATIONS OF THE PRODUCED NEUTRONS*

BY I, TÖRÖK

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

The paper summarizes the properties of the most promising neutron producing nuclear reactions in the energy and ion beam current range of the MGC compact cyclotron. Some possible applications of the neutrons producible by the MGC are discussed in the fields of basic nuclear physics, agriculture, medical therapy, energy research and activation analysis.

NEUTRONOK KELTÉSE KOMPAKT CIKLOTRON SEGITSÉGÉVEL ÉS A KEL-TETT NEUTRONOK NÉHÁNY LEHETSÉGES ALKALMAZÁSA. A dolgozat a legigéretesebb neutrontermelő magreakciók tulajdonságait foglalja össze az MGC kompakt ciklotron energia és ionáram tartományában. Az MGC-vel termelhető neutronok néhány lehetséges alkalmazását tárgyalja a magfizikai alapkutatás, a mezőgazdaság, a terápia, az energiakutatás és aktivációs analizis területén.

ГЕНЕРАЦИЯ НЕЙТРОНОВ С ПОМОЩЫО МАЛОГАБАРИТНОГО ЦИКЛОТРОНА И НЕКОТОРЫЕ ВОЗМОЖНЫЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ГЕНЕРИРОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ. В работе даны важнейшие характеристики самых многообещающих нейтроногенерирующих ядерных реакций в диапазоне энергии и тока ионного пучка малогабаритного циклотрона МГЦ. Обсуждены некоторые возможные использования генерированных нейтронов в области фундаментальной ядерной физики, сельского хозяйства, терапии исследования по энергетике и активационного анализа.

1. Introduction

The future multipurpose cyclotron (a compact cyclotron, type MGC) of the Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences is planned to be used also for neutron production. The present paper discusses the suitable neutron producing reactions and some possible applications of the produced neutrons in medical therapy, agriculture, chemistry,

*Review based on an ATOMKI Seminar lecture, given on 31st January, 1980.

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA KONYVIARA geology, energy research and basic nuclear research, including the investigation of neutron spectra from low yield reactions, where one of the outcoming particles is a neutron. All the material of this paper is restricted to the data available in the library of our Institute. The author hopes that the accumulated data are sufficient to choose the proper mode(s) of neutron production and to define the most promising application fields.

It is an often occurring problem, that many neutron data are known with considerable uncertainties only.

Neutrons as neutral particles are able to induce several processes that charged particles are not. This is a great advantage; but on the other hand, also a disadvantage because it makes difficult to measure the neutron data. It is not rare to find neutron data with uncertainties of a factor of 1.5-2, and the uncertainties sometimes reach even one or two orders of magnitude.

The author tried to concentrate on fields, in which presently not too much work is done; in which fields good results can be achieved soon and relatively cheaply. There is a real demand (scientific, economic or public for these results); we can work in these fields with our present instrumentation or only with a slight modification or the expansion of it. We have proper theoretical background to these problems. The considered fields fit into accepted or probably viable conceptions. These investigations can be based on the present means and traditions of the institute, they do not contaminate the environment too much; and include tasks which can be performed simultaneously (e.g. irradiations for different purposes).

2. The MGC compact cyclotron as a possible neutron source

Nowadays a great variety of neutron sources are available. They differ in the energy spectrum of the produced neutrons, in the neutron yield, in the angular distribution of the neutrons, in the background radiations (e.g. gamma-rays), etc. Besides isotopic and fission based neutron sources, a wide variety of accelerator based neutron sources has been evolved. Several charged particle induced reactions yield neutrons in rather high numbers. Fig. 1. shows a few examples [1]. As an accelerator of charged particles cyclotrons also can be used. Neutrons of up to an energy of several ten MeV-s can be produced in this way with satisfactory yields. Cyclotrons can not compete with other sources in the range of thermal neutron energies - this field is ruled by reactors and moderated spallation sources, because of their larger yields. For us the harder, higher energy part of the spectrum is interesting mainly the fast neutrons. The following part of this paper is based mostly on recent review articles, as e.g. [1-4]. We discuss some promising nuclear reactions in the bombarding energy and ion current range of the MGC compact cyclotron. (MGC is an abbreviation from the Russian equivalent expression for "compact cyclotron"). The expected external beam data of the MGC are summarized in table 1.





With these beam characteristics the only reasonable way to produce neutrons is the bombardment of light elements with the four available particle sort.

Table 1.	The	expected	external	beam	data	of	the	MGC
----------	-----	----------	----------	------	------	----	-----	-----

Bombarding particle	The energy limits of the bombarding particles	Maximal ion current		
p	5 - 18 MeV	50μΑ		
d	3 - 10 MeV	50μΑ		
τ	8 - 24 MeV	25μΑ		
α	6 - 20 MeV	25μΑ		

The bombardment of targets heavier than carbon with such small bombarding energy, though neutron producing reaction channels are open, results in a neutron spectrum which has a medium energy below that desired in most of the practical applications. Most of these neutrons have an energy distribution similar to a Maxwellian one corresponding to a temperature of 1-2 MeV. Only the bombardment of elements lighter than carbon yields sufficiently high average neutron energies around 10 MeV. Many useful reactions yield monoenergetic neutrons in a given direction from thin targets. These reactions fit well the requirements of basic nuclear and neutron physics investigations. For practical applications (like medical therapy, chemical analysis, energy research, irradiations for industrial and agricultural purposes) the high yield is a basic requirement. This requirement can be fulfilled only by the use of thick targets, stopping fully the bombarding particles, and leading to a continuous, wide energy spectrum of the neutrons produced.

The reactions induced by helium isotopes (e.g. $Be+\tau$) give rather high average neutron energies. Cyclotrons accelerate the τ and α particles to higher energies than the hydrogen isotopes, however, the yields of neutrons are several times lower than in the case of p and d bombardment (patly because of the lower beam intensities available at the helium isotopes.) See Fig. 2 [5].



Fig. 2. Neutron yields of several reactions.

The deuterium induced reactions of light elements give high neutron yields. Though the cross sections of the deuterium induced reactions follow a slowly increasing trend toward the heavier target nuclides, the total yield decreases with larger Z. The reason for this is that the range of the deuteron in the target material decreases faster with growing Z than cross sections increase - ions are stopped before inducing a nuclear reaction.

The most promising deuteron induced reactions are the following: ²H+d; ³H+d; Be+d; Li+d. The last two reactions have rather similar characteristics, so the following figures show only one of them in most cases. Fig. 3. [2] displays the differential cross sections for neutron production of the above reactions in the forward direction as a function of deuteron energy. In the energy range of the MGC all the above deuteron



Fig. 3. Differential cross sections for the production of neutrons in the forward direction as a function of deuteron bombarding energy for the reactions of deuterons with targets of ${}^{2}\text{H}$, ${}^{3}\text{H}$, and Be. (Reproduced, with permission, from the Annual Review of Nuclear & Particle Science, Volume 28. © 1978 by Annual Reviews Inc.)

induced reactions show a strong forward peak in the angular distribution of the neutrons. At the maximum deuteron energy of the MGC several 100 mb/sr cross-sections are available. To illustrate the uncertainties another cross section curve is shown in Fig. 4. [6] for the ²H+d reaction. Fig. 5. [2] illustrates the average neutron energies for the mentioned reactions. The ²H+d and ³H+d reactions give almost twice as high mean neutron energy as the Be+d reaction, while the latter shows higher cross section. Sorry, in many cases it is not given how the averaging was performed. Generally, averaging is done on the measured energy interval and not from zero energy. Of course, by averaging only above 5 MeV, much higher average energy can be obtained than by beginning the averaging at e.g. 0.3 MeV. The author hopes that a reasonable common base has been taken for the averaging procedure.

The calculated energy spectra of neutrons originated from the ${}^{2}\text{H+d} + {}^{n+3}\text{He}_{n+p+2}\text{H}$ reactions at two different deuteron energy is shown on Fig. 6. [7]. The yield of the two reaction channels is nearly equal, and the spectrum is hard enough to use in



Fig. 4. Absolute 0[°] cross section for the ²H(d,n)³He reaction in the laboratory system. (Reproduced from ref. [6], with the permission of North-Holland Publishing Co.)



Fig. 5. Average energy of the neutrons emitted in the forward direction in the bombardment of thick targets of ²H, ³H, and Be by deuterons as a function of deuteron energy. (Reproduced, with permission, from the Annual Review of Nuclear & Particle Science, Volume 28. © 1978 by Annual Reviews Inc.)

therapy. The best yield results were obtained by using high pressure gas target [8]. Such a gas target consists of a tube of 10-20 mm diameter, separated by a thin HAVAR foil [9] from the vacuum system of the beam transport tube. The length of the target chamber is several cm, and the pressure of the target gas is 1 - 3 MPa. An average thin closing HAVAR foil withstands the pressure and the heating of the beam about 8 hours. The best results can be obtained in the case of a cooled gas target. If the deuterium gas is forced to circulate through a liquid nitrogen cooling system, the gas temperature of about 80 [°]K facilitates the use of a shorter target (sufficient to stop fully the beam), and thus results in a better source geometry (better penumbra at the irradiation place) and even the HAVAR foil keeps better.



Fig. 6. Calculated neutron spectra for the ${}^{2}H(d,n){}^{3}He$, and ${}^{2}H(d,np){}^{2}H$ interactions. (After ref. [7] with the permission of Office for Official Publications of the European Communities.)

Tritium used as target in low-energy accelerators is generally absorbed in metals like Zr or Ti. For higher energy beams this is not the best target form. Three or five times larger yields can be obtained by using gas targets also in the case of ³H. Anyhow, as tritium itself is a radioactive material a lot of severe radiation protection problems arise from its application. The use of tritium as target material is therefore rather rare in cyclotrons for therapy purposes.

Beryllium and lithium as target materials can be handled much easier, and they are widely used in many cyclotron laboratories for fast neutron production. Because of its low melting point lithium can not withstand high bombarding power in solid phase, but a liquid lithium stream target probably can dissipate even 10 MW [10]!

An about 2 mm thick beryllium target, mounted on copper or stainless steel backing, cooled by tapwater can easily withstand the about 1 kW beam dissipation of the MGC. (The melting point of beryllium is much higher than 1000°C.)

In Fig. 2. the yields of several neutron producing reactions on Be target are compared. Fig. 7 [2] is a similar comparison between thick target yields of neutron producing reactions induced by protons or deuterons on a Be target. The 10 MeV deuteron beam yields just twice as much neutrons as the 18 MeV proton beam. On the contrary, the Be+p reaction gives a harder neutron energy spectrum, more suitable for therapy purposes.



Fig. 7. Thick target yields of high energy neutrons emitted in the forward direction for protons and deuterons incident on thick beryllium targets. The plotted yields are based on the observation of neutrons of energy above 5 MeV for p+Be, and above 2 MeV for d+Be. Many neutrons of lower energy are produced in both reactions, but their number is not accurately known. (from [3]). (Reproduced, with permission, from the Annual Review of Nuclear & Particle Science, Volume 28. © 1978 by Annual Reviews Inc.)

Recently the Li+p reaction on moderately thick target is suggested as a useful reaction for the production of therapeutically usable neutron beam. As the target thickness decreases, the neutron spectrum becomes harder, though the yield decreases. A reasonable compromise can be obtained.

The characteristics of the proton induced (and also those of deuteron induced) neutron producing reactions on Li and Be target are very similar. Fig. 8. shows the results of simple calculations for the angular distribution, and characteristics of the Be+d reaction at 10 MeV deuteron energy. The forward peaking is rather good (the half maximum of the differential yield is on a cone with a half angle of about 20 degrees). This is a property well suited to therapy purposes, because most of the produced neutrons move directly towards the irradiation place. The broad spectrum with the rather small average neutron energy (about 4 MeV), however, is not too promising. The maximum yield by the Serber theory [11] is only at cca. 3.7 MeV. The yield in the forward direction inside a cone of 20 degrees half angle and above 2 MeV neutron energies is about 1.8×10^{11} n/s at 10 MeV and 50 µA deuteron beam.



Fig. 8. Angular distribution and some other parameters of neutrons from the Be(d,n) reaction, at $E_d=10$ MeV.

Fig. 9. gives the possibility to estimate the yield in another way [12]. The curve gives the probability of neutron emission i.e. how many neutrons are produced by an incoming deuteron. The value at 10 MeV is 3.2×10^{-3} and at $13.5 \text{ MeV } 7.2 \times 10^{-3}$. For the 50 μ A ion current of the MGC the yield is about 1.10^{12} n/s . The steep increase of the yield with higher bombarding energy gives an almost three times higher yield of neutrons at only 35 % increase of the deuteron energy (13.5 MeV), and even the neutron spectrum is much harder ($\bar{\text{E}}_{n}$ =6.2 MeV). The ²H+d, Be+p or Li+p reactions give a little higher mean neutron energy at comparable yields.

Fig. 10. shows the thick target neutron yields of p and d induced neutron producing reactions on Be and Li targets at our planned maximum bombarding energies. The curves for Be+d and Li+d at 10 MeV are approximate extrapolations of curves for higher energies, after Lone et al. [13]. There is a difference of more than an order of magnitude at low neutron energies in the spectra for Li+d at E_d =14.8 and 13.4 MeV in Fig. 6. of ref. [13] which is mainly due to measurement difficulties. In former measurements the low energy part of the neutron spectra was not measured reliably. Fast neutron detectors were not sensitive to slow neutrons, and the applied simple theory did not take into account the slowing down of neutrons in thick target and the effect of other possible open neutron producing reaction channels, which all

contribute to the low energy part of the spectra.



Fig. 9. Total neutron yields from deuteron bombardment of thick Be and Cu targets. (Reproduced from ref. [12], with the permission of North-Holland Publishing Co.)



Fig. 10. Thick target neutron yields. Curves 1 and 2 from ref. [13], curves 3 and 4 extrapolations from curves measured at higher energies from the same ref.

3. Some applications of the fast neutrons produced by compact cyclotrons

3.1. Neutron spectrometry

Reactions mentioned above may produce a wide variety of neutrons regarding their energy spectra, angular distribution etc. This fact offers the possibility to investigate the basic nuclear physics of these reactions via neutron spectrometry.

The exact knowledge of the neutron field of a neutron source is a mandatory need for any application purpose, too, so we have to measure the energy and space distribution of the neutrons. For any of the following applications the lack of the knowledge of neutron parameters makes every result questionable, therefore in our Institute we must develop proper neutron spectrometry system, covering the wide energy range of neutrons producible by the MGC.

For such purposes e.g. proton recoil spectrometers, scintillation spectrometers, time-of-flight (TOF) spectrometers can be used. Examples of the first two methods are given in Figs. 11 and 12. With these two complementary systems the



Fig. 11. Block scheme of the fast neutron scintillation spectrometer measuring setup at the Škoda Works. (Reproduced from ref. [14], with the permission of Škoda-Works.)

energy range of 10 keV-10 MeV can be covered [14]. The best results can be obtained by TOF measurements, for which an arrangement is shown in Fig. 13 [10]. Because of the limited flight-path length at our planned MGC, the realisation of a high resolution TOF system is not possible. Even in this case, a limited resolution TOF system can be used to investigate neutron producing nuclear reactions. If we would like to measure also angular distribution, to avoid the necessity of building several flight-paths the use of a proper beam swinger in advisable [15].



Fig. 12. Block scheme of the proton recoil spectrometer setup at the Skoda Works. (Reproduced from ref. [14], with the permission of Skoda-Works.)



Fig. 13. Schematic arrangement for neutron time-of-flight spectral measurements. (Reproduced from ref. [10], with the permission of North-Holland Publishing Co.)

3.2. Irradiations for agro-biological purposes

This topic was discussed in another lecture [16]. I should like only to mention here that such irradiations can be performed while irradiations are going on for other purposes, e.g. for therapy. Agro-biological irradiations need often neutrons of lower energy which can be obtained in about 90° during therapeutical irradiations which use the much harder forward neutron beam.

3.3. Neutron therapy

Our task is only to initiate such investigations in Hungary, regarding to our rather low average neutron energy and low yield just at about the lower limit of therapeutically useful parameter values. We shall have only a horizontal beam, permitting only the irradiation of patients in relatively good physical condition, despite of the fact that literature proposes a vertical beam if an isocentric arrangement is not available. Based on different dose rate curves taken from literature, $8.3 \times 10^{-4} - 2.5 \times 10^{-3}$ Gy/s seems to be a realistic value, which can be reached. Fig. 14. shows the dose rate for the reaction ${}^{9}\text{Be}(d,n){}^{10}\text{B}$ at 50 µA deuteron beam and at 125 cm source distance. (This distance is reasonable and necessary for radiation protection and collimation.) According to [5] at 10 MeV deuteron energy we obtain 9.2×10^{-4} Gy/s. From other literature data the following values can be obtained at 100 cm from the target, for different reactions and for 50 µA beam:



Fig. 14. Dose rate at 50 μ A deuteron beam current, for the reaction ${}^{9}Be(d,n)^{10}B$, distance from target 125 cm.

Be(d,n) B	Ed=10	MeV	2.4×10-3	Gy/s	[3]	
⁷ Li(p,n) ⁷ Be	$E_{\rm D}=20$	MeV	2.3×10-3	Gy/s	[3]	
⁹ Be(p,n) ⁹ B	$E_{D}^{P} = 20$	MeV	4.0×10-3	Gv/s	Ī 3Ī	
² H (d,n) ³ He	$E_d^P = 10$	MeV	2.8×10-3	Gy/s	(gas	target,
10×10 cm ²).	[8,3]					

The uncertainties can be as high as a factor of 1.5 times. From these data it seems that the neutron beam from the MGC will be somewhere about the lower limit of acceptance regarding neutron yields, neutron energies and the dose rate values resulted from them.

3.4. Energy research

To solve the ever increasing energy problems, nuclear physics offers the thermal, fast breeder and thermonuclear (fusion) reactors. All these need a lot of more accurate neutron data than presently available. The IAEA tries to organize and initiate such studies all over the world, e.g. with circulating the World Request List of Nuclear Data (WRENDA). Fig. 15. shows the expected neutron spectra of a fast breeder and a fusion reactor [17]. This energy range is about the same as the energy range of neutrons produced by the MGC. Above 6-8 MeV most measured data refer to an energy of about 14 MeV. There is thus a great variety of possibilities to measure accurate cross section values, for which many conditions are already given in our Institute. Monoenergetic neutrons produced in the ³H+d reaction may be used. I mention here that our former cross-section and gamma-ray measurements on Bi target [18,19] were also requested in WRENDA, but we could measure only at 14.7 MeV, despite of the request for a wide range of neutron energies. Such measurements are possible by using the MGC.



Fig. 15. Anticipated first wall neutron spectrum in FR blanket. (Reproduced from ref [17], with the permission of AERE-Harwell.)

Another idea is to measure the cross section of (n, α) reactions leading to stable isotopes by measuring the helium production [20]. This is also an energy research related topic. as in several construction materials such reactions may cause radiation damage. The first results in this field (measurements of $\sigma(n, x^{3}He)/\sigma(n, x^{4}He)$ cross section ratios via mass spectrometry) came out from Jülich [21]. If this method were developed here in Debrecen too, and it turns out to be sensitive enough, besides measuring the overall helium production, I think, we could measure the degassing rate of materials too. The result could be the development of new, porous, but me-chanically strong materials, from which the helium produced by (n, α) reactions diffuses away without destroying the mechanical strength of the structure. A similar method is probably applicable to other hydrogen and helium isotopes too. Using such new materials, if the change of the blanket of a controlled thermonuclear reactor could be delaied by say a year or so. the costs of fusion generated energy could be much decreased.

3.5. Neutron activation analysis

For chemical analysis a cyclotron can be used in several ways. Neither method is solving all the problems alone. Fast neutron activation analysis is a good completion to other methods. A great advantage of neutron activation analysis is that it is volume analysis, nondestructive and fast. The elements which can be determined are about the same as in the case of 14 MeV neutron activation analysis. By changing the deuteron energy, and so changing the neutron energy we can optimize for certain matrix effects. The available sensitivity rises exponentially with the energy of the bombarding charged particles producing neutrons with proper nuclear reactions. E.g. the 10 MeV deuteron beam on Be target gives a rather limited sensitivity relative to bigger cyclotrons but it seems that for many elements we will get an order of magnitude gain in sensitivity relative to our present neutron generator.

One of the possible applications of the neutron activation analysis is the analysis of geological samples. Generally the major components can be determined very fast, using short activation times, and with the same or better accuracy than by the usual gravimetric methods. Using longer activations or the cyclic activation method, occasionally combined with radiochemical separation, even trace elements can be determined in the ppb range. A more detailed survey of this field is required, as the research for natural resources is a high priority field of investigations. Considering the changing and broad neutron spectra, the use of the comparator method is advisable. Such measurements can be performed as background task while other neutron irradiations are in progress, many instruments and a lot of experiences are already at our disposal.

4. Acknowledgements

The authors thanks for the kind permissions of the publishers (more detailed indications in the figure captions) and the authors of papers the figures of which were taken in the present paper.

References

- [1] J. M. Carpenter, D. L. Price, IEEE Transactions on Nucl. Sci., NS-22 (1975) 1968 [2] H. H. Barschall, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci., 28
- [2] H. H. Barschall, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci., 28 (1978) 207
- [3] M. A. Lone, BNL-NCS-50681 (1977) p.79
- [4] H. Ullmaier, R. Behrisch and H. H. Barschall, Nucl. Instr. and Meth. 145 (1977) 1
- [5] R. Jean, M. Fauchet, Strahlentherapie 154 (1978) 526 [6] B. Gómez-Moreno, W. Hardt, K. Kochskämper, W. Rosenstock
- and W. von Witsch, Nucl. Phys. A330 (1979) 269
- [7] H. Schraube, A. Morhart, and F. Grünauer, in Proceedings Second Symposium on Neutron Dosimetry in Biology and Medicine, Neuherberg/München, 1974. EUR 5273 d-e-f (1975) Vol.II. p.979.
- [8] F. T. Kuchnir, F. M. Waterman, H. Forsthoff, L. S. Skaggs, P. C. Vander Arend, and S. Stoy, Proc. Fourth Conf. Sci., and Industrial Application of Small Accelerators. North Texas State Univ. Oct. 27-29, 1976. IEEE-1976. p.513
- North Texas State Univ. Oct. 27-29, 1976. IEEE-1976. p.513 [9] Metals, catalog of Hamilton Technology, Inc. USA.
- [10] P. Grand, A. N. Goland, Nucl. Instr. and Meth. 145 (1977) 49
- [11] R. Serber, Phys. Rev. 72 (1948) 1008.
- [12] K. Goebel, A. J. Miller, Nucl. Instr. and Meth. 96 (1971) 581
- [13] M. A. Lone, C. B. Bigham, J. S. Fraser, H. R. Schneider, T. K. Alexander, A. J. Ferguson and A. B. McDonald, Nucl. Instr. and Meth. 143 (1977) 331
- [14] M. Holman, L. Franc, P. Mařik and J. Kunte, ZJE-236 (1979) Škoda Works, Plzeň
- [15] D. A. Lind, R. F. Bentley, J. D. Coreson, S. D. Schery, and C. D. Zafiratos, Nucl. Instr. and Meth. 130 (1975) 93
- [16] P. Bornemisza-Pauspertl, lecture at ATOMKI Seminar, Dec. 1979.
- [17] S. Blow, AERE-R 6581 (1971)
- [18] P. Bornemisza-Pauspertl, I. Török and I. Uray, Radiochem. Radioanal. Letters. 32 (1978) 277

- [19] I. Uray, I. Török, P. Bornemisza-Pauspertl and L. Végh Z. Physik A287 (1978) 51
 [20] Berecz I, Bohátka S, Langer G. and Uray I., Lecture at the 3rd Meeting of Hungarian Nuclear Physicists, Kecskemét, Aug. 23-27, 1976.
 [21] C. H. Wu, R. Wölfle and S. M. Qaim, Nucl. Phys. A329 (1979) 63

Referee: I. Uray



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 131-139

ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА ¹²С(p,2p)¹¹В ПРИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ ПАДАЮЩИХ ПРОТОНОВ

К. Сайлер Институт Экспериментальной Физики, Университет им. Кошута H-4001 Debrecen, Bem tér 18/a, BHP

Н

В.К. Тартаковский

нафедра Теории ядра и элементарных частиц, Ниевский Государственный Университет им. Шевченко, Киев, СССР

Получены общие формулы для дифференциальных сечений выбивания из ядер ¹²С, описываемых многочастичной оболочечной моделью, нуклонов протонами в дифракционном приближении, исходя из заданных нуклон-нуклонных взаимодействий с учетом продольной составляющей переданного импульса. Конкретные расчеты сечений проведены для энергий падающих протонов в сотни Мэв с учетом взаимодействия выбитых протонов с остаточным ядром. С помощью такого подхода удается описать ряд соответствующих экспериментальных данных без введения каких-либо подгоночных параметров.

A ¹²C(p,2p)¹¹B REAKCIÓ LEIRÁSA KÖZEPES ENERGIÁJU BOMBÁZÓ PROTONOK ESETÉN. Általános kifejezéseket kaptunk a sokrészecskés héjmodellel leirt ¹²C magon végbemenő, protonnal kiváltott nukleon-kiütési reakciók differenciális hatáskeresztmetszeteire diffrakciós közelitésben, figyelembe véve a megadott nukleon-nukleon kölcsönhatásban az átadott impulzus longitudinális összetevőjét. A konkrét számitások néhány száz MeV energiáju bombázó protonok esetére történtek a kiütött proton és a maradékmag kölcsönhatásának figyelembevételével. E módszerrel sikerült leirni számos szóbajöhető kisérleti adatot, illesztési paraméterek bevezetése nélkül.

DESCRIPTION OF THE ${}^{12}C(p,2p){}^{11}B$ REACTION AT MEDIUM ENERGIES OF INCIDENT PROTONS. In the differential cross sections of the knock-out of nucleons by protons from the ${}^{12}C$ nucleus described by the many-particle shell-model. In this approach the given nucleon-nucleon interactions are treated taking into account the parallel component of the momentum transferred. The crosssections were calculated for incident energies of a few hundred MeV taking into account the interaction of the knocked out protons with the residual nucleus. By means of this method we have successfully described some experimental data without using any fitting parameters.

1. Введение

Взаимодействие нуклонов и сложных частиц с ядрами при энергии падающих частиц порядка сотни Мэв и выше в случае, когда продольная составляющая переданного импульса эначительно меньше поперечной составляющей, носит дифракционный характер [1,2]. Это имеет место, например, при упругом рассеянии достаточно быстрых нуклонов ядрами, при дифракционном расщеплении дейтронов в поле ядра-мишени и других процессах.

В случае глубоко неупругого рассеяния нуклонов и других частиц, когда из ядер выбиваются нуклоны, продольная (относительно вектора импульса падающей частицы) составляющая переданного импульса уже не является малой величиной, и дифракционный механизм процесса нарушается, хотя сам процесс остается прямым, характиризующимся, в частности, заметной анизотропией угловых распределений рассеянных и выбитых нуклонов. Однако и в этом случае можно использовать ряд общих формул дифракционного приближения, обобщив их на случай глубоко неупругого рассеяния, введя в них довольно простым образом продольную составляющую переданного импульса [3,4].

При исследовании дифракционного взаимодействия сильновзаимодействующих частиц с многонуклонными ядрами ранее обычно вводили профилирующие функции для падающей элементарной частицы и ядра-мишени как целого. Однако такой подход не дает возможности описывать реакции выбивания частиц из ядер. Изучение таких реакций требует микроскопического подхода, в котором исходят из рассмотрения взаимодействия падающей частицы с отдельными нуклонами ядра-мишени.

В настоящей работе изучается процесс выбивания протонов из ядер углерода ¹²С при неупругом рассеянии протонов с энергией в сотни Мэв. При этом для описания взаимодействия падающего протона с ядром ¹²С вводятся нуклон-нуклонные профилирующие функции. Для описания структуры ядра ¹²С и остаточного ядра ¹¹В используется многочастичная оболочечная модель с LS – связью. Производится учет взаимодействия выбитого протона с ядром-остатком, а также дополнительный учет взаимодействия рассеиваемого протона с ядром в начальном и конечном состояниях.

В расчетах мы будем использовать импульсное приближение, поскольку вклад многократного рассеяния при малых поперечных относительно импульса падающей частицы переданных импульсах (когда хорошо и применимо дифракционное приближение) составляет в сечениях всего лишь несколько процентов. Мы будем рассматривать случай большой относительной энергии рассеянного и выбитого протонов и поэтому будем пренебрегать взаимодействием между ними, а эффекты антисимметризации учитывать лишь приближенно. Несмотря на эти упрощающие расчеты приближения, как булет видно ниже при сравнении рассчитанных зависимостей с экспериментальными, в ряде случаев удается описать соответствующие эксперименты при различных энергиях не только качественно, но и количественно.

2. Общее выражение для дифференциального сечения выбивания нуклона из ядра

Дифференциальное сечение неупругого рассеяния быстрых протонов ядрами, сопровождающегося выбиванием нуклона из nl-оболочки ядра представляется в виде:

$$d^{9}\sigma_{n\ell} = \frac{(2\pi)^{4}}{2I+1} \sum_{M_{I}M_{I}} \sum_{m_{s}} \frac{\Sigma}{2} \frac{1}{2} \sum_{\mu_{s}\mu_{s}} \frac{\kappa_{1}^{3}}{\kappa_{1}^{P_{1}}} \frac{(\epsilon_{1}+\epsilon_{A})(\epsilon_{1}^{*}+\epsilon_{A}^{*})}{A^{2}\epsilon_{2}\epsilon_{1}^{*}\epsilon_{2}^{*}} \left| U_{i+f} \right|^{2} \times \delta^{4}(P^{*}-P) \frac{d^{3}P_{1}^{*}d^{3}P_{2}^{*}d^{3}P_{A-1}^{*}}{(2\pi)^{9}}, \qquad (1)$$

где \vec{k}_1, ε_1 - импульс и энергия падающего протона в системе центра масс (СЦМ) этого протона и ядра-мишени, а $\vec{k}_1, \varepsilon_1'$ - эти же величины после столкновения; ε_A - энергия начального ядра из А нуклонов, а ε_A' - суммарная энергия остаточного ядра и выбитого нуклона в СЦМ. В лабораторной системе (ДС) импульсы падающего и рассеянного протона обозначены \vec{P}_1 и \vec{P}_1' их энергии E_1 и E_1' , импульсы, и энергии выбитого протона обозначены соответственно через P_2 , \vec{P}_2' , E_2 и E_2' ; \vec{P}_{A-1}' - импульс остаточного ядра. Р и Р' - суммарные четырехмерные импульсы всей системы до и после столкновения. Входящий в (1) матричный элемент перехода

$$\begin{split} U_{i \rightarrow f} &= \langle \hat{a} \{ \psi_{\vec{k}}^{(-)} \Psi_{\nu-1} \} | \sum_{j=1}^{\nu} \left[\sum_{\sigma \tau} \zeta_{\vec{k}}^{\ast}(\tau) \chi_{\mu_{s}}^{\ast}(\sigma) \int d^{2} \rho \exp(-i(\vec{k} \vec{\rho} - q_{\parallel} z_{j})) \times \right] \\ &\times \omega_{j}(|\vec{\rho} - \vec{b}_{j}|) \chi_{\mu_{s}}(\sigma) \zeta_{\mu_{t}}(\tau) \Big] | \Psi_{\nu} \rangle . \end{split}$$

Здесь ω_{j} - профилирующая функция для j-го нуклона ядра и падающего протона, которую будем для простоты считать не зависящей от спиновых о и изоспиновых т переменных, так что спиновые и изоспиновые волновые функции падающего протона $\chi_{\mu_S}(\sigma)$ и $\zeta_{\mu t}(\tau)$ за счет ортонормировки сразу выпадают из матричкого элемента перехода $U_{i \to f}$. Ось z выбрана нами вдоль импульса P_1 падающего протона, р и b_j - перпендикулярные к P_1 составляющие радиусов-векторов падающего протона и j-го нуклона ядра-мишени R и r_j с началом в центре ядра; к и q_{n-} поперечная и продольная составляющие переданного импульса q, k- относительный импульс выбитого нуклона и ядра-остатка. Ψ_{v}, Ψ_{v-1} и $\psi_k^*(-)$ - волновые функции соответственно группы $v=v_{n\ell}$ эквивалентных нуклонов в $n\ell$ -оболочке ядра до выбивания нуклона, группы (v-1) нуклонов в той же оболочке после вылета одного из нуклонов и относительного движения выбитого нуклона и ядра-остатна. а - оператор антисиммеризации. В сечении (1) проведено усреднение по направлениям спина начального ядра I и суммирование по проекциям M_I и m_s спинов конечного ядра и выбитого нуклона. Сечение также просуммируем по всем квантовым характеристикам ядра-остатка.

3. Энергетические спектры протонов

Проинтегрируем (1) по импульсу \vec{P}_{A-1} и перейдем от \vec{P}_1 и \vec{P}_2 к энергиям E_1^* и E_2^* и углам вылета рассеянного и выбитого нуклонов. Просуммируем теперь по спиновым и изоспиновым переменным ядра и проинтегрируем по пространственным переменным нуклонов остаточного ядра. В результате получим (все приводимые далее сечения даны в ЛС):

$$\frac{d^{6}\sigma_{n\ell}}{d\Omega_{1}d\Omega_{2}dE_{1}^{'}dE_{2}^{'}} = \frac{\nu_{n\ell}\nu_{\nu\ell}}{(\overline{P}_{1}A)^{2}} \frac{k_{1}^{2}}{k_{1}^{'}} \frac{P_{1}^{'2}}{P_{1}} \frac{(\varepsilon_{1}+\varepsilon_{A})(\varepsilon_{1}^{'}+\varepsilon_{A}^{'})}{E_{2}} G_{n\ell} \frac{d\sigma_{NN}}{d\Omega} \delta(B-B_{n\ell}),$$

$$B \equiv T_{1}-T_{1}^{'}-T_{2}^{'}-T_{A-1}^{'},$$
(3)

$$G_{n\ell}(\vec{q}, \vec{k}_{2}) = \frac{1}{(2\pi)^{3}(2\ell+1)} \sum_{m} |\vec{k}_{2}| \exp(i\vec{q}\vec{r})| n\ell m > |^{2}.$$
(4)

Здесь P₁ - величина импульса падающего протона, а dσ_{NN}/dΩ сечение упругого NN - рассеяния в СЦМ двух сталкивающихся нуклонов. В (3) использованы обозначения для кинетических энергий: T₁=E₁-M, T₁'=E'₁-M, T'₂=E'₂-M, T'_{A-1}=E'_{A-1}-M(A-1), где M - масса нуклона, E'_{A-1} - полная энергия ядра-остатка. Для ядер с одинаковым числом протонов и нейтронов х_{у2}=1/2 [5].

Величина G_{nl} зависит от структуры ядра, а сечение do_{NN}/dΩ связано с взаимодействием падающего протона с нуклоном ядрамишени, и его можно выразить через соответствующую профилируюшую нуклон-нуклонную функцию или ее параметры. При расчетах мы использовали осцилляторные волновые функции связанных в ядре нуклонов с параметром r₀=1,65 ф, а в качестве профилирующих функций брали гауссовские функции:

$$\omega(\rho) = \frac{\sigma_{t}}{2\pi} \left[a \exp(-a\rho^{2}) - i\alpha b \exp(-b\rho^{2}) \right]$$
(5)

численные значения параметров которых при различных энергиях налетающего нуклона находили из экспериментальных данных по нуклон-нуклонным столкновениям [2]. При вычислениях учитывались также конечные размеры нуклонов и делалось исправление на движение центра инерции ядра, возникающее в модели оболочек. Энергетическую дельта-функцию в (3) заменяли при сравнении (3) с экспериментальным сечением на множитель
$$\frac{1}{\Delta_{n\ell}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left[-2\left(\frac{B-B_{n\ell}}{\Delta_{n\ell}}\right)^2\right],$$

имеющий острый максимум при В≖В - энергии отделения нуклона от nl- оболочки ядра и интеграл от которого по В равен единице, как и от дельта-функции. Параметр Δ называют параметром "размазывания" дельта-функции: его величина определяет ширину максимума и связана с движением нуклонов в ядре и с рядом наших модельных упрощающих предположений о структуре ядра, являющегося сложной многочастичной системой.

На рис 1. представлены сечения (3) при выбивании протонов из 1s - оболочки (а) и 1p - оболочки (б) ядра ¹²С в зависимости от величины В или от суммарной кинетической энергии T₁'+T['] рассеянного и выбитого протонов. Экспериментальные точки взяти из работы [6]. Сечения даны для случая копланарной геометрии, когда импульсы рассеянного и выбитого протонов P₁' и P' лежат в одной плоскости с импульсом P₁ по разные стороны от



Рис. 1. Сравнение рассчитанных дифференциальных сечений (3) выбивания протонов из 1s - оболочки (а) и 1p - оболочки (б) ядра ¹²С протонами с энергией 460 Мэв с состветствующими экспериментальными данными [6]. Сплошные кривые рассчитывались с учетом тождественности рассеянного и выбитого протонов, а штрих-пунктирные - без учета тождественности с непосредственным использованием экспериментальных эначений.

него, причем угол рассеяния θ_1 налетающего протона равен углу вылета θ_2 выбитого протона и оба равны 39° . Энергии этих протонов E⁺₁ и E⁺₂ также считаются одинаковыми. Кинетическая энергия падающего протона. полагалась равной T₁ = 460 Мэв. Для этой энергии а~b=0.82 ф⁻², α и σ_t брались из [2]. Положения максимумов определяются энергиями отделения нуклонов от 1s- и 1p- оболочек B₁₀ ~ 33 Мэв и B₁₁~15 Мэв. Теоретические кривые изображены для ряда значений параметров Δ_{ro} .

4. Угловые распределения рассеянных протонов

Проинтегрировав сечение (3) по энергии выбитого протона E^{*}₂ в пределах узного интервала, содержащего точку E^{*}₂=E^{*}₁ (E^{*}₁ удовлетворяет закону сохранения энергии при B=B_{n2}), получим

$$\frac{d^{5}\sigma_{n\ell}}{d\Omega_{1}d\Omega_{2}dE_{1}^{i}} = \frac{v_{n\ell}v_{\ell}}{(\overline{P}_{1}A)^{2}} \frac{P_{1}^{i}P_{2}^{i2}}{P_{1}} \frac{k_{1}^{3}}{k_{1}^{i}} \frac{(\varepsilon_{1}+\varepsilon_{A})(\varepsilon_{1}^{i}+\varepsilon_{A}^{i})E_{A-1}^{i}}{E_{2}E_{2}^{i}} \frac{G_{n\ell}}{P_{2}^{i}} \frac{d\sigma_{NN}}{d\Omega}. (7)$$

Это сечение рассчитывалось, как и (3), при таком же копланарном расположении векторов импульсов протонов в зависимости от угла рассеяния θ_1 , причем полагали $\theta_2 = \theta_1$. На рисунках 2 и 3 показано сравнение вычисленных угловых распределений рассеянных протонов с соответствующими экспериментальными [6,7] при энергиях $T_1 = 460$ Мэв (Рис.2) и $T_1 = 156$ Мэв (Рис.3) при выбивании протонов из 1s – оболочки (а) и 1p – оболочки (б). При $T_1 = 156$ Мэв а~b=0.61 ϕ^{-2} .





Рис.2. Распределение рассеянных протонов по углам в копланарной геометрии в реанции ¹²C(p,2p)¹¹В при выбивании протонов из 1s - оболочки (а) и 1p - оболочки (б) при энергии T₁ = 460 Мэв

- с учетом тождественности улетающих протонов и их взаимодействия с ядром-остатном, а также взаимодействия падающего протона с ядроммишенью,
- 2 то же, что и 1, но с использованием экспериментального эначения сечения нуклон-нуклонного рассвяния dσ_{NN}/dΩ,
- 3 только с учетом взаимодействия выбитого протона с ядром-остатном,
- 4 без учета взаимодействия и тождественности.





Сплошные кривые рассчитаны с учетом тождественности выбитого и рассеянного протонов и взаимодействия выбитого нуклона с ядром-остатком и рассеянного нуклона до столкновения с начальным ядром и после столкновения с остаточным ядром. При этом использовался оптический потенциал взаимодействия и принималась во внимание зависимость реальной и мнимой частей этого потенциала от энергии относительного движения нуклона и ядра [8]. Штрих-пунктирные кривые 2 соответствуют такому же учету взаимодействия, как и в случае сплошных кривых 1, но dσ_{NN}/dΩ берется непосредственно из эксперимента, так что на примере сравнивания кривых 1 и 2 видно влияние выбора параметров нуклон-нуклонного взаимодействия. При вычислении зависимостей, изображаемых пунктирными кривыми 3 учитывалось только взаимодействие выбитого протона с остаточным ядром, а тождественность протонов не учитывалась. Точечные кривые рассчитаны без учета взаимодействия и тождественности.

5. Распределение ядер отдачи по импульсам

Проинтегрировав сечение (1) по Р₂ и Е₁, получим сечение как функцию величины импульса Р_{А-1} и угла вылета ядра-остатка, а также угла рассеяния падающего протона

$$\frac{d^{5}\sigma_{n\ell}}{d\Omega_{1}d^{3}P_{A-1}^{i}} = \frac{\nu_{n\ell} \times \nu_{\ell}}{(P_{1}A)^{2}} \frac{P_{1}^{i}^{2}}{P_{1}} \frac{k_{1}^{3}}{k_{1}^{i}} \frac{(\epsilon_{1}+\epsilon_{A})(\epsilon_{1}^{i}+\epsilon_{A}^{i})}{(\epsilon_{1}+\epsilon_{A})(\epsilon_{1}^{i}+\epsilon_{A}^{i})} \frac{G_{n\ell}}{G_{n\ell}} G_{n\ell} \frac{d\sigma_{NN}}{d\Omega} .$$
(8)

Это сечение рассчитывалось для копланорной геометрии в зависимости от Р¦_1 при Т₁=600 Мэв (а≃b=0.82 ф⁻²), причем импульсы

P: H P! Р́і и Р́А́-1 располагались по разные стороны от вектора Р́₁ и θ₁≃40°. В случае вылета протона из 1s - оболочки (а) угол вылета ядра-остатка θ_{A-1} =90°, а при выбивании протона из 1р -оболочки (б) θ_{A-1} =105°. Сравнение с экспериментом [9] показы-вает, что здесь в лучшем случае лишь качественно можно гово-рить о согласии (Рис.4.). Для лучшего описания эксперимента здесь необходимо освободиться от ряда использованных приближений, оказавшихся довольно грубыми. В частности, здесь сильно сказываются дефекты оболочечной модели, связанные с движением



Рис.4. Зависимости сечений от величины импульса ядра отдачи при выбивании протонов из 1s - оболочки (а) и 1р – оболочки (б) ядра ¹²С при энергии падающих протонов Т, =600 Мэв. Нумерация кривых такая же, как и на Рис. 2. и Рис. 3. причем 1а отличается от 1а пренебрежением тождественности улетающих протонов, а 16 рассчитано для других значений параметров опти-ческого потенциала [10]. Нривая 2 изображает d⁵σ_{nl}/(dΩ₁d³P_{l-1})/2.

центра инерции ядра, поскольку мы рассматриваем распределения по импульсам ядер отдачи, включающих в себя все нуклоны (кроме одного выбитого), которые составляли начальное ядро-мишень.

Литература

1] А.И. Ахиезер, А.Г. Ситенко, УФЖЗ (1958) 16

2] В.С. Барашенков, В.Д. Тонеев, Взаимодействие высокоэнергетических частиц и атомных ядер с ядрами (Атомиздат, Москва, 1972) с. 648 В.С. Барашенков, Сечения взаимодействия элементарных час-

тиц (Наука, Москва, 1966) 3] А.Г. Ситенко, В.К. Тартаковский, УФЖ5 (1960)

- 581
- 4] Е.Б. Левшин, А.Д. Фурса, ЯФ24 (1976) 1115

5] В.Н. Тартановский, А.А. Пасичный, УФЖ13 (1968) 1361 6] H. Tyrén, S. Kullander, O. Sunberg, R. Ramachandran, P. Isacsson, Nucl. Phys. 79 (1966) 321

[7] E. Hourany, T. Yuasa, J.P. Didelez, M. Hage Ali, F. Reide, F. Takeuchi, Nucl. Phys. Al62 (1971) 624
[8] В.Н. Тартаковский, И.В. Коэловский, Е.М. Малярж, Институт Творетической физики АН УССР, ИТФ-77-88Р (1977)

[9] S. Kullander, F. Lemeilleur, P.U. Renberg, G. Landaud, J. Yonnet, B. Fagerström, A. Johansson, G. Tibell,

Nucl. Phys. A173 (1971) 357

[10] L.W. Person, P. Benioff, Nucl. Phys. A187 (1972) 401

Рецензент: Р. Г. Ловаш



ATOMKI KÖZLEMÉNYEK 22 (1980) 141-153 COULOMB ENERGIES IN THE NEW QUASI-PARTICLE SCHEME WITH EXAMPLES FOR THE f76 SHELL*

WIESŁAW A. KAMIŃSKI

Institute of Physics, Maria Skłodowska-Curie University, Lublin, Poland

We present the transformation of a charge-dependent interaction to the new quasi-particle representation of Hecht and Szpikowski, and apply it to the calculation of the Coulomb energies of the A=46 and 48 isobars. The experimental data are reproduced very well.

COULOMB-ENERGIÁK AZ UJ KVÁZIRÉSZECSKE-SZKÉMÁBAN AZ f, HÉJRA VONATKOZÓ PÉLDÁKKAL. Egy töltésfüggő kölcsönhatásnak a Hecht-Szpikowski-féle uj kvázirészecskés reprezentációra való transzformálását mutatjuk be és alkalmazzuk az A=46-os és 48-as izobárok Coulomb-energiájának kiszámitására. A kisérleti adatokat e számolás igen jól visszaadja.

КУЛОНОВСКИЕ ЭНЕРГИИ В НОВОЙ КВАЗИЧАСТИЧНОЙ СХЕМЕ И ИХ ПРИ-МЕРЫ В ОБОЛОЧКЕ f_{7/2}. Аннотация: В настоящей работе мы определяем гамильтониян зависящего от заряда взаимодействия в форме квазичастиц Гехта-Шпиковского. Проводятся также расчеты кулоновских энергий изобаров A=46 и 48. Получено хорошее согласие теоретических расчетов с экспериментальными данными.

1. Introduction

The application of group theory to nuclear structure is useful both in exploring the basic interaction symmetries [e.g. the symplectic symmetry Sp(n), the orthogonal O(5), the unitary SU(3) and SU(4) symmetries] and in constructing and interpreting the many-particle wave functions. An important property of the classical group chains is that they are connected with generators which do not change the number of nucleons. Recently some attempts have been published which utilize the particle-hole type transformation for the research of new chains of groups

*Work awarded the third prize of the international competition of ATOMKI.

and non-traditional spectroscopic schemes. The pseudo-spin theory [1-3] and the investigations of the new quasi-particle symmetries [4,5] should be mentioned among them.

The present paper is an example of an efficient application of the new quasi-particle basis to expressing realistic nucleon configurations in a case when, in addition to the short-range nucleon-nucleon interaction, the Coulomb force is included. The nuclei considered are the A = 46 and A = 48 isobars. The main points of the paper are a transformation of the isospindependent interaction to the Hecht-Szpikowski quasi-particles and an investigation of the electromagnetic interaction between the 17/2 shell protons in this formalism.

2. Complete factorization of the $1f_{\gamma_2}$ nuclear shell

The new quasi-particle transformation has been used to the construction of complete bases of states for atomic [6] and nuclear [4,5] configurations. The same idea was adopted to a generalization of the quasi-particle formalism on the j = 7/2 nuclear shell [7] and to its application to concrete calculations of some nuclear properties [8,9].

Now we follow the notation of refs. [5,7] and the way they introduce the basic ideas and we quote some of their general results which will be useful for the succeeding paragraphs.

Let us define the particle-hole transformation (for a particular j-number):

$$\lambda_{m}^{\dagger} = (2)^{-\frac{1}{2}} \left\{ a_{m\frac{1}{2}}^{\dagger} - (-1)^{j-m} a_{-m-\frac{1}{2}} \right\}, \quad \lambda_{m}^{\dagger} = (\lambda_{m}^{\dagger})^{\dagger},$$

$$\mu_{m}^{\dagger} = (2)^{-\frac{1}{2}} \left\{ a_{m-\frac{1}{2}}^{\dagger} - (-1)^{j-m} a_{-m\frac{1}{2}} \right\}, \quad \mu_{m}^{\dagger} = (\mu_{m}^{\dagger})^{\dagger},$$
(1)

where the operators a[†] (a) are the neutron $(+\frac{1}{2})$ and proton (- $\frac{1}{2}$) creation (annihilation) operators. The fermion operators λ^{\dagger} (λ) and μ^{\dagger} (μ) can be used to construct the rotation group generators separately in the " λ " and " μ " spaces. Then, we can easily build up the quasi-angular momentum vector operator J_{λ} (J_{μ}) and the quasi-spin vector operator T_{λ} (T_{μ}). A very important property of the quasi-particle quantities is that they can be added up to give the real total angular momentum J and the real total isospin T for the system of protons and neutrons:

$$J = J_{\lambda} + J_{\mu}, \quad T = T_{\lambda} + T_{\mu}. \quad (2)$$

The coupled vectors of the type

$$|(J_{\lambda}J_{\mu})JM (T_{\lambda}T_{\mu})TM_{T}\rangle$$
 (3)

form a complete set of wave functions in the subspace j = 7/2. Because of the non-diagonality of the particle number operator in the basis (3), one has to perform a transformation to states which are diagonal in N. In fact, such a transformation is possible [5,7] by invoking the quasi-spin group R(5) so as to make the new basis vectors also diagonal in the seniority v and the reduced isospin t:

 $|j^{n}(vt) \beta TM_{T}; \alpha JM > =$

$$= \sum_{\substack{T_{\lambda}T_{\mu}}} C_{H_{1}\beta;T_{\lambda}T_{\mu}}^{(vt)T} \sum_{\substack{J_{\lambda}J_{\mu}}} D_{\lambda}^{T_{\mu};J} | (J_{\lambda}J_{\mu})JM(T_{\lambda}T_{\mu})TM_{T} >.$$
(4)

The quantum numbers β and α are additional labels of the R(5) and Sp(2j+1) groups, respectively. H₁ is simply connected with the number of nucleons n:

$$H_1 = \frac{1}{2}(n-2j-1)$$
.

For the j=7/2 shell the coefficients C and D are tabulated in ref. [7].

For the quasi-particle formalism to be applicable the creation and annihilation operators should be expressed in terms of the spherical tensors Λ and M of the λ and μ spaces:

$$a_{mm_{t}}^{\dagger} = (2)^{-\frac{1}{2}} \left(\Lambda_{mm_{t}}^{j\frac{1}{2}} + M_{mm_{t}}^{j\frac{1}{2}} \right),$$

$$a_{mm_{t}}^{\dagger} = (2)^{-\frac{1}{2}} \left(-1 \right)^{j-\frac{1}{2}+m+m} t \left(\Lambda_{-m-m_{t}}^{j\frac{1}{2}} - M_{-m-m_{t}}^{j\frac{1}{2}} \right).$$
(5)

Here m denotes the third component of the angular momentum j and $m_{\rm t}$ stands for the third isospin component of a nucleon.

In the second quantization formalism special significance is assigned to multipole and pair creation (and annihilation) operators. Because of (5) one can transform them to the quasiparticle form. As a consequence, any Hamiltonian can be expressed in coupled Λ -M terms. The application of such a technique to expand the most general rotationally invariant, charge-independent two-body interaction acting within a single j-shell was used in a number of papers [5,7,9]. Below we shell describe an analogous transformation for a rotationally invariant, isospin-dependent nuclear Hamiltonian.

3. The isospin-dependent interaction

3.1. The isospin-dependent interaction in the quasi-particle form

The irreducible tensor operators of the orthogonal group R(5) will be denoted by $T^{(\omega_1,\omega_2)}_{\beta H_1 \ m_{\pm};m}$ [10]. The symbols ω_1 and ω_2 are simply connected with the seniority number and the reduced isotopic spin t:

$$ω_1 = \frac{1}{2}(2j+1-v),$$
 $ω_2 = t.$
(6)

The quantum numbers β , H₁, m, m_t have the same meaning as above. A study of the commutation relations between the Λ -M operators and the infinitesimal generators of the R(5) group give the following relations:

$$T_{\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2});j} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\Lambda_{m}^{j} \frac{1}{2} + M_{m}^{j} \frac{1}{2} \right),$$

$$T_{\frac{1}{2}}^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2});j} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\Lambda_{m}^{j} \frac{1}{2} - M_{m}^{j} \frac{1}{2} \right).$$
(7)

The most complicated operators can be built up in the ordinary way:

$$T_{H_{1}T}^{(\overline{\omega}_{1}\overline{\omega}_{2});J} = \sum_{\substack{mm'm_{t}m't \\ h_{1}h_{1}'}} (jmjm'|JM)(tm_{t}tm_{t}'|TM_{T})$$
(8)

 $\times < (\omega_1 \omega_2) h_r t; (\omega_1^2 \omega_2) h_1^2 t | | \omega_1 \omega_2 H_1 T > T_{h_1 t m_t; m}^{(\omega_1 \omega_2); j} T_{h_1 t m_t; m}^{(\omega_1 \omega_2); j}.$

The symbols $<(\omega_1\omega_2)h_1t;(\omega'_1\omega'_2)h'_1t||(\overline{\omega}_1\overline{\omega}_2)H_1T>$

are Wigner coefficients (see e.g.[10]). Formula (8) permits to express any physically important operator in terms of the R(5) generators and, because of (7), in the quasi-particle form. The standard forms of the R(5) generators in terms of the pair creation (annihilation) and monopole operators and in the $\lambda-\mu$ convention are given in table 1.

An isospin-dependent two-body interaction can be written as a sum of terms of definite transformation character in the abstract isospin space:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{JT} \sum_{MM_{T}} V_{JMTM_{T}} A^{\dagger}(j^{2}; JMTM_{T})A(j^{2}; JMTM_{T}) =$$

$$= V^{O} + V^{1} + V^{2},$$
(9)

where V^0 , V^1 and V^2 are*

$$V^{0} = -\frac{1}{3} \sum_{J} V_{J1} \sqrt{(2J+1)} \left\{ \sqrt{2} T^{(22);0}_{000;0} + \sqrt{2}_{5} T^{(22);0}_{000;0} + 3 \sqrt{2}_{5} T^{(00);0}_{000;0} \right\}, (10)$$

$$V^{1} = -\frac{1}{3} \sum_{J J 1} \sqrt{2J+1} \left\{ \sqrt{6} T_{010;0}^{(10);0} - \sqrt{3} T_{010;0}^{(22);0} \right\},$$
(11)

$$V^{2} = -\frac{1}{2} \sum_{J} V_{J1} \sqrt{2J+1} \left\{ T_{020;0}^{(22);0} + \sqrt{2} T_{020;0}^{(20);0} \right\}.$$
(12)

The right hand sides of eqs. (10)-(12) can be transformed to the quasi-particle basis with the aid of table 1.

We omit the M and M_T indices of V_{JMTM_T} because the two-body matrix element does not depend on them. Only the T=l part of sum (9) is taken into account for protons.

T(11);J 11M _T ;M	A [†] (j ² ;JM;T=1M _T)	$\frac{1}{2} \left[\Lambda \times \Lambda\right]_{MM_{T}}^{J1} + \frac{1}{2} \left[M \times M\right]_{MM_{T}}^{J1} + \left[\Lambda \times M\right]_{MM_{T}}^{J1}$	J even
T ⁽¹⁰⁾ ;J 100 ;M	А [†] (ј ² ;JM;Т=ОМ _Т =О)	$\frac{1}{2} [\Lambda \times \Lambda]_{MO}^{JO} + \frac{1}{2} [M \times M]_{MO}^{JO} + [\Lambda \times M]_{MO}^{JO}$	J odd
T ^{(11);J} -11-M _T ;-M	(-1) J-M-M _T A(j ² ;JM;T=1M _T)	$\frac{1}{2} \left[\Lambda \times \Lambda\right]_{-M-M_{T}}^{J1} + \frac{1}{2} \left[M \times M\right]_{-M-M_{T}}^{J1} - \left[\Lambda \times M\right]_{-M-M_{T}}^{J1}$	J even
T ^{(10);J} -100;-M	(-1) ^{J-M+1} A(j ² ;JM;T=OM _T =O)	³ [Λ×Λ] ^{JO} _{-MO} + ³ [M×M] ^{JO} _{-MO} -[Λ×M] ^{JO} _{-MO}	J odd
т ^{(11);J} ^т о1М _Т ;М	√2 U(j ² ;JM;T=1M _T)	$\sqrt{2}(-[\Lambda \times \Lambda]_{MM_{T}}^{J1} + [M \times M]_{MM_{T}}^{J1}$	J even
T ^{(11);J} 7000;M	√2 U(j ² ;JM;T=OM _T =O)	$\sqrt{2} \left(\left[\Lambda \times M\right]_{MO}^{JO} + \frac{2j+1}{2} \delta_{JO} \right)$	J even
T ^{(10);J} 01M _T ;M	$-\sqrt{2}$ U(j ² ;JMT=1M _T)	$-\sqrt{2}[\Lambda \times M]_{MM_{T}}^{J1}$	J odd
T ^{(00);J} 7000;M	√2 U(j ² ;JMT=OM _T =O)	$\sqrt{2}(-[\Lambda \times \Lambda]_{MO}^{JO} + [M \times M]_{MO}^{JO})$	J odd

Table 1. The R(5) generators in the standard form of coupled pairs and in the quasi-particle form.

145

3.2. The Coulomb interaction

The most important isospin-dependent interaction is the Coulomb force between the protons of a nucleus:

$$V_{c} = \sum_{i < j} \frac{e^{2}}{r_{ij}} \left(\frac{1}{2} - t_{3}^{(i)} \right) \left(\frac{1}{2} - t_{3}^{(j)} \right).$$
(13)

The operator $t_3^{(i)}$ is the third component of the isospin operator of the nucleon labelled by i; r_{ij} means the distance between protons i and j.

The Coulomb interaction operates only between protons, therefore non-zero matrix elements are only obtained between two-particle states with total isospin T = 1. For such a pair of nucleons the generalized Pauli principle restricts the total angular momentum to even values. From table 1 and eqs. (11)-(12) it follows directly that

From table 1 and eqs. (11)-(12) it follows directly that the isovector and the isotensor parts of the Coulomb interaction are

$$V_{c}^{1} = -3_{2}\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{(n-2j-1)}{2j+1} \sum_{\text{Jeven}} (2J+1) V_{J1}^{c}$$

$$-3_{2}\sqrt{\frac{1}{2}} \sum_{\text{Jeven}} (2J+1)^{\frac{1}{2}} V_{J1}^{c} \left\{ [(\Lambda \times \Lambda)^{J1} \times (\Lambda \times \mathbf{M})^{J1}]_{00}^{01} + (14) + [(\mathbf{M} \times \mathbf{M})^{J1} \times (\Lambda \times \mathbf{M})^{J1}]_{00}^{01} \right\},$$

$$V_{c}^{2} = -\frac{1}{2}\sqrt{3}_{2} \sum_{Jeven} (2J+1)^{\frac{1}{2}} V_{J1}^{c} \left\{ [(\Lambda \times \Lambda)^{J1} \times (\Lambda \times \Lambda)^{J1}]_{00}^{02} + (15) + [(M \times M)^{J1} \times (M \times M)^{J1}]_{00}^{02} - \sqrt{3}_{2} \sum_{J_{o}} U_{J_{o}1}^{c} ([\Lambda \times \Lambda]^{J_{o}1} \times [M \times M]^{J_{o}1})_{00}^{02} , \right\}$$

where the V_{J1}^{C} is a two-body matrix elements of the Coulomb interaction,

$$V_{J1}^{c} = \langle j^{2} JMTM_{T} | \frac{e^{2}}{r_{ij}} | j^{2} JMTM_{T} \rangle$$
, T=1, (16)

and

$$U_{J_0} = \sum_{\text{Jeven}} \sqrt{2J+1} V_{J1}^c \left\{ \delta_{JJ_0} + (-1)^{J_0+1} 2(2J_0+1) \times \left\{ \begin{array}{c} j j J_0 \\ j j J \end{array} \right\} \right\}$$
(17)

Eqs. (14)-(15) are applicable to a nuclear structure calculation as soon as we know the matrix elements of the coupled Λ -M pair operators. These are given in the Appendix.

4. The Coulomb energy of the A = 46 and A = 48 isobars

4.1. General discussion

For a set of A nucleons the eigenvalue of the charge operator $Q_A=\frac{1}{2}A-T_3$ is $\frac{1}{2}A-M_T.$ The third component of the total isospin operator,

$$T_{3} = \sum_{i} t_{3}^{(i)},$$
 (18)

has the eigenvalue

$$M_{T} = \frac{1}{2}A - Z = \frac{1}{2}(N - Z), \qquad (19)$$

which is always a good quantum number (conservation of charge). Here N and Z are the numbers of the neutrons and protons, respectively.

If the neutron-proton mass difference is neglected and the nuclear forces are taken to be charge independent, then the states of an A-nucleon system belonging to a fixed set of quantum numbers but different M_T are degenerate. We call such a set of states a T multiplet and its members the isobaric analogue states. The Coulomb interaction and other electromagnetic effects spoil the degeneracy and introduce a small admixture of states of different isospin and shift the members of the multiplet with respect to each other.

The major contribution to the Coulomb energy can be calculated by first order perturbation theory. For each of the (2T+1) degenerate eigenstates $|\gamma TM_T \rangle$ of the isospin independent part of the nuclear Hamiltonian H_o, it is given by the expectation value of the Coulomb interaction (13).

For the eigenstates $|\gamma \text{TM}_{\rm T}>$ of the time-independent Schrödinger equation

$$H_{o}|\gamma TM_{T} \rangle = E_{\gamma}|\gamma TM_{T} \rangle$$
(20)

K.T. Hecht and R. Hemenger [10-12] used shell-model wave functions with a limit for the seniority values ($v \le 2$). Hecht calculated the Coulomb energies also in states classified by the Wigner supermultiplet quantum numbers (the total spin S and the total isospin T).

In the present paper we select the $|\gamma TM_T \rangle$ states in a different way. We adopt the wave functions which were taken from the exact solution of (20) with a pairing + quadrupole force in the quasi-particle scheme [8,9]. It should be stressed that these functions include mixed configurations with seniority numbers up to 8.

By using the decomposition (9) and reducing the matrix elements in the isospin space, the expectation value of $V_{\rm C}$

$$E_{c}(A,T,M_{T}) = \langle \gamma TM_{T} | V_{c} | \gamma TM_{T} \rangle$$

$$= E_{c}^{0}(A,T) - M_{T}E^{1}(A,T) + (3M_{T} - T(T+1))E_{c}^{2}(A,T)$$
(21)

is separated to the isoscalar, isovector and isotensor Coulomb energy:

$$E_{C}^{O}(A,T) = \langle \gamma T | | V_{C}^{O} | | \gamma T \rangle, \qquad (22)$$

$$E_{C}^{1}(A,T) = -[T(T+1)]^{-\frac{1}{2}} < \gamma T ||V_{C}^{1}||\gamma T > , \qquad (23)$$

$$E_{c}^{2}(A,T) = [T(T+1)(2T-1)(2T+3)]^{\frac{1}{2}} < \gamma T ||V_{c}^{2}||\gamma T > .$$
(24)

The scalar Coulomb energy $E_c^0(A,T)$ represents the average Coulomb energy for a given T-multiplet. The energy $E_c^0(A,T)$ cannot be determined from experiment because the eigenvalues of the scalar Coulomb energy operator and the charge-independent nuclear Hamiltonian cannot be measured separately. It is, however, possible to determine the Coulomb energy difference (or Coulomb displacement energy) ΔE_c between members of a multiplet defined by

$$\Delta E_{c}(A,T,\widetilde{M}_{T}|M_{T}) = E_{c}(A,T,\widetilde{M}_{T}) - E_{c}(A,T,M_{T})$$
(25)

The isovector and the isotensor Coulomb energies can be expressed in terms of ΔE_c as follows:

$$E_{c}^{1}(A,T) = \Delta E_{c}(A,T,T-1|T) + (T-\frac{1}{2}) \left\{ \Delta E_{c}(A,T,T-2|T-1) - \Delta E_{c}(A,T,T-1|T) \right\},$$

$$E_{c}^{2}(A,T) = \frac{1}{6} \left\{ \Delta E_{c}(A,T,T-2|T-1) - \Delta E_{c}(A,T,T-1|T) \right\}.$$
(26)
(27)

These equations show that $E_c^1(A,T)$ and $E_c^2(A,T)$ are directly connected with the measured quantities, and they are very convenient for a systematic study of the effect of the Coulomb force.

4.2. Results

The experimental vector Coulomb energies E_c^1 for the isobaric nuclei calcium, scandium, titanium, vanadium and chromium are shown in fig.1. The dependence of the energy E_c^1 on A is essentially linear within a shell. The experimental tensor Coulomb energies E_c^2 shown in fig. 2 have an oscillatory pattern and decrease slowly with increasing A. These effects, especially the oscillations of E_c^2 for T= 1, are not easy to understand [13].

The magnitude of the interaction between a valence and a core proton was estimated by the weighted average Coulomb interaction energy \overline{V}_{C} . The additional vector Coulomb energy due to this interaction is $Z_{O}\overline{V}_{C}$, where Z_{O} is the charge number of the core. This quantity was identified with the Coulomb displacement energy of the Ca-Sc isobaric pair [13]:

$$\Delta E_{(Ca-Sc)} = Z_{V} = 7175 \text{ keV}.$$
 (29)



Fig. 1. Vector Coulomb energies E_c^1 as a function of the mass number A. All experimental uncertainties are less than 50 keV.



Fig. 2. Tensor Coulomb energies E_c^2 as a function of the mass number A. Experimental uncertainties are less than 3 keV.

The relations given in subsection 4.1 with the additional energy (29) was the framework for writing the computer programme. The calculations were done on the RIAD 32 computer in the Computation Centre of the M. Skłodowska-Curie University in Lublin.

The results of the calculations and the experimental values are collected in table 2.

			and the second s					
Isobars	ΔE _C Exp	Iso- spin	∆E _c Th	ΔE_{c}^{*} Th	E ¹ c	Е <mark>1*</mark> с	E _c ²	E _c ^{2*}
			A=	46			Bran pulling the	
Sc - Ca Ti - Sc V - Ti	7175 7620 7834	3 2 1	7230 7670 7933	7724 7913	8430 8255 8134	7925 8114	80 65 67	67
			A=	48				
Ca - Sc Ti - Sc V - Ti Cr - V	7190 7518** 7819 8226	4 3 2 1	7188 7550 7860 8229	8094 8383	8700 8540 8400 8430	8232 8421	72 66 60 67	46

Table 2. Coulomb displacement energies for lf_{γ_2} shell nuclei and their isovector and isotensor parts.

Exp - experimental values [14]

Th - calculated values

*From [15] and [13]. **[16]

4.3 Remarks

 (i) All the results presented in this section were obtained in the first order approximation of the perturbation theory. A full diagonalization of the Coulomb interaction is also possible in the quasi-particle basis. Since a very small correction is expected [10] from the off-diagonal matrix elements, to save computer time we did not carry out such a calculation. (ii) The wave functions of the pairing + quadrupole

(ii) The wave functions of the pairing + quadrupole Hamiltonian [8] were used in the estimation of the Coulomb energies. Strictly speaking they are not correct, especially for odd-odd nuclei [9]. However, because of the long-range character of the Coulomb force, the detailed microscopic structure of the functions does not influence the values of the Coulomb displacement energies significantly. The very good agreement with the experimental data in table 2 confirms this conclusion.

(iii) The tensor Coulomb energies in the isobars under discussion are 50 % larger than their values published previously. The effect is due to the admixtures from the higher seniority configurations (v=4 and v=6). This result is compatible with the suggestion of ref. [10].

5. Summary

In this paper we presented the transformation of a chargedependent interaction to the new quasi-particle scheme, and applied it to the calculation of the Coulomb energies for the A=46 and A=48 isobars. The formulas for the matrix elements of the coupled Λ -M pairs needed in the diagonalization of the Coulomb Hamiltonian are available in the Appendix.

The standard technique for the evaluation of the matrix elements of the nuclear Hamiltonian uses the fractional parentage coefficients (cfp.). For a configuration of both protons and neutrons a complete tabulation of the $n \rightarrow n-1$ and $n \rightarrow n-2$ cfp. in the isospin formalism is only available for $j \leq \frac{5}{2}$ shells. This method, however, does not require any cfp. It is particularly useful in the calculation of matrix elements between states of large particle number (in our case n=6 and n=8) and small isospin, where the cfp. expansion becomes extremely cumbersome.

The author wishes to express his deep gratitude to Professor S. Szpikowski for very useful discussions and suggestions which significantly contributed to many phases of this work. Many thanks are due to Mrs. Teresa Pikus and Mr. Z. Skorzyński for much help in the computation. The carefulness of Mrs. T. Piasecka in producing the typed manuscript from a handwritten copy is very much appreciated.

Appendix

The matrix elements $\langle ab||[M \times M]^{J_0^1}||cd \rangle$ were tabulated [7].

The matrix elements of the operator $\{ [\Lambda \times \Lambda]^{J_0^1} \times [\Lambda \times \Lambda]^{J_0^1} \}_{00}^{02}$ have analogous forms except a change of indices λ and μ on the right hand side of formula (A1).

$$< (J_{\lambda}^{*}J_{\mu}^{*})JM(T_{\lambda}^{*}T_{\mu}^{*})T^{*}M_{T} | \left\{ [\Lambda \times \Lambda]^{J_{0}} \times [M \times M]^{J_{0}} \right\}_{00}^{02} | (J_{\lambda}J_{\mu})JM(T_{\lambda}T_{\mu})TM_{T} >$$

$$= (-1)^{J_{\lambda}^{+}J_{\mu}^{+}+J^{+}J_{0}^{-}} [5(2T+1)/(2J_{0}^{+}+1)]^{-\frac{1}{2}} \left\{ \begin{array}{c} J_{\mu}J_{\lambda}J \\ J_{\mu}^{*}J_{\mu}^{*}J \\ J_{\lambda}^{*}J_{\mu}^{*}J_{0} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} 1 & 1 & 2 \\ T^{*}T^{*}T^{*}T^{*}T \\ T^{*}\lambda^{T}\mu^{T} \\ T^{*}\lambda^{T}\mu^{T} \end{array} \right\}$$

$$(A2)$$

$$\times < \Delta J_{\lambda}^{*}T_{\lambda}^{*} | | [\Lambda \times \Lambda]^{J_{0}} | | \Delta J_{\lambda}T_{\lambda} > < \Delta J_{\mu}^{*}T_{\mu}^{*} | | [M \times M]^{J_{0}} | | \Delta J_{\mu}T_{\mu} > .$$

$$<(J_{\lambda}J_{\mu})JM(T_{\lambda}T_{\mu})TM_{T}|\left\{[\Lambda \times \Lambda]^{J_{0}1} \times [\Lambda \times M]^{J_{0}1}\right\}^{01}_{00}|(J_{\lambda}J_{\mu})JM(T_{\lambda}T_{\mu})TM_{T}>$$

$$=(-1)^{T+T^{*}-2J-1}(TM_{m}10|T^{*}M_{m})(2J+1)^{-1}[3/(2J_{0}+1)(2T^{*}+1)]^{-\frac{1}{2}}$$

(A3)

$$\begin{array}{c} J+J_{1} \left\{ \begin{array}{c} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ J_{1}T_{1} & T_{1} \end{array} \right\} \\ J_{\lambda_{1}}T_{\lambda_{1}}J_{\mu_{1}}T_{\mu_{1}} \end{array}$$

 $* < (J_{\lambda}^{*}J_{\mu}^{*})J(\mathbb{T}_{\lambda}^{*}\mathbb{T}_{\mu}^{*})\mathbb{T}^{*} | | [\Lambda \times \Lambda]^{J_{O}^{-1}} | | (J_{\lambda_{1}}J_{\mu_{1}})J_{1}(\mathbb{T}_{\lambda_{1}}\mathbb{T}_{\mu_{1}})\mathbb{T}_{1} >$

$$\times < (J_{\lambda_1}J_{\mu_1})J_1(T_{\lambda_1}T_{\mu_1})T_1 | [[\Lambda \times M]]^{O^1} | | (J_{\lambda}J_{\mu})J(T_{\lambda}T_{\mu})T > .$$

The standard Racah methods allow to express the matrix elements of the operators $[\Lambda \times M]$ and $[\Lambda \times \Lambda]$ in terms of matrix elements of Λ and M. An exchange of the respective indices between the Λ and μ spaces given an analogous formula for the $\{[M \times M]^{J_01} \times [\Lambda \times M]^{J_01}\}_{00}^{01}$

References

- [2] K. T. Hecht, A. Adler, Nucl. Phys. A137 (1969) 129
- [3] K. T. Hecht, in "Proceedings of 15th Solvay Conference in Physics, ed. I. Prigogine (Gordon and Breach Sc. Pub., New York, 1973)p.301
- [4] J. P. Elliott, I.A. Evans, Phys. Lett 31B (1970) 157
- [5] K. T. Hecht, S. Szpikowski, Nucl. Phys. A158 (1970) 449
 [6] L. Armstrong, B. R. Judd, Proc. Roy. Soc. A315 (1970)
 - 27; 39

- [7] W. A. Kamiński, S. Szpikowski and K. T. Hecht, Atomic Data and Nuclear Data Tables 16 (1975) 311
- [8] W. A. Kamiński, doctoral thesis, Maria Skłodowska-Curie University, unpublished (1977)
- [9] S. Szpikowski, W. A. Kamiński, Izv. AN SSSR, Fiz. Ser. 42 (1978) 807 [10] K. T. Hecht, Nucl. Phys. Alo2 (1967) 11
- [11] K. T. Hecht, in Isobaric Spin in Nuclear Physics, ed. J. D. Fox and D. Robson (Academic Press, New York-London, 1966) p.823
- [12] R. Hemenger, doctoral thesis, The Michigan State University, unpublished (1968)
- [13] J. Jänecke, in Isospin in Nuclear Physics, ed. D. H.
- Wilkinson (North-Holland, Amsterdam, 1969) p.299
- [14] W. J. Courtney, J. D. Fox, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 15 (1975) 141 [15] J. Jänecke, Nucl. Phys. All4 (1968) 443
- [16] R. T. Kouzes, P. Kutt, D. Mueller and R. Sherr, Nucl. Phys. A309 (1978) 329

Referee: R. G. Lovas



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 155-171

DESIGN STUDY ON THE ACCELERATION TUBE AND BEAM TRANSPORT SYSTEM OF A HIGH CURRENT NEUTRON GENERATOR

E, KOLTAY,* GY, MÓRIK,* GY, SZABÓ*

Institute of Experimental Physics, Kossuth University Debrecen, Hungary

Physical and technical design has been made of an ion beam acceleration and transport system as element of a new high current neutron generator to be built up in the Institute of Experimental Physics of the Kossuth University in Debrecen.

TERVTANULMÁNY EGY NAGYÁRAMU NEUTRONGENERÁTOR GYORSITÓCSŐVÉ-NEK ÉS NYALÁBVEZETŐ RENDSZERÉNEK TERVEZÉSÉHEZ. A debreceni Kossuth Lajos Tudományegyetem Kisérleti Fizikai Intézetében felépitendő uj nagyáramu neutrongenerátor gyorsitó- és iontranszport rendszerének fizikai és technikai terveit mutatjuk be.

ОПИСАНИЕ ПЛАНА УСКОРИТЕЛЬНОЙ ТРУБКИ И СИСТЕМЫ ТРАНСПОРТИ-РОВКИ СИЛЬНОТОЧНОГО НЕЙТРОННОГО ГЕНЕРАТОРА. В статье представлены физический и технический планы ускорительной системы и системы транспортировки пучка нового сильноточного нейтронного генератора, создаваемого в Институте экспериментальной физики дебреценского Университете имени Лайоша Кошута.

1. Introduction

Recently a project has been started in the Institute of Experimental Physics of the Kossuth University in Debrecen aiming at the development of a 200 kV 30 mA accelerator [1,2]. As part of this activity physical and technical design has been made of the acceleration tube and beam transport system. The acceleration of both deuterium ion and light heavy ion beams has been considered according to the different needs of generating 14 MeV neutrons and investigating problems of astrophysical nuclear reactions, respectively.

*Permanent adress: Institute of Nuclear Research, Debrecen, Hungary

A 220 kVolt 30 mA direct current power supply of Haefely 200/60 K modified type [3] and a duoplasmatron ion source DP-30 manufactured by the High Voltage Engineering Corporation [4] were taken as basic commercial elements to be used in the accelerator.

2. General considerations

As a first step to the electron-optical treatment of the system the magnitude of the eventual space charge effects is to be considered. Depending on the actual conditions three possible ways of electron optical desription can be followed:

- 1. applying the usual space charge free description by fully ignoring the space charge represented by the low energy intense ion beam, 2. determining beam trajectories according to the successive
- approximation method of the space charge optics,
- 3. performing calculations in space charge free approximation while taking special measures in dimensioning the system to decrease the effect of the space charge and to com-pensate for the neglected weak effects. The former task can be achieved by short acceleration tube and short source-totarget total distance while the latter one can be solved most probably by using flexible strong focusing elements near to the high energy end of the tube.

A qualitative estimate of the actual conditions can be obtained by comparing the emittance and perveance terms of the Kapchinski-Vladimirski equation [5,6]. According to the emittance data of the present duoplasmatron source [4] the working area of the accelerator marked in Fig. 1 is placed in the vicinity of the border separating the areas I and II in



Fig. 1. Emittance dominated and space charge dominated areas on the perveance-emittance diagram with working area of the present accelerator indicated.

which emittance and perveance plays a leading role, respectively. Consequently, space charge effects can be considered as a slight perturbation in our case. Therefore we decided to avoid the time consuming full description of the system and to follow the third way throughout the present work.

3. Acceleration tube

The basic requirements to be fulfilled in the tube design were summarized as follows:

- 1. minimum tube length to decrease space charge effects,
- 2. good voltage holding of the tube in spite of its short length,
- 3. tube electrodes shaped to result in effective beam focusing,
- 4. careful screening of the tube insulators from scattered ions and secondary electrons,
- 5. wide apertures on tube electrodes and focusing elements,
- 6. immediate entrance of the accelerated beam to the additional strong focusing system,
- 7. high pumping speed of the tube matched to the gas leak rate of the ion source,
- 8. applicability of the glass-metal tube technology successfully used in producing our Van de Graaff tubes [7,8],
- 9. maximum flexibility of the mechanical construction enabling us to change inner electrode configuration in the case of eventual troubles which might appear during test runs.

The above conditions are partly contradictory. Points 1,3,4 can be well fulfilled by using a single gap inhomogeneous field tube where focusing is performed by a cylindrical lens of immersion type. On the contrary points 2,5,6 and 8 are for the application of a homogeneous field tube.

The proposed acceleration tube shown in Fig. 2 meets all the requirements formulated in points 1.-9. On the same figure the vacuum connection element also used for housing a quadrupole multiplet working as the additional focusing system is presented, too.

The construction follows the arrangement of Huguenin and Dubois [9] and that of Hepburn et al [10]. From the point of view of electron optics it represents a single gap immersion lens closed in a homogeneous tube the electrodes of which are formed according to the requirements of wall screening and voltage holding. The inner conical electrodes are easily replaceable without unjointing the metal-glass bond according to the point 9.

The conductivity of the tube itself calculated for D_2 gas amounts to 3100 l/sec, the resulting conductivity of the tube and the vacuum connection element makes 2000 l/sec. When making use of a diffusion pump system described in [11] the effective pumping speed at the ion source 710 l/sec results in about 1.10^{-5} mbar required in the data sheet of the source [12].





4. Field strength values in the acceleration tube

Predictions for the voltage holding properties of the tube can be obtained on the basis of estimated field strength values appearing at eminent points of its electrodes.

Useful formulae are gathered for electrode arrangements of practical importance in an early paper of Bouwers and Cath [13].

Complicated electrode configurations of rotational symmetry can easily be treated by the method of stress multiplication factors according to the work of Boag [14]. Here fields of rotational symmetry can be reduced to the corresponding field distributions in the meridional plane of the system through stress multiplication factor $f_{\rm Cyl}$ while the latter is to be replaced by a plane condenser of the corresponding electrode distance and voltage difference using a further stress multiplication factor f_i . The quoted article presents results of approximate calculations for a number of electrode shapes typically used in high voltage accelerators. Stress multiplication factors are given in formulae, tables and diagrams. Field strength values for actual cases can be deduced by the multiplication of the two corresponding factors with the field value appearing at the plane condenser of the given voltage difference and electrode distance.



Fig. 3. Critical points of the acceleration tube treated for field strength values in Table 1.

Table 1. Field strength values in the acceleration tube (U=200 kV)

Field strength				1	
notation	position	formula, reference	Geometrical parameters	Stress multiplication factors	E kV/cm
Eo	avarage axial field	E=U/d	d=41.4 cm	1	4.8
El	avarage accelera- tion field	E=U/d	d=10 cm	1	20
E2	axial field of outer anticorona ring (7/8 U)	Boag (3)	$\gamma = \frac{g}{d} = \frac{3 \cdot 2}{2}$	1.49	11.6
E ₃	radial field of outer anticorona ring (7/8 U)	Boag, Fig. 22 Boag (24)	$q = \frac{1}{2.6} = 0.38$ $\frac{R}{r} = \frac{100}{25}$ $R \ge 100$ $f_{tor} \cdot f_{cy}$	f _{tor} = 1.92 f _{cyl} = 2.14	9.6
E ₄	radial field of acceleration electrode (U-5/8U)	Boag (24)	$\frac{R}{r} = \frac{15.1}{8} = 1.89$	f _{cyl} = 1.38	14.6
E ₄	radial field of inner anticorona ring (U-5/8 U)	UNDERESTIMA- TED VALUE cylindrical approximation $E=\frac{U}{R \ln \frac{R}{r}}$	<u>R</u> = 1.89	f _{cyl} = 0.74	7.8
		OVERESTIMA- TED VALUE rings of cir- cular shape Boag, Fig. 22	q= 0.4 2.6 = 0.15	f _{tor} = 2.6 f _{cyl} = 0.74	
			f _{tor} f _{cy}	1= 1.92	20.6
		OVERESTIMA- TED VALUE rings of oval shape Boag, Fig. 22	$q = \frac{1 \cdot 2}{2 \cdot 6} = 0.46$	f _{tor} = 1.7 f _{cyl} = 0.74	
			f _{tor} . f _{cy}	1 ⁼ 1.26	13.5

5. Electron optics

The electron optical system of the accelerator will be composed of four units. The beam emitted by the ion source will be accelerated to the total energy in an acceleration tube. For compensating against space charge effects and for adjusting beam parameters according to the needs of experiments a quadrupole focusing system will be built up as near as possible to the acceleration tube. For mass analyzing the beam the use of a velocity filter of Wien-type is also planned.

5.1. Ion source

According to the factory data sheet the electron optical parameters of HVEC-DP-30 duoplazmatron source to be taken as input data in designing the acceleration tube are as follows:

maximum ion energy50 keVmaximum ion beam intensity30 mAminimum beam diameter at 50 keV1 cmdistance of the minimum diameter beam50 cmspot measured from the source61 cmemittance5-7.10⁻³ cm.rad.MeV

5.2. Acceleration tube

The second unit of the system is represented by the cylindrical immersion lens of the acceleration tube. Here first and second electrodes are fed by the source focusing voltage V_1 and by the sum V_2 composed of V_1 and total voltage of the high voltage power supply, respectively. Focusing properties of lenses of axial symmetry as function of the voltage ratio V_2/V_1 can be described for space charge free case in a good approximation by the help of the Gans method [15]. Using this approximation the field structure is to be described by the axial potential distribution. In the present case the conical screening electrodes linearly fed by the voltage divider chain result in an axial distribution somewhat different from that of a simple tube lens. However, the similarity of the asymmetry properties with respect to the gap midle plane for both the gap and the screening electrode system makes this difference small. As no data are available for the actual electrode configuration the P-Q characteristics and focal curves given for unscreened gap in articles [16,17] were used here to get the image distance and magnification while beam envelope data rmax and rmax of the accelerated beam were obtained from the Liouville theorem written for our case in the form

Here r_{max} and r'_{max} denote the beam data at the place of minimum beam diameter while E stands for the energy of the beam accelerated through the gap.

Table 2 contains optical data obtained by this method for the tube gap. It is clearly seen that image distance does not change much for voltage ratios between 3 and 5 while showing

Gap voltage (kV)	Beam energy (keV)	Voltage ratio	Image distance measured from gap midle plane (cm)	Magnifi- cation	Image size ^r max (cm)	Max. beam divergence r' max (rad)
0	50	1	7	l	0.5	0.05
50	100	2	-200	big	big	small
100	150	3	2	0.7	0.35	0.025
150	200	4	3.5	0.6	0.30	0.037
200	250	5	6.5	0.48	0.25	0.04

Table 2. Focusing properties of the acceleration gap lens

up radip changes for those between 1 and 3. The extreme image distance indicates that the beam becomes practically parallel and of big diameter. Such a beam shape appearing at low accelerating voltages would result in a heavy beam load of the beam transport elements following the acceleration tube. This difficulty can be avoided by increasing the voltage ratio through diminishing the source voltages. Such an adjustment would cause the decrease of the beam intensity of the accelerator at the voltages below 100 kV. At the same time the space charge effect will also be stronger because of the lower ion energy. The expected energy dependence of the beam intensity can not be fortold in an easy way, the optimum working conditions in this range will be found experimentally on the operating accelerator.

5.3. Quadrupole focusing system

Aiming at the optimum construction of the focusing system to be built up behind the acceleration tube the following requirements are to be met:

- 1. minimum beam losses within the lens system,
- 2. no need of forced cooling of the lens electrodes,
- 3. easy realisation within the main vacuum system,
- 4. limited number of power supply blocks of moderate voltage,
- 5. using a low number of adjustable parameters in order to facilitate the proper setting of the optical properties,
- high flexibility of the system in forming the beam according to the different needs of future experiments.

The above requirements can be well fulfilled by the use of an electrostatic quadrupole multiplet system. In order to find the most appropriate solution a number of electron optical calculations have been carried out both in Gauss-type trajectory [18] and phase space envelope [19] descriptions for various quadrupole (doublet, triplet and quadruplet) arrangements. Data contained by Table 2 have been used as beam entrance data for the quadrupole system.

The application of doublets and asymmetrical quadruplets is practically excluded because of their having magnifications with order of magnitude differences in the two basic planes perpendicular to each other. Furthermore, beam envelope within the lens increases tremendously in one of the planes for such lens systems.

Table 3 contains the main geometrical and optical data of quadrupole systems of various configurations. According to the different needs of mass analyzer arrangements to be treated in paragraph 5.4. the data were calculated for three different image distances. Based on these data the aperture radius and the maximum electrode voltages to be applied can be decided.

Maximum beam radii in the quadrupole lens system are presented for two special cases. Pessimal case corresponds to the condition of focusing the beam by the acceleration gap onto the object plane of the quadrupole system with unit magnification and with image data $r_{max}=0.5$ cm, $r_{max}=0.05$ rad (see first row of Table 2). This case represents a strong overestimation of the beam size at least for U>100 kV and for space charge free conditions. Normal case means running the accelerator at maximum voltage. As beam envelope radii within the lens are mainly defined by r_{max}^{\prime} normal case data are to an extent overestimated, as well.

Target spot diameters have been derived both from magnifications in Gaussian optics and from phase space description. Namely, as shown by Resmini [20] in the case of finite beam emittance, minimum beam size at a given image distance is reached at lens strengths somewhat weaker than those given by calculations in Gaussian optics. Due to the many local minima and zeros of the two-or three dimensional surfaces defined by the phase space equations for lens strength values even a numerical solution can hardly be found. Therefore the data in the last column of Table 3 were simply taken by searching for minimum beam spot size in phase space description near the Gaussian image plane. This method may result in a sligth overestimation of the real size.

From the numerical data given in Table 3. the following conclusion can be drawn. Two parameter systems are preferred to the others due to the simpler realisation of the power supply system and the easy adjustment of the optical parameters. Stigmatic focusing and high optical flexibility are for symmetrical quadruplet. Two parameter triplet of equal electrode length is considered as the second best solution.

Configuration	Length	Length of	Aperture	Maximum	Image dis-	Plane	Magni- fication	Maximum I in th	beam radii e lens	Target sp calcul	ot diameter ated from
	lenses (mm)	separating the lenses (mm)	Electrode radius (mm)	supply voltage (kV)	(cm)			pess. (mm)	norm. (mm)	magni- fication (mm)	phase space description (mm)
Two parameter triplet ^β 1 ^{*β} 3 ^β 2	L ₁ =175 L ₂ =175 L ₃ =175	45	40 46	2x <u>+</u> 17	500 1200 1500	CDC DCD CDC DCD CDC DCD	1.02 1.75 1.75 3.45 2.09 4.17	26.5 40.0 34.9 36.3 36.2 35.8	22.3 32.8 29.3 27.5 30.1 29.9	10.2 17.6 17.4 34.6 20.8 41.6	9.2 12.0 16.0 20.0 17.0 21.0
	L ₁ =131,25 L ₂ =262.5 L ₃ =131.25	45	40 46	2x <u>+</u> 17	500 1200 1500	CDC DCD CDC DCD CDC CDC DCD	0.91 1.77 1.59 3.51 1.90 4.23	29.3 38.0 38.3 34.7 39.6 34.1	24.6 31.2 32.5 28.2 33.9 27.8	9.2 17.6 15.8 35.0 19.0 42.2	8.2 11.0 14.0 18.0 16.0 30.0
Three parameter triplet $\beta_1, \beta_2, \beta_3$	L ₁ =175 L ₂ =175 L ₃ =175	45	40 46	3x <u>+</u> 18	500 1200 1500	CDC DCD CDC DCD CDC DCD	1.53 1.53 2.85 2.85 3.41 3.41	19.1 43.9 22.4 42.2 22.9 41.9	15.1 36.6 18.5 35.2 18.7 35.0	15.4 15.4 28.4 28.4 34.0 34.0	14.0 14.0 16.0 16.0 24.0 24.0
	L ₁ =131.25 L ₂ =262.5 L ₃ =131.25	45	40 46	3x <u>*</u> 20	500 1200 1500	CDC DCD CDC DCD CDC DCD CDC DCD	1.53 1.53 2.84 2.84 3.40 3.40	20.1 42.3 23.0 41.1 23.6 40.8	17.1 35.3 20.1 34.6 20.5 34.9	15.2 15.2 28.4 28.4 34.0 34.0	10.0 10.0 15.0 15.0 24.0 24.0
Two parameter (symmetrical) quadruplet $\beta_1 = \beta_4$ $\beta_2 = \beta_3$	L ₁ =120 L ₂ =120 L ₃ =120 L ₄ =120	45	35 42.5	2x <u>+</u> 20	500 1200 1500	CDCD DCDC CDCD DCDC CDCD DCDC DCDC	1.48 1.48 2.73 2.73 3.27 3.27	32.5 27.9 34.5 26.7 34.8 26.5	27.3 23.9 28.7 22.1 29.1 23.5	14.8 14.8 27.4 27.4 32.8 32.8	10.0 10.0 16.0 16.0 22.0 22.0

Table 3. Focusing properties of the quadrupole systems treated

5.4. Beam analyzer

As shown by preliminary considerations on different beam analyzer units to be used here up to ion mass 20 a.m.u. Wien mass filters composed of crossed homogeneous magnetic and electrostatic fields [21] are preferable to magnetic sector fields due to lower weight and shorter total optical length in the former case. According to beam size data given by the calculations on the quadrupole system a free air gap and a distance between deflector plates amounting to 60 mm are to be used.

Table 4. contains the main physical parameters obtained for three different configurations of the beam analyzer. Case 1.

Case	Maximum mag- netic field inten- sity (T)	Ampere turns	Max. de- flecting voltage, (kV)	Length of the filter (cm)	pole-to exit slit dis- tance (cm)	Comments	Figure No
l	3	16000	<u>+</u> 15	40	60	noseparation for AM=1 isotopes if M>14	4
2	7	37000	<u>+</u> 30	2x20	80	40 cm drift length with cooled slits	6
3	3.5	18000	<u>+</u> 15	100	100	heavy loading of the electrodes	7

Table 4. Main parameters of the Wien filter for the cases treated

represents a mass filter which would separate beam components of different atomic numbers and charge states. However its mass resolution would be too poor for resolving neighbouring isotopes at masses M>14. Straight lines in Fig. 4 show the separation between pairs of beam components versus magnetic field intensity at the plane of the exit slit. For beam diameters to be expected at the slit the separation given for the pairs 14 N+- 15 N+ and 16 O+- 17 O+ does not meet the condition of fully analyzed beam. Easy realization makes case 1 convenient if separation of Δ M \approx 1 isotopes is not necessary. A schematic of the magnet yoke deflecting plates and vacuum chamber is shown in Fig. 5.



Fig. 4. Separation of beam groups versus magnetic field stength for a Wien-filter of 40 cm length and 60 cm drift gap.

Case 2 represents a mass filter system composed of two filters of 20 cm length separated by a field free drift tube of 40 cm long. High field intensity and big pole-to-slit distance result in good isotope separation up to 20 a.m.u. as shown in Fig. 6. High deflecting voltage makes electrical insulation of the plates difficult. Heavy loading of the electrodes by strongly deflected beam components can be avoided by the help of water-cooled adjustable slit plates to be placed in the middle of the drift tube. For final dimensioning of case 2 experimental determination of the beam size data seems to be necessary.

According to straight lines of Fig. 7 case 3 gives fully separated $\Delta M \approx 1$ groups with a single filter. However beam loading of the deflector plates and consequent cooling difficulties cannot be avoided here.

Final decision on the configuration to be realized can be made an the basis of detailed plans fo the experiments to be performed on the accelerator.







Fig. 6. Separation of beam groups versus magnetic field for a pair of Wien-filters separated by a gap of 40 cm. Filter lengths are 20 cm each, drift gap is 80 cm.

Special care must be taken of the optimum shaping of the detector plates. Namely, the field structure is strongly influenced by the ratio of the interelectrode distance to the heigth of the plates as well as by the relative width of the vacuum chamber. On the other hand at +15 kV deflector voltages a field strength of 10-20 kV/cm will appear at the electrodechamber wall gap depending on the radius (r) used for rounding



Fig. 7. Separation of beam groups versus magnetic field strength for a Wien filter of 100 cm and 100 cm drift gap.

off the plate edges and on the width (a) of the wall-to-electrode gap. The approximate value for the field strength can be calculated from the formula [13]

E=0.9
$$\frac{U}{2.3 \text{ r } \log_{10} \frac{r+a}{r}}$$

6. Space charge expansion of the beam

The space charge effect has been neglected throughout this work due to the difficulties of a consequent treatment of the whole system. However a rough estimation of the beam expansion can be obtained using the formulae given in the articles of Green [6] and Hutter [23] for parallel beams (i.e. for the case of zero emittance). In Fig. 8 the expanded radius r of beams with given energies and intensities are shown for some values of the initial radius r_m versus axial distance measured in meters.



Fig. 8. Space charge beam expansion expressed in units of expanded versus entrance radii as function of the axial distance.

Fig. 9 presents similar data as function of the energy for fixed axial distances initial radii and beam currents.

According to the data on the above figures difficulties may appear for energies smaller than 100 kV. However, due to the expected beam radii higher than 10 mm in the system and to intensity decrease caused by the extraction of unwanted beam components in the mass filter no serious troubles will be caused by the beam expansion above energies of 100-150 keV.



Fig. 9. Space charge beam expansion expressed in units of expanded versus entrance radii as function of the beam energy.

References

] J. Csikai, IAEA Consultant's Meeting on Neutron Source
Properties, Debrecen, 1980.] Sztaricskai T, ATOMKI Közlemények 22 (1980) 47] Haefely, E-135.o.] HVEC Data Sheets-1053-S] T.S. Green, G.A.G. Mosson, ATOMKI Közlemények 18
(1976) 391 T.S. Green, Rep. Prog. Phys. 37 (1974) 1325
I. Berecz, A. Kiss. E. Koltay, I. Papp, A. Szalay, R. Ďzmuraň, ATOMKI Közlemények 19 (1977) 379
] I. Berecz, A. Kiss, E. Koltay, I. Papp, A. Szalay, R. Ďzmuraň, Revue de Phys. Appl. 12 (1977) 1511
] J. Huguenin, R. Dubois, CERN, 65-23] J.D. Hepburn, J.H. Omrod, B.G. Chidley, IEEE Tr. NS-22 (1975) 1809
Berecz I, Papp I. ATOMKI Közlemények 21 (1979) 249 Berecz I, Bohátka S, Koltay E, Szabó Gy, Contract Report, Debrecen. 1979
A. Bouwers, P.G. Cath, Philips Technische Rundschau 6 (1941) 274.
 J.W. Boag, Proc. IEEE 100, IV. No.5 (1953) 63 E. Koltay, Nucl. Instr. Meth. 6 (1960) 45 E. Koltay, S. Czeglédy, Acta Phys. Hung. 20 (1966) 341 B. Gyarmati, E. Koltay, ATOMKI Közl. 9 (1967) 319 E. Regenstreif, Focusing with Quadrupoles, dublets and triplets.In Focusing of Charged Particles. Ed. A. Septier Volume I. Chapter 2.4. (1967) Academic Press. New-York, 1967
[19] Szabó Gy, Thesis, Debrecen, 1969
[20] F. Resmini, Nucl. Instr. Meth. 68 (1969) 235
[21] K. Jensen, E. Veje, Nucl. Instr. Meth. 122 (1974) 511
[22] R. Hutter, Beams with Space-Charge. In Focusing of Charged Particles, Ed. A. Septier Volume II. Chapter 3.1. (1967) Academic Press, New-York, 1967.

Referee: A. Kiss



ATOMKI KÖZLEMÉNYEK 22 (1980) 173-190 K/AR DATING OF BASALTIC ROCKS IN TRANSDANUBIA, HUNGARY

Á, JÁMBOR*, Z. PARTÉNYI*, L. RAVASZ-BARANYAI*, G. SOLTI*, K. BALOGH**

Pliocene-Pleistocene basaltic rocks from Transdanubia,Hungary were dated by the K/Ar method. In evaluating the radiometric data the geological position and petrographic type and character of the samples were taken into account. Besides the conventional K/Ar ages, the ⁴⁰Ar/³⁶Ar-K/³⁶Ar isochron ages were calculated for presumably cogenetic samples. According to the present determinations the age of the basalts erupted near Pula at the end of the middle part of the Upper Pannonian Formation is 4.15±0.17 m.y. The basalts of Szentgyörgy-hill, Badacsony, Láz-hill (Uzsa-quarry) and the quarries near Sümegprága and Bazsi can be considered to belong to the upper part of the Upper Pannonian Formation. The average K/Ar age of the Pleistocene basic volcanic rock (jumillit) at village Bár is 2.02±0.14 m.y. and its isochron age is 2.11 0.17±m.y.

DUNÁNTULI BAZALTOS KŐZETEK K/Ar KORMEGHATÁROZÁSA. K/Ar kormeghatározásokat végeztünk pliocén-pleisztocén koru dunántuli bazaltos kőzeteken. A koradatokat a minták földtani helyzetének és kőzettani jellegének figyelembevételével értékeltük. A hagyományos K/Ar korok mellett néhány kogenetikusnak feltételezhető mintára a ⁴⁰Ar/³⁶Ar-K/³⁶Ar izokron korokat is megadtuk. Meghatározásaink alapján a felsőpannoniai formáció középső részének végén kitört bazlatok kora 4.15±0.17 mill. év. A Szentgyörgyhegy, a Badacsony, a Láz-hegy (Uzsabánya) továbbá a Sümegprága és Bazsi kőfejtőiben feltárt bazlatok a felsőpannoniai formáció felső részébe sorolhatók. A Bár község mellett található pleisztocén koru bázisos vulkáni kőzet (jumillit) átlagos K/Ar kora 2.02±0.14 mill. év, izokron kora 2.11 0.17 mill. év.

"Hungarian Geological Institute, Budapest ** Institute of Nucl. Res. of the Hung. Acad. of Sciences, Debrecen ОПРЕДЕЛЕНИЕ АБСОЛЮТНОГО ВОЗРАСТА КАЛИЙ- АРГОНОВЫМ МЕТОДОМ БАЗАЛЬТОВЫХ ПОРОД ЗАДУНАЙСКОГО КРАЯ. Абсолютный возраст плиоцено-плейстоценовых базальтов Задунайского края был определен калий- аргоновым методом. Результаты анализов обрабатывались с учетом геологического положения и петрографического состава пород. Для сингенетических пород, помимо обычного аргонового возраста, был определен и изохронный (⁴⁰ Ar/³⁶ Ar-K/³⁶ Ar) возраст. Воэраст базальтов, излившихся в конце средней части верхнепаннонской формации, представляется нам равным 4.15±0.17 млн. лет. Базальты гор Сентдьердьхедь, Бадачень, Лазхедь (Ужабаня), Шюмегпрага и Бажи можно отнести к верхней части верхнепаннонской формации. Средняя величина аргонового возраста плейстоценокой формации. Средняя величина аргонового возраста плейстоценовых вулканических пород основного состава (юмиллит) вблизи села Бар составляет 2.02±0.14 млн. лет, а изохронного возраста 2.11±0.17 млн. лет.

1. Introduction

Two different views arose in respect of the age of the Transdanubian basaltic rocks. G. Pantó [1] considered them to be the products of a single eruption around the Pliocene-Pleistocene boundary, while L. Lóczy [2] supposed prolonged volcanic activity during the Upper Pannonian period. Based upon the palaeontological investigations and deep drillings of the last two decades it could be concluded that basaltic volcanites occur in three levels in the Upper Pannonian and in one level in the early Pleistocene.

The systematic radiometric age determination of Neogene volcanics in Hungary started in 1975, at the proposal of G. Hámor, as a joint project between the Hungarian Geological Institute and the Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences. After the improvement of instruments and the elaboration of new experimental methods in 1976-77, the datation of Pliocene-Pleistocene basalts - the youngest igneous rocks in Hungary - could be started. Hereby a new method, independent of stratigraphy, was opened for the determination of the geological age of basaltic volcanism.

To an extent, depending on the petrographic character and the circumstances of solidification the radiometric age of basalts may differ from the geological one. These possible differences may be revealed and often even corrected by detailed investigation and by applying the isochron method, the conventional K/Ar ages of single samples, however, can be regarded only as approximations of the real age. The stratigraphy is also uncertain in a number of cases, since the age difference between the basalts and the underlying and especially the overlying, sediments is usually too great, or because the basalts were formed as subsurface bodies.

Our main purpose is to obtain a more exact knowledge of the age and duration of basaltic volcanism in Transdanubia by confronting and aligning the stratigraphic, K/Ar and petrographic data. The present work reports on the first stage and the results of this program. The conclusions drawn from the stratigraphic and radiometric data are partly the same and partly differ from each other. The age of a basaltic rock is accepted only when the stratigraphic and radiometric ages are in accord, otherwise additional investigations required for solving the problem are outlined.

The evolution of volcanism, the identification of the products of eruptions may be approached by petrographic methods and the petrographic character plays an important role in the interpretation of K/Ar data as well. The third part of this paper presents a petrographic description of the dated rocks, as well as a comparison and evaluation of petrographic, stratigraphic and radiometric data.

Geological setting

In the Transdanubian region of Hungary almost a hundred basaltic occurrences are known, all having independent eruption centres of their own. The majority of eruptions took place in the Upper Pannonian, only two baslats (Magyargencs and Bár) are known to originate from the Pleistocene. Regionally, these basalts can be found in great numbers in the Balaton Highland, including in this area three occurrences on the southern shore of Lake Balaton (Balatonboglár, Balatonfenyves, Balatonszentgyörgy), in the southern part of the Bakony Mountains and also in the Little Plain basalts and basaltic tuff bodies are known on the surface (Gérce, Sitke, Mount Bottyán, Kemenesmagosi, Várkesző, Kissomlyó, Magyargencs), or in a subsurface position (Vát, Mihályi, Malomsok, Kemeneshőgyész). Finally there is a single outcrop south-east of the Mecsek Mountains near the village Bár. (Fig. 1.).

The majority of smaller occurrences (their diameter is about 1 km) were developed at the cross of small-size faults and fissures and are connected to volcanic necks producing pyroclastic material in the beginning, which was followed by lava flow. There are several greater occurrences of 3-5 kms in diameter in the South-Bakony and Balaton Highland (Kab-hill, Kistó hill, Tik-hill, Agártető, Bondoró, Apáti-hill, Királykő, Sátorma, Harasztos, Köveskál, Szentgyörgy-hill, Badacsony) and two on the Little Plain (Malomsok-Várkesző, Ság-hill). These are stratovolcanoes built up of two-three alternate tuff-lava sheets. Beside these two main types, volcanic tuff rings (South-Bakony: Pula; Little Plain: Gérce, Sitke, Kissomlyó, Kemenesmagosi, Várkesző), concordant subsurface bodies, dykes and volcanic necks are also known [2-20].

The basalts in Transdanubia show varied petrographic, mineralogical and chemical features, but the definite dependence of these features on age, tectonic position, and regional distribution has not been established. All basalts in the Balaton Highland, South-Bakony and the Little Plain are slightly alkaline, the occurrence near Bár is a potassium rich basic rock, i.e. not a basalt in the strict sense of the word.



Fig. 1 Distributions of the Pliocene and Pleistocene basaltic volcanics in the Transdanubian region, Hungary

Going into a more detailed description of the geological setting of the dated rocks, the basalt near Pula was formed by the solidification of a 500 m wide lava pool on the bottom of a 1.2-1.5 km diameter tuff ring. A narrow homogeneous basaltic neck leads to it from below. The accumulation of pyroclastics - as indicated by the intercalated fauna bearing sediments - started in the lower part of the Upper Pannonian (Pa_2^1) , and was followed by lava flow at the end of the middle part of the Upper Pannonian (Pa_2^2) . The lava flow is covered by an alginitic-diatomaceous sequence belonging to the upper part of the Upper Pannonian Formation (Pa_2^3) .

Geological considerations suggest a similar age for Somlóhill, Haláp-hill (the dated sample comes from the letter's big quarry) and for the lower sample of borehole Monostorapáti-1. The Somló-hill is represented by sample No.586. from the top of the hill and by three samples from borehole Doba-3, sunk on the south-eastern slope of the hill. The borehole Monostorapáti-1 is on the south-western part of Bondoró; it cuts the oldest lava flow, which was dated by sample No.386. The lava flow of all three occurrences overlie sediments of the middle part of the Upper Pannonian Formation with the interdeposition of thin pyroclastic layers. The oldest cover of these basaltic bodies is Wurmian loess, they are ranged into the middle part of the Upper Pannonian Formation, on analogy with the basalts near Pula.

The samples from Szentgyörgy-hill, Badacsony, Diszel and the slope of Kab-hill towards öcs village come from stratovolcances similarly overlying sediments of the Pa_2^2 age. The cover is also Wurmian loess but the stratigraphic position of these samples is more uncertain than that of the samples treated previously, since these are poorly exposed. The Kapolcs-l borehole cut three lava flows (dated by samples No.399, 398 and 400) with two interbedded sediment layers belonging to the middle and upper part of the Upper Pannonian Formation.

A likely coeval with the youngest flow of the Kapolcs-l borehole is the basalt of Tálod forest, west of Nagyvázsony village, cut by drilling Vigandpetend-l. This lava flow overlies the youngest Upper Pannonian sediments of this area and is covered by Wurmian loess. According to Mollusca stratigraphy, the samples from Rábaszentandrás-l, Malomsok-2, Marcaltő-l, Várkesző-l, Várkesző-3, Várkesző-4, Kissomlyó and Ság-hill are of similar age. All of these basalt flows overlie sediments of the upper part of the Upper Pannonian Formation. Ság-hill is covered by Wurmian loess, the basalts from Várkesző and Kissomlyó (?) by alginitic-diatomaceous sediments of the Pa³ age, while the rest is overlain by the Early Pleistocene terrace (terrace No.VI.) of the river Rába.

The stratigraphic age of basalts from the Uzsa quarry and from the quarries at Sümegprága and Bazsi can be established only with a smaller accuracy. These are concordant subsurface sheets or dykes intruding among the layers of the middle part of the Upper Pannonian Formation. The basalt near Bazsi shows definite contact with the under- and overlying sediments as well. The basaltic body near Uzsa (Láz-hill) is built up similarly (columnar jointing in the middle, laminar parting parallel to its boundary in the lower and upper parts), but this was covered by Wurmian loess after a longer period of denundation. Statigraphically these concordant subsurface bodies are ranged into the middle or upper part of the Upper Pannonian Formation.

The geological age of the basic alkaline rock near Bár can be given relatively well, since at the proposal of T. Szederkényi this body is drilled through on the purpose of stone prospecting. As pointed out by Gy. Hőnig [21], the basaltic rock overflowed the Early Pleistocene red clay and is covered by Wurmian loess.

The stratigraphic positions of dated basalts is summarized in Table 2.

2. Petrography of the dated rocks

The basaltic rocks of Transdanubia are representatives uniformly of the continental alkaline basalts. From a petrographic point of view, the basaltic rocks can be grouped into three types. Olivin basalts of slightly tholeiitic composition and of a more explosive nature, are frequently surrounded by pyroclastic rings (type 1). They contain sporadic augite or a few amount of it as phenocrysts, Na_2O is usually higher than K_2O and xenolithes are frequent. The following dated samples of different localities can be classed into this type: Diszel-Délkő, Doba-3, (Somlyó), Uzsa-quarry, Pula-(1,8,14); Várkesző, Kapolcs, Zalahaláp, Kissomlyó and the lower basalt flow at Monostorapáti (Table 1).

The second group (type 2) is represented by olivin rich varieties and also the phenocrysts are olivin alone. This type frequently forms shields, thicker flows and subsurface bodies, the texture is mainly holocrystalline, often subophitic-ophitic. They are more alkaline than the basalts of type 1, and K₂O is generally higher than Na₂O. Xenolithes are not observable except some fragments of wall rock, usually older basalt pieces. List of dated samples: Malomsok, Marcaltő, Rábaszentandrás, Bazsi-quarry, Kab-hill, Ság-hill, Vigándpetend, Sümegprága, Szentgyörgy-hill, Badacsony and perhaps the upper basalt flow at Monostorapáti (Table 1).

The third group (type 3) cannot be classed as true basalts. Regarding the mineralogical as well as chemical composition of the basic volcanic rock occurring at Bár (Table 1), it can be classed as melanocratic feldspathoid-rich phonolites and related most probably to the rare jumillit varieties [22]. Its occurrence is restricted to the above locality. We suppose that there are correlations between volcanic forms and petrographic features, as well as mineralogical composition, but in our present knowledge, no direct connection has been found regarding their localization in the area. a) "Jumillit" at Bár

Locality	Texture	oli- vine	pyro- xene	hornblende (pseudo- morphs as aggregates)	biotite	sanidine- -anortho- clase	leucite	an- alcime	opak	Mineral iddings- ite	altera- tion serpen- tine	vesicle filling zeolite
Bár-4 18.0 m	porphiric- poikilitic	Х	x	0	S	х	х	0	Δ	· 0		
Bár-6 62,0 m	poikilitic	х	Х	0	0	х	х	0	Δ	0		
°67,0 m	poikilitic	х	Х	0	0	х	Х	Х	Δ		0	S

b) Basalt samples of Transdanubia

Locality	Texture	1	henocr	ysts			Grou	undmass				vesicle	filling	xeno-	Miu	neral alter	ation
		oli- vine	pyro- xene	plagio- clase	olivine	pyro- xene	plagio- clase	sani- dine	an- alcime	glass	opak	carbo- nate	zeo- lite	lith	iddings- ite	ser- pentine	chlorite- montmoril lonite
Malomsok 40,0-58,1	sub- ophitic				Х	х	х	0			ц				x		
Marcaltő 51,8-60,5	sub- ophitic				Х	Х	Х	0			п				Х		
⁶ Rábaszent- andrás 56,0-58,5	sub- ophitic				Х	Х	Х	0			ц				х		
Bazsi- quarry	sub- ophitic				X (pseudo- morphs)	Х	Х	0	0		Δ			basalt	х	0	
Kab-hill	sub- ophitic inter- granulare	x			Х	Х	Х	0			ц				х		
Ság-hill	inter- granulare	X			0	Х	Х	0			ц				0		
⁰Sümeg- prága	inter- sertale	x		S	Х	Х	Х			Х	ц		0	sand-			
Sztgyörgy- hill	inter- granulare	X	S		X	Х	х	0	0		ц			stone			0
Badacsony	inter- granulare	x			x	Х	х	0	0		Δ				0		
Diszel, Délkő	inter- sertale	x	S		0	Х	Х		0	Х	∇	0					
^o Doba-3. 47,0-48,9 m	corse inter- sertale	x	S		0	Х	Х	0	0		п				0		0
71,0-72,0 Om	corse inter-	х	х		x	х	x	0	0		ц				0		0
115,0-116,0	corse inter- sertale	x	S		0	х	х			0	п	0			0		

179

b) Basalt samples of Transdanubia (continued)

Locality	Texture	Phenocrysts		vsts	Groundmass						vesicle filling		xeno-	Mineral alteration			
		oli- vine	pyro- xene	plagio- clase	olivine	pyro- xene	plagio- clase	sani- dine	an- alcime	glass	opak	carbo- nate	zeo- lite	lith	iddings- ite	ser- pentine	chlorite- montmoril
Uzsa,quarry, banked upper part	inter- sertale	х	S		х	Х	х		х		Δ						x
Uzsa,quarry, yard	inter- sertale	X	S		Х	Х	х		0	0	۵						
Uzsa,quarry, lower part	inter- sertale	x	S		x	Х	Х		0	Х	Δ		0				0
Uzsa, lower quarry	inter- granu- lare inter- sertale	х	S		x	Х	Х		0		۵						0
Pula-1 40,0-40,5 m	inter- sertale	Х	S		0	Х	х			Х	⊽	0	0	sand-			
Pula-1 144,0-147,0	inter- sertale	X	S		0	Х	Х			Х	⊽						
Pula-8 51,5-55,0	inter- sertale	x	S		0	Х	Х			Х	▽	0					
Pula-14 30,3-34,0	inter- sertale	x	S		0	Х	х			Х	V	σ					
Várkesző-1. 71,5-76,5	inter- sertale	х	S		0	х	х			Х	V						
Várkesző-3. 26,5-33,0	inter- sertale	х	0		0	х	х			Х	⊽	0					0
Várkesző-4. 94,5 m	inter- sertale	X	S			Х	Х			Х	V	x					0
Kapolcs-1. 45,0-50,0	inter- granu- lare	x	S		0	Х	Х	S			⊽						0
Kapolcs-1. 70,0-75,0	inter- sertale	X	S		S	х	х		0	0	V	x	0	spinel			
Kapolcs-1. 85,0-91,0	inter- sertale	x	S		0	Х	х		0		⊽	0		spinel hornfels	0		0
Monostor- apáti-1. 39,7-41,0	inter- sertale	x	S		x	Х	Х				⊽			skarn	0		
Monostor- apáti-1. 120,8-122,4	inter- sertale	x	0		0	х	Х		• 0		Ø	0		spinel corundum			
Zalahaláp	inter- granu- lare	x	S		0	Х	х				V						
Kissamlyó	inter- sertale	0	Х		0	Х	Х		0	0	⊽	0					0

X major constituents 0 constituents < 10 % S sporadic I ilmenite △ titanomagnetite V magnetite-titanomagnetite minor amount of biotite in the mass < titano diopsidic augite

180

It seems plausible that representatives of the first type are products of the most active period of volcanism, while olivin rich varieties (type 2) have been formed during the time of decreasing activity as later derivatives of differentiation. For this reason, basalts of type 2 may be younger. The peralkaline type 3 also should be a late and local derivative of alkaline basaltic volcanism. Repeated volcanic activity producing both of types within a few million years in the area is not impossible and we also note that both of types could be formed contemporaneously if the active volcanic zone (fault system) had been moved in space and time.

Alteration of mafic minerals and the amount of secondary minerals may also have influenced the measured K-Ar ages.

The basaltic rocks under consideration, as well as the feldspathoid basic rock at Bár, originated from the mantle and volcanic material erupted along deep faults. Their alkalineperalkaline nature maybe due to the local composition of the mantle and fractional crystallization also played a role.

The main petrographic data of the examined rock types are grouped in Table 1.

3. Experimental methods

Dating was carried out in the Institute of Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen. All but one of the determinations was made on whole rock samples. Potassium content was measured by flame photometry, using Li as an internal standard. Samples were degassed by high frequency induction heating, the ³⁸Ar spike was introduced into the argon extraction line from a gas-pipette. The isotopic composition of the argon was measured by a statically operated 15 cm deflection radius magnetic mass spectrometer. The Soviet standard "Asia 1/65" was used for calibration, its radiogenic argon content was taken to be 4.441×10⁻⁵ ccSTP/g. Details of the instruments and experimental methods are described elsewhere by K. Balogh and Gy. Mórik [23,24].

The given errors are based on the reproducibility of the potassium concentration and on the argon isotopic compositon determinations measured on international standards and atmospheric argon. The error of the radiogenic argon and radiometric ages were calculated with the equations given by A. Cox and G.B. Dalrymple [25]. The analytical error can be reduced by repeated measurements but geological errors - arising when the sample was not a closed system or contains excess argon - cannot be discovered in this way. Therefore, instead of repeating the measurements, we preferred dating more samples from the same formation. This, in addition, also made the application of the isochron method possible, which will also be briefly reviewed.

4. Isochron methods

The calculation of conventional K/Ar ages is based on the assumption that

1.) the samples were properly degassed during their formation, the isotopic composition of their argon content at that time was identical with atmospheric argon, and

2.) the samples remained closed systems in respect of potassium and argon throughout their history.

If these basic conditions are not fulfilled, the K/Ar age shows a divergence from the real geological age. In spite of this, by dating more samples from one and the same formation or by dating separated fractions of a sample, the unsuitability of a certain sample and the unreliability of its age may be revealed. By using the isochron methods in two special cases even the real geological age of individually unsuitable samples can be determined. These two cases are the following.

1.) All of the samples incorporated an equal quantity of radiogenic argon. In this case the measured radiogenic argon content is plotted against the potassium content. The points fit in a straight line, the slope of which is proportional to the isochron age and the intercept with the ⁴⁰Ar_{rad} axis gives the initially incorporated radiogenic argon. This method is also applicable when all of the samples have lost the same quantity of radiogenic argon.

2.) The initially incorporated argon has an equal ⁴ ⁰Ar/³⁶Ar ratio in all of the samples. In this case the measured ⁴ ⁰Ar/³⁶Ar ratio is plotted against the K/³⁶Ar ratio. Again, the points fit in a straight line, the slope of which is proportional to the isochron age and the intercept with the ⁴⁰Ar/³⁶Ar axis gives the ⁴⁰Ar/³⁶Ar ratio of the incorporated argon.

If either of these two conditions are un fulfilled, the points tend to show a random distribution in the relevant coordinate system, indicating that there are no reliable isochron ages. It is more serious, however, that in certain cases the points define a straight line, but it is not isochron. For instance, if the argon isotopic composition is constant from sample to sample, but the K content is different, the "isochron age" in the 40 Ar/36 Ar-K/36 Ar diagram will be zero. If the samples contained a constant amount of radiogenic argon and potassium in the time of their formation, but the incorporated atmospheric argon is different, the points will fit in a straight line (mixing line) in the 40 Ar/36 Ar-K/36 Ar diagram, but the defined "age" is older than the age of the volcanic activity. Therefore, the evaluation of isochron data requires very careful consideration, including the study of the geological situation and petrographic character of the samples. In spite of these uncertainties the isochron is very useful for discovering the unreliability of conventional analitical ages.

For a more detailed treatment of the isochron methods we refer to the comprehensive work of M. Shafiqullah and P.E. Damon[26].

We have tried to evaluate our data by the "^oAr_{rad}-K and "^oAr/³⁶Ar-K/³⁶Ar methods as well, but owing to the small range of the potassium content of cogenetic samples the "^oAr_{rad}-K method turned to be inapplicable, since the defined ages had too great errors.

Slopes and intercepts of the isochrons were computed by the method elaborated by D. York [27], using two ways to calculate variances.

1.) Only the errors of related ⁴⁰Ar/³⁶Ar and K/³⁶Ar values were considered, their deviation from the fitted regression line was disregarded. (In the case of two samples this is the only possibility.)

2.) The deviation of points from the fitted regression line was considered. In this case - contrary to York - we have calculated the variance of slope and original ⁴⁰Ar/³⁶Ar ratio, and not the variance of average slope and average intercept. These values depend only on the distribution and not on the number of points.

The greater of the variances obtained by the two methods was accepted.

5. Evaluation of the radiometric data

The conventional K/Ar ages of the rocks from the Balaton Highland, South-Bakony and the Little Plain are in the 2.63-5.4 m.y. interval, averaging 4.00±0.76 m.y. Though geological evidences prove that the volcanic activity lasted for a longer time, i.e. the real age of the samples is different, in order to have an approximative information on the age and duration of the volcanism and on the applicability of the isochron method, we calculated the common isochron age of these rocks. If the potassium content of the rocks did not change significantly during the volcanism and the initial 40 Ar/36 Ar ratio of the samples is approximately the same, the average age and duration of volcanism can be obtained in this way. On the other hand, unacceptable isochron age points to the unreliability of individual conventional ages. The common isochron age is 4.29±0.67 m.y. and the initial 40 Ar/36 Ar ratio is 286.3±21.5, that is 3.1 % lower than the atmospheric value. In spite of the great error of the intercept, it is important to consider the possible reasons for this in detail. The reality of an initial ratio lower than the atmospheric value and characterizing the whole investigated area is excluded, since there is only one report [28] on similar ⁴ ⁶Ar/³⁶Ar ratio found in volcanic exhalation. Another possible explanation would be the loss of radiogenic argon proportional to the total argon content, but this is also very unlikely since the great majority of samples is unweathered and was not exposed to post formation effects. Intercept, lower than the atmospheric value may also result if the potassium content decreases during the evolution of volcanism, but this theoretical possibility can also be discarded since it contradicts the general character of volcanic processes. The most likely reason of the low interception is that the conditions for the applicability of the isochron method

No.	Location, sample	K %	40 Ar rad	⁴⁰ Arrad	⁴⁰ Ar _{tot}	K/ ³⁶ Artot	Age m.y.	Stratigraphic position	Petrographic type#
	0	1 00			tot	[writesipny/] x lu			
392.	Doba-3.	1.26	5	1.720	316.1	0.114	3.42±0.95	Paz	1
	47.0-48.9 m	2.35	37	2.709	469.0	1.505	2.89±0.20	Paź	1
391.	Doba-3., 71.0-72.2 m	1.49	25	1.871	394.0	0.784	3.15±0.35	Pa ₂ ²	1
393.	Doba-3., 115.4-116.2 m	1.91	69	3.098	953.2	4.055	4.07±0.20	Pa2	1
471.	Haláp-hill, quarry	1.77	18	1.845	360.4	0.622	2.63±0.35	Pa2	1
408.	Pula-1., 40.0-40.5 m	1.88	34	3.093	447.7	0.925	4.12±0.32	Pa2	1
406.	Pula-1., 144.5-147.0 m	1.86	8	2.831	321.2	0.169	3.82±0.93	Pa2	1
409.	Pula-8., 51.5-55.0 m	2.03	46	3.379	547.2	1.512	4.17±0.26	Pa2	1
407.	Pula-14., 30.3-34.0 m	1.61	50	2.599	591.0	1.831	4.05±0.27	Pa2	1
398.	Kapolcs-1., 70.0-75.0 m	0.75	34	1.263	447.7	0.904	4.22±0.43	Pa2	1
399.	Kapolcs-1., 85.0-91.0 m	0.98	56	1.758	671.6	2.097	4.50±0.33	Pa2	1
386.	Monostorapáti-1., 120.8-122.4 m	0.92	61	1.970	757.7	2.158	5.40±0.39	Pa2	1
385.	Monostorapáti-1.,	0.60	20	0.674	369.4	0.658	2.83±0.60	Pa ₂ ³	2
400.	Kapolcs-1.,	1.23	32	1.883	434.5	0.908	3.84±0.34	Paz	1
475.	Kissomlyó,	2.15	59	3.375	720.7	2.709	3.94±0.20	Pa	1
382.	Rábaszent- andrás-1., 56.0-58.5 m	1.08	52	1.956	615.6	1.768	4.54±0.30	Pa ³	2
383.	Malomsok-2.,	1.20	28	2.502	410.4	0.551	5.23±0.28	Pa ³	2
384.	Malomsok-1.,	1.52	24	2.913	388.8	0.487	4.80±0.24	Pa2	2
387.	Marcaltő-1.,	1.44	43	2.584	518.4	1.242	4.61±0.33	Paz	2
397.	Várkesző-1.,	1.79	61	3.816	757.7	2.168	5.34±0.26	Pa ³	1
396.	Várkesző-3.,	2.09	63	2.435	798.6	4.319	3.05±0.17	Pa	1
394.	Várkesző-4.,	1.00	51	1.679	603.1	1.832	4.21±0.31	Pa	1
410.	94.5 m Vigándpetend-1.,	1.33	70	2.594	985.0	3,535	4.89±0.30	Pa	2
468	7.5 m Ság-bill	1 55	41	3 099	500.8	1.027	5 01+0 25	Pa ?	2
473.	Sümegprága,	2.38	33	2.869	441.0	1.207	3.02±0.20	Pa2-Pa2	2
467.	Sümegprága,	2.82	19	3.853	364.8	0.507	3.43±0.40	Pa2-Pa2	2
470.	Bazsi,	1.63	15	2.463	347.6	0.345	3.79±0.62	Pa2-Pa2	2
474.	lizea, quarry	2 03	18	2 986	360 4	0 441	3 96+0 33	Dat - Dat	1
472.	Uzsa, quarry	2.05	24	2.725	388.8	0.702	3.33+0.25	Pai-Pai	1
464.	Uzsa, quarry	1.15	3.4	1.916	305.9	0.062	4.18±2.50	Pa3-Pa3	1
465.	Uzsa, quarry	2.07	17	3.622	356.0	0.346	4.39±0.63	Pat-Pat	1
249.	Uzsa, quarry	1.87	15	3, 508	347.6	0.278	4.70+0.65	Pa ² -Pa ²	1
5.83	Badagaony	2 12	46	2 917	547.2	1 894	3 33+0 20	Pat-Pat	2
585.	Diszel, quarry	1.85	35	2.837	454.6	1.038	3.85+0.20	Pal-Pal	2
469.	of Delko Kab-hill, slope toward Ocs	1.43	49	2.587	579.4	1.569	4.53±0.23	Paž-Paž	2
	village								
589.	Szentgyörgy-hill	1.84	12	2.054	335.8	0.361	2.80±0.33	Pai-Pai	2
439.	Bár-6., 67.0 m	4.32	14	3.603	343.6	0.577	2.09±0.30	Q	3
440.	Bár-4., 18.0 m	4.20	23	3.181	383.8	1.165	1.90±0.20	Q	3
504.	Bár-6., 62.0 m whole rock potash feldspar	5.17 10.07	42 8	4.370 7.386	509.5 321.2	2.532 0.350	2.12±0.20 1.84±0.35	0	3

Table 2. K/Ar age, stratigraphic position and petrographic type of basaltic rocks from Transdanubia, Hungary

 $\lambda_{g} = 0.583 \times 10^{-10} y^{-1}; \lambda_{g} = 4.72 \times 10^{-10} y^{-1}; {}^{40} \text{K/K} = 1.19 \times 10^{-4} \text{ mol/mol}; \text{ error: } 1\sigma$

Petrographic types explained in text.

were not fulfilled, the investigated samples had different initial ⁴ ⁰Ar/³ ⁶Ar ratios, that is a part of the samples was not completely degassed. The variance of initial isotopic ratio may result in lower interception, if samples of a high K/³ ⁶Ar value - that is which contain less atmospheric argon - have a higher initial ⁴ ⁰Ar/³ ⁶Ar ratio. This may happen easily since complete degassing means intensive argon exhange between the rock and the atmosphere lasting until the homogenization of isotopic composition, therefore it can be accepted that samples from which the radiogenic argon was not completely removed incorporated a smaller quantity of atmospheric argon.

From the general isochron test of samples from the Balaton Highland, South-Bakony and the Little Plain we may conclude that a certain number of the samples contains radiogenic excess argon, therefore not only the common isochron age but even the number of the conventional ages is higher than the real geological age. In order to reveal the uncertainty of single data the isochron control must be applied to rocks of simultaneous formation from a common magma reservoir.

Four samples coming all from boreholes were dated from the occurrence near the village Pula. The isochron age is very well defined as 4.15±0.17 m.y., the intercept (293.5±5.5) is very close to the atmospheric value, indicating proper degassing (Fig. 2a). Regarding the good fit of data in a straight line and the unweathered character of the rocks, the possibility of argon loss can be dismissed. The basalt is stratigraphically well defined, the underlying sediment belongs to the middle part of the Upper Pannonian Formation and it is covered by sediments of the upper part of the Upper Pannonian Formation. This is the first basalt found in Transdanubia overlain by undoubtedly Upper Pannonian sediments. The radiometric age of 4.15±0.17 m.y. is in good agreement also with the age of Pliocene-Pleistocene boundary, which is slighly older than 2 m.y. Based upon the exact stratigraphy, accurate radiometric age, petrographic character and the reasonable worldwide correlation, the radiometric age of this basalt may serve as a key datum for establishing a more detailed absolute time scale for the Pannonian Formation.

On fig. 2b 7 samples from the localities Rábaszentandrás, Malomsok, Várkesző and Marcaltő are plotted. These samples are considered for stratigraphic reasons to be of the same age. The isochron age is 3.99±0.92 m.y., the great error indicates that the points do not fit in a straight line, and it appears from the figure that samples No. 397 and 396 are far from the isochron while the other 5 samples fit it acceptably well. Omitting samples No. 397 and 396 the remaining points define an isochron age of 4.14±0.32 m.y. the intercept of 313.2±12.4 indicates incorporated radiogenic argon. The deviation of sample No. 397 from the isochron can be explained by a greater amount of excess argon, but the explanation of the too young age of sample No. 396 is more difficult. The possible reason may be radiogenic argon loss or, solely on radiometric grounds, younger geological age is also permitted. The reality of this younger age should be controlled by extended investigations. There is, however, a more serious problem. These basalts overlie sediments which are con-



Fig. 2. ⁴⁰Ar/³⁶Ar-K/³⁶Ar isochron diagrams of cogenetic basaltic rocks.

sidered biostratigraphically younger than the sediments underlying the 4.15±0.17 m.y. old basalts near Pula. The stratigraphically expectable younger age is supported by petrographic considerations, though not all rocks of this area are of the same petrographic type. Therefore, in spite of the relatively good fit of the 5 samples the reality of the age of 4.14±0.32 m.y. requires further confirmation. The best way for this would be the separation of samples No. 387, 382 and 394 into fractions of different potassium content, and calculating isochron ages for the individual samples by plotting their fractions in the ⁴ ⁰Ar/³ ⁶Ar-K/³ ⁶Ar coordinate system.

Subsurface basalts from the quarries of Uzsa, Sümegprága and Bazsi are plotted on Fig. 3c. The rocks intrude sediments belonging to the middle part of the Upper Pannonian Formation, thus only the lower limit of the geological age is defined. All the points fit in the straight line, the isochron age 2.94±0.19 m.y. does not contradict the stratigraphy. The intercept (307.2±3.6) shows again the presence of radiogenic excess argon.

The basaltic Somló-hill near the village Doba is considered to be the product of short volcanic activity. The rock is overlying sediments of Pa_2^2 age and the eruption is likely to have taken place at about the same time. The data are shown in fig. 2d, 3 points fit very well in the isochron defining an age of 2.90±0.19 m.y. the intercept (298.9±5.2) is close to the atmospheric value, indicating proper degassing. This age appears to be acceptable, though it does not correspond to the stratigraphic expectations. The point of sample No. 393 is far from the straight line, therefore the isochron age of all the 4 samples (3.64 ± 0.59 m.y.) has too great an error, the irreality of which is supported by the intercept below the atmospheric (287.3±19.9). It requires further investigations to value decide if the older age of sample No. 393 is realistic or arises from incorporated excess argon. All samples representing Somlóhill have the same petrographic character, this too is an argument against prolonged volcanic activity.

3 samples were dated from the single occurrence near Bár, from sample No. 504. separated potash feldspar has been measured as well. The stratigraphic age of the rock is undoubtedly Pleistocene, since it overlies Early Pleitocene red clay. The data fit well in a straight line, the isochron age is 2.11±0.17 m.y. The intercept is insignificantly below the atmospheric value, therefore the average of conventional K/Ar ages (2.02±0.14 m.y.) may be a better approximation of the real geological age. Both the isochron and conventional ages show that the Pliocene-Pleistocene boundary is slightly over 2 m.y.

Reviewing the radiometric data obtained on rocks where the number of samples made the application of isochron method possible, we may conclude that part of the rocks contains radiogenic excess argon and their conventional K/Ar ages exceed the geological age. We have no sufficient evidence for supposing radiogenic argon loss from part of the rocks, therefore the radiometric ages of individual samples are considered to be the maximum geological ages possible.

On this ground, the stratigraphically uncertain basalts of Badacsony and Szentgyörgy-hill are ranged in the upper part of the Upper Pannonian Formation (Pa³/₂). The radiometric age of a number of rocks is definitely older than it is presumed from their geological position and petrographic type (Ság-hill, Vigándpetend-1). These radiometric ages should be controlled, therefore greater number of samples or sample fractions - sufficient for applying the isochron method - have to be dated.

Similarly, more investigations are advisable on the middle

and upper lava flows cut by the borehole Kapolcs-1 in order to establish a precise absolute age for the interbedded sediments and on the basalt of Kab-hill which is in a stratigraphically uncertain position

6. Conclusions

39 basaltic rocks from the Transdanubian region of Hungary were dated by the K/Ar method. Owing to the petrographic character of the basalts the enrichment of radiogenic argon is well measurable, thus these rocks are suitable substances for the determination of the geological age of basaltic volcanism by radiometric dating. Only one sample - coming from the basaltic tuff ring at Gérce - turned out to be unsuitable for dating on account of its very high atmospheric argon content.

Isochron analysis of samples from Várkesző, Malomsok, Rábaszentandrás and Marcaltő, and from the quarries of Uzsa, Sümegprága and Bazsi showed that part of the samples contains radiogenic excess argon. Therefore, if radiogenic argon loss can be excluded on petrographic grounds, the conventional K/Ar ages are only maximum ages. Reliable geological age can be established only by dating more samples or sample fractions from one and the same formation.

The stratigraphically well defined occurrence near Pula was dated with 4 samples. The isochron age of 4.15±0.17 m.y. can be accepted as the real age of the final phase of the Pa² period.

Subsurface basaltic bodies were sampled from the quarries of Uzsa, Sümegprága and Bazsi. Stratigraphically only their maximum age can be given, since they intrude sediments of the Pa² age. According to their common isochron age of 2.94±0.19 m.y. they were formed during the Pa³ period.

The isochron age of the occurrence near Bár village is 2.11±0.17 m.y. Since the intercept is slightly below the atmospheric value (291.9±6.4), the average of conventional ages (2.02±0.14) may be closer to the real age. Both data indicate that the underlying Early Pleistocene red clay is older than 2 m.y.

Regarding the conventional K/Ar ages as the lower limit of the real age, the stratigraphically uncertain Szentgyörgy-hill and Badacsony are ranged into the Pa³ period.

In a number of cases the radiometric data contradict the stratigraphic expectations. In order to solve this problem an increased number of datations is required for the following occurrences.

- The reality of isochron on samples from the villages Várkesző, Rábaszentandrás, Malomsok and Marcaltő should be controlled.

- A greater number of samples making the application of isochron method possible are required from the basalt of Ság-hill, from the lower part of Somló-hill sampled now by No. 393 and the borehole of Vigándpetend-1.

- The reality of the too young age of Haláp-hill should be investigated as well.

An upper limit for the age of sediments underlying the youngest lava flow of borehole Kapolcs-1 (No. 400) could be given by isochron dating of this rock. Confronting the results with the age of basalts near Pula, the age of sediments introducing the Pa³ period could be restricted to a presumably short interval.

References

	1] 2] 3]	G. Pantó, MTA Müsz. Tud. Oszt. Közl. 29 (1961) 299 L. Lóczy, Balaton Tud. Tanulm. Eredm. 1/1 (1913) Chapt. 1. L. Jugovics, Ann, Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1915.,
Γ	4]	L. Jugovics, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1916.,
[5]	L. Jugovics, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1944., (1953) 13
Γ	6]	L. Jugovics, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1953., (1954) 65
[7]	L. Jugovics, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1968., (1971) 223
[8]	L. Jugovics, Ann, Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1968., (1971) 245
Γ	9]	L. Jugovics, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1970., (1972) 79
[]	0]	L. Jugovics, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1974., (1976) 431
[] []	1]	 Á. Jámbor, G. Solti, Acta Miner. Petr., 22 (1975) 9 G. Bence, Á. Jámbor, Z. Partényi, Ann. Rep. of the Hung. Ceol Inst. of 1977 (1979) 257
[]	3]	A. Jámbor, Z. Partényi, G. Solti, Ann. Rep., of the Hung.
[]	4]	L. Kulcsár, A. Guzyné Somogyi, Acta Geogr. Debr. 9
[]	5]	G. Láng et. al., Explanations for the engineering geological map series at 1:10000 of the Balaton and its
[]	6]	B. Mauritz, H. F. Harwood, Min. Petr. Mitt., 48 (1936) 373
[]	7] 8]	B. Mauritz, H. F. Harwood, Föld. Közl., 67 (1937) 241 Zs. Peregi, Geological description of the 1:10000 sheet areas of Taliándörögd, Kapolcs and Sáska, Doc. Dept. of the Hung. Geol. Inst. (1974), manuscript
[]	9]	E. Szádeczky-Kardoss, Mitt. Berg. Hüttemmann, Abt. Joseph Univ., Sopron. (1938)
[2	20]	I. Vitális, Balaton Tud. Tanulm. Eredm. 1/1 (1911) App. Miner.
[2	1]	Gy. Hőnig, Strata succession of drillings B-4, B-5 and B-6 at Bár village. Doc. Dept. of the Hung. Geol. Inst.
[2	22]	L. Ravasz-Baranyai, Petrographic examination of alkaline basic volcanic rocks at Bár village, Doc. Dept. of Hung.
[2	3]	K. Balogh, Gy. Mórik, Atomki Közl. 20 (1978) 215

- [24] K. Balogh, Gy. Mórik, Atomki Közl. 21 (1979) 363
 [25] A. Cox, G. B. Dalrymple, Jour. Geophys. Res. 72 (1967) 2603
- [26] M. Shafiqullah, P. E. Damon, Geochim. et Cosmochim. Acta, 38 (1974) 1341
 [27] D. York, Can. Jour. of Phys. 44 (1966) 1979
 [28] V. V. Cherdintsev, Yu. V. Shitov, Geochem. Int. 4 (1967)
- 507

Referee: A. Kovách

ATOMKI KÖzlemények 22 (1980) 191-201 THE AGE AND DURATION OF THE INTERMEDIATE AND BASIC VOLCANISM IN THE TOKAJ MOUNTAINS, NORTH-EAST HUNGARY, WITH RESPECT TO K/AR DATINGS

V. SZÉKY-FUX*, K. BALOGH**, S. SZAKÁL*

Intermediate and basic volcanic rocks from the northern part of the Tokaj Mts., Hungary, were dated by the K/Ar method. The majority of the samples were collected from the vicinity of Telkibánya. The majority of the radiometric data are in accordance with the geological results and indicate that the volcanic activity started in the Upper Badenian and terminated in the Pannonian. Some opacitized samples resulted K/Ar ages younger than expected geologically. It has been confirmed that the basalt near Sárospatak uncovered by borehole Sp-10 is of Pannonian age.

A TOKAJI-HEGYSÉG INTERMEDIER ÉS BÁZISOS VULKÁNOSSÁGÁNAK KORA ÉS IDŐTARTAMA A K/Ar VIZSGÁLATOK TÜKRÉBEN. A Tokaji-hegységből, elsősorban Telkibánya környékéről származó intermedier és bázisos vulkáni kőzetek K/Ar korát határoztuk meg. A K/Ar korok a földtani vizsgálatokkal összhangban a vulkáni müködésnek felső bádenitől pannoniai emeletig terjedő korát igazolták. Néhány opacitosodott minta radiometrikus kora a földtanilag várható értéknél fiatalabbnak adódott. Igazoltuk a sárospataki Sp-10. mélyfurással feltárt bazalt pannoniai korát.

ВОЗРАСТ И ВРЕМЯ СРЕДНЕГО И ОСНОВНОГО ВУЛНАНИЗМА ТОНАЙСКИХ ГОР В СВЕТЕ ИССЛЕДОВАНИЙ НАЛИЙ-АРГОНОВЫМ МЕТОДОМ. Налий-аргоновым методом был определен возраст средних и основных вулканических пород Токайских гор, в первую очередь, из окрестностей с. Телкибаня. Данный метод наравне с геологическими исследованиями показал возраст вулканической деятельности от верхнего бадена до паннонского яруса. Радиометрический возраст нескольких опацитизированных образцов оказался моложе ожидаемого. Был подтвержден паннонский возраст базальта, вскрытого глубокой Sp-10, пробуренной в Шарошпатак.

*Chair of Min. and Geol., Kossuth L. Univ., Debrecen **Institute of Nucl. Res. of the Hung. Acad. Debrecen

1. Geological Introduction

The Tokaj Mts. is the youngest unit among Hungary's volcanic mountains. Its volcanism is characterized by a varied intermingling of extensive acid tuff formations and intermediate lavas. The latter, principally andesite volcanism, excells by its predominance of lava rocks. Andesite pyroclastics can be hardly found in the range. Subvolcanic forms, laccoliths, dykes, sills and irregular subvolcanic masses are typical. Surface lava flows, flow- and stratovolcanoes occur to a considerably smaller degree. It follows from the above that the solidification of an overwhelming amount of andesites took place at considerably lower depths. The andesites, and dacites of the mountains are markedly of calcalkaline nature and are the products of island arc volcanism connected with the formation of the Carpathians [1,2,3].

The main period of the volcanic activity is Upper Badenian (Tortonian*) and Sarmatian, but it also extends into the Pannonian. In the area of the mountains the Upper Badenian units, besides the volcanic formations, are principally made up of marine deposits. In the Sarmatian, as salt water grad-ually become fresh fresh-water formations appeared. [1]

These sediments are rather poor in fossils, therefore the question of the Sarmatian and Pannonian border is especially uncertain. It has not been established either whether the temporal interruption in Lower Sarmatian andesite volcanism is significant and whether the temporary cessation of volcanic activity between the two was merely a brief period. What was the exact duration of volcanic activity? What is the temporal relation between metalliferous andesite volcanic activity and potassic metasomatism in the ore mineralization of the Telkibánya area?

In order to provide answers to these questions, K/Ar datings were performed on carefully selected samples collected in the north-eastern part of the mountains.

2. Previous K/Ar datings from the Tokaj Mts. and the neighbouring areas

The first K/Ar datings on rocks collected in Hungary were made in 1960 by Ovchinnikov, Panova and Shangaryeev in Sverdlovsk. Their results were published in Hungary in 1965 [4]. They dated about 15-20 rock and mineral samples, among them a potash trachyte from an adit at Telkibánya (Tokaj Mts.) yielded an age of 24±12 m.y., which is older than the geologically established one. The excessively high age and the considerably great analytical error can be attributed to the high gas content of the sample which regarding the level of experimental methods of that time, made them less suitable for K/Ar dating.

the designation Tortonian is used here in agreement with Hungarian literature on volcanology previously published

The first account of K/Ar datings carried out in Hungary on rocks from the Tokaj Mts. was given by Balogh and Rakovits [5]. Their data, representing the first results of the K/Ar laboratory established in the Institute of Nuclear Research (ATOMKI), Debrecen, agreed fairly well with the geological expectations. Later control measurements were made on the same sample fractions with a highly improved technique and the results showed a 1.5-14 % difference in age.

In the neighbouring East-Slovakian territories in the Slanské vnchy Mts. (Szalánci Mts.) and in the Vihorlát-Popricny Mts. (Vihorlát) radiometric datings were made on a larger scale [6]. More than 50 rock samples were dated in Soviet and West German laboratories. According to the investigations of the geochronological laboratory in Yerevan, in the Vihorlat-Popricny Mts. [7] the volcanism started in the Middle Sarmatian (11.4-11.9 m.y.) and terminated in the Pannonian stage (8.7-9.3 m.y.). The Slanské vrchy Mts. is slightly older, volcanic activity started there in the Upper Badenian and only postvolcanic activity connected with ore mineralization is pointed out in the Pannonian stage. The investigations of the Radiometric Laboratory in Hannover indicated in the Vihorlat-Popricny Mts. Middle Sarmatian and in the Slandské vrcky Mts. Lower and Middle Sarmatian volcanic rocks [8].

The K/Ar ages published here represent the first step in the detailed radiometric chronological investigation of the Tokaj Mts. These data, besides, facilitate the settling of several debated and disputable questions, the planning of further more detailed investigations and their joint evaluation with the K/Ar data of East-Slovakia may contribute to studying the temporal evolution of the Miocene volcanism of the wider region as well.

3. Experimental methods

The K/Ar datings were carried out in the Institute of nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences (ATOMKI), Debrecen, in 1976-80 on whole rock samples. The samples were crushed and the 0.25-0.5 mm sieve fractions which were considered chemically homogeneous were retained and divided for potassium and radiogenic argon determination. The potassium determination was made by flame photometry, while the radiogenic argon content was measured by an argon extraction line and a magnetic mass spectrometer, using stable isotope dilution techniques. The instruments were developed in the ATOMKI and in the course of these investigations were consideralby improved. Until the and of 1976, a small capacity argon extrac-tion and purification line [9] in connection with a dynamically operated mass spectrometer was used. In 1977 a high capacity argon extraction and purification system [10] and a mass spectrometer capable for static operation [11] was introduced. In 1979 a microcomputer system for recording and evaluating the mass spectra was constructed.

The Soviet standard "Asia 1/65" was used for calibration. Its radiogenic argon content, according to the measurements of 21 Soviet laboratories, is 4.441×10^{-5} cc STP/g. The error of the K/Ar ages depend on the error of flame photometric and mass spectrometric measurements and on the ratio of the radiogenic and atmospheric argon contents of the rock. The average age given in Table 2 is the weighted mean of the individual data.

4. Interpretation of the K/Ar data

Though radiometric dating is a unique method for establishing actual geological age, the interpretation of individual data requires great care and consideration. The possible divergence of individual data from the geological age may arise from two different sources.

1) The analytical error originates from the error of the argon and potassium determinations. The most difficult task is the measurement of the very low 36 Ar concentration $(10^{-12}-10^{-11} \text{ g/g})$, which value is needed for the determination of the radiogenic part of the 40 Ar content. The analytical error of a single measurement cannot be reduced below several percent, but by repeated measurements, by using international standards for calibration and through a continual improvement of the experimental techniques and methods it can be theoret-ically more and more decreased.

2) If the basic assumptions used for the deduction of the age equation are unfulfilled, geological errors arise. This happens in cases when the radiogenic argon is not completely released during rock formation, or when, as a consequence of postformation geological processes, the rock does not remain a closed system in respect of its potassium and radiogenic argon content. The geological errors may be revealed and in certain cases eliminated by petrographic investigations and by dating more chronologically clearly related samples or more different fractions of a given sample.

It can be stated that the agreement of a single datum with the real geological age cannot be decided with certainty, but in the course of detailed investigations the results themselves may prove the reality of the obtained data and the applicability of the method. The importance of radiometric dating methods is that the geological age of magmatic rocks in a stratigraphically uncertain position can be established only by these methods, and these methods are likewise used for determining the real age of palaeomagnetic and biostratigraphic zones.

In practice the number and quality (whole rock, mineral, etc.) of the samples selected for dating has to be adjusted, within the given possibilities, to the particular geological problem to be sholved. Frequently only more ore less weathered samples can be collected; certain geological problems, however (e.g. minimum age) can be determined even in this case. Thus, partially unsuitable samples only restrict but do not prevent the applicability of radiometric methods. In the course of planning radiometric investigations, it is of utmost importance to estimate the ratio of age or age difference to be determined to the analytical error. The smaller this ratio, the higher is the number of measurements required to answer to the question. The theoretical limit of available accuracy is determined by the not eliminable geological errors characterising the particular rocks. This geological error may be estimated by dating more fractions of the samples or by measuring the age of different samples of the same lava flow or other rock unit.

In the Tokaj Mts. Miocene volcanism started in the Badenian and terminated in the Pannonian stage, i.e. it lasted for a remarkably longer time than the analytical error of our measurements. Therefore, the greater phases of volcanism can be differentiated by dating a limited number of unaltered samples. During the radiometric investigation of the Tokaj Mts. (and also in case of the investigation of other Miocene volcanic mountains in Hungary) the most expedient way is to control the geologically established conceptions by dating several selected samples. If the geological and radiometric methods lead to the same conclusion, the investigated question may be regarded as reliably solved. Otherwise the outlining of further measurements required for settling the problem may be attempted.

In view of the above, our samples were collected from Telkibánya and its vicinity, i.e. from the mountain's geologically most thoroughly examined area.

The locations of sampling are shown in figures 1 and 2; the detailed description of rocks and the K/Ar ages measured are included in table I and II.



Fig. 1. Profile of Telkibánya research borehole No.2 1 - pyroxene orthoandesite, 2 - hypo(propylite) and metaandesite, 3 - rhyolite tuffogene propylite, 4 - dacitogene propylite, 5 - sulfo potash trachyte, 6 - pyritic potash trachyte with sphalerite stringers, 7 - clayey marl, 8 - quarzosesulfidic vein, 9 - pyritic, clayey, chalcedony vein, 10 - pyritic, carbonate or pyritic, chalcedony ore stringer

No.	Location	Sample	K G	Phenocrysts	Groundmass
285.	Alsókéked Száraz-hill	Pyroxene andesite with amphibole	1.68	plagioclase fresh hypersthene, augite, amphibole	hyalopilitic porphyric
189.	Borehole Telkibánya-2 19.2-20.0 m	Potash trachyte (potash metasomatite)	9.03	adularia sericitized (pseudomorphose after plagio- clase), pyrit	microholocrystalline porphyric with pyrit and secunder quartz
211.	173.6 m	Hypersthene andesite with amphibole	1.57	plagioclase (labradorite) little hypersthene cloritized, amphibole, biotite	microholocrystalline porphyric
192.	182.5-183.0 m	Hypersthene andesite (chloroandesite)	1.87	plagioclass (labradorite), hypersthene cloritized and clay mineralized, biotite	microholocrystalline porphyric
190.	947.7-949.5 m	Potash trachyte (siliceous-pyritic)	5.95	low temperature sanidine	porphyric, accompanied by pyritization, adularization and silification
191.	1024.2-1024.6 m	Andesitogene propylite	1.92	plagicclase carbonatized, epidotized, hypersthene cloritized, carbonatized, epidotized, little opaci- tized amphibole	microholocrystalline porphyric
283.	Telkibánya, Csengő-adit	Hypersthene andesite (chloritized)	1.58	plagioclase sericited, hypersthene cloritized	microholocrystalline porphyric with carbonatizic and silification
360.	Telkibánya,between Kánya- and Gyepü-hill	Pyroxene andesite with amphibole	1.79	plagioclase, hypersthene (prismațic elongated), amphibole opacitized	microholocrystalline porphyric
641.	Telkibánya, Baglyas-valley	Amphibole andesite (potash metasomatized)	2.46	sanidine sericitized, plagioclase amphibole opacitized	hyalopilitic porphyric with silification
359.	Telkibánya, Magostér	Pyroxene andesite	1.89	plagioclase (oligoclase), hypersthene (prismatic elongated) augite	hyalopilitic porphyric with little clay mineralization
642.	Telkibánya, Tokár peak	Pyroxene andesite	2.00	plagioclase clay mineralized, hypersthene augite	hyalopilitic porphyric
640.	Telkibánya, Hársas- hill quarry of Cenkely	Pyroxene phenoandesite with amphibole (dacite)	2.51	plagioclase fresh, sanidine hypersthene, augite, amphibole, biotite	hyalopilitic porphyric
286.	Sátoraljaujhely, Sátor-hill	Amphibole andesite with pyroxene	2.05	plagioclase fresh, amphibole	hyalopilitic porphyric
484.	Borehole Sáros- patak-10 91.2-94.9 m	Basalt	1.15	olivine iddingsitized, plagioclase, (labradorite- byotonite) hypersthene, augite, biotite	intersertalic porphyric
543.	Tarcal, quarry No. III.	Pyroxene dacite (phenoandesite)	2.80	plagioclase, hypersthene, augite	hyalopilitic porphyric

Table 1. Petrographic description of the dated samples

The rock collected at the village of Kéked, north of Telkibánya, as indicated in figure 1, belongs to the lower Sarmatian so-called acid pyroxene andesite complex. Its measured K/Ar age (13.1±1.2) is in good agreement with its geological age.



Fig. 2. Geological sketch map of the Tokaj Mts.

In Baglyas valley at Telkibánya, from the Telkibánya-2 oreprospecting borehole sunk 1240 metres and traversing, on the basis of the interbedded fossiliferous sedimentary complex, both the Lower Sarmatian and the Upper Badenian (Upper Tortonian) volcanic complex, five samples were selected. On the basis of geological and petrographic examinations, the Sarmatian (No. 189, 211, and 192) and the Badenian (Tortonian) volcanism (No. 190 and 191) could be distinctly separated. The K/Ar datings have established that the time between the two, temporarily distinct, volcanisms was rather short, and that in the Telkibánya volcano-tectonic rift the thick Upper Badenian andesite volcanism, following a brief period of sedimentation, continued in the Lower Sarmatian. The K/Ar datings have also supported the preliminary petrogenetic assumption that there is no significant age difference, either in the Upper Badenian (No. 190 and 191) or in the Sarmatian (No. 189 and 121). between volcanic activity and potassium metasomatism.

According to the geological-petrographic observations the age of the hypersthene andesite from the Csengő adit (No. 283), Kánya-hill, which contains fresh plagioclase is equal with the age of the Lower Sarmatian "acid" pyroxene andesite and the non-subvolcanic laminated pyroxene andesite which shows similar mineral composition, hyalopilitic texture and forms high ridges (No. 359 and 642) is younger than the Lower Sarmatian "acid" pyroxene andesite. Both observations are supported by the K/Ar data.

No.	Sample, Location	к	Arrad	"Ar _{rad}	K/Ar age	
		æ	F	10 ⁻⁶ cc STP/g	mill. year	
285.	Pyroxene andesite Alsókéked, Száraz-hill	1.68	24	0.874	13.1±1.2	
189.	Borehole Telkibánya-2: Potash trachyte	9.03	91	4.696	12.9±1.3	12.0±0.8
	19.2-20.0 m		72	4.165	11.5±0.9 J	
211.	Hypersthene andesite 173.6 m	1.57	33 15	0.824	13.2±1.5 12.1±1.8	12.8±1.2
192.	Chloroandesite . 182.5-183.0 m	1.87	20 16	0.870	11.8±1.3 11.4±1.5	ll.6±1.0
190.	Potash trachyte 947.7-949.5 m	5.95	87 16 67	3.345 3.154 3.159	14.1±1.1 13.3±1.4 13.3±0.6*	13.5±0.5
191.	Andesitogene propylite 1024.2-1024.6 m	1.92	53 63 16 36	0.966 1.071 0.932 0.962	12.6±1.2 14.0±1.2 12.2±1.6 12.6±1.1*	13.0±0.8
283.	Hypersthene andesite Telkibánya, Csengő-adit	1.58	36	0.749	12.0±0.8	
360.	Pyroxene andesite NE of Telkibánya, between Kánya- and Gyepü-hill	1.79	27 53 47 49	0.669 0.778 0.762 0.671	9.4±1.1 10.9±0.9 10.6±1.4 9.4±1.4	10.3±0.8
641.	Amphibole andesite Telkibánya, upper part of Baglyas valley	2.46	37	1.043	10.6±0.5₩	
359.	Pyroxene andesite SE of Telkibánya, West- ward end of Magastér	1.89	31 36	0.845 0.807	11.2±0.7 * 10.7±0.6 *	10.9±0.5
642.	Pyroxene andesite Telkibánya, Westward side of peak Little- Tokár	2.00	24	0.835	10.4±0.6₩	
640.	Pyroxene andesite (dacite) Telkibánya, Westward base of Hársas-hill, quarry at Cenkely	2.51	23	1.132	ll.3±0.7₩	
286.	Amphibole andesite Sátoraljaujhely, Sátor-hill	2.05	54 72	0.932 0.968	ll.5±0.9 ll.8±0.6	11.7±0.5
484.	Basalt Bonehole Sáros- patak-10. 91.2-94.9 m	1.15	27 19	0.431 0.411	9.38±0.6* 8.94±0.7*	9.2±0.5
543.	Pyroxene dacite Tarcal, quarry No. III.	2.80	75	1.123	10.0±0.5¥	

Table 2. K/Ar age of intermedier and basic volcanic rocks in the Tokaj Mts.

1

 $\lambda_{\text{e}} = 0.584 \times 10^{-10} \text{y}^{-1}; \qquad \lambda_{\beta} = 4.72 \times 10^{-10} \text{y}^{-1}; \qquad \ \ \text{```K/K=1.19\times 10^{-4} mol/mol; error: lot}$

#/argon measurements were made by statically operated and microcomputer controlled mass spectrometer.

The latter age proved to be the same as that of the pyroxene phenoandesite from the Hársas-hill quarry (No. 640, $11.3\pm0.7 \text{ m.y.}$), between Telkibánya and Gönc, which, because of its slightly higher SiO₂ content, used to be identified by some authors as dacite (it contains no quartz).

As expected, the dacite from the Tokaj-hill (Tarcal quarry) turned out to be young. The youngest of all (9.2±0.5 m.y.) is the basalt from the Sárospatak-10 borehole, representing the final stage of the mountain's andesite volcanism. It is interesting that the ages of only three carefully examined rocks proved to be younger than the predicted geological ages (No. 360, 614 and 286). The supposed reason for this, in the case of all the three rocks, may be the intensive opacitization of the coloured components of the rocks.



Fig. 3. Part of Neogene time scales and the evolution of intermediate and basic volcanism in the Tokaj Mts. (Compilation after ref. 6, 12-21)

In fig. 3 the evolution of intermediate and basic volcanism in the Tokaj Mts., as indicated by the present K/Ar data, and its relation to the Neogene stages are demonstrated. The diagram has been constructed on the approximative assumption that the real K/Ar age is of equal probability within the time interval given by the analytical error. In order to illustrate the uncertainty of the stage boundaries, in addition to the extreme values marked in fig. 3, all ages suggested by the cited authors are given as well.

We wish to emphasize the importance of the joint application of K/Ar and plaeomagnetic measurements which is very promising in the Tokaj Mts. first of all for the separation of Upper Sarmatian and Pannonian volcanics. The beginning of the Pannonian stage is not later than the magnetic reversal between the magnetic polarity epochs No. 10 and 9 showing inverse and normal remanent magnetisation, respectively. Thus rocks which are younger than about 10.8-10.9 m.y. and are normally magnetized, can be classed as Pannonian with great certainty. For instance the pyroxene andesite of the Kopaszhill at Tokaj has been dated with sample No. 543 from quarry No. III of Tarcal as 10.0±0.5 m.y. The remanent magnetization of this hill is normal in accordance with the measurements of Nairn et. al. [22]. Therefore, if further datings prove the reality of the 10 m.y. age, the rock has to be ranged into the Pannonian stage.

5. Conclusions

The greatest part of the K/Ar data is in agreement with or does not contradict the geologically established results. Therefore the K/Ar ages of the unchanged or slightly changed rocks can be accepted as good approximations of the geological ages, and it can be stated that the minimum period of the volcanic activity extends to 4-5 million years.

In the Telkibánya area, there was no significant time difference in volcanic activity, propylite formation and potassium metasomatism. The possible divergences are bound to be less considerable than our measurement errors. Therefore, on the basis of data from the Telkibánya-2 borehole it must be exluded that the volcanism and the potassium metasomatism should have shown significant divergences from each other, either in the older Badenian (Tortonian) stage (cf. the stratocolumn of the Telkibánya-2 borehole) or in the Sarmatian.

It has been successfully proved that in the Telkibánya area the so-called Sarmatian sheet pyroxene andesite forming the high ridges (No. 359 and 642) is younger than the more ubiquitous Sarmatian andesite (No. 285, 211 and 192).

The basalt from the borehole at Sárospatak (Sp. 10) (No.484) according to the K/Ar measurements, represents the youngest final member (9.2±0.5 m.y.) of this part of the Tokaj Mountains. If comparing its K/Ar age with the Central Paratethys time scale, its Pannonian age can be regarded as unequivocally established.

Our measurements showed the amphibole andesite from Sátorhill, Sátoraljaujhely, younger than the geological age. The measurements were carried out on the whole rock. The rock is characterized by the opacitization of the coloured components, especially of amphibole. A similar phenomenon was observed in the case of the rocks from Baglyas valley (No. 360 and 641), which also underwent opacitization and were found to be younger than expected. This phenomenon may be connected with the opacitization of rocks. The definitive answer to this question could be provided through the determination of the separated fractions of minerals that did not undergo the process of opacitization.

References

[1]	G. Pantó et. al., Explanation for the 1:200000 geological map series of Hungary, M-34-XXXIV. Sátoraljaujhely (Buda-
Γ	2]	pest, 1966) P. Gyarmati, Intermediate Volcanism in the Tokaj Mountains,
		Annals of the Hung. Geol. Inst. LVIII. (Müszaki Könyvkia- dó, Budapest, 1977)
[3]	V. Széky-Fux, The Telkibánya mineralization and its Intra- Carpathian connections. Petrogenetic evolution and
Г		mineralization. (Akadémiai Kiadó, Budapest, 1970)
L	4]	Acta Geol. Hung. 9 (1965) 305
Ľ	5]	K. Balogh, Z. Rakovits, Ann. Rep. of the Hung. Geol. Inst. of 1974. (1976) 471
[6]	D. Vass, J. Tőzsér, G. P. Bagdasaryan, M. Kaliciak,
[7]	J. Slavik, G. P. Bagdasaryan, M. Kaliciak, J. Tőzsér,
[8]	D. Durica, M. Kaliciak, H. Kreuzer, P. Müller, J. Slavik,
[9]	J. Tőzsér and D. Vass, Vest, Ust. ust geol. 53 (1978) 75 K. Balogh, I. Berecz and S. Bohátka, Földt. Közl. 106
Г	07	(1976) 208 K. Balogh Cy. Mónik, ATOMKI Közl, 21 (1970) 262
	[1]	K. Balogh, Gy. Mórik, ATOMKI Közl. 20 (1978) 215
[]	_2]	J. L. LaBrecque, D. V. Kent and S. C. Cande, Geology, 5 (1977) 330
[]	3]	W. B. F. Ryan, M. B. Cita, M. Dreyfus Rawson, L. H. Burkle,
ГЭ	47	and T. Saito, Riv. Ital. Paleont. 80 (1974) 631 F. Steininger, F. Rögl and E. Martini, Current
-	1	Oligocene/Miocene biostratigraphic concept of the Central
		ranean Neog. Strat. VI. Congr., Bratislava, 1975.
[]	_5]	0. Orlicky, J. Slávik and J. Tőzsér, Geol. Carp. XXV.
[]	[6]	F. F. Steininger, F. Rögl, Ann. Geol. Pays Hellen, Tome
Г	77	hors serie, (1979) 1153 C. Hámon I. Ravasz-Bananyai K. Balogh F. Anya-Sós
LJ		Ann. Geol. Pays Hellen, Tome hors serie (1979) 491
[]	_8]	M. Báldi-Beke, A. Nagymarosi, Ann. Geol. Pays Hellen,
[]	9]	T. Báldi, Földt. Közl. 98 (1968) 285
[2	20]	G. Hámor, Á. Jámbor, Földt. Közl. 101 (1971) 91
Li	21]	D. Vass, Geol. Práce, 70 (1978) 197
L	22]	A. L. M. Nairn, J. Negendank and G. Panto, Geol. Rdsch. 60 (1971) 727

Referee: P. Gyarmati

201



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 203-209 MŰHELYÜNKBŐL, LABORATÓRIUMUNKBÓL

NIVÓSÉMA ÉPITŐ PROGRAM DOMBRÁDI ZSOLT

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51.

Az ismertetett FORTRAN program a támasznivók módszerével az energiamérleg alapján több lépésben épiti fel a sémát, figyelembe véve a gamma-gamma koincidencia, a küszöbenergia mérések eredményét és más mérésekből származó nivóadatokat.

PROGRAMME FOR THE CONSTRUCTION OF LEVEL SCHEMES. A FORTRAN programme is presented, wich constructs the level scheme in several steps on the basis of energy balance by the method of adopted levels, using the results of gamma-gamma coincidence and threshold energy measurements and data from other measurements.

ПРОГРАММА ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ СХЕМЫ УРОВНЕЙ. Описывается программа, строящая схему уровней по шагам на основе балланса энергии с помощью метода опорных уровней используя результаты измерения гамма-гамма совпадений, пороговой энергии гамма-лучей и данные, полученные из других измерений.

1. Bevezetés

Napjainkban a nagy felbontóképességü gamma- és elektronspektrométerek lehetővé teszik a magreakcióból, illetve bomlásból származó átmenetek százainak a megfigyelését. A spektroszkópiai mérések eredményei, lehetőséget adnak az atommagok nivósémájának felépitésére, amelyek a magok tulajdonságainak elméleti értelmezéséhez és gyakorlati alkalmazásokhoz egyaránt szükségesek. Gamma-spektroszkópiai adatok használatakor a gerjesztett állapotok létének és energiájának meghatározásához az átmenetek energiamérlegéből szokás kiindulni. Az energiamérleg szerinti sémaépitésre kidolgozott módszerek egyike pusztán a gamma energiák kombinációit használja, a másikhoz az irodalomból ismert és elfogadott nivók adataira is szükség van. A Bäclin [1], a Johnson és Kenett [2] és a Kalmikova és

A Bäclin [1], a Johnson és Kenett [2] és a Kalmikova és Burmisztrov [3] által közölt nivóséma-épitő programok, és a jelen program is, valószinüségi megfontolásokat alkalmaznak az uj nivók elfogadásánál, ezért e programok elsősorban ott használhatóak, ahol sok átmenetet észleltek, igy a statisztikai megfontolások érvényesek, ill. olyan magoknál, amelyek gerjesztett állapotai több, nagy átmeneti valószinüségü gamma átmenettel bomlanak. Ha ezek a feltételek nem teljesülnek, a programok akkor is hasznos segédeszköznek bizonyulnak, de a nivók létének eldöntéséhez nem nyujtanak elegendő információt. Ilyenkor az ellentmondást nem tartalmazó nivójelöltek közül a program által figyelembe nem vett megfontolások alapján lehet választani. A program használata könnyebbé és lényegesen gyorsabbá teszi a séma épitését.

2. A nivóséma épités módszere

A séma épitéséhez a támasznivók módszerét használjuk [4]. Ezzel a módszerrel lényegében a más mérésekből elfogadott nivóséma továbbfejlesztése történik, ezért döntő, hogy mely nivókat fogadjuk el. A nivók közti válogatásnál a fő szempont a megbizhatóság. Támasznivónak fogadjuk el az alapállapotot és a legmegbizhatóbb alacsonyan fekvő nivókat.

A kiválasztott témasznivók és a mért gamma-átmenetek energiája összegének és különbségének a képzésével uj nivójelölteket állitunk elő. A nivójelöltek közül néhányan hibahatáron belül egybeesnek. Az ilyen csoportokat nevezzük próbanivónak, amelynek energiáját a csoportba tartozó nivójelöltek energiájának sulyozott átlaga adja. A próbanivót támasznivónak fogadjuk el, ha kielégiti a következő, általunk szabott feltételeket:

- A próbanivó véletlen előállásának a valószinüsége ne legyen nagyobb, mint egy előre megadott érték.
- A gamma-átmenet ne induljon nagyobb energiáju nivóról, mint az átmenet küszöbenergiájának és a reakció küszöbenergiájának a különbsége.
- 3. Ne mondjon ellent a koincidencia mérésnek.
- A nivóra menő átmenetek intenzitásának összege ne legyen nagyobb, mint a nivóról induló átmenetek intenzitásának az összege.
- 5. Magreakcióban különböző bombázó energiáknál az azonos nivóról jövő gamma-átmenetek intenzitás-aránya állandó legyen.
- 6. A gamma-átmenetek multipolaritása segitségével meghatározott spin és paritás értékek ne tartalmazzanak ellentmondást.

A fentieken kivül még más követelmények is figyelembe vehetők. A nivó létét valószinüsiti, ha más mérésekben (magreakció, bomlás) is gerjesztődik azonos energiáju állapot. A különböző tipusú vizsgálatokban gerjesztődő nivók azonban az energiáik hibahatáron belüli egyezésével nem azonosithatóak, az egybeesés véletlen is lehet. A véletlen egybeesés valószinüségét a kisérleti nivósürüségből és az energiamérés hibájából egyszerüen számolja a program. A koincidenciafeltétel kielégitése jelentősen növeli a nivó létének a valószinüségét, de a növekedés pontos értékét még kvalitativ megfontolásokkal is nehéz közeliteni. A programban koincidenciánként egy nagyságrenddel csökkentjük a próbanivó véletlen előállási valószinüségét.

A nivók véletlen előállásának a valószinüségét A. Bäclin [1] által javasolt módszer alapján lehet számolni. Tekintsünk egy G energiáju próbanivót és tegyük fel, hogy ez J darab támasznivóval van kapcsolatban. A nivó véletlen előállásának a valószinüségén a J darab nivójelölt véletlen egybeesésének a valószinüségét értjük. Adva van összesen N darab támasznivó $F_1...F_N$ energiával, és a mért gamma átmenetek E_i energiával. Annak a valószinüsége, hogy az

$$||G-F_j|-E_i| \leq C\sqrt{(\Delta F_j)^2 + (\Delta E_i)^2}$$

feltétellel definiált összeesés véletlen

$$W_{j} = P(G) \times C \sqrt{(\Delta F_{j})^{2} + (\Delta E_{i})^{2}}$$

tipusu kifejezésekből számolható, ahol P(G) azon 100 keV-es intervallumban levő jelöltsürüség, amelybe G esik. C hibafaktor értékét a hiba jellegétől függően l és 2 közötti értéknek célszerű választani. Annak a valószinüsége, hogy a lehetséges N-ből J véletlen összeesés történik,

$$W_{i}W_{i}\ldots W_{i}(1-W_{i})\ldots (1-W_{i})$$

1 2 J J J + 1 N

tipusu tagok összege. Az általános kifejezés a véletlen összeesések valószinüségének (W(J)) meghatározására a következő:

$$W(J) = \sum_{\substack{i \\ 1 \le i_2 \le \dots \le i_d}}^{N} (\Pi W_i) \prod_{\substack{i \\ m \ne 1}}^{\Pi} (1 - W_i)$$

Ezen pontos kifejezés számolása tulságosan sok időt követelne, ezért W; helyett egy átlagértéket szokás használni (\overline{W}), ahol az átlagot a fent emlitett 100 keV-es intervallumra képezzük. Igy a W(J)-re kapott kifejezés binomiális eloszlásba megy át:

$$W(J) = N! [J! (N-J)!]^{-1} \overline{W}^{J} (1-\overline{W})^{N-J}$$

Ez a közelités legfeljebb egy kettes faktorban különbözik a pontos értéktől [1].

3. FORTRAN program a nivóséma felépitésére

A sémaépitésre irt NIVOSEMA program az energiamérleg alapján számol, felhasználva a más mérésekből elfogadott támasznivók adatait. Az energiamérleget kielégitő próbanivókhoz meghatározza a véletlen előállásuk valószinüségét. Figyelembe tudja venni a küszöbenergia, a koincidencia mérésekből és a korábbi mérésekből származó eredményeket.

A program a támasznivók és a gamma-átmenetek energiájából több lépésben épiti fel a sémát. Először képezi a támasznivók és a gamma-átmenetek energiáinak kombinációit, és ezeket nagyság szerint sorba rakja. Ezután a gép veszi a legnagyobb energiáju jelöltet és megnézi, hogy hibafedéssel egybeesik-e a következő jelölttel. Ha egybeesik, akkor kiszámolja a két jelölt energiájának az energia hibájával sulyozott átlagát és hibáját, majd megnézi, hogy a következő jelölt hibafedéssel egybeesik-e az átlagértékkel. Az eljárás addig folytatódik, amig egybeeső jelöltek vannak. A kapott átlagértéket nevezzük próbanivónak. Ha a próbanivó egy előre megadott értéknél több jelölt egybeeséseként áll elő, a program kiszámolja a próbanivó véletlen előállásának valószinüségét a binomiális eloszlás szerinti közelitő formulával. Ha a próbanivó véletlen előállásának a valószinüsége elég kicsi, és kielégiti a korábban felsorolt követelményeket is, támasznivónak fogadjuk el.

A támasznivók közé eső gamma-átmeneteket kivesszük a bemenő adatok közül és az uj támasznivókat is felhasználva a programot ujra futtatjuk. A gamma-átmenetek kivételére azért van szükség, mert benthagyásuk esetén néhány futtatás után olyan mértékben állnak elő egymásnak ellentmondó jelöltek, hogy a kiértékelést lehetetlenné teszik.

A több lépésben történő sémaépités előnye, hogy viszonylag kis számu jelölttel dolgozik a gép, ami a kiértékelést könnyebbé teszi és a futási időt is csökkenti. Ugyanakkor lehetőséget ad a kvalitativ követelmények figyelembevételére és a nem gépesitett követelmények kielégitésének a vizsgálatára is, ami az előállitott séma megbizhatóságát növeli.

Más mérésekben meghatározott nivókkal való egybeesést is lehet figyeltetni a programmal. Ha a nivóenergiák 10 keV-es határon belül megegyeznek, ezt a program jelzi és hatását figyelembe veszi a véletlen előállás valószinüségében.

A küszöbfeltételt a program már a próbanivók képzésénél figyelembe veszi.

Koincidenciamérés esetén annak az eredményét is figyelembe lehet venni. Az erre a célra szolgáló programrész csak akkor használható, ha a koincidenciakapunak megfelelő gamma-átmenetet már elhelyeztük a sémában. A program egy adott kapuval a mérés szerint koincidenciában levő átmeneteket csak a koincidenciafeltételeknek megfelelően helyezi el a sémában. Azoknál a próbanivóknál, amelyeknél a program valószinüséget számol, a valószinüségben figyelembe veszi a koincidencia hatását, és kiirja, hogy melyik kapuval melyik átmenet van koincidenciában. A koincidenciafeltételt figyelembe kell venni a koincidenciában nem levő átmenetek elhelyezésénél is. Ezt a negativ koincidenciafeltételt ugy veszi figyelembe a program, hogy a megfelelő intenzitásu átmeneteket, amelyeket a bemenő adatok
között jelölni kell, hogy ugy helyezi el, hogy ne legyenek koincidenciában egyetlen kapuval sem.

A 2. fejezetben megadott feltételek közül a program számolja a véletlen egybeesés valószinüségét (1), figyelembe veszi a küszöbfeltételt (2), azonkivül egyszerüen figyelembe tudja venni a más adatokkal való egyezést is. A koincidenciafeltétel (3) figyelembevétele kicsit nehézkes a feltételek bonyolultsága miatt, ezért csak nagyobb mennyiségü adat esetén célszerü használni. Az intenzitásmérleg (4) gépi ellenőrzése egyszerüen megoldható lenne, de a következő futtatáshoz való adatelőkészitéshez szükséges idő alatt ezt a munkát számitógép nélkül is el lehet végezni. Hasonló a helyzet a gerjesztési függvények arányosságának a vizsgálatával is (5). Ez utóbbi feltétel programon kivüli figyelése mellett szól az is, hogy gépi figyelés esetén jelentősen nő a program memória igénye, mivel minden átmenet teljes kisérleti gerjesztési függvénye az operativ memóriában van, miközben ezen adatok jelentős részére nincs is szükség.

A multipolaritás (6) gépi figyelembevétele a rendelkezésre álló kevés adat miatt nem célszerü.

A program futtatása előtt meg kellett határozni azt a valószinüségi értéket amelynél nagyobb véletlen előállási valószinüséggel rendelkező próbanivót véletlennek kell tekinteni. A feladat megoldása véletlen számokból történő sémaépités alapján történt. 10 próbálkozásból 100 véletlen szám felhasználásával nem állt elő 10⁻⁵-nél kisebb valószinüséggel próbanivó. Igy ezt az értéket fogadtuk el felsőhatárnak. A program tesztelését a ¹⁹⁵ T& bomlásából gerjesztődő ¹⁹⁵ Hg

A program tesztelését a ¹⁹⁵Tl bomlásából gerjesztődő ¹⁹⁵Hg izotóp nivósémájára végeztük, ami az irodalomból ismert [5]. Négy támasznivóból kiindulva 100 gamma átmenetet kellett beépiteni a sémába. A tesztelést két esetre végeztük. Az első esetben csak az energiamérleget használtuk, a második esetben figyelembe vettük a koincidenciamérés eredményeit is. A 10⁻⁵-ös valószinüségi korláttal számolva, a 23 biztos irodalmi nivó közül az első esetben 18, a másodikban 19 állt elő és a program téves nivót nem generált. A programot ujra futtatva 10⁻⁵-ös korlát esetén uj támasznivó már nem állt elő. A korlátot 10⁻⁴-re csökkentetve az energiamérleg alapján mind a 23 biztos irodalmi nivó előállt, a koincidencia adatok figyelembevételével csak 21. Mindkét esetben 3-3 nivónak nincs irodalmi megfelelője.

A programot felhasználtuk a ¹⁰⁰ Tc, ⁹⁴Nb és a ⁹⁶Nb sémájának az épitésénél is.

4. A NIVOSEMA program bemenő adatai

kártya
 1-5: a támasznivók száma
 6-10: a beépitendő gamma-átmenetek száma
 11-15: a figyelembe veendő más mérések száma
 16-20: a koincidenciakapuk száma
 30-35: a próbanivót előállitó nivójelöltek minimális száma
 36-45: a keresett uj nivók maximális energiája

46-55: a keresett uj nivók minimális energiája 56-65: a hibafaktor

Az első kártya formátuma: 4I5, 10X, I5, 3F10.0 2. kártyától

A támasznivók energiája és hibája 2F10.0 formátumban, támasznivónként uj kártyán kezdve, majd a gamma átmenetek energiája, hibája, küszöbenergiája és az antikoincidenciafeltételt jelző érték (1) 3F10.0,Il formátumban, átmenetenként uj kártyán kezdve.

A: Ha az első kártyán a ll-15 karakterek nullák, akkor lásd B:-t, egyébként itt következnek a figyelembe vett más tipusu mérésekben meghatározott nivók számai 2014 formátumban, utána mérésenként uj kártyán kezdve az egyes reakciókban meghatározott nivók energiája 8F10.0 formátumban.

B: Ha az első kártyán a 16-20 karakterek nullák, akkor vége a bemenő adatoknak, egyébként itt következnek az egyes kapukkal koincidenciában levő átmenetek számának eggyel növelt értékei 2014 formátumban. Utána az egyes kapuk és a velük koincidenciában levő átmenetek energiája 8F10.0 formátumban kapunként uj kártyán kezdve. Az ezt követő kártyán az egyes kapukkal koincidenciában levő átmenetek által összekötött támasznivók száma következik 2014 formátumban, majd ezek energiája 8F10.0 formátumban, kapunként uj kártyán, a kapu által összekötött támasznivókkal kezdve.

Minden energia adatot keV-ben kell megadni.

5. A program eredményei

E(LEVEL)	ERROR	N(GA)	N(RE)	N(CO)	W(N)
299.97	0.191	3	1	1	0.69E-10
	E(GAMMA)	E(LEVEL)	ERROR	DEV	D/E
	200.12 400.07 299.81	100.00 700.00 0.00	0.288 0.387 0.336	0.146 0.044 0.164	0.505 0.114 0.489
	COINCIDENCE	GAMMA 200.12	GATE 100.02		

A fenti eredménylistán az első sor adatai a próbanivóra vonatkoznak. Az első két adat a próbanivó energiája és hibája, amelyek a próbanivót előállitó nivójelöltek energiájának és hibájának sulyozott átlagaként állnak elő. Továbbá itt szerepel az, hogy a próbanivó hány nivójelölt egybeesésével áll elő, (N(GA)), hány más mérésben gerjesztődő állapottal esik egybe (N(RE)), létét hány koincidencia adat erősiti (N(CO)), végül a próbanivó véletlen előállásának a valószinüsége növetkezik (W(N)),

A második szövegsor alatti rész a próbanivót előállitó nivójelöltek adatait tartalmazza. Megadja, hogy milyen energiáju gamma átmenet (E(GAMMA)) és támasznivó (E(LEVEL)) felhasználásával állt elő a nivójelölt, mekkora a nivójelölt energiájának a hibája (ERROR), mennyire tér el az átlagenergiától (DEV), és azt, hogy ez az eltérés hányszorosa a hibának (D/E).

Amennyiben a próbanivóhoz van koincidencia adat is, akkor külön felirat alatt szerepel, hogy a próbanivó előállitásában résztvevő gamma-átmenetek közül melyek és milyen kapuval vannak koincidenciában.

Hivatkozások

- [1] A. Bäclin, Nucl. Instr. Meth. 53 (1967) 177.
- [2] L. U. Johnson, T. J. Kenett, Nucl. Instr. Meth. 87 (1970) 109.
- [3] L. A. Kalmikova, V. R. Burmisztrov, OIJaI, 10-9808 (1976)
 [4] B. Sz. Dzselepov, Metodi razrabotki szlozsnih szhem
- raszpada (Nauka Kiadó, Leningrád, 1974) 116 o.
- [5] J. B. Vandlik, Ja. Vandlik, N. G. Zajceva, I. Mahunka,
 M. Mahunka, Z. Máté, H. Tyrroff, T. Fényes és V. J. Fominih,
 Izv. Akad. Nauk SzSzSz (szer. fiz.) 37 (1973) 1804

Lektor: Mahunka Imre



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 211-220

CAMAC REAL-TIME PERIFÉRIÁK, CAM 2.04-81 SCALER TIMER MODUL

MOLNÁR JÓZSEF

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51.

A cikk rövid bevezető ismertetést ad a CAMAC modulok általános felépitéséről, áttekintve azokat a szabványokat, ajánlásokat, amelyeket a fejlesztésnél, tervezésnél figyelembe kell venni. A továbbiakban ismerteti az ATOMKI-ben kifejlesztett vezérelt CAMAC SCALER-TIMER modult.

CAMAC REAL-TIME PERIPHERIALS. CAM 2.04-81 SCALER-TIMER MODULE. The paper gives a short introduction to the general structure of CAMAC modules surveying the standards and propositions to the observed in development and design. Then it presents the CAMAC SCALER-TIMER module controlled by the dataway which was developed in ATOMKI.

ПЕРИФЕРИЙНЫЕ БЛОКИ В СТАНДАРТЕ КАМАК, СЧЕТЧИК-ТАЙМЕР "САМ 2.04-81". В статье дается краткое введение об общем построении бликов в стандарте КАМАК с обзором предложений и норм, учитываемых при разработке. Описан также счетчик-таймер "САМ 2.04-81", разработанный в АТОМКІ.

1. Bevezetés

Az élet különböző területén egyre gyakrabban fordul elő, hogy mérési adatokat közvetlenül digitális számitógépbe kell táplálni, ill. megforditva, a digitális számitógép szolgáltat adatokat valamely folyamathoz. Az adatok számitógépes feldolgozása azért is válik egyre gyakoribbá, mert a laboratóriumokban, üzemekben mind több adatot gyüjtenek össze, és ezt a hatalmas adattömeget emberi erővel már nemigen lehet feldolgozni, vagy a feldolgozás olyan lassu, hogy közben az adat el is évülhet. A mérendő folyamat gyorsasága, a folyamat irányitásához szükséges nagy mennyiségű adat gyors feldolgozása elképzelhetetlen számitógép nélkül.

A számitógépek azonban nem rendelkeznek olyan bemenetekkel, amelyek a folyamatoktól érkező analóg vagy digitális jeleket közvetlenül fogadni tudnák. Erre a célra fejlesztették ki a REAL-TIME PERIFÉRIAKAT, amelyek a bemenetükre érkező analóg vagy digitális villamos jeleket a számitógép által érthető formáju villamos jelekké alakitják át, és ezeket a számitógép kérésére át tudják adni, akár pedig meg tudják szakitani a gép müködésének normális menetét ezzel jelezve, hogy foglalkozzon velük. A real-time perifériák másik csoportja a számitógép által kiadott adatokat alakitja át olyan analóg vagy digitális jelekké, amelyeket a beavatkozó szervek megértenek.



1. ábra A real-time perifériák csatlakoztatása a számitógéphez.

A fizikai folyamatok számitógépes mérése a nukleáris technikában terjedt el legkorábban. Ezért először a nukleáris mérések-kel és az ilyen folyamatok irányitásával foglalkozók körében merült fel a real-time perifériák szabványositásának kérdése. A nagy európai laboratóriumokban összegyült tapasztalatok alapján nemzetközileg szabványositották a real-time perifériakészlet mechanikai méretét, villamos jeleit, egyes software megoldásokat: ezt nevezték el CAMAC szabványnak, ill. ezen szabványok szerint összeállitott rendszereket CAMAC rendszernek. A CAMAC moduláris müszerrendszerről már korábban olvashattunk ismertetőt [1]-ben, ahol a szerző emlitést tett azokról a tervekről, amely ezen rendszer intézetünkben történő meghonositására irányul. Az ATOMKI-ben 1974. év végén jelent meg az első KFKI gyártmányu CAMAC müszerrendszer magfizikai mérésekhez, majd 1977-ben további egy berendezés az Elektronikus Osztályon folyó mikroprocesszoros hardware-software fejlesztések segitésére. Ezzel egyidőben megvalósult annak a feltétele, hogy gyakorlatban is megismerkedhessünk a CAMAC rendszerrel és megkezdjük az első vezérelt CAMAC real-time periféria - továbbiakban CAMAC modul - tervezését, gyártását. Ezideig CAMAC rendszerben az adatutról nem vezérelhető analóg modulok készültek az intézetben.

2. A CAMAC modulok általános felépitése

Mint azt a bevezetőben már emlitettem a számitógépek a felhasználói modulokon keresztül kapcsolódnak a külső világhoz. E modulok általános felépitésére szintén vannak szabványok, ajánlások, szokások, melyeket célszerű áttekinteni, mielőtt a cimben jelzett, az intézetünkben kifejlesztett modult ismertetném.

A CAMAC modulok belső felépitése általában három, jól elválasztható részre különithető:

- 1) az ADATUT-hoz kapcsolódó áramkörök
- 2) LAM kezelés- és vezérlő állapotregiszterek
- 3) specifikus áramkörök.



2. ábra A CAMAC modulok általános felépitése

Az ADATUT-hoz kapcsolódó áramkörök feladata az ADATUT jeleinek fogadása, ill. az ADATUT-ra kijutó jelek illesztése. A következő négy alapvető feladatot kell ellátni:

- a binárisan kódolt alcimek (A), és a funkciók (F) dekódolását, valamint a busy (B) és állomásszám (N) jelek fogadását
- az általános vezérlőjelek (Z, C, I, S1, S2) fogadását
- a modul válaszjeleinek (X, Q) és figyelemfelhivó (L) jelének továbbitását
- valamint az iró (W), olvasó (R) adatvezetékek kapuzását.

A szabvány [2] előirja, hogy az A és F dekódolás teljes legyen, azaz minden dekódolt A és F jelhez csak egyetlen bemenő A és F kódkombináció tartozzon. Egy-egy áramkörrel külön-külön kell dekódolni az A1, A2, A4, A8 valamint F1, F2, F4, F8, F16 jeleket, ezután kapuzni a B és N jelekkel. A gyakorlatban használt dekódoló áramkör csak l6 kombinációt tud előállitani, ez az 5-bites F kód dekódolására kevés. A legtöbb esetben a modul csak a l6 szabványosított F kódot használja, s ezeknél F4=0. Tehát pl.: F1, F2, F8 és F16 jelek kerülnek a dekódolóra, F4 jel pedig kapuzza a dekódolt jelet.

A dekódolt A-F jelekből további kombinációs hálózatokkal állitják össze a modul további kapuzásához szükséges F/x/A/y/ funkció-alcim kombinációkat. Ilyen A-F dekódoló egységre mutat példát a 3. ábra

Az általános vezérlő jelek (C,Z,I) és az időzitő jelek (S1,S2) felhasználásával a modul tervezője az általa kijelölt belső regisztereket törölheti, alaphelyzetbe állithatja, valamint meghatározott tevékenységeket tilthat, engedélyezhet. Altalában a C és I jelek modulon belüli hatásosságának megengedéséről külön vezérelhető regiszterek gondoskodnak. Az X és Q jelek a modul válaszjelei.

Az X jel létrehozása az ADATUT-on kötelező: nyugtázása a kiküldött A-F kód elfogadásának, tulajdonképpen a modul hardware tesztje. Az X jel összeállítása egyszerüen abból áll, hogy az A-F dekódoló és kombinációs áramkör kimenő F/x/A/y/ jeleit VAGY kapura vezetik és ez közvetlenül szolgáltatja az X jelet.



3. ábra A-F dekódoló felépitése

Q válaszjelet a modul a következők miatt küldhet:

- a LAM állapotot vizsgáló F/8/A/i/ utasitás eredményeként
 valamilyen más állapotvizsgálat F/27/A/j/ utasitás hatá-
- sára
 az l. csoportu adatregiszterek irásakor vagy olvasásakor, ha az adatátvitel érvényes volt. (ez nem szabvány).

E három ok VAGY kapcsolata kerül ki a Q vonalra (4. ábra).



4. ábra Q és X jelek összeállitása

Ha a modul kapcsolatba kiván lépni a számitógéppel, akkor ezt az L vonalon kéri.

A modul speciális részéből érkezhet a LAM forrásjel (LAM source), amely pl.: jelezheti, hogy egy számláló tulcsordult. A LAM forrás bebillenti a LAM állapot bistabilt (LAM status). A LAM állapotbistabilt kapuzni lehet az engedélyezés-tiltás kapuval (LAM request). Több LAM forrás esetén ezután kerülnek a LAM kérések VAGY kapcsolatba: ez a közös LAM (L jel) - ha a LAM kérés engedélyezett a modul számára - kijut az ADATUT-ra. Az ADATUT-ra kijutó L jelet kapuzni kell. A szabvány előirja, hogyha egy modul, amely L jelet ad ki egy olyan utasitást kap, mely megszünteti ezt az L jelet, akkor a modulnak még az S1 mintavevőjel előtt le kell tiltani a kimenő L jelet. Ezt a követelményt legegyszerübben ugy lehet teljesiteni, hogy az L jelet az N jellel kapuzzuk. Igy a LAM kérés megszünik, ha a modul meg van cimezve. Utasitásokkal vizsgálni lehet a LAM állapotot, LAM kérés és közös L jelek állapotát.

Ha egy modul L jelet generál, akkor biztositani kell:

- a LAM állapot bistabil törlését
- az egyedi LAM kérés állapotvizsgálatát
- a közös L jel állapotvizsgálatát
- több LAM forrás esetén a LAM kérések azonositását a LAM minta (LAM pattern) ADATUT-ra történő kiolvasásával

Az alapállapot (Z) jel hatására a LAM állapotregisztereknek törlődni kell, az engedélyezés-tiltás kapuknak a LAM kérést tiltani kell. Példaként két LAM forrással rendelkező LAM kezelő áramkört mutat be az 5. ábra.



5. ábra LAM vezérlés

A W-R adatvonalak kapurendszere bonyolitja le a modul és a számitógép közötti adatforgalmat.

Megfelelő A-F kód hatására történik CAMAC IRAS-kor a W vonalak mintavételezése és beirása pl.: a vezérlőregiszterekbe, ill. a modul adatainak rákapuzása az R vonalakra CAMAC OLVASAS müveletekkor.

Szót kell még ejtenünk a specifikus áramkörökről, amelyek meghatározzák, hogy az illető modul milyen funkciót, feladatot lát el. Az alkalmazások során igen sok célra terveztek modulokat, s mivel ma már a legtöbb alkalmazáshoz rendelkezésre áll a megfelelő modul, a tipusválaszték növekedési üteme csökkent. Napjainkban is készülnek uj modulok az uj felhasználó igények kielégitésére, ill. a technológiai lehetőségek változása miatt.

3. CAM 2.04-81 SCALER-TIMER

A CAM 2.04-81 tipusjelü SCALER-TIMER modul - 6. ábra - egy 6 dekádos számlálót tartalmaz, amelynek tartalmát egy 7 szegmenses kijelző egység folyamatosan megjeleniti. A modul belső időalap generátorral is rendelkezik. A számláló vagy a bemenetére jutó impulzusokat számlálja, vagy az időalapról müködtetve időmérésre használható. Az alapvető üzemmódokat a MODE kapcsolókkal állithatjuk be. A számláló vagy az előlapi IN csatlakozón keresztül érkező impulzusokat fogadja (MODE: SC), vagy az időalap generátorról müködik (MODE: T). A modul vezérlési módja átkapcsolható:



6. ábra A CAM 2.04-81 Scaler-Timer modul

- kézi müködtetésü (MODE: M)
- számitógépes (MODE: C)

Ez a két vezérlési mód lehetőséget nyujt arra, hogy a számlálót használni lehessen keretvezérlővel ellátott vagy azzal nem rendelkező CAMAC keretben (PORTACAMAC) is.

További speciális üzemmód a REAL-TIME CLOCK-ként való müködtetés. Ekkor az időalap generátor jele diszkrét – 10 hatványainak megfelelően – osztásban kinyerhető és felhasználható időmérő áramkörök hitelesitésére, analizátorok mérésidő órájához mint élőidő korrigált órajel.

Ha a felhasználó ugyanazzal az érték vagy időelőválasztással kiván több mérési ciklust végezni, FOLYAMATOS PRESET müködtetést állithat be. Azaz a PRESET érték elérésekor nem STOP hanem RESET jel keletkezik.

A számláló kaszkádositható: a tulcsorduló impulzus egy további számláló bemenő impulzusaként használható fel. A modul a következő müszaki paraméterekkel rendelkezik:

A modul a kovelkezo muszaki parameterekkei rendeike

A számlálás paraméterei:

BCD kódban
15 MHz
10 ⁶ -1
jobb, mint 5.10 ⁻⁵ /C
1 106 dekadikus lépésekben
1 106 sec. dekadikus lépésekben
min. 50 nsec

Csatlakozók:

A ki- és bemeneti csatlakozók jelszintjei megfelelnek az EUR. 4100 riport 7.2.1. előirásainak.

START STOP RESET kin ber	menetként müködnek, ha a modul MASTER menetként, ha a modul SLAVE
IN	a számláló bemenete
INH. EXT.	a számláló tiltó bemenete
GATE	az időalap tiltó bemenete
LAM	kiszolgálást kérő kimenet
OWF	tulcsordulás

Uzemmódok:

(MODE:	M)			
(MODE:	C)			
(MODE:	SC)			
(MODE:	T)			
Master				
Slave				
FOLYAMATOS PRESET				
REAL TIME CLOCK				
	(MODE: (MODE: (MODE: (MODE: PRESET CLOCK			

Számitógépes vezérlési módban a modulra értelmezett, a CAMAC szabványnak megfelelően kialakitott A-F kódok használhatók. Ezek a következők:

A/O/F/O/ A/O/F/2/ A/O/F/9/	számláló kiolvasás számláló kiolvasás és törlés számláló törlés	Q=1 Q=1	
A/0/F24/	stop	-	
A/0/F/26/	start	-	
A/2/F/24/	OWF LAM tiltás	-	
A/2/F/26/	OWF LAM engedélyezés	-	
A/2/F/27/	OWF LAM STATUS vizsgálat	Q=1;	ha volt OWF
A/2/F/8/	OWF LAM REQUEST vizsgálat	Q=1;	ha volt OWF és OWF LAM enge- délyezve
A/2/F/10/	OWF LAM STATUS törlés	-	
A/4/F/24/	STP LAM tiltás	-	
A/4/F/26/	STP LAM engedélyezés	-	
A/4/F/27/	STP LAM STATUS vizsgálat	Q=1;	ha volt STP
A/4/F/8/	STP LAM REQUEST vizsgálat	Q=1;	ha volt STP és STP LAM enge- délyezve

217

A/4/F/10/ STP LAM STATUS tölés A/8/F/24/ MODUL LAM tiltás A/8/F/26/ MODUL LAM engedélyezés A/8/F/8/ MODUL LAM STATUS vizsgálat

Q=1; ha volt modul LAM

A/14/F/1/ LAM PATTERN kiolvasás A/11/F/17/ vezérlő regiszter beirás

Ahhoz, hogy a modul kezelőszervekkel beállitott üzemmódját számitógép oldalról nyilván lehessen tartani és azonositani lehessen a LAM forrást, szükséges a modul állapotára jellemző információ. Ez az ADATUT-on keresztül kiolvasható. Az egyes bitek jelentése:

DW-R1: LAMROWF
DW-R2: LAMRSTP
DW-R3: MODE STATUS = 1; ha a modul MASTER
DW-R4: MODE STATUS = 1; ha a modul TIMER

Egy ADATUT-on keresztül beirható vezérlő regiszter 2 bitje engedélyezi a C és I jelek modulon belüli hatásosságát, további 2 bittel állitható be az emlitett két speciális üzemmód.

DW-W1: INHIBIT engedélyezés DW-W2: CLEAR engedélyezés DW-W3: REAL TIME CLOCK DW-W4: FOLYAMATOS PRESET

A 7. ábrán látható a modul blokkvázlata bemutatva a főbb funkcionális egységeket.



7. ábra A modul elvi vázlata

Naf dekódoló

A modulra értelmezett utasitások fogadása, valamint az X válaszjel adás történik meg ebben az egységben. A modul minden értelmezett utasitásra X válaszjelet generál.

Lam vezérlő

Ez az egység tartalmazza azokat a FLIP-FLOP-okat amelyekkel beállithatók a modul LAM kérésének feltételei. MODUL LAM keletkezhet OWF és STP jelre. Ezek a jelek egy-egy FLIP-FLOP-ot billentenek be. Amennyiben a LAM kérés az adott jelre engedélyezett és a modul egészére is, ugy a csatlakozósáv L vonala és az előlapi LAM csatlakozó aktivvá válik. Q vonalon válaszjel keletkezik a számláló tartalmának kiolvasásakor, valamint LAM TEST utasitások hatására.

Vezérlő egység

Az áramkör a következő részekből épül fel:

- 4 bites regiszter gondoskodik a C és I jelek modulon belüli engedélyezéséről, valamint a FOLYAMATOS PRESET (CPR) és REAL TIME CLOCK (RTC) üzemmód beállitásáról. Ennek megfelelően MODE: M üzemmódban vagy alaphelyzetben:
 - C és I nem hatásos
 - az időalap NORMAL TIMER
 - az OWF jel STOP-ot generál
- a START, STOP, RESET monostabil MV-ok vagy a kézi nyomógombokkal indithatók, vagy az azonos feliratu csatlakozón keresztül érkező impulzusokkal, vagy számitógépről a megfelelő utasitás kiküldésével MODE: C esetben.

Időalap

Tartalmazza a 10 MHz frekvenciáju kvarc oszcillátort, a 7 dekádos osztó számláncot. A hátlapon elhelyezett GATE csatlakozón érkező logikai szint az oszcillátorkört kapuzza. NORMAL TIMER-ként müködve 1 Hz frekvenciáju órajel jut az idő-

alapról a számláló bemenetére.

REAL TIME CLOCK üzemben az osztó számlánc megfelelő dekádjaira kapcsolódó kapuk engedélyező bemenetét a PRESET kapcsoló állitja. A LAM előlapi csatlakozón keresztül érhető el a leosztott frekvenciáju órajel.

Számláló - kijelző

A számláló 6 dekádos felépitésü. Egy-egy dekád kimenete a 7 szegmenses LED kijelzőre, valamint a számitógép R1-R24 vonalait meghajtó kapuhálózatra csatlakozik. Olvasáskor a számláló tartalma az ADATUT-ra kerül, BCD kódban. Ugyanakkor az R1-R4 vonalakon olvasható ki a modul státusz információja. A számlálódekádok kimenetéről müködik az érték- vagy időelőválasztás, ami a PRESET kapcsolóval állitható.

A számláló bemenetén tilt az ADATUT I, vagy az INH.EXT, csatlakozó jele.

RESET jelre törlődik a számláló tartalma.

Az áramkör a magasabb helyiértéken keletkező nullákat kioltja. Bekapcsoláskor a legkisebb helyiértéken lévő nulla világit, ezzel jelezve a modul üzemkész állapotát.

Hivatkozások

- [1] Horkay Gy., ATOMKI Közlemények 1975. 17. 9-22
- [2] CAMAC: A Modular Instrumentation System for Data Handling,
- [2] CARAC. A Hoddiar Instrumentation System for Data Hand EUR. 4100 e. 1972. CEC, Luxemburg
 [3] Biri J., Lukács J., CAMAC perifériarendszer. Müszaki Könyvkiadó, 1976. Budapest
 [4] A CAMAC rendszer (KFKI)
- [5] The TTL data book for design engineers Texas Instruments, 1976.

Lektor: Horkay György

TUDOMÁNYOS ÉS ISMERETTERJESZTŐ ELŐADÁSOK, ISMERETTERJESZTŐ KÖZLEMÉNYEK

ATOMKI, 1979

TUDOMÁNYOS ELŐADÁSOK*

- 1. ANTONY, M.S. KISS Á. KOLTAY E. NYAKÓ B. SZABÓ GY.
- 2. ARANYOSI J. BERECZ I. BOHÁTKA S. LANGER G. SZAMARÁNSZKY J.
- 3. ÁRVAI Z. FÉNYES T. GULYÁS J. *KIBÉDI T.* KRASZNAHORKAY A. LÁSZLÓ S.

4. ARVAI Z. KIBÉDI T. HY3HEЦOB, B.B. FÉNYES T. Систематическое исследование Времени жизни некоторых состояний ядра ¹⁴ N в реакции ¹³С(р, ү)¹⁴ N.

XXIX. Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Рига, 27-30 марта 1979 г.

Anaesthesiológiai kisérletes vizsgálatok egy kifejlesztés alatt álló vérgázelemző tömegspektrométerrel.

A Magyar Anaesthesiológiai és Intenziv Therápiás Társaság Vándorgyülése, Zalaegerszeg, 1979. augusztus 29-31.

In-beam nuclear structure studies in the A \approx 100 region.

Department of Physics, University of Iyväskylä, Finnland, December 7, 1979.

Уливерительный комплекс для исследования короткоживущих ядер с использованием полупроводниковых детекторов и "Мини-апельсина".

Совещание по программе ЯСИАПП-2, Дубна, Октябр 30-Ноябр 1, 1979 г.

*A többszemélyes munkákról szóló előadásokat az tartotta, akinek a neve dőlt betüvel van irva.

5.	BACSÓ J.
6.	BACSÓ J.
7.	<i>BACSÓ J.</i> HORVATH <i>S.</i> SZÜCS M.
8.	BACSÓ J. <i>Horváth S.</i> Szücs M.
9.	BALOGH K.
10.	BERECZ I.

A röntgenemissziós analitikai módszer interdiszciplináris alkalmazásai.

Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Csongrád megyei Csoportja, a MTESZ (Müszaki és Természettudományi Egyesületek Szövetsége) Környezetvédelmi Bizottsága és a Magyar Kémikusok Egyesülete megyei Csoportja rendezésében, Szeged, 1979. február 15.

Röntgen-fluoreszcenciaspektrometria.

"Modern kutatási módszerek alkalmazásának lehetőségei az orvostudományban" c. konferencia sorozat. IX. Konferencia "Spektrometria II." Debreceni Orvostudományi Egyetem, I. sz. Belgyógyászati Klinika, Debrecen, 1979. március 22.

Examination of the risk factory of coronary heart disease and the Cacontent in hair.

3rd European Congress of Nuclear Medicine, Karlovy Vary, May 15-18, 1979.

Hagyományos rizikófaktorok és a haj kalcium tartalmának vizsgálata ischaemiás szivbetegeknél.

Tudományos ülés. A Debreceni Orvostudományi Egyetem és a Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete rendezésében, Debrecen, 1979. november 30.

Calculation of stage boundaries from radiometric data.

VIIth International Congress on Mediterranean Neogene, Athens, September 27- October 2, 1979.

Kvadrupól tömegspektrométer fejlesztése az ATOMKI-ben.

XXII. Magyar Szinképelemző Vándorgyülés, Salgótarján, 1979. január 19-22.

12.	BOHÁTKA S. DIÓS Z. GÁL J. JENEY S. KISS L. LANGER G. PAÁL A. BOHÁTKA S. BERECZ I. LANGER G.	
14.	BERÉNYI D.	
15.	BERÉNYI D.	
16.	BERÉNYI D. <i>Mukoyama, T.</i> Sarkadi L. Koltay E.	
17.	BERÉNYI D.	
18.	BERÉNYI D.	

11. BERECZ I.

Quadrupole mass spectrometers in the ATOMKI.

Hungarian-Austrian Vacuum Conference, Győr, October 22-26, 1979.

Some interesting measurements with quadrupole mass spectrometers. (Poster).

Hungarian-Austrian Vacuum Conference, Győr, October 22-26, 1979.

A felület-vizsgálati módszerek fejlődése és jelenlegi helyzete hazánkban és világviszonylatban.

Disztribuciós Szeminárium, Csepel, 1979. október 18.

A fotoelektron-spektroszkópia alapjai és alkalmazásai.

Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Diffrakciós Szakcsoportjának Őszi Iskolája, Tihany, 1979. október 3.

A fotoelektron-spektroszkópia jelene és fejlődési tendenciái.

A Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékének Szemináriuma, Debrecen, 1979. október 23.

 $K\beta/K\beta$ intensity ratios and energy shifts of $K\beta$ rays produced by N-ion impact.

The VIth International Seminar on Ion-Atom Collisions, Tokai-mura, Ibaraki, Japan, September 6-7, 1979.

Kβ/Kβ ratios in higher energy collision processes.

Institut für Kernphysik der Johann Wolfgang Goethe-Universität, Frankfurt am Main, May 28, 1979.

Korszerü anyagvizsgálati módszerek.

A Magyar Tudományos Akadémia 1979. évi Közgyülése keretében rendezett "Anyagtudomány és gyakorlat" c. ülésszak, Budapest, 1979. május 7.

19.	BERÉNYI D.	Recent results on ion-atom colli- sions in ATOMKI, Debrecen.
		Atominstitut der Österreichischen Universität, Wien, December 11, 1979.
20.	BERÉNYI D.	Результаты и планы в области ионно- атомных столкновений при высоких энергиях в АТОМКІ, Дебрецен.
		A. F. Ioffe Physical-Technical Institute, Leningrad, September 27, 1979.
21.	BÍBOK GY.	Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences - its story, present status and future plans.
		Abo Akademi, Turku, December 20, 1979.
22.	BÍBOK GY.	Nuclear electronic developments in ATOMKI.
		Abo Akademi, Turku, December 20, 1979.
23.	<i>bozóky l.</i> Medveczky l.	Neue Ergebnisse auf dem Gebiet der Radondosimetrie.
		Internationales Symposium der Grundlagen der Radontherapie, Bad Münster am Stein-Ebernburg, May 24-26, 1979.
24.	<i>CSERNY I.</i> Kádár I.	Accuracy of binding energy values measured by an XPS instrument.
		International Conference on Surface Analysis, Karlovy-Vary, June 12-15, 1979.
25.	CSONGOR É.	Determination of the Kr-85 con- tamination of the atmosphere.
		Seminarios sobre proteccion contra las radiaciones. (Cuba) Havana, April 23-27, 1979.
26.	CSONGOR E. BORSY Z. SZABÓ I.	Ages of charcoal samples of geomorphological interest in North-East Hungary. (Poster).
		Xth International Radiocarbon Conference, Bern-Heidelberg, August 19-26, 1979.

- 27. DOMBRÁDI ZS. GULYÁS J. KOLTAY E. KRASZNAHORKAY A. FÉNYES T.
- 28. DOMBRÁDI ZS. GULYÁS J. KRASZNAHORKAY A. FÉNYES T.

29. FÉNYES T.

30. FÉNYES T.

31. FÉNYES T.

32. FÉNYES T.

33. FÉNYES T.

Исследование ү-лучей реакции ⁹⁴Zr(p,nү)⁹⁴Nb.

XXIX. Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Рига, 27-30 марта 1979 г. (Тезисы докладов, стр. 578)

Гамма-лучи из реакции ⁹⁶Zr(p,nү)⁹⁶Nb.

XXIX. Совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Рига, 27-30 марта, 1979 г. (Тезисы докладов, стр. 579).

An on-line Si(Li) electron spectrometer with superconducting magnet transporters.

Department of Physics and Astronomy, University of Kentucky, Lexington, October 23, 1979.

In-beam nuclear structure studies in the A~100 region.

International Symposium "Future Directions in Studies of Nuclei far from Stability", Nashville, Tennessee, September 10-13, 1979.

Nuclear Structure studies in the $A\sim 100$ region.

Department of Physics and Astronomy, University of Kentucky, Lexington, October 2, 1979.

Nuclear structure studies in the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna.

Department of Physics and Astronomy, University of Kentucky, Lexington, October 15, 1979.

Nuclear structure studies in the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna.

46th Meeting of the South-eastern Section of the American Physical Society, Chattanooga, November 8-10, 1979. 34. FÉNYES T.

- 35. FREYER, K. TREUTLER, H. Ch. SOMOGYI, G. (GY.) VARGA ZS.
- 36. *GÖDÉNY S.* SZABÓ GY. *KISS I.* KOLTAY E.
- 37. GROENEVELD, K.O. SCHUMANN, S. SZABÓ GY.
- 38. GYARMATI B.

- 39. HÁMOR G. RAVASZ-BARANYAI L. BALOGH K. ÁRVA-SÓS E.
- 40. *HAMOR G*. RAVASZNÉ BARANYAI L. BALOGH K. ARVÁNÉ SOÓS E.

Проблемы исследования структуры атомного ядра в ОИЯИ (Объединенный институт ядерных исследований).

XXVIII. Сессия ученого совета по физике Низких Энергий ОИЯИ, Дубна, 29 мая, 1979 г.

Boron determination using PC nuclear track detector and Cf-252 source.

XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.

A nyomelem vizsgálatok jelentősége a szülészetben. A protongerjesztéses röntgenanalitika (PIXE) lehetőségei.

DOTE (Debreceni Orvostudományi Egyetem) - ATOMKI (Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete), Tudományos ülés, Debrecen, 1979. november 30.

Heavy ion induced secondary electron emission.

VIIIth International Conference on Atomic Collisions in Solids, Hamilton, Canada, August 13-17, 1979.

A sok-részecske szórás kvantumelméletétől a transzferegyenletekig.

Szeminárium. Magyar Tudományos Akadémia Központi Fizikai Kutató Intézete - Részecske és Magfizikai Kutató Intézet, Budapest, 1979. május 4.

K/Ar dating of Miocene pyroclastic rocks in Hungary.

VIIth International Congress on Mediterranean Neogene, Athens, September 27 - October 2, 1979.

A magyarországi miocén riolittufaszintek radiometrikus kora.

Magyarhoni Földtani Társulat Őslénytan-Rétegtani Szakosztály előadóülése, Budapest, 1979. február 14. 41. HOCK G.

42. HOCK G.

43. KÁDÁR I.

44. KÁDÁR I.

45. KADAR I.

46. KISS A.

47. *KIS-VARGA M.* BACSÓ J. KALINKA G. KOVÁCS P. Critical analysis of the Kolbenstvedt approximation.

Institut for Chemical Research, Kyoto University, Kyoto, September 3, 1979.

On Coulomb distortion effects in K-shell ionization by electrons and positrons. (Poster).

XIth International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Kyoto, August 29 -September 4, 1979.

Az ATOMKI ESA-ll spektrométerének mérőrendszere és kalibrálása.

Szeminárium a fotoelektron spektroszkópia (ESCA) helyzetéről és alkalmazási lehetőségeiről, Tahi, 1979. április 9-10.

Bevezető.

Szeminárium a fotoelektron spektroszkópia (ESCA) helyzetéről és alkalmazási lehetőségeiről, Tahi, 1979. április 9-10.

Investigations in the field of atomic physics and related instrumentation in ATOMKI, Debrecen.

Hahn-Meitner Institut, Bereich Kernund Strahlenphysik, Seminar, Berlin(West), June 28, 1979.

Doppler-effektus a magfizikában. (Magnivók élettartamának mérése.)

Az ELFT (Eötvös Loránd Fizikai Társulat) ujjá alakulásának 30. évfordulóját, valamint az ELFT Borsod megyei csoportja megalakulásának 25. évfordulóját ünneplő jubileumi Vándorgyülés, Miskolc, 1979. augusztus 30. - szeptember 1.

Soil-5 nemzetközi talajstandard összetételének meghatározása REA módszerrel standardizálás céljából.

A Magyar Kémikusok Egyesületének Érc- és Kőzetanalitikai Szakcsoportja által rendezett vitaülés, Debrecen, 1979. április 19-20. 48. *KIS-VARGA M*. BACSÓ J. KALINKA G. KOVÁCS P. MÓRIK GY.

49. KOLTAY E.

- 50. KOVÁCH Á. SUDÁRNÉ SVINGOR É.
- 51. KOVÁCS P. SZÉKYNÉ FUX V. BACSÓ J.

52. KÖVÉR L.

53. *LANGER G.* BERECZ I. BOHÁTKA S. XRFA-5 izotópos sárgarézelemző készülék. (Poster).

X. Kohászati Anyagvizsgáló Napok, Balatonaliga, 1979. május 2-6.

Fejlődési irányok a kisérleti magfizikában.

A Magyar Tudományos Akadémia Matematikai és Fizikai Tudományok Osztályának 1979. évi közgyülése keretében tartott tudományos ülés, Budapest, 1979. május 8.

A fertőrákosi palarög metamorf korviszonyai Rb-Sr kormeghatározások tükrében.

A Magyarhoni Földtani Társulat Ásványtan-Geokémiai Szakcsoportjának előadóülése, Budapest, 1979. december 10.

Telkibánya 2. szerkezetkutató furás furómagjának összetételére vonatkozó vizsgálat REA módszerrel, Cn, Zu, Pb,valamint Cd, In és Ag elemekre.

A Magyar Kémikusok Egyesülete Analitikai Szakosztályának Érc- és Kőzetanalitikai Szakcsoportja, a Magyar Kémikusok Egyesületének Debreceni Csoportja és a Kossuth Lajos Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének vitaülése, Debrecen, 1979. április 19-20.

ESCA-alkalmazások az ATOMKI-ben.

Szeminárium a fotoelektron spektroszkópia (ESCA) helyzetéről és alkalmazási lehetőségeiről, Tahi, 1979. április 9-10.

The design of medical gass analysers. (Poster).

Hungarian-Austrian Vacuum Conference, Győr, October 22-26, 1979.

54.	<i>LANGER G.</i> BOHÁTKA S. BERECZ I.	In vivo kisérletek testnedvekben ol- dott gázok meghatározására. Tudományos ülés A Debreceni Orvos-
	ARANYOSI J.	tudományi Egyetem és a Magyar Tudo- mányos Akadémia Atommagkutató In- tézete rendezésében, Debrecen, 1979. november 30.
55.	LOVAS R.	Charge-exchange effects in nuclear reactions.
		Science Research Council, Daresbury Laboratory, Theory Group Seminars, Daresbury, January 18, 1979.
56.	LOVAS R.	Charge-exchange (p,n) reactions.
		Nuclear Physics Laboratory, University of Oxford, Informal Seminars, Oxford, March 23, 1979.
57.	MAHUNKA I.	Az U-103 ciklotron ipari-mezőgaz- dasági alkalmazási lehetőségeinek áttekintése.
		Az Országos Atomenergia Bizottság és a Magyar Tudományos Akadémia Magfizikai Albizottsága müszaki- tudományos tanácskozása "Gyorsitók népgazdasági alkalmazása" cimmel, Debrecen, 1979. november 23.
58.	MEDVECZKY L.	Comparison of the neutron sensitivity of SSNTDs.
		Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.
59.	MEDVECZKY L.	A munkahelyi és baleseti neutron- dozimetria.
		"Az atomerőmü dolgozóinak és kör- nyezetének sugárvédelme" c. tan- folyam, felkért hozzászólás, Tengelic, 1979. április 23-27.
60.	MEDVECZKY L.	A neutrondozimetria aktuális kér- dései.
		Magyar Tudományos Akadémia Atommag-

kutató Intézete, honvédségi látogatók részére, Debrecen, 1979. február 13. 61. MEDVECZKY L.

A személyi neutrondozimetria módszerei.

Sugárvédelmi Továbbképző Tanfolyam. Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat Sugárvédelmi Szakcsoportja rendezésében, Kecskemét, 1979. március 28-30.

62. MEDVECZKY L.

- 63. *MEDVECZKY L*. BORNEMISZA- PAUSPERTL P.
- 64. MEDVECZKY L. BOZÓKY L.
- 65. MEDVECZKY L. BOZÓKY L.
- 66. MONNIN, M. GOURCY, J. SOMOGYI, G. (GY). TOTH-SZILAGYI M.
- 67. *MUKOYAMA, T.* SARKADI L.

Szilárdtest nyomdetektorok dozimetriai alkalmazása.

A Budapesti Müszaki Egyetem Továbbképző Intézete által szervezett R.48. sz. "Atomerőmüvi sugárvédelmi iskola" elnevezésü tanfolyam, Budapest, 1979. október 30.

Target spot localization at neutron producing accelerators.

XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.

Autoradiography of medical Ra preparations.

XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.

Leakage testing of medical radium sources.

Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.

Non-etching track visualization: development of the method.

Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.

Electronic relativistic effects in L-shell ionization by chargedparticle impact.

XIth International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC-XI), Kyoto, Augustus 29 - September 4, 1979.

68.	<i>RAKOVITS Z. BALOGH K.</i> SZASZIN, G.G.	Az alunitosodás korviszonyainak K/Ar vizsgálata Szovjet-Kárpát- alján.
		A Magyarhoni Földtani Társulat Ásványtan-Geokémia Szakosztályának előadóülése, Budapest, 1979. októ- ber 8.
		<i>,</i>
69.	SÁMSONI Z. <i>pintér g</i> .	Feszültség-frekvencia konverzión alapuló integrátor atomabszorpciós spektrofotométerhez.
		XXII. Magyar Szinképelemző Vándor- gyülés, Salgótarján, 1979. junius 19-22.
70.	SÁMSONI Z. PINTÉR G.	Integrator für Atom-Absorptions Spektrometer analogischer Signalisierung.
		Symposium on the Analytical Geochemical Methods for Investiga- tion of Geological Materials, Tatranska Lomnica, October 29 - November 2, 1979.
_		
71.	SCHLENK B.	Research work in ATOMKI, Debrecen.
		Michigan State University, East Lansing, November 14, 1979.
72.	SOMOGYI G. (GY.)	Development of etched particle tracks: I. Theoretical treatment.
		"Development and Application of the Solid Track Detectors". Inter- national Spring School. Institute of Nuclear Science and Technology, Islamabad, (Pakistan), March 2-16, 1979.
73.	SOMOGYI, G. (GY.)	Development of etched particle tracks II. Selected theoretical and practical questions.
		"Development and Application of the

Solid Track Detectors". International Spring School. Institute of Nuclear Science and Technology, Islamabad, (Pakistan), March 2-16, 1979.

74. SOMOGYI, G.	(<i>GY</i> .)	Development of track techniques.
		Josef Stefan Institut, Ljubljana, May 23-29, 1979.
75. SOMOGYI, G.	(GY.)	Results and problems related to polymeric nuclear track detectors.
		Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.
76. SOMOGYI, G. Almási gy.	(GY.)	Etch-pit formation in thin foils and a conductometric study of the hole parameters.
		Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.
77. <i>somogyi, g.</i> DAjkó g.	(GY.)	Amplification of radiograms by electrochemical track etching technique.
		XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.
78. SOMOGYI, G. DAJKÓ G.	(GY.)	A proposal for spark counting at high track densities.
		Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.
79. SOMOGYI, G. DAJKÓ G. TUREK, K.	(GY.)	On background and recoil tracks in electrochemically etched PC and PET detectors.
SPURNY, F.		Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.
80. SOMOGYI, G. HUNYADI I.	(GY.)	Etching properties of the CR-39 polymeric nuclear track detector.
		Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.
81. <i>SOMOGYI, G.</i> HUNYADI I. VARRÓ T.	(GY.)	Light and heavy-ion radiography using CR-39 homopolymer as track detector.
		XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.

- 82. *SOMOGYI*, *G*. (*GY*.) TÓTH-SZILÁGYI M.
- 83. SOMOGYI, G. (GY.) TÓTH-SZILÁGYI M. MONNIN, M. GOURCY, J.
- 84. SOMORJAI E.

85. SZABÓ GY. GROENEVELD, K.O. *SCHUMANN, S.*

86. SZÉKELY G.

87. SZÉKELY G.

Development of a new track visualization: The dyeing method.

XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.

Non-etching track visualization: some recent results.

Xth International Conference on Solid State Nuclear Track Detectors, Lyon, July 2-7, 1979.

Nuclear physics around the Van de Graaff accelerator and other scientific activities at the Institute of Nuclear Research in Debrecen.

Department of Experimental Nuclear Physics, University of Warsaw, Warsaw, December 7,1979.

Heavy ion induced secondary electron emission.

VIIIth International Conference on Atomic Collision in Solids, Hamilton, Canada, August 13-17, 1979.

A PDP-11/40 számitógép alkalmazási területei az ATOMKI-ben, tapasztalatok az RSX rendszerrel.

A NJSzT (Neumann János Számitógéptudományi Társaság) HLUG (Hungarian Local User Groups) csoportjának rendezésében, Budapest, 1979, november 30.

Többfelhasználós, interaktiv operációs rendszer a PDP-11/40 számitógépen.

A NJSZT (Neumann János Számitógéptudományi Társaság) rendezésében, MTESZ (Müszaki és Természettudományi Egyesületek Szövetsége) Székház, Debrecen, 1979. október 31.

88.	VALEK A.	A Debrecenben létesülő ciklotron laboratórium.
		Az Országos Atomenergia Bizottság és a Magyar Tudományos Akadémia Magfizikai Albizottsága müszaki- tudományos tanácskozása "Gyorsitók népgazdasági alkalmazása" cimmel, Debrecen, 1979. november 23.
89.	VARGA D.	Az ATOMKI-ben épitett elektron- spektrométerek.
		Szeminárium a fotoelektron spekt- roszkópia (ESCA) helyzetéről és al- kalmazási lehetőségeiről, Tahi, 1979. április 9-10.
90.	VARGA D. KADAR I. KÖVÉR Á.	Electrostatic electron spectrometers developed at the Institut of Nuclear Research in Debrecen.
	KOVER L. MÓRIK GY. CSERNY I.	International Working Seminar on Low Energy Electron Spectroscopy. Nuclear Physics Institut of Czechoslovakian Academy of Sciences, Řež/Prague, December 5-6, 1979.
91.	<i>VARRÓ T.</i> SOMOGYI, G. (GY.) VARGA ZS. MÁDI I.	Quantitative mikroautoradiographische Untersuchungen der Ionentransport- vorgänge in einem Photopapier. XIth International Symposium of Autoradiography, Kolobrzeg, October 1-6, 1979.
92.	VATAI E.	Новые результаты по теории внутрен- ней конверсии и по применению ядер- ных методов в медицине. Československá Akademie Věd Ústav Jaderného Výzkumu, Řež, June 6, 1979.
93.	VATAI E. KADAR I. CSERNY I. BOLYKI L.	Hordozható REA müszer acélok válo- gatására Cu, Ni, Mn, Cr, Ti és Pb tartalmuk alapján. X. Kohászati Anyagvizsgáló Napok, Balatonaliga, 1979. május 2-6.
94.	<i>VATAI E.</i> SZABÓ GY.	Роль обменной коррекции в процессе внутренней конверсии.
		XXIX. Совещания по ядерной спектро- скопии и структуре ядра, Рига, 27-30 марта 1979 г.

234

95. *VATAI E. SZABÓ T.* NAGY GY.

96. VINCZE J.

SOMOGYI GY.

A röntgenfluoreszcencia-analizis alkalmazhatósága a pajzsmirigy diagnosztikában és az ATOMKI-ban elért eredmények.

Tudományos ülés. A Debreceni Orvostudományi Egyetem és a Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete rendezésében, Debrecen, 1979. november 30.

Nyomdetektoros radiográfiás módszer a geokémiai kutatásban.

"Korszerü ásványtani-geokémiai anyagvizsgáló módszerek" c. ankét, Veszprém, 1979. október 26-27.

ISMERETTERJESZTŐ ÉS EGYÉB ELŐADÁSOK

97. BACSÓ J.

Röntgensugarak uj szerepkörben – . REA (hajszálanalizis, nyersanyagkutatás, ötvözetek vizsgálata).

"Őszi fizikusnapok". A Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ, az ATOMKI (Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete) és a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) rendezésében, Debrecen, 1979. november 15.

A hajanalitika egészségügyi vonatkozásai. (Poster.)

"Ószi fizikusnapok". A Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ, az ATOMKI (Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete) és a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) rendezésében, Debrecen, 1979. november 12.

Az atomenergia jelene és jövője.

Az ELFT (Eötvös Loránd Fizikai Társulat) Egri Csoportja és a TIT (Tudományos Imseretterjesztő Társulat) közös szervezésében, Eger, Technika háza, 1979. december 18.

98. BACSÓ J. KOVÁCS P. HORVÁTH S. SZÜCS M.

99. BERÉNYI D.

100. BERÉNYI D. Einstein és a modern fizika. Megemlékezés Einstein születésének 100. évfordulójáról. Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ, Debrecen, 1979. március 5. 101. BERÉNYI D. Energiatermelés és környezetvédelem. A DAB (Debreceni Akadémiai Bizottság) Matematikai, Fizikai Szakbizottsága és a Magyar Elektrotechnikai Egyesület Szolnok Megyei Csoportjának közös rendezésében, Szolnok, 1979. november 27. Fizika és korszerű műveltség. 102. BERÉNYI D. Előadói konferencia a nyiregyházi Bessenyei György Értelmiségi Klubban, 1979. április 25. 103. BERÉNYI D. A fizika és a természettudományok szerepe a mai ember müveltségében. "Őszi fizikusnapok". A Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ az ATOMKI (Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete) és a TIT (Tudomá-nyos Ismeretterjesztő Társulat) rendezésében, Debrecen, 1979. november 12. 104. BERÉNYI D. A fotoelektron-spektroszkópia (ESCA) a modern kémiai vizsgáló módszerek között. A Magyar Kémikusok Egyesülete EGYT (Egyesült Gyógyszer és Tápszergyár) Gyógyszervegyészeti Gyári csoportjában, Budapest, 1979. december 3. 105. BERÉNYI D. Korreferátum az "Atomenergetika és környezetvédelem" cimü témához a Magyar-Szovjet-Tudományos és Müszaki Együttmüködés 30. évfordulója alkalmából rendezett Atomenergetikai Tudományos Ülésszakon, Debrecen, 1979. október 2. 106. BERÉNYI D. Megnyitó. Az Országos Atomenergia Bizottság és a Magyar Tudományos Akadémia Magfizikai Albizottsága müszaki-tudományos tanácskozása "Gyorsitók népgazdasági alkalmazása" cimmel,

Debrecen, 1979. november 23.

Atomerőmüvek környezetében fellépő 107. CSONGOR É. radiokarbon szennyezés. "A primerköri hőhordozó analitikája" c. megbeszélés, a Magyar Villamos Müvek szervezésében, Budapest, 1979. december 19. 108. DIÓS Z. Az lxl-től a kalkulátorokig. Logikai áramkörök és alkalmazásaik. "Az elektronika világa" c. előadássorozat, a TIT (Tudományos Imseretterjesztő Társulat) Hajdu-Bihar megyei Bizottsága és a Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ rendezésében, Debrecen, 1979. április 25. Számitógépek felépitése és alkal-109. HORKAY GY. mazása. "Az elektronika világa" c. előadássorozat, a TIT Tudományos Ismeretterjesztő Társulat Hajdu-Bihar megyei Bizottsága és a Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ rendezésében, Debrecen, 1979. május 2. Képek a debreceni fizika multjából 110. KOLTAY E. és jelenéből. Megnyitó előadás. "Őszi fizikusnapok". A Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ, az ATOMKI (Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete) és a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) rendezésében, Debrecen, 1979. november 12. 111. KOVÁCH Á. Korreferátum. Országos Béketanács debreceni Tudo-

május 28.

112. LAKATOS T.

Elektronika a tudományban és a mindennapi életben.

mányos Fóruma, Debrecen, 1979.

"Az elektronika világa" c. előadássorozat, a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) Hajdu-Bihar megyei Bizottsága és a Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ rendezésében, Debrecen, 1979. április 18. 113. LOVAS R.

114. MATHÉ GY.

115. MOLNÁR J.

116. SULIK B.

117. SZALAY S.

118. SZALAY S.

Okság és véletlen a természetben.

A TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) rendezésében, József Attila Gimnázium, Polgár, 1979. november 21.

Az elektroncsőtől az integrált áramkörig. Az elektronika kialakulása, fejlődése.

"Az elektronika világa" c. előadássorozat, a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) Hajdu-Bihar megyei Bizottsága és a Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ rendezésében, Debrecen, 1979. március 28.

Uj utak a hangtechnikában, hirközlésben. Szórakoztató elektronika.

"Az elektronika világa" c. előadássorozat a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) Hajdu-Bihar megyei Bizottsága és a Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ rendezésében, Debrecen, 1979. április 11.

Kibernetika. Az ember és a gép.

"Az elektronika világa" c. előadássorozat, a TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) Hajdu-Bihar megyei Bizottsága és a Kölcsey Ferenc Müvelődési Központ rendezésében, Debrecen, 1979. május 9.

Életszinvonal és energiatermelés, jövőnk és az atomenergia.

A TIT (Tudományos Ismeretterjesztő Társulat) rendezésében, Hajduszoboszló, 1979. március 1.

Mikroelemek szerepe a növény és állatvilágban, jelentősége a mezőgazdasági termelésben.

Müvelődési Ház, Sárospatak, 1979. febru**ár** 8.

ISMERETTERJESZTŐ ÉS EGYÉB KÖZLEMÉNYEK

119. BERÉNYI D.

A ciklotron szimpozium (Debrecen, 1975. augusztus 25-27) és a magyar ciklotron beruházás. A Magyar Biofizikai Társaság Értesitője, 6 (1978) 74-75. 120. BERÉNYI D. Elektronspektroszkópia az alapkutatásban és a gyakorlatban. Fizikai Szemle, 29 (1979) 174-178. 121. BERÉNYI D. Energiaforrások ma és holnap. Népszabadság, 37 (1979) 3. nov. 17. 122. BERÉNYI D. A fizika mai életünkben és kulturánkban. Hajdu-Bihari NAPLÓ, 36 (1979) 5. nov. 10. 123. BERÉNYI D. "Inelastic electron tunneling spectroscopy. Proceedings of the International Conference and Symposium on Electron Tunneling. University of Missouri-Columbia, USA, May 25-27, 1977. Berlin-Heidelberg-New York, 1978, Springer Verl." Könyvismertetés. Magyar Fizikai Folyóirat, 27 (1979) 70. 124. BERÉNYI D. "Inelastic electron tunneling spectroscopy. Proceedings of the International Conference and Symposium on Electron Tunneling. University of Missouri-Columbia, USA, May 25-27, 1977. Berlin, Heidelberg, New York, 1978, Springer-Verl." Recension. Acta Physica Academiae Scientiarum Hungaricae, 46 (1979) 54.

125. BERÉNYI D.	Megnyitó.
	"Felkészülés a debreceni U-103 ciklotron orvosi célu alkalmazásá- ra". A Magyar Tudományos Akadémia Atommagkutató Intézete és a Debre- ceni Orvostudományi Egyetem közös Tudományos Ülése, Debrecen, 1978. november 28."
	ATOMKI Közlemények, 21 (1979) 50-51.
126. BERÉNYI D.	Mit jelent a tudomány és a gyakor- lat igényei szempontjából a debre- ceni ciklotron?
	Magyar Tudomány, 24 (1979) 332-336.
127. BERÉNYI D.	Prof. Sándor-Szalay 70 years old.
	Acta Physica Academiae Scientiarum Hungaricae, 45 (1978) 283-284.
128. BERÉNYI D.	Szocialista együttmüködés.
	KFKI Hiradó, 23 (1979) 7-8. 9.sz.
129. BERÉNYI D.	Természet- és müszaki tudományok a közmüvelődésben.
	Fórum, 3 (1979) 7. 2.szám.
130. BERÉNYI D.	Válságban az egyetem?
	Magyar Tudomány, 24 (1979) 667-668.
131. KOVÁCH Á.	A fizika helye és szerepe a kör- nyezetvédelemben.
	Magyar Tudomány, 86 (1979) 161.
132. LOVAS R.	A nukleon optikai modelljének meg- alapozása. Eredmények rovat.
	Fizikai Szemle, 29 (1979) 9.szám (hátsó boritólapon).
133. SULIK B.	Uj áramerősitő eszköz a szupra- vezető tranzisztor. Eredmények rovat.
	Fizikai Szemle, 28 (1978) 391.
134. TÖRÖK I.	A ciklotron fogadását előkészitő kutatások az ATOMKI neutrongenerá- torán.
	Hajdu-Bihari NAPL6, 36 (1979) 3. jan. 9.
	Összeállitotta: Darin Sándorné

Az ATOMKI Közlemények negyedévenként jelenik meg. Terjeszti az ATOMKI Könyvtára (Debrecen, Postafiók 51, 4001). Tudományos intézetek és könyvtárak kiadványaikért cserébe vagy ellenszolgáltatás nélkül is megrendelhetik. Kérésre egy-egy számot vagy különlenyomatot magánszemélyek is ingyen kaphatnak.

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 az ATOMKI nyomdájában

Törzsszám: 11320 Debrecen,1980/szeptember Példányszám: 440

27


ATONKI cooemehna

TOM 22 / № 3

СОДЕРЖАНИЕ

научные сообщения

HAJ	ИНЫЕ СООБЩЕНИЯ	113
И.	Терек: Генерация нейтронов с помощью малогаба- ритного циклотрона и некоторые возможные ис- пользования генерированных нейтронов	113
H.	Сайлер, В. Н. Тартаковский: Описание процесса ¹² С(р,2р) ¹¹ В при средних энергиях падающих протонов	131
в.	А. Наминьски: Нулоновские энергии в новой нвазичастичной схеме и их примеры в оболочке 1 _{7∕2}	141
э.	Нольтаи, Дь. Морик, Дь. Сабо: Описание плана ускорительной трубки и системы транспортировки сильноточного нейтронного генератора	155
А. К.	Йамбор, З. Партени, Л. Равас-Баранаи, Г. Шольти, Балог: Определение абсолютного возраста калий- аргоновым методом базальтовых пород Задунайского края	173
Β.	Секи-Фукс, Н. Балог, Ш. Сакал: Возраст и время среднего и основного вулканизма Токайских гор в свете исследований калий-аргоновым методом	191
ПО	МАСТЕРСКИМ И ЛАБОРАТОРИЯМ	203
ж.	Домбради: Программа для построения схемы уровней	203
Й.	Мольнар: Периферийные блоки в стандарте НАМАН, СЧЕТЧИН-ТАЙМЕР "САМ 2.04-81"	211
	ИЧНЫЕ И НАУЧНО-ПОПУЛЯРНЫЕ ДОКЛАДЫ И НАУЧНО- ЛУЛЯРНЫЕ СООБЩЕНИЯ, АТОМКІ, 1979	221

стр.

ATOMKI BULLETIN

Volume 22/ Number 3

CONTENTS

SCIENTIFIC PAPERS

	113
I. Török: Neutron production by compact cyclotrons and some possible applications of the produced neutrons	113
K. Sailer, V. K. Tartakovsky: Description of the ¹² C(p,2p) ¹¹ B reaction at medium energies of incident protons	131
W. A. Kamiński: Coulomb energies in the new quasi-particle scheme with examples for the f_{γ_2} shell	141
E. Koltay, Gy. Mórik, Gy. Szabó: Design study on the acceleration tube and beam transport system of a high current neutron generator	155
 A. Jámbor, Z. Partényi, L. Ravasz-Baranyai, G. Solti, K. Balogh: K/Ar dating of basaltic rocks in Transdanubia, Hungary 	173
V. Széky-Fux, K. Balogh, S. Szakál: The age and duration of the intermediate and basic volcanism in the Tokaj mountains, north-east Hungary, with respect to K(An datings)	101
hungary, with respect to KAR datings	191
FROM OUR WORKSHOP AND LABORATORY	203
Zs. Dombrádi: Programme for the construction of level schemes	203
J. Molndr: CAMAC REAL-TIME peripherials. CAM 2.04-81 SCALER-TIMER module	211
SCIENTIFIC AND POPULAR LECTURES AND POPULAR PUBLICATIONS, ATOMKI, 1979	221

Page

810565

御

ATO MKI KÖZLEMÉNYEK

22. kötet / 4. szám



MTA ATOMMAGKUTATÓ INTÉZETE, DEBRECEN / 1980

9

ATOMKI Közlemények

22. kötet /4. szám

TARTALOMJEGYZÉK

TUDOMANYOS KOZLEMENYEK	243
V. I. Nyefedov: A felületösszetétel fotoelektron- spektroszkópiai analizisének fizikai alapjai	243
Kruppa A.: A PSE módszer alkalmazása a ²⁵ Mg részecske- rotor modelljében	267
Juhász K., Németh G.: A PADÉ-féle közelités és általá- nositásai	281
Török I., Uray I., Bornemisza-Pauspertl P., Kovács P.: Koincidencia információ egyetlen Ge(Li) detektorral felvett spektrum összeg-csucsainak vizsgálatából	301
Kiss I., Koltay E., Szabó Gy., Mészáros Á., László S., Gődény S.: Protonok által keltett röntgen-sugárzás, mint biológiai és atmoszférikus minták analizisének eszköze	321
Bacsó J., Dániel J., Kalinka G.: K/Ca arány vizsgálata egészséges és peronoszpórás dohánylevelekben	335
MŰHELYÜNKBŐL, LABORATÓRIUMUNKBÓL	
Szőkely G., Asztalos Gy.: A CDC UT200 termináljának használata PDP-ll gépről RSX-llM operációs rend- szerben	339
Illés G., Székely G.: Tapasztalatok y és x irányban is sulyozott legkisebb négyzetes módszerekkel	345
Gáspár A.: Elektronikus programok PDP-11/40 számitó- gépre	353
Bibok G., Cál J.: Állandó arányu időzitő egység CAMAC mechanikában	365

Molnár J., Paál A., Sepsy K.: Mikroprocesszoros rendszer folyamatirányítási, adatgyűjtési és feldolgozási feladatokhoz

369

539

HU ISSN 0004-7155

TUDOMÁNYOS KÖZLEMÉNYEK

ATOMKI Közlemények 22 (1980) 243-266

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РЕНТГЕНОЭЛЕКТРОННОГО АНАЛИЗА СОСТАВА ПОВЕРХНОСТИ*

В. И. Нефедов

Институт общей и неорганической химии АН СССР, Москва

В обзоре изложены физические основы количественного рентгеноэлектронного анализа состова поверхности твердых тел. Выведены основные формулы интенсивности рентгеноэлектронных спектров различных образцов и отмечены ограничения при практическом применении этих формул в связи с шероховатостью поверхности и наличием упругого рассеяния фотоэлектронов в образце. Приведены сводки экспериментальных относительных интенсивностей линий, теоретические значения сечений фотоионизации и формулы для расчета длин свободного пробега фотоэлектрона. Рассмотрены вопросы проведения послойного анализа с помощью ионного травления и влияние характера измененного слоя образца, полученного в результате травления, на рентгеноэлектронный анализ поверхности.

1. Введение

В настоящее время рентгеноэлектронная спектроскопия широко применяется для анализа количественного состава и определения характера химических соединений поверхности твердых тел.Рентгеноэлектронные спектры позволяют определить такие важные характеристики как наличие определенных функциональных групп, степень окисления, характер валентных уровней. Рентгеноэлектронные спектры несут информацию о 10-20 А верхнего поверхностного слоя, а при использовании угловой зависимости интенсивности или ионного травления можно определить изменения распределения концентрации исследуемых элементов по глубине образца на несколько тысяч ангстрем. Рентгеноэлектронная спектроскопия является универсальным методом - можно исследовать все элементы, начиная с лития, проводники и изоляторы, неорганические и органические соединения, охлаждать и нагревать образец.

*Дрклад, прочитанный на ЭСХА-семинаре социалистических стран (Дебрецен, 15-18 апреля 1980 г.)

Чувствительность составляет в среднем доли монослоя.

Эти достоинства метода превратили рентгеноэлектронную спектроскопию в один из важнейших методов при изучении катализаторов, адсорбции, коррозии, сегрегации, флотации, реакций газов и жидностей с поверхностью твердых тел, например, окисление металлов в полупроводников. Общее представление об основах метода, областях применения и аппаратуре можно получить на основе монографий [1-10]. В настоящем обзоре мы остановимся только на проведении рентгероэлектронного количественного анализа поверхности.

В обзоре рассмотрены зависимость интенсивности рентгеноэлектронных линий от различных факторов, методика проведения анализа поверхности и послойный анализ по глубине образца. В первую очередь, рассматриваются физические основы анализа, а конкретные примеры служат только для иллюстрации общих положений.

2. Интенсивность рентгероэлектронных линий

Зависимость интенсивности рентгеноэлектронных линий от различных факторов рассматривалась в работах [11-13]. Интенсивности 1 удобно представить как произведение трех факторов аппаратурного А, процесса фотоионизации В и характеристик образца С.

$$I = A B C \tag{1}$$

Аппаратурный фактор. Интенсивность рентгеновского излучения в слое dz на глубине z (рис. 1) определяется формулой

$$I_{z} = I_{o} \exp(-z/\lambda_{x} \sin \phi^{*}) \simeq I_{o}$$
(2)



Рис. 1. Счема рентгероэлектронного спектрометра и принятые обозначения. где λ_X -линейный коэффициент поглощения рентгеновских лучей. Поскольку λ_X >> λ , где λ -длина свободного пробега фотоэлектрона в твердом теле, а глубина z выхода фотоэлектронов на поверхность порядка λ , то величина z/λ_X мала и справедливо второе равенство в (2). Отметим, что плотность излучения на единицу поверхности образца при фиксированном I₀ пропорциональна sinф', однако путь рентгеновского излучения в слое dz обратно пропорционалем sinф', поэтому вероятность фотоионизации не зависит от угла ф'. Исключение составляет лишь область предельно малых значений ф'≲ I⁰, при которых эффекты рефракции и отражения могут увеличить относительную интенсивность рентгеновского потока в самой верхней поверхностной пленке [12,14].

Эффективная площадь образца S определяется несколькими факторами: углом α, площадью входной щели анализатора A_O и рентгеновского пятна S_O. Если величина S_O не является лимитирующим фактором, то

$$S=A_o/sin\alpha$$
; $\alpha > \alpha_{min}$
 $S=A_o/sin\alpha_{min}$; $\alpha < \alpha_{min}$ (3)

где α_{min} -тот наименьший угол, при котором щель спектрометра еще "закрыта" полностью образцом.

Если лимитирующим фактором является площадь рентгеновского пятна, то

$$S=S_/sin\phi'$$
 (4)

Пропускная способность спектрометра Т пропорциональна телесному углу Ω_O и в зависимости от характера анализатора прямо или обратнопропорциональна Е_{кин}

$$T \sim \Omega = E_{HHH} T \sim \Omega / E_{HHH}$$
 (5)

где Е_{кин} - кинетическая энергия фотоэлектрона. Таким образом, обычно имеем

$$A = I_{O}(A_{O}/sin\alpha)[\Omega_{O}f(E_{HHH})] F(E_{HHH})$$
(6)

где F(E_{КИН}) - эффективность детектора электронов. Отметим, что зависимость A от а получена при некоторых упрощающих предположениях*. Более детальный анализ [15] показывает, что эти упрощения не влияют на относительные интенсивности линий, которые используются для анализа.

Сечения фотоионизации. Вероятность фотоионизации электронного уровня изучаемого атома описывается сечением фотоионизации. Полное сечение σnl фотоионизации атомной оболочки nl в случае неполяризованного излучения имеет вид

*Использовано, например, равенство (3), предполагающее равномерное рентгеновское облучение площади всего образца при любых значениях «.

$$\sigma_{nl}^{*}(4\pi\alpha a_{o}^{2}/3h\nu)[lR_{l-1}^{2}+(l+1)R_{l+1}^{2}]$$
(7)

где а_о - радиус Бора, α -лостоянная тонкой структури.

$$R_{l\pm1} = \int R_{nl}(r) r R_{l\pm1}(r) r^2 dr,$$

R_{n±l}(r) – радиальная часть волновой функции электронного уровня, а Rl±1(r) – функция фотоэлектрона с энергией Е_{кин}=hv-E_{св}(nl). Обычно Rl±1>>Rl-1 ·

Дифференциальное сечение равно

$$d\sigma_{nl}/d\Omega = (\sigma_{nl}/4\pi) [1 - \frac{1}{2}\beta(\frac{3}{2}\sin\theta - 1)]$$
(8)

где в угол между направлением фотона hv и фотоэлектрона, а β параметр ассиметрии, являющийся функцией $R_{l\pm1}$ и фаз $\delta_{l\pm1}$, характеризующих осциллирующий характер $R_{l\pm1}(r)$ Величина β = 2 для l=0 и $-I \leq \beta \leq 2$ для других l. При β =2 величина σ_{nl} имеет максимум при θ =90° и равна нулю при θ =0 и 180°. При β =-1 величина σ_{nl} равна нулю при θ =0 и 180°.

В настоящее время опубликованы сводные расчеты σ_{nl} для AlKa, MgKa, YMξ, ZrMξ, FKa, CoLa, TiKa, AuMa, AgLa и некторых других линий [13-22]. В табл. 1 приведены относительные аначения σ_{nl} (линия H2p принята за единицу) для наиболее интенсивных рентгеноэлектронных линий, возбуждаемых линиями MgKa и AlKa.

Сводные расчеты величин в опубликованы в работе [23].

Необходимо учесть, что различные многоэлектронные процессы приводят к ослаблению интенсивности рентгеноэлектронной линии: сечение фотоионизации σ_n распределяется по нескольким каналам, что приводит к появлению сателлитов в рентгеноэлектронных спектрах. Если ввести множитель K<I для учета этих потерь, то множитель В в формуле (1) принмает вид

$$B = K(\sigma_{n\ell}/4\pi) [I - \frac{1}{2}\beta(3_{2}\sin\theta - 1)]$$
(9)

Обычно К≃0,8÷0,9, однако имеются и случаи, например, Cu 2pлинии в соединениях Cu (П), когда К∿0,5.

Влияние свойств образца на интенсивность. Пусть dN-число фотоэлектронов, испытавщих неупругое взаимодействие при прохождении пути dl в твердом теле. Для однородного образца величина dN должна быть пропорциональна N и обратнопропорциональна средней величине свободного пробега λ фотоэлектрона без неупругих столкновений

$$dN = -Nd\ell/\lambda = -Nd\ell/\lambda \sin\alpha \qquad (10)$$

Интегрируя (10), получим

$$N_{z}=N_{exp}(-z/\lambda \sin \alpha)$$
(11)

где N_z/N_o - доля фотоэлектронов, вышедших из образца после прохождения пути 1 без неупругих взаимодействий.

В объеме Sdz, находящемся на расстоянии z от поверхности, в результате фотоионизации имеем dN_o фотоэлектронов, испуснаемых в телесный угол Ω_o за единипу времени (см. (2) и (9))

$$dN_{o} = KI_{o}\Omega_{o}nSdl(d\sigma_{nl}/d\Omega)$$
(12)

где n - число атомов в единице объема, I_о - число фотонов, падающих в секунуду на единицу площади.

Согласно (11) поверхности образца из общего числа dN_o фотоэлектронов достигает без неупругих столкновений лишь dN_z фотоэлектронов

 $dN_{z}=D \exp(-z/\lambda \sin \alpha)dz$ (13)

где D=I_Ω_nS(dσ_n/dΩ)

Интегрируя (13) легко рассчитать число электронов N, достигших поверхности образца без неупругих столкновений. Например, для полубесконечного плоского образца, интегрируя (13) по dz от 0 до ∞ получим

Итак,

$$C = (N/D) \cdot n \tag{15}$$

С учетом (I), (6), (12), (13) легко получить формулы для интенсивностей рентгеноэлектронных линий для образцов разного типа.

Например, для полубесконечного образца

$$I_{1}=I_{0}A_{0}\Omega_{0}f(E_{kin})F(E_{kin})*K(\sigma_{n\ell}/4\pi)n\lambda \times$$

$$\times [1-\frac{1}{2}\beta(\frac{3}{2}sin\theta-1)], \alpha \ge \alpha_{min}$$

$$I_{1}^{*}=I_{1}sin\alpha/sin\alpha_{min}; \alpha \le \alpha_{min}$$
(16)

Для пленки толщиной †

$$I_{2}=I_{1}[1-\exp(-t/\lambda \sin \alpha)]; \quad \alpha \ge \alpha_{\min}$$

$$I_{2}^{*}=I_{2}\sin \alpha/\sin \alpha_{\min}; \quad \alpha \le \alpha_{\min}$$
(17)

Для полубесконечного образца, покрытого сплошной пленкой толщиной †

$$I_{3}^{=I} = I_{1} \exp(-t/\lambda_{2} \sin \alpha) \quad \alpha \ge \alpha_{min}$$

$$I_{3}^{*=I} = I_{3} \sin \alpha / \sin \alpha_{min} \quad \alpha \le \alpha_{min}$$
(18)

где λ_2 длина свободного пробега электрона в пленке.

Зависимость I от а согласно теоретическим предсказаниям представлена на рис. 2 [11]. В случае полубесконечного образца (рис. 2а) при а<а_{min} эффективная площадь постоянна (3)и в соответствие с (14) и (16) I растет как sina. При а>а_{min}.



Рис. 2. Графики функций I1, I2, и I3

I не зависит от α за исключением области малых φ^{*} (см. выше). Поверхностный слой толщины † (рис.2в) и сплошной образец под слоем толшины † (рис. 2в) при α>α_{min} дают интенсивности, сумма ноторых приблизительно постоянна и слабо зависит от α.

Экспериментальные данные качественно согласуются с этими результатами (рис. 3 [11]).При выводе формул (16-18) сделан однако ряд допущений. Остановимся на двух наиболее существенных.

Влияние шероховатости. Для сплошного образца без слоя загрязнений интенсивность от степени шероховатости не зависит*, поскольку проекция любой поверхности на щель спектрометра равна A₀/sina при a>a_{min}. Если, однако, рассматривать отношение интенсивности от субстрата, покрытого пленкой адсорбата, к интенсивности сигнала адсорбата, то это отношение должно быть чувствительно к профилю поверхности [24], причем, если поверхность имеет определенный профиль, то можно получить довольно сложную зависомость отношения интенсивностей от угла a. Влияние шероховатости сводится к замене угла a на некий средний угол a. Поскольку последний сравнительно слабо зависит от a, то зависимость I от a выражена обучно слабее, чем это следует из формулы (17) и (18) остаются качественно правильными и поэтому для увеличения чувствительности к самым внешним поверхностным слоям необходимо уменьшить a.

Влияние упругого рассеяния. Упругое рассеяние фотоэлектронов может существенным образом влиять на угловое распределение фотоэлектронов [25-27]. В случае полубесконечного образца происходит изотропизация углового распределения, т.е. зависимость

«Предполагается, что можно пренебречь экранировкой рентгеновского излучения вследствие шероховатости поверхности.



Рис. 3. Зависимость экспериментальных интенсивностей линий Au 4f и CIs (сплощная линия) от угла а для монокристалла покрытого углеродсодержащей пленкой. Штриховая кривая-представление экспериментальных дакных в виде (18) для Au 4f и в виде (17) для CIs.

от угла θ становится менее сильной, чем следует из формулы (9): для малых значений θ интенсивность увеличивается, а для больших значений интенсивность уменьшается по сравнению с формулой (9) при β>0. Таким образом, для относительных интенсивностей упругое распределение в рассматриваемом случае приводит к появлению дополнительного множителя, зависящего от параметров упругого рассеяния. На интенсивность линий субстрата и адсорбата упругое рассеяние влияет довольно сложным образом. В принципе, экспериментальные величины I₂ и I₃ можно представить в виде (17) и (18). Например, вместо (18) получим при постоянном α и переменном †

$$I_{z} = const_{1} exp(-const_{2})$$

Однако значения const_ и const_ не совпадают в общем случае с ${\rm I}_1$ и t/asina.

Кроме шероховатости и упругого рассеяния есть и другие факторы, например, островной характер пленки адсорбата, которые не учитывались при выводе формул (17) и (18). Совокупность этих факторов приводит к тому, что формулы (17) и (18) не являются обычно адекватными, например, для определения † или λ. Например, эти формулы могут приводить к зависимости † от α или давать различные значения †/λ для одинаковых экспериментальных данных при применении формулы (17) вместо (18) и т.д. [28,29]. С учетом этого обстоятельства нужно довольно осторожно относиться к "экспериментальным" значениям λ, полученным на основе идеализированных формул (17) и (18). Длина свободного пробега фотоэлектрона в твердом является важным параметром в формулах (16) - (18) и поэтому кратко рассмотрим основные данные по величинам λ . Экспериментальные методы определения λ описаны в работах [28-30]: они основаны на формулах (16) - (18). Подборки полученных значений приведены в [30, 31]. Величины зависят от Екин и для различных материалов имеют минимум в районе 30-100 эв (рис. 4 [31]).



Рис. 4. Зависимость λ от Е_{нин}. Точки- экспериментальные данные для различных элементов. Сплошная линия - среднестатистическая "универсальная" кривая.

Нак теоретические, так и экспериментальные данные свидетельствуют о зависимости величин λ не только от Е_{кин}, но и от химической природы изучаемого образца. Если, однако, учесть наличие большого разброса в экспериментальных значениях λ, найденными различными авторами, а также неопределенность теоретических предпосылок, использованных при измерениях (см. выше), то в настоящее время вполне уместен статистический подход [31] для определения λ в зависимости от Е_{кин}. На основе обработки экспериментальных данных предложены [31] следующие формулы

 $\lambda_{i} = A_{i} / E_{kin}^{2} + B_{i} E_{kin}^{\frac{1}{2}}$ (для всех $E_{KИH}$) $\lambda_{i} = B_{i} E_{kin}^{\frac{1}{2}}$ (Е_{КИН}>150 эв) (19)

где λ в Å, Е_{ңин} в эв, а А и В равны 0,00143 и 0,54 для элементов, 0,00641 и 0,96 для неорганических соединений, 0,00031 и 0,87 для органических соединений. Формулы (19) правильно отражают рост λ при переходе от элементов к соединениям и зависимость от Е_{кин}.

В ряде работ проводились теоретические расчеты величин λ. Правда, как правило, валентные электроны рассматривались в приближении свободного электронного газа. Наиболее полные таблицы значений λ получены в работе [32]. В этой работе выведена формула

250

λ=E_{нин}/a(ln E_{нин}+b)

причем значения а и b затабулированный для всех элементов при Е_{кин} >200 эв. Подчеркнем, что формула (20) передает зависимость λ от природы элемента. Обычно величина λ убывает для элементов вдоль периода Периодической таблицы и возрастает в группах сверху_овниз. Например, при Е_{кин}=1000 эв λ=36,5; 25,1; 20,5; 19.6 (A) для Na, Mg, Al, Si и λ=25,1, 27,6, 31,7, 31,0 (A) для Mg, Ca, Sr, Ba. Величина λ согласно (20) возрастает с Е_{кин} приблизительно по закону Е^{0,77} при Е_{кин}~700 эв.

Ноличественный анализ поверхности твердых тел.

Как следует из предыдущего параграфа, длина свободного пробега фотоэлектрона в твердом теле при Е_{нин}∿1000 эв составляет около 15-40 А. Поскольку интенсивность рентгеноэлектронных линий в зависимости от расстояния z исследуемого объема до поверхности падает по экспоненциальному закону I∿exp(-z/λ), то согласно формуле (17) вклад поверхностного слоя толщиной λ, 2λ и 3λ составляет 63, 87 и 95 % от общей интенсивности рентгеноэлектронной линии. Следовательно рентгеноэлектронные спектры несут информацию о самом верхнем слое исследуемого образца порядка 15-40 Å. Поверхностную чувствительность метода можно увеличить за счет уменьшение угла* α или уменьшения величины Е_{ниы} путем выбора уровня с большой знергией связи и рентгеновского кванта с меньшей энергией. Эти вопросы рассмотрены ниже. Поскольку интенсивность рентгеноэлектронной линии прямо пропорциональна концентрации, то рентгеноэлектронные спектры позволяют судить о количественном составе сверхтонких поверхностных пленок.

Согласно (16) при α>α_{min} и при f(E_{kin})∿1/E_{kin}=1/E для отношения интенсивностей имеем*:

$$\frac{I_{1}}{I_{2}} = \frac{n_{1}\sigma_{1}[1-\frac{1}{2}\beta_{1}(\frac{3}{2}\sin\theta-1)]\lambda_{1}K_{1}E_{2}}{n_{2}\sigma_{2}[1-\frac{1}{2}\beta_{2}(\frac{3}{2}\sin\theta-1)]\lambda_{2}K_{2}E_{1}}$$
(21)

Обычно θ=90°, а β изменяется в диаразоне от I до 2, поэтому максимальная ощибка, допускаемая при пренебрежении множителем I-½β(3⁄2sinθ-1) не выще 20 %. В подавляющем большинстве случаев величина К составляет 0,9-0,8, поэтому различием К₁ и К₂ также можно в первом приближении пренебречь. Для величин λ можно приближенно принять λ;∿√E; (см.(19)). С учетом этих упрощающих предположений имеем:

*Глубина исследуемого слоя пропорциональна sinα, см. (17).

**Положено F(E_{КИН})*const, поскольку предполагается, что развертка спектра осуществляется замедляющим полем и в детектор поступают электроны с постоянной Е_{КИН} .

(20)

$$I_{1}/I_{2} = n_{1}\sigma_{1}\sqrt{E_{2}}/n_{2}\sigma_{2}\sqrt{E_{1}}$$
 (22)

Поскольку в реальных образцах на поверхности всегда имеется слой загрязнений толщиной порядка λ, то более точное выражение для I₁/I₂ с учетом (18) имеет вид

$$I_{1}/I_{2} = (n_{1}\sigma_{1}\sqrt{E_{2}}/n_{2}\sigma_{2}\sqrt{E_{1}})exp(-t/\lambda_{1}+t/\lambda_{2})$$
(23)

где † толщина слоя загрязнений, а λ₁ и λ₂ длины свободного пробега в этом слое при энергиях E₁ и E₂. Величина † может варьироваться в широких пределах, но обычно она порядка десятка ангстрем, т.е. примерно ½λ÷λ при Е_{кин} в пределах 500-1000 эв. Положим †∿λ₁λ₂/(λ₁+λ₂), тогда на основе (23) получим

$$I_{1}/I_{2}=C(n_{1}\sigma_{1}/n_{2}\sigma_{2})$$

$$C=\sqrt{E_{2}/E_{1}} \exp[(\sqrt{E_{1}}-\sqrt{E_{2}})/(\sqrt{E_{1}}+\sqrt{E_{2}})]$$
(24)

Анализ состава обычно ведется при Е_{кин} в диапазоне 500-1400 эв.



Рис. 5. Сравнение относительных сечений фотоионизации и интенсивностей рентгеноэлектронных линий (в расчете на один электрон). Данные для Na1s приняты за единицу. Точки и треугольники – экспериментальные данные по относительным интенсивностям. Крестики – теоретические значения для относительных сечений фотоионизации.

Полагая Е₂/Е₁∿1,5 имеем С∿1,1. Если даже положить Е₂/Е₁∿2,5 имеем С∿1,25. Относительные величины σ₁/σ₂ изменяются в довольно широком диапазоне (табл. 1), поэтому полагать σ₁/σ₂∿І нельзя. Следовательно простейший вариант количественного анализа на основе рентгеноэлектронных спектров основан на формуле

$$n_1/n_2 = (I_1/\sigma_1)/(I_2/\sigma_2)$$
 (25).

252

где

	МдКа				Alka		
Уровень атом	Твория Эксперимент 1 σ			Теория Энсперимент о			
	[18]	[38]	[36]	[33]	[18]	[38]	[33]
ls							
3 Li 4 Be 5 B 6 C 7 N 8 O 9 P	0,0147 0,0493 0,122 0,247 0,440 0,710 1,06	0,0167 0,0267 0,100 0,157 0,300 0,463 0,657	0,0257 0,120 0,125 0,254 0,276 0,328	0,102 0,366 0,563	0,0143 0,0470 0,122 0,252 0,456 0,742 1,13	0,0148 0,0333 0,0955 0,192 0,348 0,523 0,803	- 0,106 0,215 0,368 0,599 -
25							
11 Na 12 Mg 13 Al 14 Si	0,0971 0,131 0,170 0,213	0,103 0,123 -	0,145 0,181 0,189 0,210	0,115 - 0,0983 0,117	0,107 0,146 0,191 0,243	0,117 0,142 0,159 0,182	0,117 0,142 0,141 0,167
2p							
11 Na 12 Mg 13 Al 14 Si 15 P 16 S	0,0525 0,0892 0,141 0,214 0,309 0,431	- 0,15 0,25 0,33 0,41	0,0828 0,119 0,184 0,263 - 0,472	- - - 0,442	0,0489 0,0842 0,135 0,206 0,300 0,421	0,0614 0,0909 0,114 0,177 0,264 0,418	- - - 0,256 0,375
2p	and a nandright an de antesta an an an				alan ya munakan Galakan juu kunakan kunakan kunaka		
17 Cl 19 K 20 Ca 21 Sc 22 Ti 23 V 24 Cr 25 Mn 26 Fe 27 Co 28 Ni	0,586 1,00 1,26 1,58 1,94 2,36 2,86 3,35 3,93 4,55 5,22	0,53 1,00 1,13 1,20 1,15 1,33 1,40 1,55 1,81 2,37 2,30	0,581 1,00 0,950 - 0,888 0,723 0,894 - 0,782 - 0,772	0,513 1,00 0,884 - - - - - - -	0,579 1,00 1,27 1,60 1,99 2,42 2,95 3,49 4,12 4,81 5,57	0,582 1,00 1,18 - 1,09 1,45 1,68 2,32 2,77 3,18 3,77	0,550 1,00 1,02 1,28 - - - -
3р				1994 - D. 1995 - 1995 - 1995 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 199 1995 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 - 1997 -			
24 Cr 25 Mn 26 Fe 27 Co 28 Ni 29 Cu 30 Zn 31 Ga 32 Ge 33 As 34 Se 35 Br	0,277 0,331 0,387 0,445 0,508 0,508 0,568 0,642 0,723 0,811 0,903 1,00 1,10	- - - - - - - - - - - - -	0,234 0,256 0,315 0,446 0,521 0,472 0,591 - - - 0,894	0,215 0,141 0,200 0,198 0,278 - - - - - -	0,296 0,358 0,419 0,485 0,558 0,629 0,716 0,813 0,917 1,03 1,15 1,28		0,172 0,161 0,222 0,256 0,345 - 0,488 - - - 0,882 0,876
3ds					********		
45 Rh 46 Pd 47 Ag 52 Te 54 Xe	2,09 2,37 2,63 4,36 5,22	-		1,51 1,66 - -	2,12 2,39 2,69 4,55 5,49		2,08 2,07 2,06 3,19 5,08

Таблица 1. Относительные сечения фотоионизации о и интенсивность I рентгеноэлектронных линий (Значения для К 2p приняты за единицу)

	MgKa				Alka		
Уровень атом	Твория σ	Эн	Эксперимент 1		Теория σ	1я Энспер	имент 1
	[18]	[38]	[36]	[33]	[18]	[38]	[33]
3d							
33 As	0,485	0,550	-	-	0,456	-	0,345
34 Se	0,608	0,567	-	0,878	0,577	0,500	0,571
35 Br	0,751	0,700	0,865	0,639	0,716	0,606	-
37 Rb	1,10	-	1,35	-	1,06	-	-
38 Sr	1,30	1,33	-	-	1,27	-	-
39 I HQ 7m	1,54	1 62	-	2 05	1,50	1 36	1 70
41 Nb	2,09	1,02	-	1 92	2,07	1,50	1,74
42 Mo	2.41	2,10	-	-	2.39	2.27	1,71
43 Tc	2.73	-	-	-	2.74	-	-
44 Ru	3,12	1,75	-	-	3,14	-	-
45 Rh	3,53	2,67	-	-	3,57	2,88	-
46 Pd	4,00	3,08	-	-	4,05	3,33	-
47 Ag	4,45	-	3,41	-	4,55	-	-
48 Cd	4,96	5,11	3,82	-	5,08	4,70	-
49 In	5,50	5,43	2 22	-	5,66	5,15	-
50 Sh	6,09	5,07	3,33	-	6 98	6 29	-
3d	0,75	0,00			0,50	0,25	
52 Te	7,38	-	2 00	-	7,70	- 00	-
53 U 54 Y+	8,09	6,6/	3,00	-	0,00	0,82	_
55 Cs	9.54	_	_	_	10,11	-	-
56 Ba	10.29	7.83	-	-	10,98	9.33	-
4d			9-1				
50 Sn	0.633		0.960	-	0.677		-
51 Sb	0,735		-	-	0,792	-	1,04
52 Te	0,843	-	-	-	0,913	-	0,815
53 J	0,958	-	1,11	0,885	1,04	-	
54 Xe	1,08	-	-	-	1,18	-	
55 Cs	1,20	-	1,86	-	1,32	-	1,67
56 Ba	1,33	-	2,20	-	1,47	-	1,64
41							
73 Ta	2,23		-	2,17	2,16	-	1,96
74 W	2,52	1,95	2,93	2,18	2,46	-	1,91
75 Re	2,83	2,43	-	2,53	2,77	-	-
76 US	3,15	2,43	-	-	3,11	-	11 58
78 P+	3,00	2 1 3	_	3 31	3,40	_	2,90
79 Au	4.30	5,15	4.72	5,51	4.30	-	-
80 Hg	4.72	4.53	4.43	-	4.73	-	-
81 TL	5,18	4,67	5,57	-	5,23	-	-
82 Pb	5,65	5,37	5,36	4,93	5,73	-	5,29
83 Bi	6,15	-	-	4d			
				1.72	6.27	-	5.47
84 Po	6.66	-	-		6.63	-	-
85 At	7,24	-	-	-	7.42	-	-
86 Rn	7,81	-	-	-	8,05	-	-
87 Fr	8,37	-	-	-	8,68	-	-
88 Ra	8,97	-	-	-	9,33	-	-
89 Ac	9,56	-	-	-	10,00	-	-
4f							
90 Th	10,17	-	8,43	-	10,69	-	-
91 Pa	10,92	-	-	-	11,52	-	-
92 U	11,61	-	5,41	-	12,30	-	-

Таблица 1. (продолжение)



Рис. 6. Зависимость I Zn3p/I Zn2p_{3/2} от абсолютной интенсивности I Zn2p_{3/2} в процессе удаления поверхностного слоя загрязнений (Т - время ионной очистки).

Соотношение (25) действительно выполняется обычно даже с большей точностью, чем это можно предположить, учитывая характер допущений, сделанных при выводе этого соотношения. На рис. 5 [15,16] показана довольно высокая степень соответствия отношений I_1/I_2 и σ_1/σ_2 (n_1/n_2 =I). Формулой (25) можно пользоваться с тем большим основанием, чем ближе отношение E_2/E_1 к единице. Желательно, чтобы отношение E_2/E_1 было не выше 2, причем $E_1>400$ эв, в этом случае ошибка для n_1/n_2 не выше 20-30 % (если считать, что σ_1/σ_2 известно).

Высокая степень соответствия между І1/І2 и 01/02 не достигается для случаев E₂/E₁>4, поскольку в этом случае величина ехр в (23) существенно зависит от т. В качестве примера на рис. 6 приведена зависимость отношения I Zn3p/I Zn2p, где Еı/Е₂∿4, от интенсивности I Zn2p образца металлического Zn. С уменьшением толщины загрязнений †, достигаемого ионной очисткой увеличивается, I Zn2p. Хотя абсолютные эначения I Zn3p тоже увеличиваются, но отношение I Zn3p/I Zn2p уменьшается, поскольку в (23) $\lambda_1 >> \lambda_2 (\lambda_1 \sim 2\lambda_2)$ и величина ехр заметно уменьшается с уменьшением т. Исключительно большой разброс замеренных [33] величин I Na2s/I Na1s (от 0,036 до 0,081) при возбуждении спектров линией MgKa, где Е1/Е2=6,5, и от 0,044 до 0,069 при возбуждении спектров линией АlKa, где Eı/E₂∿3,4, в различных соединениях связан как с влиянием ехр в выражении (23), так и с изменением показателя р в зависимости λ∿Е^{-Р} для различных соединений.

Таким образом, величина сечения фотоионизации является величиной, которая в основном определяет зависимость относительных интенсивностей рентгеноэлектронных линий (при одинаковых концентрациях). Для практического применения соотношения (25) можно использовать теоретические эначения о. Сравнительно высокая степень точности рассчитанных о следует как из сравнения рассчитанных полных сечений фотоионизации атомов с экспериментальными [13,14,19,21,22], так и из довольно хорошего соответствия теоретических значений и "экспериментальных" значений σ_1/σ_2 , определенных в работах [33-36] на основе соотношения (21), в котором I_1/I_2 взято из экспериметна, а остальные параметры оценивались. Например, для β взято теоретическое значение, для λ использовалась зависимость $\lambda \sim E^{-p}$, К не учтено и т.д. Хотя относительные "экспериментальные" значения о не обязательно точнее теоретических, они полезны для выявления неноторых отношений σ_1/σ_2 , которые не дают правильного описания наблюдаемых I_1/I_2 , например, это имеет место для σ_2s/σ_2p К и Са [16,33].

Для получения наиболее точных значений n1/n2 (с точностью 5-10 %) используют метод градуировочных кривых [13,16]. В рамках этого метода определяется отношение I₁/I₂ в зависимости от n1/n2 для ряда соединений (рис. 7.). Это позволяет точно учесть отношения, связанные с σ,β почти точно с величиной К и, в основном, отношения λ в соотношении (21) и величину ехр в (23). Метод позволяет исключить случайные выбросы и усредняет матричные эффекты, связанные с величинами λ и ехр. При изменении атомных отношений А/В в пределах до 8 до сих пор не удалось обнаружить существенного отклонения от линейной зависимости между отношениями Ід/Ів и А/В. Вообще говоря, матричные эффекты следует ожидать при малых содержаниях А и В, если величины λι и λ₂ для матриц 1 и 2 существенно различные, а Е_{нин} для А и В также различаются. Однако в настоящее время такие эффекты пока не обнаружены, поэтому для анализа пользуются относительными интенсивностями линий при любом отношении А/В и для любых матриц. Эксперименьальные эначения относительных интенсивностей приведены в табл. 1. При использовании метода градуировочных кривых безразлично, каким образом измерять интегральную интенсивность - важно делать это идентичным образом, при построении градуировки и при определении n1/n2 на основе I1/I2. В работах [13,16,37,38] измерялась площадь линии под экспериментальным профилем и условной линией фона. Это дает значения І пропорциональные о.

Необходимо отметить, что при составлении градуировочных кривых необходимо брать вещества, поверхностный состав которых



Рис. 7. Градуировочная кривая для атомарного отношения Cl/Rh.

не искажается вследствие гидролиза, окисления и т.д. Линии, используемые для построения градуивочных кривых, не должны искажаться наложением других линий. Для градуровки нельзя использовать смеси веществ, поскольку метод чувствителен только к поверхностному слою: вследствие этого интенсивность линии увеличивается при более тонком растирании одной из компонент или в результате покрытия поверхности частиц одного компонента другим. В работе [39] показано, в частности, что добавка графита к смеси солей свинца и МоО₃ приводит к существенному изменению наклона I Pb4f/I Mo3d в зависимости от отношения Pb/Mo для различных солей свинца.

Определенная осторожность необходима также при использовании значений относительных интенсивностей, полученных на другом спектрометре (даже такого же типа, на котором проводится анализ). Хотя данные различных авторов по относительным интенсивностям, приведенные в табл. 1, сравнительно хорошо согласуются друг с другом*, результат проверки [40] относительных интенсивностей, полученных различными авторами на однотипных приборах, показал возможность исключительно большого разброса экспериментальных значений. Этот разброс частично объясняется неисправностями в приборах, а в основном, по-видимому, вызван не идентичностью условий проведения эксперимента различными исследователями, хотя эти условия и были заранее заданы.

Выше предполагалось, что все исследуемые элементы равномерно распределены в поверхностном слое исследуемого образца. В тех случаях, когда величина является функцией z, т.е. имеет место градиент концентрации в поверхностном слое, можно найти [41,42] такую толщину х поверхностного слоя, что средняя концентрация h в этом слое пропорциональна измеряемой интенсивности, т.е. I;∿n;. Анализ различных распределений n(z) показал, что х=1,8λsinα, причем изменением коэффициента перед λsinα можно существенно улучшить точность соотношения I;∿n; для различных типов градиентов концентрации.

Таким образом, рентгеноэлектронные спектры несут информацию о среднем числе атомов в единице объема поверхностного слоя толщиной порядка λsina. Толщину изучаетого поверхностного слоя, как уже отмечалось выше, можно уменьшить как за счет а, так и за счет λ: чем меньше а и Е_{КИН} (Е_{КИН}>150 эв), тем выше поверхностная чувствительность метода. В качестве простейшего примера на рис. 8 показан рост относительной интенсивности линии Al2p в окисле по сравнению с Al2p металла в образце металлического алюминия, покрытого пленкой Al2O3, в зависимости от угла а [11]. В качестве несколько более сложного примера рассмотрим результаты изучения [43,44] поверхностной пленки на

*Различие частично вызвано тем обстоятельством, что в работе [36] $I \sim f(E_{\rm KMH}) \sim E_{\rm KMH}$, а в работах [35,37,38] $I \sim f(E_{\rm KMH}) \sim I/E_{\rm KMH}$ (см. (5) и (6)). Кроме того, необходимо учесть, что толщина слоя загрязнений зависит от вакуума в спектрометре и вследствие этого различно даже для спектрометров одного типа. интерметаллиде ZrNi_s, образовавшейся при нагреве образца на воздухе в течение 320 минут. Рентгеноэлектронный анализ с последовательным ионным травлением (см. следуюший раздел) показал, что атомарное отношение Ni/Zr характеризуется наличием минимума, который достигается через 1,5-2 минуты травления (это соответствует примерно 30-40 Å от поверхности (рис. 9)).



Рис. 8. Зависимость интенсивности линии Al2p в окисле и металле для металлического алюминия, покрытого пленкой окисей, от угла α.



Рис. 9. Зависимость отношения Ni/Zr от времени травления.

На рис. 10 показана зависимость атомарного отношения Ni/Zr от угла α и времени ионного травления. Отношение Ni/Zr определялось по интенсивности линий Ni2p/Zr3d (A) и Ni3p/Zr3d (B). Величины $\lambda, \lambda \sin 65^\circ$, $\lambda \sin 25^\circ$ равны 33, 30 и 13 (Å) для фотоэлектронов линии Ni3p и 19,18 и 8 (Å) для фотоэлектронов линии Ni2p ($E_{\rm KuH}(Ni2p) < E_{\rm KuH}(Ni3p)$). В соответствие с этим атомарнов отношение Ni/Zr в поверхностном слое до травления оказалось в случае A выше, чем в случае B, поскольку в поверхностном слое имеется резкий градиент концентраций (рис. 9). Наличие этого градиента приводит к росту отношения Ni/Zr с уменьшением а в обоих случаях A и B. Это справедливо и для измерений после 0,5 минуты травления, однако после одной минуты травления рост Ni/Zr наблюдается лишь для малых значений а, причем он несколько лучше выражен для случая B. Это объясняется тем, что в случае B величина 1,8 $\lambda \sin \alpha$ при α =65° больше расстояния (10-20 Å) от поверхности до минимума отношения Ni/Zr (рис. 9), но меньше или примерно равно при α =25°, поэтому рост отношения Ni/Zr начинается при некотором промежточном угле (рис. 10).



Рис. 10. Зависимость отношения Ni/Zr от времени травления и угла α.

В случае А угловая зависимость крайне слаба поскольку диапазон 1,8λαsinα (25<α<65°) приходится на район минимума (Ni/Zr)_{ат}. После 2-х минут травления поверхность образца примерно соответствует району минимума (Ni/Zr)_{ат} и поэтому с уменьшением α величина Ni/Zr уменьшается. Это справедливо также и после четырех минут травления.

Анализ распределения концентраций по глубине образца

Для анализа распределения концентраций по глубине образца обычно применяют ионное травление. Измерение интенсивностей проводится при этом через определенные промежутки времени травления. Пересчет интенсивностей в концентрации нельзя проводить по формулам предыдущего раздела, поскольку ионное травление влияет на распределение элементов в образце. Необходимо учитывать, что ионное травление размывает первоначальный профиль концентраций вследствие неравномерного травления и эффекта "вбивания" атомов в глубь образца. Кроме того, образуется измененный слой на поверхности травленного образца, концентрации в котором вследствие преимущественного распыления и диффузии могут заметно отличаться от объемных. И, наконец, возможно протекание химических реакций под воздействием ионного пучка, что изменяет химический состав поверхности. Эти факторы рассматриваются в этом разделе.

Неравномерность травления вызвана статистическим характером процесса травления. При ионном травлении происходит распыление атомов только в поверхностном монослое. Очевидно, что после удаления атома из первого поверхностного монослоя появляется вероятность удаления атома из второго монослоя, хотя еще есть атомы в первом монослое. В результате получается профиль поверхности со значительной шероховатостью. В работах [45,46] показано, что характер распределения высот z для вершин и углублений относительно средней величины Δz подчиняется закону Гаусса

(26)

$$W(z) \sim \exp(-2z/\Delta z)^2$$

где а - толщина монослоя.

Экспериментальные оценки Δz [46] иногда согласуются с формулой (26), однако обнаружены и другие виды зависимости от z [47,48]. Некоторая модификация формулы для Δz получена в работе [49], а в работе [50] проанализирована зависимость интенсивности рентгеноэлектронного спектра от величины Δz или шероховатости поверхности, вызванной ионным травлением. Мы не будем останавливаться детально на этих результатах, поскольку экспериментальные данные зависят не только от неравномерности травления, но и от эффектов "вбивания".

Эффект "вбивания" атомов в глубь образца при ионной бомбардировне приводит обычно к образованию затянутых "хвостов" в изучаемых распределениях n(z), причем протяженность "хвоста" возрастает с величиной Е_{кин} бомбардируемых ионов [51] и зависит от матрицы [52], а также от угла падения ионного пучка на поверхность [53]. Для учета этого мнонообразия факторов ионное травление моделируют в рамках метода Монте-Нарло (см., например, сылки в [53]). Остановимся на результатах таких расчетов в работе [53]. Согласно расчету при перпендикулярном падении пучка Ar+(E_{кин}=5 кэв) на Si наибольшее изменение для n(z) монослоя атомов В в матрице Si на расстоянии z₀ поверхности наблюдается при z₀=20 n (n толщина монослоя), что примерно соответсвует расстоянию, гле наблюдается максимум потерь энергий ионами Ar⁺. При угле падения ионов 0=60° наибольшие изменения n(z) наблюдаются при zo=0. На рис. 11 [53] показаны рассчитанные распределения атомов В (zo=50 n) в зависимости от глубины травления бz, а также профиль n(z), ожидаемый, например, для метода масс-спектрометрии вторичных ионов, который отражает состав на поверхности в процессе травления. Из рисунка видно образование "хвоста" и смещение максимкма n(z) в глубь образца. Расчеты показывают, что это смещение максимально при перпендикулярном падении пучка ионов, но слабо зависит от их энергии Екин. Уваличение Екин сильно размывает. Последний эффект наблюдается также с уменьшением коэффициента распыления, поскольку это приводит к увеличению времени травления.



Рис. 11. Расчет методом Монте-Чарло распределений n(z) атома В в Si в зависимости от величины распыленного слоя δz, 1 - положение поверхности; 2 - распределение n(z); 3 - фиксируемое распределение n(z) в рамках метода масс-спектрометрии вторичных ионов; z - глубина в монослоях.

Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными.

Преимущественное распыление и анализ сплавов. Коеффициенты распыления у атомов в сплаве часто отличаются по абсолюьным и относительным эначениям от их значений для чистых металлов (см., например, [54]). Вследствие различия величин у; для отдельных компонент наблюдается обогащение поверхностного слоя менее распыляемым компонентом в процессе травления. Степень этого обогащения увеличивается лишь в начале ионного травления, а затем достигается равновесное состояние. Соотношение между атомными объемными концентрациями C_1^{\vee} и C_2^{\vee} бинарного сплава и поверхностными концентрациями C_1^{S} и C_2^{S} в состоянии равновесия легко вывести на основе баланса концентрации C_1^{S} на поверхности (см., например [55])

$$c_{1}^{s}/c_{2}^{s}=(c_{1}^{v}/c_{2}^{v})(\gamma_{2}/\gamma_{1})$$
(27),

где С^S концентрация на поверхности в стационарном режиме. Формула (27) позволяет спределить С^V₁, если построить градумровочную кривую зависимости I₁/I₂ от С^V₁ и С^V₂ (см. рис. 12 [56]). Так как

TO

$$I_{1}/I_{2} = (\sigma_{1}\lambda_{1}/\sigma_{2}\lambda_{2})(C_{1}^{v}/C_{2}^{v})(\gamma_{2}/\gamma_{1})$$
(29).

(28),

Если γ_1/γ_2 не зависит от состава сплава, что часто, но не всегда, имеет место, то отношение $\rm I_1/I_2$ линейно зависит от $\rm C_1^V/C_2^V$ (рис. 12.)





При выводе формулы (27) не учитывалось образование измененного слоя конечной толщины на поверхности, процессы диффузии, сегрегации и т.д. Однако учет этих членов, хотя и приводит к различным распределениям концентраций в измененном слое, оставляет формулу (27) справедливой самого внешнего монослоя сплава.

Измененный слой. Нак уже отмечалось выше, в процессе ионной бомбардировки на поверхности, например, сплава, образуется измененный слой, концентрации в котором отличаются от объемных. Простейшая модель (см., например [57]) предполагает, что образуется слой толщиной & с постоянной концентрацией в этом слое. В рамках этой модели концентрация поверхностного слоя Су следующим образом зависит от времени травления † и &:

$$C_{1}^{s} = (C_{1}^{v} - C_{1}^{s}) e \times p(-t/\tau) + C_{1}^{s}$$

$$\tau = I / \delta N[\gamma_{1} - (\gamma_{1} - \gamma_{2})C_{1}^{v}]$$
(30)

где I – интенсивность потока ионов, N – атомная плотность сплава.

Подчеркнем, что при т→∞ имеет место С^S → С^S. Определение δ в рамках этой модели [57] для сплавов CuNi показало, что б слабо зависит от состава и равно около 10 Å при Е_{нин}=0,5 кэв для ионов Ar+. При увеличении Е_{кин} для Ar+ от 0,5 кэв величина δ в сплаве CuNi (Cu=38,4 %) растет от 10 до 25 Å. Оценки δ для других сплавов также дают величины порядка нескольних десятков Å [58]. Величины δ сильно зависят от применяемой расчетной модели: в работе [59] для δ в Pt₂Si получено значение 530 Å.

В работах [60,61] учтено влияние диффузии на концентрации в измененном слое. Согласно модели [60] состав измененного слоя в зависимости от глубины х изменяется следующим образом (в стационарном случае)

$$C_{1}^{S}(x) = C_{1}^{V} \{ I - [H/(H - I)] e x p(-xV/D) \}$$
 (31),

где V – скорость травления, D – коэффициент диффузии, H – некая функция ү;,С^ү.

По определению можно положить δ=D/N поскольку в этом случае

$$(C_{1}^{s}-C_{1}^{v})/\delta = (\partial C_{1}^{s}/\partial x)_{x=0}$$
 (32).

Таким образом, согласно (31) концентрации экспоненциально изменяются в измененном слое и толщина слоя & указывает лишь на скорость изменения концентрации. На рис. 13 [62] изображены различные теоретические варианты изменения концентраций в измененном поверхностном слое. На этом же рисунке приведены экспериментальные результаты [62] для измененного слоя сплава CuNi



Рис. 13. Различные варианты изменения концентрации С⁵ легко распыляемого компонента сплава в измененном слое, в зависимости от глубины х. Варианты а,б и в соответствуют работам [60], [61] и [62] соответственно. Согласно работе [62] только в районе II (рис. 13) ход концентрации определяется процессами диффузии, а в районе I наблюдается обогащение самого верхнего слоя атомами меди вследствие сегрегации меди, имеющей более низкую энергию поверхностной связи, чем никель. Вследствие этого состав самойоверхней части измененного слоя определяется термодинамическим процессом сегрегации. В пользу такого предположения свидетельствует зависимость профиля концентраций от температуры.

Зависимость профиля концентраций в измененном слое от расстояния до поверхности крайне важна для понимания угловых зависимостей, физического смысла градуировочных кривых и т.д. Например, если концентрация постоянна во всем измененном слое толщиной δ , причем $\delta \sim \lambda$, то соотношение (27) справедливо для всего слоя. На основе формулы (29), используя теоретическую оценку $\sigma_1\lambda_1/\sigma_2\lambda_2$ в этом случае можно определить γ_1/γ_2 . Отношение I_1/I_2 не зависит от α . Если справедливо соотношение (31), то

 $I_{1} \sim \sigma_{1} \lambda_{1} C_{1}^{\vee} \{1 - [H\delta/(H-1)](\delta + \lambda \sin \alpha)\}$ (33)

Если δ>>λ для I₁/I₂ получим соотношение (29). Если λ>>δ или δ∿О, то

$$I_{1}/I = \sigma_{1}\lambda_{1}C_{1}^{\vee}/\sigma_{2}\lambda_{2}C_{2}^{\vee}$$
(34).

В общем случае λ∿б можно записать

$$I_{1}/I_{2} = \sigma_{1}\lambda_{1}C_{1}^{\vee}/\sigma_{2}\lambda_{2}C_{2}^{\vee}(\gamma_{2}/\gamma_{1})^{k}$$
(35)

где О≤к≤І.

Отметим, что в этом случае отношение I₁/I₂ является функцией угла α.

Изменение химических соединений при ионном травлении. Ионная бомбардировка иницирует протекание некоторых химических реакций в образце. В частности, наблюдается восстановление окислов и галогенидов до металла, распад FeS и FeS₂ на серу и металлическое железо (см., например, [63,64] и осылки в этих работах). Обычно степень протекания реакции пропорциональна дозе ионного облучения и рост Е_{кин} увеличивает скорость протекания реакции. Реакция протекает быстрее при вертикальном падении ионного пучка на мишень . Установлено также, что восстановление тонких слоев окислов на металлах протекает легче, чем компактных образцов. Особенно быстро под воздействием ионного облучения распадаются органические молекулы. С учетом этих обстоятельств перед проведением анализа после ионной очистки нвобходимо убедиться, что распыление вещества проходило конгруэнтно.

Литература

Γ	1]	К. Зигбан, К. Нордлинг, А. Фальман, Р. Нордберт и др. Электронная спектроскопия. "Мир". М.д 1971.
[2]	K. Siegbahn, C. Nordling, G. Johanson et. al. ESCA applied to free molecules. Amst., 1969.
Γ	3]	В. И. Нефедов, "Применение рентгеноэлектронной спектрос- копии в химии". Серия "Строение молекул и химическая
[4]	В. И. Нефедов, "Электронные уровни химических соединений".
Γ	5]	В. В. Немошкаленко, А. Г. Алешин, "Электронная спектрос- копия кристаллов". Киев. "Наукова лумка". 1976.
Ľ	6]	T.A. Carlson, Photoelectron and Auger Spectroscopy Plenum Press N.Y., 1976.
Γ	7]	Electron Spectroscopy, Teory, Techniques and applications Ed. C. R. Brundle, A. D. Baker, Acad. Press Lond. vol 1,2, 1977, 1978
Ľ	8]	И. Г. Нозлов, Современные проблемы электронной спектрос- копии. М., Атомиздат, 1978
Ľ	9]	В. Риггс, М. Паркер, в. "Методы анализа поверхностей". "Мир". М., 1979. стр. 137.
[1	0]	А. Бейкер, Д. Беттеридж, Фотоэлектронная спектроскопия. "Мир". М., 1975.
[1	1]	C.S. Fadley, R. Baird, W. Siehans, T. Novakov, S.A.L. Bergstrom J. Electron Spectroscopy 4 (1974) 93.
	2] 3]	B.L. Henke, Phys. Rev. A6 (1972) 94 V.I. Nefedov, N.P. Sergushin, I. M. Band, M. B. Trzhas-
[1 [1	4] 5]	M. Mehta, C. S. Fadley, Phys. Lett. 55 (1975) 59 R. J. Baird, C. S. Fadley, J. Electron Spectrosc. 11 (1979) 39
[1	6]	V. I. Nefedov, N. P. Sergushin, Ja. V. Salyn, I. M. Band and M. B. Trzhaskovskya, J. Electron Spectrosc. 7 (1975) 175
[1 [1	7] 8]	J. H. Scofield, J. Electron Spectrosc., 8 (1976) 129 I. M. Band, Yu. I. Kharitonov and M. B. Trzhaskovskaya, Atomic Data and Nuclear Tables (Submitted)
[1	9]	V. I. Nefedov, V. G. Yarzhemsky, J. Electron Spectrosc. 11 (1977) 1
[2	0]	В. Г. Яржемский, В. И. Нефедов, Ж. структ. химии 19 (1978) 934
[2	1]	V. G. Yarzhemsky, V. I. Nefedov, I. M. Band and M. B. Trzhaskovskava, J. Electron Spectrosc., 18 (1980) 173
[2 [2	2] 3]	V. I. Nefedov, V. G. Yarzhemsky, Phys. Ser. 18 (1977) 291 R. F. Reilman, A. Msezone and S. T. Manson, J. Electron
[2	4]	R. J. Baird, C. S. Fadley and B. Kawamoto, M. Mehta.
[2	5]	0. A. Baschenko, V. I. Nefedov, J. Electron Spectrosc., 17 (1979) 409
[2 [2 [2	6] 7] 8]	0. A. Baschenko, V. I. Nefedov, J. Electron Spectrosc. 0. A. Басченко, В. И. Нефедов, Поверхность (В печати). M. F. Ebel, J. Electron Spectrosc. 14 (1978) 287

[29] C. R. Brundle, H. Hopster and J. D. Swalen, J. Phys. Chem. 70 (1979) 5190 [30] C. J. Powell, Surf. Sci. 49 (1974) 29 [31] M. P. Seah, W. A. Dench, Surf. Interface Anal. 1 (1979) 2 [32] D. R. Penn, J. Electron Spectrosc. 9 (1976) 29 [33] C. D. Wagner, Anal. Chem. 49 (1977) 1282 [34] R. C. G. Leckey, Phys. Rev. A13 (1976) 1043 [35] C. J. Powell, P. E. Larson, Appl. Surf. Sci. 1 (1978) 186 [36] S. Evans, R. G. Pritchard and J. M. Thomas, J. Electron. Spectrosc. 14 (1978) 341 [37] В. И. Нефедов, Н. П. Сергушин и Н. М. Жаворонков, Ж. анал. химии 29 (1974) 231 [38] Н. П. Сергушин, В. И. Нефедов, Ж. анал. химии 31 (1976) 2198 [39] D. M. Hercules, J. Electron Spectrosc. 5 (1974) 811 [40] C. J. Powell, N. E. Erickson, and T. E. Madey, J. Electron Spectrosc. 17 (1979) 361 [41] В. И. Нефедов, "Поверхность" (В печати) [42] V. I. Nefedov, Surf. Interface Anal. (в печати) [43] В. И. Нефедов, В. В. Лунин и Н. Г. Чулков, "Поверхность" (В печати) [44] V. I. Nefedov, V. V. Lunin and N. G. Chulkov, Surf. Interface Anal. (в печати) [45] A. Bennighoven, Z. Phys. 230 (1976) 403 [46] S. Hoffman, Appl. Phys. 9 (1976) 59 [47] W. O. Hoffer, P. J. Martin, Appl. Phys. 16 (1978) 271 [48] H. J. Mathieu, D. E. McClure and D. Landolt, Thin Solids Films 38 (1976) 281 [49] R. Shimizu, Appl. Phys. 18 (1979) 425 [50] J. E. Castle, L. B. Hazel, J. Electron Spectrosc. 12 (1977) 195 [51] F. Schulz, K. Wittmaack, J. Maul. Radiat Eff, 18 (1973) 211 [52] M. L. Tarng, G. K. Wehner, J. Appl. Phys. 43 (1972) 2268 [53] S. T. Kang, R. Shimizu and T. Okutani, Jap. J. Appl. Phys. 18 1979 1987 [54] P. H. Holloway, Surf. Sci. 66 (1977) 479 [55] H. Shimizu, M. Ono and K. Nakagama, Surf.Sci. 36 (1973) 817 [56] V. I. Nefedov, P. P. Pozdeev, V. F. Dorfman and B. N. Pypkin, Surf. Interface Anal. 2 (1980) 26 [57] P. S. Ho, J. E. Lewis, H. S. Wildman and J. K. Howard, Surf. Sci. 57 (1976) 393 [58] K. Goto, T. Koshikowa, K. Ishikawa, R. Shimizu, Surf. Sci. 75 (1978) L 373 [59] P. K. Haff. Appl. Phys. Lett. 31 (1977) 259 [60] P. S. Ho. Surf. Sci. 72 (1978) 253 [61] M. Arita, M. Someno, Proc. 7th Intern Vac. Congr. 3rd Intern. Conf. Solid Suffaces Vienna 1977, p.2511. [62] M. Yabumoto, H. Kakibayashi, M. Mohri, K. Watanabe and T. Yamashita Thin Sol. Films 63 (1979) 263 [63] T. Tsang, G. J. Coyle, I. Adler and Y. Lin, J. Electron Spectrosc. 16 (1979) 589 [64] S. Storp, R. Holm, J. Electron Spectrosc. 16 (1979) 183

Рецензент: Д. Варга

ATOMKI KÖZLEMÉNYEK 22 (1980) 267-279 A PSE MÓDSZER ALKALMAZÁSA A ²⁵Mg RÉSZECSKE-ROTOR MODELLJÉBEN

KRUPPA ANDRÁS

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51.

A PSE módszerrel számolt deformált egyrészecske-pályákat használtuk a ²⁵Mg részecske-rotor modelljében. A nyert eredmények azt mutatják, hogy az uj módszer sokkal alkalmasabb könnyü deformált magok leirására mint a szokásosabb WFE módszer.

APPLICATION OF THE PSE METHOD IN THE PARTICLE-ROTOR MODEL OF ²⁵Mg. Deformed single particle orbits calculated with the PSE method were used in the particle-rotor model of ²⁵Mg. The results show that the new method is better suited of the description of light deformed nuclei than the more conventional WFE method.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СРП В ЧАСТИЦА-РОТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ²⁵ Mg. Результаты применения метода сепарабельного разложения потенциала (СРП) при расчете деформированных одночастичных орбит в частица-ротационной модели ²⁵ Mg показывает, что новый метод является более пригодной для описания легких деформированных ядер чем конвенциональный метод разложения волновой функции.

1. Bevezetés

Különböző tömegszám-tartományokban (A≈19-25, 150<A<190, A>224) a részecske-rotor modell [1,2] sikeresen alkalmazható deformált páros-páratlan magok tulajdonságainak megértésére [3-5]. Ebben a modellben csatolás van a páratlan részecske és a merev rotorként elképzelt törzs között. A kollektiv forgást leiró hullámfüggvény adott: nem más, mint a Wigner-féle D függvény, mig a részecskéé egy deformált potenciált tartalmazó Hamilton-operátor sajátfüggvénye. Ha a Nilsson-modellben [6] használt deformált harmonikusoszcillátor-potenciálnál realisztikusabb alaku potenciált akarunk használni akkor a deformált egyrészecskepályát valamilyen közelitő módszerrel kell meghatározni. A cikkben a ²⁵Mg nivószerkezetét és néhány elektromágnes tulajdonságát határoztuk meg a részecske-rotor modell keretében, különböző módszerekkel számolt deformált egyrészecskepályákat alkalmazva. A fő célunk az volt, hogy egy uj, a potenciál szeparálható sorfejtésén (PSE) alapuló közelitő módszer alkalmazhatóságát kipróbáljuk erre az esetre, mivel ez a módszer gömbszimmetrikus potenciál esetén nagyon előnyösnek mutatkozott [7].

Igen elterjedt, közelitő módszer az, melyben az ismeretlen hullámfüggvényt véges számu ismert függvény szerint "sorbafejtjük" (WFE): ez annak felel meg, hogy a teljes Hamiltonoperátort csonkitjuk egy adott bázison. Ezzel szemben a potenciál sorfejtési módszer (PSE) csak a kölcsönhatást csonkitja - a kinetikus energiát nem – igy biztos, hogy a kapott hullámfüggvény aszimptotikája a rövid hatótávolságu potenciálok által megköveteltnek megfelel. A PSE módszer bizonyára minden olyan esetben hatásos, amelyben a hullámfüggvény aszimptotikája fontos. A PSE módszer konvergenciáját általános esetre a [7] munkában bizonyitottuk. Itt adtuk a módszer összehasonlitását más közelitő eljárásokkal és mutattuk be a WFE módszernél gyorsabb konvergenciáját, valamint a konvergencia gyorsitására további lehetőségeket javasoltunk. A PSE módszer alkalmazása deformált potenciált tartalmazó

A PSE módszer alkalmazása deformált potenciált tartalmazó Schrödinger-egyenlet megoldására igen hasznosnak látszik, mivel deformált egyrészecskepálya számolására csak néhány módszer áll rendelkezésre és ezek is különböző hátrányos tulajdonságokkal rendelkeznek.

Jelen cikkben nem célunk a ²⁵Mg részecske-rotor modellbeli részletes vizsgálata valamint a különböző magmodellek kritikai összehasonlitása, sem annak vizsgálata, hogyan van deformálva a törzs a különböző rotációs sávokban. Célunk a PSE módszerrel számolt deformált pályát használva a részecske-rotor modell legegyszerübb formájának alkalmazása és ezáltal indikációk nyerése arra nézve, hogy az uj közelitő módszer sikeresen alkalmazható-e ezen a területen.

2. A részecske-rotor modell

Egy részecske-rotor rendszer Hamilton-operátora a következő [1,2]

ahol $H_{bels\tilde{o}}$ a belső részecskemozgás operátora amely azt irja le, hogy az utolsó nukleon a deformált páros-páros törzs által keltett potenciálban mozog,

$$H_{\text{bels}\tilde{o}^{\ast}} \frac{p^2}{2m} + V(r,\beta,\tilde{\ell},\tilde{s}).$$
(2)

Itt β a deformációs paraméter \overline{l} és s a pálya-impulzusmomentum, illetve a spin. A továbbiakban feltesszük, hogy a rendszer tengelyszimmetrikus. Az (l) egyenletben a forgási rész a következő

$$H_{\text{forg}} = \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} \sum_{k=1,2} (I_k - j_k)^2 = \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} (I^2 - I_3^2) + \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} (j^2 - j_3^2) - \frac{\hbar^2}{2\Theta_0} (I_{+j} - *I_{-j+})$$
(3)

ahol I_k és j_k a teljes és a belső impulzusmomentum komponensei a törzshöz rögzitett koordinátarendszerre vonatkoztatva, és Θ_0 a törzs tehetetlenségi nyomatéka. A (3) egyenlet jobboldalának első tagjából származik a forgási spektrum jól ismert I(I+1) szabálya. A második tag az un. visszalökési tag. Ezt a tagot a [8] hivatkozásban javasoltak szerint nem olvasztottuk bele a H_{belső}-be, hanem perturbációként kezeltük. A harmadik tag csatolja a részecske és a rotációs mozgást ez az un. Coriolis-csatolás. Ha a Coriolis-csatolást elhanyagoljuk, mind K, mind Ω (I₃ illetve j₃ sajátértéke) jó kvantumszám, és mivel a szimmetriatengely körül forgás nem lehetséges K= Ω . Igy a részecske-rotor rendszer leirására a következő hullámfüggvények által meghatározott bázist szokás használni

$$|IMK\rangle = (\frac{2I+1}{16\pi^2})^{\frac{1}{2}} [D_{MK}^{I} | \Omega \rangle + (-)^{I+K} D_{M-K}^{I} | \Omega \rangle]$$
(4)

Az |Ω> pálya H_{belső} sajátfüggvénye. Az (l) Hamilton-operátor várható értéke a (4) bázist használva

$$E = =E_{K} + \frac{\hbar^{2}}{2\Theta_{O}}[I(I+1)-2K^{2}] + \frac{\hbar^{2}}{2\Theta_{O}}a(I+\frac{1}{2})(-)^{I+\frac{1}{2}}\delta_{K,\frac{1}{2}} + \frac{\hbar^{2}}{2\Theta_{O}}$$
(5)

ahol E_K a $H_{bels\delta}$ sajátértéke és a az un. lecsatolási paraméter, amely a törzs és a részecske csatolási erősségét méri

$$a = - \langle K = \frac{1}{2} | j | K = -\frac{1}{2} \rangle$$
 (6)

A Coriolis-csatolás eggyel különböző K értékü sávokat tud összecsatolni, ekkor a rendszer hullámfüggvénye

$$|IM\rangle = \sum_{K} d_{K} |IMK\rangle$$
(7)

A Coriolis-csatolás teljes figyelembevétele azt jelenti, hogy a (7) függvénnyel képezzük az (1) operátor várható értékét, az (5) kifejezés ennek csak a diagonális járulékát veszi figyelembe. Az uj közelitő módszert a

$$H_{\text{helso}} | K \rangle = E_{K} | K \rangle$$
(8)

sajátértékegyenlet megoldására használtuk. A (8) egyenlet megoldására korábban elterjedten használt módszer, hogy Hbelső gömbszimmetrikus részének sajátfüggvényei szerint kell a |K> függvényt kifejteni. Ez tehát a WFE módszerek családjába tartozik. A |K> pontos meghatározása igen lényeges mivel nagyban befolyásolja a nivószerkezetet. Emellett a |K> a B(M1) redukált átmeneti valószinüséget is meghatározza, mivel

$$B(M1;I_{i}K \rightarrow I_{f}K) = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^{2} (g_{K} - g_{R})^{2} K^{2} |\langle I_{i}1K0|I_{f}K\rangle|^{2}$$
(9)

ahol

$$g_{K}^{K} = \langle K | g_{\ell}^{\ell} g_{3}^{*} g_{3}^{*} g_{3}^{*} | K \rangle$$
(10)

és g_l, g_s, g_R a pálya, a spin, illetve a törzs mágneses g faktora. A sztatikus mágneses dipolmomentum értéke pedig

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} (g_{R}I + (g_{K} - g_{R}) \frac{K^{2}}{I+1})$$
(11)

A K= ½ sáv esetén (ll)-hez és (9)-hez többletjárulékot kapunk (lásd 10. 57. old.), a konkrét példánk esetén ezt is figyelembe vettük.

3. A 25Mg részecske-rotor modellje

Litherland volt az első, aki a ²⁵Mg kisenergiáju nivóit a Nilsson-modell keretében értelmezte [ll], azóta igen sok számitást végeztek erre a magra a Nilsson-modell továbbfejlesztett változataival: sávkeveredés és magasabb rendű deformációk figyelembevétele, deformált Saxon-Woods potenciál használata [9]. A tengelyszimmetrikus törzset feltételező részecske-rotor számitásokat [l2-l4] követték az aszimmetrikus rotort használók [15,16]. A ²⁵Mg-re vonatkozó nagyszámu kisérleti adat értelmezésére még manapság is szivesen alkalmazzák ezt a modellt [17,18]. A héjmodell és a deformált Hartree-Fock számitások [19,20] is igazolják, hogy a ²⁵Mg alacsony energiáju (<7 MeV) nivói forgási spektrum alakját mutatják.

A deformált héjmodellben a mag alapállapotát ugy kapjuk, hogy az egyes nukleonok sorban betöltik az energetikailag legalacsonyabb egyrészecske-pályákat. Ezen pályák páronként töltődnek be, mivel kétszeresen elfajultak (± Ω), és emiatt a páros-páratlan mag alapállapotában a teljes impulzusmomentum éppen az utolsó, a le nem párositott nukleon Ω impulzusmomentuma. Láthatjuk tehát, hogy a deformált potenciál spektrumának szerkezete dönti el, hogy ez a modell milyen alapállapoti spint jósol. A deformált héjmodellben a mag gerjesztett állapotát legegyszerübben ugy képzelhetjük, hogy az utolsó nukleon egy magasabb energiáju pályára kerül. Az utolsó neutron vagy az $\Omega=5_2$, vagy az $\Omega=1_2$ pályára kerül, mivel a mélyebben fekvő pályák mind betöltöttek, az $\Omega = \frac{5}{2}$ és az $\Omega = \frac{1}{2}$ pályák a d_{5/2}, illet-ve az s_{1/2} gömbszimmetrikus állapotokból erednek. Azt, hogy ezek közül melyik van jobban kötve, a deformáció határozza meg. A ²⁵Mg alapállapotának spinje ⁵/₂. Ha tehát vissza akarjuk kapni a helyes alapállapoti spint, akkor az már megszoritást ad a deformációs paraméterekre.

*A használt deformált potenciál $V(\tilde{r})=V_0f(r)+V_s\frac{1}{r}\frac{df}{dr}\tilde{l}s-V_0r_0A^{\frac{1}{3}}\frac{df}{dr} \times [\beta_2Y_{20}+\beta_4Y_{40}], ahol f(r) Saxon-Woods formafaktor. A paraméterek értékét lásd [9] -ben.$



l. ábra. A deformált potenciál PSE módszerrel számolt energia-sajátértékei a deformáció függvényében. A szaggatott vonallal a helyes alapállapoti spint adó deformációs paraméter intervallumokat jelöltük.

Az l. ábra mutatja a számunkra érdekes két pálya energiáját a deformáció függvényében. Ha csak kvadrupól deformációt tételezünk fel, akkor az ábrából látszik, hogy a PSE módszer azt jósolja, hogy akkor kapjuk vissza a helyes alapállapoti spint, ha $\beta_2 \leq 0,28$, ugyanezt adja a WFE módszer is. Ennél nagyobb érték esetén az $\Omega = 5/2$ és az $\Omega = 1/2$ pálya sorrendje megfordul, ha azonban a hexadekapólus deformációt is bekapcsoljuk, akkor ez vissza tudja forditani a két pálya sorrendjét. Ha a β_2 értékét 0,4-nél rögzitjük, akkor a WFE módszer jóslata szerint $\beta_4 \geq 0,25$ a PSE módszer szerint $\beta_4 \geq 0,4$ hexadekapólus deformáció visszaállitja a helyes alapállapoti spint. Természetesen a β_2 értékét nem feltétlenül 0,4-nél kell rögziteni. Hogy milyen deformációs paramétert kell választani, azt az alap (I^T= $5/2^+$) és az első gerjesztett állapot (I^T= $1/2^+$) helyes sorrendjének elérése még nem rögziti, ehhez további mérhető fizikai mennyiségeket kell meghatároznunk.

Az alap- és az első gerjesztett állapot közötti energiakülönbséget nem egyszerüen az $\Omega = \frac{5}{2}$ és $\Omega = \frac{1}{2}$ deformált egyrészecske pálya energiájának a különbsége adja, hanem az (5) által meghatározott teljes energia különbsége. Ennek a meghatározásában viszont már igen nagy szerepet játszik a deformált egyrészecske hullámfüggvény is, mivel meg kell határozni a <j²> átlagot, ami a legujabb vizsgálatok [8] szerint nem elhanyagolható, és a lecsatolási paraméter meghatározásához is szükség van a hullámfüggvényre. Az 585 keV gerjesztési energiáju első l. táblázat. A ²⁵Mg első gerjesztett állapotának a PSE és a WFE módszerrel számított energiája $\hbar^2/20_0=0,15$ MeV-nél, a törzs különböző deformációinál. A kisérleti érték: E₁+=0,585 MeV.

-	-		
		WFE	PSE
β2	β4	E _{1/2} +[MeV]	E _{1/2} +[MeV]
0,2 0,2 0,2 0,3 0,3 0,4	0,0 -0,05 -0,1 0,1 0,2 0,4	0,731 0,501 0,269 0,213 0,726 0,714	0,973 0,910 0,822 0,469 0,915 0,772

gerjesztett állapot a K=½-del jellemzett rotációs sáv első tagja, mig az alapállapot a K=5/2-es sáv első tagja. Ezen két sáv között még a Coriolis-kölcsönhatás sem képes sávkeveredést okozni, mivel ΔK=2. A PSE módszert használva elhanyagoltuk a sávkeveredést de a Coriolis-kölcsönhatásnak a diagonális járulékát a K=½ sávra meghatároztuk. Igy az E½+ értékének jósága már méri bizonyos mértékig a hullámfüggvény jóságát és utmutatást is ad a deformációs paraméter kiválasztására.



2. ábra. Az alapállapotra épülő "tiszta" rotációs sáv nivóinak összevetése a mért értékekkel az A= $\hbar^2/20_0$ két értékére.

2. táblázat. A ²⁵Mg első gerjesztett állapotának a PSE és a WFE módszerrel számított energiája ħ²/20₀=0,2 MeV-nél, a törzs különböző deformációinál. A kisérleti érték: E₁+=0,585 MeV.

		WFE	PSE
β2	β4	E _{1/2} +[MeV]	E _{1/2} +[MeV]
0,2 0,2 0,2 0,3 0,3	0,0 -0,05 -0,1 0,1 0,2	0,609 0,380 0,187 0,149 0,635	0,944 0,922 0,864 0,568 1,000
0,4	0,4	0,611	0,992

Az l. és a 2. táblázat mutatja a K=½,I=½+ állapot energiáját különböző deformációs paramétereknél. A számitásokat a PSE és a WFE módszerrel is elvégeztük. A K=5/2-es alapállapoti sáv ezen modell keretén belül tisztán rotációs és a $\hbar^2/2\Theta_0$ paraméter értéke szabja meg a nivók elhelyezkedését. A környező páros-páros magokra ezen paraméter kisérleti értéke 0,15 MeV --0,20 MeV körül van. A tehetetlenségi nyomaték értékére a részecske-rotor modell nem ad becslést, ezt vagy a kisérletből vesszük, vagy egy másik modell jóslatát fogadjuk el, vagy illesztendő paraméternek tekintjük. Akármelyik eljárást követ-jük a $\hbar^2/2\Theta_0$ értékére 0,15 MeV, 0,25 MeV körüli érték adódik. A K= $\frac{5}{2}$ -es sáv alakját csupán ez az egy paraméter befolyásolja. A 3. ábra mutatja ezen sáv nivóit: a kisérleti értékeket és az (5) formulával számoltakat a $\hbar^2/2\Theta_0$ paraméter 0,15 MeV és 0,2 MeV értékeinél. A K= 3 sáv alakját már nagyban befolyásolja a deformált egyrészecske-hullámfüggvény, mivel ez határozza meg az (5) formulában szereplő lecsatolási paramétert. E formula tartalmazza a $\hbar^2/2\Theta_0$ paramétert is. Az irodalomban már régóta feltételezik [11], hogy a két sávhoz különböző tehetetlenségi nyomaték tartozik, azaz másként van a törzs deformálva az egyes sávokban. A PSE módszert alkalmazva a K=12-es sávra a $\hbar^2/2\Theta_0=0,15$ MeV érték adja a legjobb egyezést (3. ábra) a kisérletekkel, mig a K=5/2 sávra a 2. ábra szerint a $\hbar^2/2\Theta_0=0,2$ MeV érték. Az 1. és 2. táblázat szerint nincs lényeges különbség az első gerjesztett állapotnak a két módszerrel kapott energiájában, azonban ha a K=3 sáv többi nivóit nézzük (3.,4. és 5. ábra) már szembeötlő, hogy a WFE módszer milyen rossz eredményt ad.

Különösen nagy az eltérés a kisérleti értékekhez képest a $\beta_2=0,4$, $\beta_4=0,4$ deformációs értékeknél a WFE módszer alkalmazása esetén, ekkor az $I=\frac{1}{2}$, $I=\frac{3}{2}$ nivók helyes sorrendje is megfordul. A deformációs paraméter ezen értékeit a ²⁵Mg leirására a [9] munkában javasolták. Olyan számitást is végeztünk a WFE módszerrel, amelyben a Coriolis-kölcsönhatásnak csak a diagonális járulékát vettük figyelembe, s azt kaptuk, hogy a defor-



3. ábra. A ²⁵Mg PSE módszerrel számolt energiaszintrendszere az alapállapotra vonatkoztatva, (---) $\hbar^2/2\theta_0=0,15$ MeV, (----) $\hbar^2/2\theta_0=0,2$ MeV. A Coriolis-kölcsönhatásnak csak a diagonális járuléka van figyelembe véve.



4. ábra. Ugyanaz, mint a 3. ábra csak a törzs deformációs paraméterei: $\beta_2=0,4,\ \beta_4=0,4.$
mációs paraméterek ilyen nagy értékeinél a WFE módszerrel adódó lecsatolási paraméter igen nagy. Mivel a WFE módszer nagyobb részecske-törzs csatolást jósol, mint a PSE, és igy a WFE használata esetén a sávkeveredést is figyelembe kell vennie.



5. ábra. A ²⁵Mg WFE módszerrel számolt energiaszint-rendszere különböző törzs deformációknál a sávkeveredés figyelembevételével, Hird és Huang nyomán [9]. Az S.W. a deformált Saxon-Woods a H.O. a deformált oszcillátor potenciál használatára utal. Az utolsó oszlopban $(\hbar^2/20)_{\rm Cor.}$

Az 5. ábrát a [9] munkából vettük át. Ez a számitás a sávkeveredést teljes mértékben figyelembe vette, de igy sem sikerült a két nivó helyes sorrendjét megkapni. Ezt csak ugy tudták elérni, hogy a Coriolis-kölcsönhatásban a $\hbar^2/2\theta_0$ értékét ötödrészére csökkentették. Ezzel szemben a PSE módszer ennél a deformációs paraméterpárnál is helyes nivósorrendet és elhelyezkedést ad, noha a sávkeveredés nincs figyelembe véve. A PSE módszerrel a $\beta_2=0,3$, $\beta_4=0,1$ paraméterpár adta a legjobb egyezést a kisérletekkel. Összehasonlitva a 4. és 5. ábrákat láthatjuk, hogy a PSE módszer mennyivel jobb nivóenergiákat ad. Ez a javulás jórészt a PSE által szolgáltatott hullámfüggvény javára irható, mivel az realisztikusabb mint a WFE hullámfüggvénye [7].

A ²⁵Mg alapállapotának kvadrupolusmomentumát már régóta ismerik. Legujabban sikerült a hexadekapolmomentumra is megbizható kisérleti értékeket nyerni [21] ezek a következők:

$$Q_{2} = (24, 4^{+0}_{-4,0}) \text{ efm}^{2}$$

$$Q_{40} = (15, 3^{+2}_{-10,0}) \text{ efm}^{4}$$
(12)

A 6. ábra mutatja a Q_2 és a Q_{40} értékeit a deformáció függvényébem. A satirozott intervallum jelöli a kisérleti értékeket. Láthatjuk, hogy ha csak kvadrupól deformációt tételezünk fel és megköveteljük, hogy az alap- és első gerjesztett állapot sorrendje helyes legyen ($\beta_2 \leq 0,28$ lásd fentebb) akkor mindkét momentum jóval kivül esik a kisérleti értékek hibahatárán. Az is kiderül az ábrából, hogy a nivósémából legjobbnak talált deformációs paraméterek ($\beta_2=0,3$, $\beta_4=0,1$) jobban egyeznek a kisérlettel, mint a [9] munkában javasolt deformáció ($\beta_2=0,4$, $\beta_4=0,4$).



6. ábra. A $^{25}\rm Mg$ alapállapotának kvadrupól- és a hexadekapolmomentuma a deformáció függvényében. A folytonos vonal a Q₂-t, mig a szaggatott vonal a Q₄₀-t jelöli.

Az alapállapoti mágneses dipolmomentumot a (ll) formula adja, az ebben szereplő és a törzs forgása által keltett mágneses dipólmomentumot meghatározó $\mathfrak{g}_{\mathsf{R}}$ faktor a hidrodinamikai modell szerint $\mathfrak{g}_{\mathsf{R}} = \frac{Z}{\mathsf{A}}$. Jelen szémitásokban ezt az értéket használtuk. A $\mathfrak{g}_{\mathsf{K}}$ mennyiséget már a deformált egyrészecske-hullámfüggvény határozza meg (l0). A szabad neutron esetén a pályamozgásából, illetve a spinből eredő mágneses d faktorok értékei $\mathfrak{g}_{\mathsf{L}}^{\mathsf{SZ}}=0$, $\mathfrak{g}_{\mathsf{S}}^{\mathsf{SZ}}=-3,82$ eh/2mc egységekben. A törzs polarizációját, amit az utolsó le nem párosított nukleon okoz, ugy vesz-

szük figyelembe, hogy effektiv g faktorokat használunk. Kimutatható ugyanis, hogy az utolsó nukleon a törzs nukleonjainak spinjét saját spinjével ellentétes irányba törekszik állitani 3. táblázat. Az $x=g_s^{eff}/g_s^{sz}$ spinpolarizáció értéke amellyel meg-

kapjuk a K=½ sávon belüli kisérleti B(M1;32-2+) = =15,4+1,3.10⁻³ Wu (I), illetve a B(M1;72+-52+)= =7,8+1,5.10⁻³ Wu (II) redukált átmeneti valószinüségeket. A β₂, β₄ mennyiségek a törzs deformációját jellemzik.

		PS	SE	WFE			
β ₂	β4	X(I)	X(II)	X(I)	X(II)		
0,2 0,2 0,2 0,3 0,3	0,0 -0,05 -0,1 0,1 0,2	0,612 0,661 0,704 0,526 0,502 0,508	0,469 0,513 0,547 0,400 0,374	0,945 1,004 1,109 0,673 0,691	0,673 0,729 0,814 0,485 0,467		

és a törzs dipolmomentuma legalacsonyabb rendben a polarizáló nukleon <sz> értékével arányos [3]. Számitásainkban a g^{sz} értéket használtunk, de bevezettük az

x=9^{eff}_s/9^{sz}_s

mennyiséget, amely a spin-polarizáció nagyságát méri. A ²⁵Mg alapállapotában a kisérleti mágneses dipolmomentum μ =-0,86 μ o, ahol μ_0 a Bohr-magneton [22]. Mind a WFE, mind a PSE módszert használva ezt az értéket x=0,9 spinpolarizációval kapjuk viszsza. Az az érdekes dolog derült ki, hogy az általunk vizsgált deformációk esetén (-0,1≤β₂≤0,5, -0,05≤β₄≤0,5) deformációtól független a dipólmomentum. Ennek az az oka, hogy deformációtól függetlenül az (Ω =5/2+)-szal jellemzett deformált egyrészecskehullámfüggvényben a d_{5/2} gömbszimmetrikus pálya 99 %-os sullyal szerepel.

Meghatároztunk néhány redukált B(M1) átmeneti valószinüséget, mind a K= $\frac{5}{2}$ -es mind a K= $\frac{1}{2}$ -es sávon belüli átmenetekre. A kisérleti értékeket a [18] munkából vettük. Az alapállapoti K= $\frac{5}{2}$ sávban B(M1; $\frac{7}{2}$ + $\frac{5}{2}$ +)=0,29+0,06 Wu. Mind a PSE, mind a WFE módszert alkalmazva a korábban használt x=0,9 spinpolarizáció érték most is jó, ugyanis ekkor mindkét módszerrel B(M1; $\frac{7}{2}$ + $\frac{5}{2}$ +)=0,25 Wu adódik. A 3. táblázat mutatja a K= $\frac{1}{2}$ sávon belüli átmenetekre nyert eredményeket. Ez esetben mindkét módszer nagyobb spinpolarizációt jósol. A táblázatokból most elég csupán a β_2 =0,3, β_4 =0,1, β_2 =0,4, β_4 =0,4 paraméterpároknál álló eredményeket figyelni, hiszen ezek azok, amelyekkel már jól leirtuk a ²⁵Mg energianivóit. Láthatjuk, hogy ezen paraméterpárokkal most is jól megkapjuk a ²⁵Mg néhány elektromágneses tulajdonságát.

4. Összefoglalás

A PSE módszer minden különösebb nehézség nélkül alkalmazható deformált egyrészecskepálya meghatározására. Legjobb tudomásunk szerint az itt bemutatott számitás az első a PSE módszerrel ezen feladat megoldására. Deformált potenciált tartalmazó Schrödinger-egyenlet megoldására korábban gyakorlatilag két módszert használtak: az egyik csatolt differenciálegyenlet-rendszerre vezet, ám ennek egzakt megoldása manapság sem könnyü; a másik módszerben pedig gömbszimmetrikus pályák szerint fejtjük sorba a deformált hullámfüggvényt. Ha a deformált pálya sorfejtésében (WFE) résztvevő függvények a gömbszimmetrikus héjmodell-potenciál sajátállapotai, akkor könnyü magok esetén ez a módszer nagy nehézséggel néz szembe, ugyanis a bázisállapotok száma kicsi. A PSE módszernél ez a nehézség nem lép fel és semmiféle többletnehézség nincs a gömbszimmetrikus esethez képest.

Számitásaink azt mutatják, hogy a 25 Mg szerkezetének leirására a részecske-rotor modell jól müködik. Ezen modell alkalmazásához deformált egyrészecskepályákat határoztunk meg különböző módszerekkel. A PSE módszerrel számolt nivósémák a kisérletekkel összehasonlitva sokkal jobb eredményt adtak, mint a WFE módszerrel nyertek. Ez véleményünk szerint annak köszönhető, hogy az uj módszer deformált egyrészecske-pályája sokkal közelebb áll a valódihoz, mint a WFE módszeré. E miatt az uj eljárás sokkal kisebb részecske-törzs csatolást jósol mint a régi módszer. Eddig számitásaink a 25 Mg alap- és első gerjesztett állapoti rotációs sávjára a $\beta_2=0,3$ és $\beta_4=0,1$ deformáció értékeket favorizálják.

A ²⁵Mg-re elvégzett vizsgálatok alapján azt mondhatjuk, hogy a PSE módszer sokkal alkalmasabb a könnyü deformált magok leirására mint a WFE módszer.

Megköszönöm Dr. Lovas Rezső kollégámnak, hogy a WFE módszerhez szükséges programját átadta és köszönöm Tóth Péter fizikusnak a számitástechnikai problémák megoldásában nyujtott segitségét.

Hivatkozások

- [1] A. Bohr, B. R. Mottelson, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid. Selsk. 27. 16. füzet (1953)
- [2] A. K. Kerman, Mat.Fys.Medd.Dan,Vid. Selsk. 30. 15. füzet (1956)
- [3] O. Nathan, S. G. Nilsson Alpha-beta- and gamma-ray spectroscopy, Szerk.: K. Sieghban, I. kötet (North-Holland, Amsterdam, 1965) 259 o.
- [4] B. Elbek, P. O. Tjom, in Advances in Nuclear Physics,
 3. kötet szerk.: M. Baranger, E. Vogt (Plenum Press, New York, 1969) 159. o.
- [5] W. Ogle, S. Wahlborn, R. Piepenbring és S. Frederiksson, Rev.Mod.Phys. 43 (1971) 424

[6	5]	S. G. Nilsson, Dan.Mat.Fys.Medd. 29. 16. füzet (1955)
[7]	B. Gyarmati, A. T. Kruppa és J. Revai, Nucl. Phys. A326
		(1979) 119
[8	3]	E. Osnes, J. Rekstad és O. K. Gjotterud, Nucl. Phys.
		A253 (1975) 45
[9]	B. Hird, K. H. Huang, Can. J. Phys. 51 (1973) 956
[10		A. Bohr, B. R. Mottelson, Nuclear Structure II. kötet
		(W. A. Benjamin, Inc., 1975)
[1]]	A. E. Litherland, Can. J. Phys. 36 (1958) 378
[12	2]	K. H. Bhatt, Nucl. Phys. 39 (1962) 375
[13	3]	C. Daum, Nucl. Phys. 51 (1964) 244
[14	-]	M. Lanbertm, P. Midy és P. Desgrolard, Phys. Rev. C8
		(1973) 1728
[15	5]	B. E. Chi, J. P. Davidson, Phys. Rev. 131 (1963) 366
[16	5]	B. E. Chi, A. E. Anderson, Phys. Rev. 185 (1969) 1594
[17]	T. K. Alexander, O. Häusser, A.B.McDonald és G. T. Ewan,
		Can. J. Phys. 50 (1972) 2193
[18	3]	P. A. Butler, A. J. Brown, L. L. Green, A. N. James,
		C. J. Lister, J. D. MacArthur, P. J. Nolan, és J. F.
		Sharpey-Schafer, J. Phys. G. 1 (1975) 665
[19]	B. J. Cole, J. Phys. G. 2 (1976) 541
[20)]	G. Ripka, Advances in Nuclear Physics szerk.: M.
		Baranger, E. Vogt p. 183
[21	_]	H. Enteneuer, H. Rohhaas, O. Schwenther, J. R. Moreira,
		C. W. de Jager, L. Lapikás, H. de Vries, J. Flanz,
		K. Itoh, G. A. Peterson, D. V. Webb, W. C. Barber és
-	-	S. Kowalski, Phys. Rev. C. 16 (1977) 1703
L 2 2	2]	P. M. Endt, C. Van Der Leun, Nucl. Phys. A310 (1978)

Lektor: Vertse Tamás



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 281-300

PADE APPROXIMATION AND ITS GENERALIZATIONS

K. JUHÁSZ, G. NÉMETH*

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

The algorithms and their programs for the numerical evaluation of *Chebyshev-*, *Legendre-*, *Laguerre-* and *Hermite-*Padé approximants as well as recursion relations together with their programs for Taylor series transformations to the series of the above mentioned polynomials are briefly described. To the best of our knowledge the results of the Sections 3.-6. have not been published to this date.

A PADÉ-FÉLE KÖZELITÉS ÉS ÁLTALÁNOSITÁSAI. *Csebisev-*, *Legendre-*, *Laguerre-* és *Hermite-*Padé közelitések numerikus számolását lehetővé tevő algoritmusokat és programjaikat, valamint Taylor-sorok fenti polinomok szerinti sorokra való transzformálására szolgáló rekurziós összefüggéseket és programjaikat ismertetjük. Legjobb tudásunk szerint a 3.-6. rész eredményeit eddig nem publikálták.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ПАДЕ И ЕГО ОБОБЩЕНИЯ. В статье описаны алгоритмы и соответствующие программы для нумерического расчете приближений Чебышева-, Лежандра-, Лагерра- и Эрмита-Паде, а также рекурсивные соотношения и соответствующие программы для преобразования рядов Тейлора в ряды по упомянутым полиномам. На сколько нам известно, результаты, описанные в 3.-6. главах до сих пор еще не опубликованы.

1. Introduction

Padé approximations are particular types of rational fraction approximations to the value of a function. A Padé approximant is the ratio of two polynomials constructed from the series expansion coefficients of the function [1].

Suppose that the function to be approximated is defined by the power series

*Central Research Institute for Physics, Budapest

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i$$
.

We denote the M,N Padé approximant to f(x) by

$$S_{M,N}(x) = \frac{P_{M}(x)}{Q_{N}(x)} = \frac{\sum_{i=0}^{M} p_{i} \times i}{\sum_{i=0}^{N} q_{i} \times i}$$

The coefficients of $\mathsf{P}_\mathsf{M}(\mathsf{x})$ and $\mathsf{Q}_\mathsf{N}(\mathsf{x})$ are determined by the equation

$$f(x) - \frac{P_{M}(x)}{Q_{N}(x)} = O(x^{M+N+1})$$

with the normalization condition

$$Q_N(0) = 1$$
.

Finally we require that P_M and Q_N have no common factors.

The Padé approximations may be generalized first [2] in a way to enable us to obtain rational approximations which are better in a given interval. In the previous definition we have only to replace the sequence of monomials $1, x, x^2, ...$ by a sequence of other functions (e.g. orthogonal polynomials) ϕ_0 , ϕ_1 , ϕ_2 ,..., where ϕ_1 has degree i.

If we work with polynomials we cannot hope to get good approximations in problems with infinite intervals. In these cases we get the approximations by annihilating as far as possible the leading term in

$$Q_N(x) f(x) - P_M(x)$$
.

This is the second method of generalized approximations.

The contents of the present paper are algorithms and their programs for numerically evaluating the Padé approximants from series of *Chebyshev*, *Legendre*, *Laguerre* and *Hermite* polynomials as well as recursion relations together with their programs for transforming Taylor series to the series of the above mentioned polynomials.

2. Padé Approximants for Finite Intervals

2.1. Chebyshev-Padé Approximation

The expansion of functions in terms of *Chebyshev* polynomials has proved to be the most useful when one needs to approximate such functions in the neighbourhood of an interval of a line rather than in the neighbourhood of a point. Without loss of generality we may take this interval to be [-1,+1]. Our aim in this subsection is to present a method, due to C.W. Clenshaw and K. Lord [3], which extends the Padé idea to the case of *Chebyshev* series in order to obtain readily an accurate rational approximation on [-1,+1] to a function with a convergent *Chebyshev* series expansion.

We denote the Chebyshev series of the function f(x) by

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i T_i(x) ,$$

where $T_i(x) = \cos(i \cos^{-1}x)$ and $\sum_{i=0}^{\infty} c_i$ means the sum $\frac{1}{2}c_0 + c_1 + c_2 + \dots$. Let

$$S_{M,N}(x) = \frac{P_M(x)}{Q_N(x)} = \sum_{i=0}^{\infty} A_i^{T_i}(x)$$

Here $P_{M}(x) = \sum_{i=0}^{M} p_{i}T_{i}(x)$ and $Q_{N}(x) = \sum_{i=0}^{N} p_{i}T_{i}(x)$, and in order to

maintain the analogy with the Padé method we give q_0 the value of 2. We attempt to find the coefficients p_i and q_i in the following way.

We write

$$\begin{split} & \stackrel{\mathsf{M}}{\Sigma} \stackrel{\mathsf{p}}{}_{\mathsf{I}} \mathsf{T}_{\mathsf{I}} = \begin{pmatrix} \stackrel{\mathsf{N}}{\Sigma} \stackrel{\mathsf{q}}{}_{\mathsf{I}} \mathsf{T}_{\mathsf{I}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \stackrel{\infty}{\Sigma} \stackrel{\mathsf{A}}{}_{\mathsf{I}} \mathsf{T}_{\mathsf{I}} \end{pmatrix} \\ & \stackrel{\mathsf{m}}{}_{\mathsf{I}} = 0 \end{split}$$

Applying the fundamental relation

NI

$$T_{i}T_{j} = \frac{1}{2} (T_{i+j} + T_{i+j})$$

using a term-by-term multiplication we get

(2.1.1)
$$p_i = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N} q_j (A_{i+j} + A_{i-j}), i = 0, 1, 2, ...$$

We examine (2.1.1) for i > M. It is evident that we may take $p_i \equiv 0$ for i = M+1, M+2,..., therefore

$$\sum_{j=0}^{N} (A_{i+j} + A_{i-j}) = 0, i = M+1, M+2, \dots$$

This is a symmetric linear difference equation in A_i of order 2N with constant coefficients. Its general solution may be expressed as a linear combination of the i-th powers of the roots of the polynomial equation

$$\sum_{j=0}^{N} q_{j}(+^{j}++^{-j}) \equiv 0 .$$

We may factorize our polynomial in t in the following manner

(2.1.2)
$$\sum_{j=0}^{N} q_{j}(+^{N+j}++^{N-j}) = \mu(\sum_{j=0}^{N} \gamma_{j}+^{N-j}) (\sum_{j=0}^{N} \gamma_{j}+^{j})$$

where each zero of $\sum_{j=0}^{N} \gamma_j + \sum_{j=0}^{N-j} \beta_j$ is less than unity in modulus.

Here μ is a scaling factor. Since $A_i \rightarrow 0$ as $i \rightarrow \infty$, it must be expressible in terms of those roots of modulus less than unity; thus A_i satisfy the equation

(2.1.3)
$$\sum_{j=0}^{N} \gamma_{j}^{A} |i-j|^{=0}$$
, $i=M+1, M+2, ...$

As in the Padé case, we equate A; to a; for i=0,1,...,M+N, and then calculate the coefficients γ_j for j=1,2,...,N by solving the system of N simultaneous equations

$$\sum_{i=0}^{\infty} \gamma_{i} = |i-j|^{=0}$$
, $i=M+1,...,M+N$,

remembering that γ_{-1} . From (2.1.2)

N

$$N-j$$

$$q_{j} = \mu \sum_{k=0}^{N-j} \gamma_{k} \gamma_{j+k}$$

and according to our convention that $q_0=2$, we get

$$\mu^{-1} = \frac{N}{2} \sum_{k=0}^{N} \gamma_{k}^{2}$$

Finally from (2.1.1) we can calculate the coefficients

$$P_{i} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{N} q_{j} (a_{i+j} + a_{i-j}), i=0,1,\ldots,M.$$

The error can be given by

$$E(x) = f(x) - S_{M,N}(x) = \sum_{i=M+N+1}^{\infty} (a_i - A_i)T_i(x),$$

where we can generate A; for i=M+N+1, M+N+2, ... from (2.1.3) when the γ_i have been found.

2.2. Legendre-Padé Approximation

In earlier papers [4,5] two kinds of Padé approximants for *Legendre* series were introduced. They are fairly difficult to use for numerical calculations. Now we describe an algorithm, due to J.T. Holdeman, Jr. [6], applied to *Legendre* polynomial case.

The function to be approximated is given by

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i P_i(x)$$

where $P_i(x)$ is the Legendre polynomial of degree i. We denote the approximant to f(x) by

$$S_{M,N}(x) = \frac{\sum_{i=0}^{M} P_i P_i(x)}{\sum_{i=0}^{N} q_j P_j(x)}$$

where the sets of coefficients p; and q; must satisfy

(2.2.1.)
$$f(x) \sum_{j=0}^{N} q_j P_j(x) - \sum_{i=0}^{M} p_i P_i(x) = \sum_{i=M+N+1}^{\infty} \rho_i P_i(x)$$

with q = 1. To solve this equation we introduce a H^{f} matrix associated with the function f(x) whose elements are given by

 $H_{ij}^{f} = (i+\frac{1}{2}) \int_{-1}^{1} f(x) P_{i}(x) P_{j}(x) dx$

and satisfy the recursion relation

$$\frac{i+1}{2i+3} \stackrel{\text{H}}{}^{\text{H}}_{i+1,j} + \frac{i}{2i-1} \stackrel{\text{H}}{}^{\text{H}}_{i-1,j} = \frac{j+1}{2j+1} \stackrel{\text{H}}{}^{\text{H}}_{i,j+1} + \frac{j}{2j+1} \stackrel{\text{H}}{}^{\text{H}}_{i,j-1}.$$

Since this relation remains valid for i=0 and j=0 provided we set $H_{i,-1}^{f}=H_{-1,j}^{f}=0$, any element of the matrix can be generated by recursion from the first column which is equal to the expansion coefficients of f(x),

Multiplying (2.2.1) by $(i+\frac{1}{2}) P_i(x)$ dx and integrating over [-1,+1] yields the set of equations

On the analogy of the Padé approximation we now require ρ_i to be zero for $i{\le}M{+}N.$ The equations to be solved for the coefficients p_i and q_j are

$$\sum_{j=1}^{N} H_{j}^{f} = -H_{j}^{f} = -a_{j}, \quad i=M+1, \dots, M+N$$

and

$$p_i = \sum_{j=0}^{N} H_{ij}^f q_j, \quad i=0,1,\ldots,M$$

The coefficients ρ_i are given by

. .

$$\rho_i \stackrel{N}{=} \Sigma H_{ijqj}^f, \quad i \stackrel{M+N+1}{=} M \stackrel{N+N+2}{=} \dots$$

3. Padé Approximants for Infinite Intervals

3.1. Laguerre-Padé Approximation

In this section we use the well-known recursion relations for orthogonal polynomials to obtain generalized Padé approximations. First the basic functions will be the generalized *Laguerre* polynomials.

Let us suppose that the *Laguerre* series of the function to be approximated is given by

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i L_i^{(\alpha)}(x)$$

where $L_i^{(\alpha)}(x)$ is the generalized *Laguerre* polynomial of degree i and the coefficients a_i are given by

$$a_{i} = \frac{\Gamma(i+1)}{\Gamma(i+\alpha+1)} \int_{0}^{\infty} e^{-x} x^{\alpha} f(x) L_{i}^{(\alpha)}(x) dx, \quad i=0,1,\dots$$

For later use we mention that the generalized *Laguerre* polynomials satisfy the recursion relations

$$L_{0}^{(\alpha)}(x) = 1$$
, $L_{1}^{(\alpha)}(x) = \alpha + 1 - x$

(3.1.1)

We attempt to get the coefficients p; and q; in the approximant

$$S_{M,N}(x) = \frac{P_{M}(x)}{Q_{N}(x)} = \frac{\sum_{i=0}^{M} p_{i} x^{i}}{\sum_{i=0}^{N} q_{i} x^{i}}$$

by the annihilation of the leading terms in

$$Q_N(x)f(x) - P_M(x)$$
.

Let

$$\times f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \times L_i^{(\alpha)}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i^{(1)} L_i^{(\alpha)}(x) .$$

It is obvious from (3.1.1) that

$$\times L_{i}^{(\alpha)}(x) = (2i + \alpha + 1) L_{i}^{(\alpha)}(x) - (i + 1) L_{i+1}^{(\alpha)}(x) - (i + \alpha) L_{i-1}^{(\alpha)}(x) ,$$

therefore

$$a_{0}^{(1)} = (\alpha + 1) (a_{0} - a_{1})$$

$$a_{i}^{(1)}(2i+\alpha+1) a_{i}^{-}(\alpha+i+1) a_{i+1}^{-} a_{i-1}^{-}, i=1,2,...$$

In general let

$$x^{j} f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_{i}^{(j)} L_{i}^{(\alpha)}(x), j=1,2,...,$$

then the recursion relations

$$a_{0}^{(j)} = (\alpha+1) (a_{0}^{(j-1)} - a_{1}^{(j-1)})$$

$$a_{i}^{(j)} = (2i+\alpha+1)a_{i}^{(j-1)} - (\alpha+i+1)a_{i+1}^{(j-1)} - ia_{i-1}^{(j-1)}, i=1,2,...$$

are valid for the coefficients ai. Then we may write

$$Q_{N}(x)f(x) = \begin{pmatrix} N \\ \Sigma \\ j=0 \end{pmatrix}f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \begin{pmatrix} N \\ \Sigma \\ j=0 \end{pmatrix}L_{i}^{(\alpha)}(x).$$

We choose the polynomial

$$P_{M}(x) = \sum_{i=0}^{M} \left(\sum_{j=0}^{N} q_{j} a_{i}^{(j)} \right) L_{i}^{(\alpha)}(x) .$$

In the usual way coefficients $\mathsf{q}_{\,j}$ are determined by solving the system of equations

$$\Sigma q_{ja_{i}}^{(j)} = 0$$
, $i = M+1, ..., M+N$
 $j = 0$

with $q_0=1$. Knowing the coefficients q_j the polynomial $P_M(x)$ can be calculated and finally rewritten in powers of x by using the explicit expression of $L_i^{(\alpha)}(x)$.

3.2. Hermite-Padé Approximation

Now let us consider the case of *Hermite* polynomials. The function f(x) to be approximated is given by

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i H_i(x)$$

where $H_i(x)$ is the *Hermite* polynomial of degree i and the coefficients a_i are defined by

$$a_{i} = \frac{1}{i!2^{i}\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^{2}} f(x) H_{i}(x) dx, i=0,1,...$$

The recursion relations used are

$$H_{0}(x) = 1, H_{1}(x) = 2x$$

(3.2.1)

$$H_{i+1}(x) = 2xH_i(x) - 2iH_{i-1}(x), i=1,2,...$$

Similarly to the previous method we calculate the coefficients p_i and q_i in the approximant

$$S_{M,N}(x) = \frac{P_{M}(x)}{Q_{N}(x)} = \frac{\sum_{i=0}^{M} p_{i} \times^{i}}{\sum_{i=0}^{N} q_{i} \times^{i}}$$

by annihilating the leading terms in

$$Q_N(x)f(x) - P_M(x)$$
.

Let

$$xf(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x H_i(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i^{(1)} H_i(x) .$$

From (3.2.1) it is clear that

$$XH_{O}(X) = \frac{1}{2}H_{1}(X)$$

 $xH_{i}(x)=\frac{1}{2}H_{i+1}(x) + iH_{i-1}(x), i=1,2,...,$

hence

$$a_{0}^{(1)} = a_{1}$$

$$a_{i}^{(1)} = \frac{1}{2} a_{i-1}^{+(i+1)} a_{i+1}^{i=1,2,\ldots}$$

Generally we may write

111

$$x^{j}f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_{i}^{(j)}H_{i}(x), j=1,2,...,$$

where the coefficients $a_i^{(j)}$ satisfy the recursion relations

a_o(j)_{=a}(j-1)

$$a_{i}^{(j)} = \frac{1}{2} a_{i-1}^{(j-1)} + (i+1) a_{i+1}^{(j-1)}, i = 1, 2, \dots$$

Therefore

$$Q_{N}(x)f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \left(\sum_{j=0}^{N} q_{j}a_{i}^{(j)} \right) H_{i}(x) .$$

Let us choose

$$P_{M}(x) = \sum_{i=0}^{M} \left(\sum_{j=0}^{N} q_{j} a_{i}^{(j)} \right) H_{i}(x)$$

and solve the equations

$$\sum_{j=0}^{N} q_{j}a_{i}^{(j)} = 0, \quad i = M+1, \dots, M+N$$

with $q_0=1$ in order to obtain the coefficients q_j . Then we can determine the polynomial $P_M(x)$ and rewrite it in powers of x applying the explicit expression of $H_i(x)$.

4. Series Transformation

When a function is a polynomial or its Taylor series converges well, it is possible to transform the expansion coefficients of Taylor series to those of series of orthogonal polynomials. We present recursion relations for transformations in the case of *Chebyshev*, *Legendre*, *Laguerre* and *Hermite* polynomials. Let the function be given by the Taylor series

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i$$

with known coefficients a_i . In general we denote a function expanded in series of orthogonal polynomials $p_k(x)$ by

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k p_k(x)$$

where bk is defined by the integral

$$b_{k} = c_{k} \int_{a}^{b} \omega(x) f(x) p_{k}(x) dx$$
.

Here c_k is a normalizing factor and $\omega(x)$ is the weight function with respect to which the polynomials $p_k(x)$ are orthogonal in [a,b]. Substituting the Taylor series of f(x) we may write

(4.1)
$$b_{k} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n} p_{n}^{(k)}$$

where

 $\rho_n^{(k)} = c_n \int_a^b x^n \omega(x) p_n(x) dx$

If we put n=k+2l (or n=k+l for *Laguerre* polynomials) in (4.1) we get

$$b_{k} = d_{k} \sum_{l=0}^{\infty} a_{k+2l} \rho_{l}^{(k)}$$

or in Laguerre case

 $b_{k} = d_{k} \sum_{l=0}^{\infty} a_{k+l} \rho_{l}^{(k)}$

the quantities $\rho_{l}^{(k)}$ can be easily defined. Here d_k is a normalizing factor from the condition $\rho_{o}^{(k)}=1$. Using the Rodrigues formula for the given orthogonal polynomial we get

$$\rho_{\ell}^{(k)} = \frac{\Gamma(k+2\ell+1)}{2^{k+2\ell-1}\Gamma(\ell+1)\Gamma(\ell+k+1)}, \quad \ell=0,1,2,\ldots; \quad k=0,1,2,\ldots;$$

$$\rho_{\ell}^{(0)} = \frac{\ell-\frac{1}{2}}{\ell} \rho_{\ell-1}^{(0)}, \quad \rho_{\ell}^{(k)} = \frac{(k+2\ell)(k+2\ell-1)}{4\ell(\ell+k)} \rho_{\ell-1}^{(k)}, \quad \ell=1,2,\ldots,$$

$$d_{k} = 2^{1-k}$$

in the Chebyshev case;

$$\rho_{\ell}^{(k)} = \frac{\sqrt{\pi}(2k+1)\Gamma(k+2\ell+1)}{2^{k+2\ell+1}\Gamma(\ell+1)\Gamma(\ell+k+3/2)}; \quad \ell=0,1,2,\ldots; \quad k=0,1,2,\ldots;$$

$$\rho_{\ell}^{(0)} = \frac{\ell-\frac{1}{2}}{\ell+\frac{1}{2}}\rho_{\ell-1}^{(0)}, \quad \rho_{\ell}^{(k)} = \frac{(k+2\ell)(k+2\ell-1)}{4\ell(\ell+k+\frac{1}{2})}\rho_{\ell-1}^{(k)}, \quad \ell=1,2,\ldots,$$

$$d_{k} = \frac{k!}{(2k-1)!!}$$

in the *Legendre* case;

$$\rho_{\ell}^{(k)} = \frac{\Gamma(k+2\ell+1)}{2^{k+2\ell}\Gamma(\ell+1)\Gamma(k+1)}, \quad \ell=0,1,2,\ldots; \quad k=0,1,2,\ldots$$

$$\rho_{\ell}^{(0)} = (\ell-\frac{1}{2}) \quad \rho_{\ell-1}^{(0)}, \quad \rho_{\ell}^{(k)} = \frac{(k+2\ell)(k+2\ell-1)}{4\ell} \quad \rho_{\ell-1}^{(k)}, \quad \ell=1,2,\ldots$$

$$d_{k} = 2^{-k}$$

in the Hermite case and

$$\rho_{l}^{(k)} = \frac{(-1)^{k} \Gamma(k+l+1) \Gamma(k+l+\alpha+1)}{\Gamma(k+\alpha+1) \Gamma(k+1) \Gamma(k+1)}, \ l=0,1,\ldots; \ k=0,1,\ldots$$

$$\rho_{l}^{(o)} = (l+\alpha) \rho_{l-1}^{(o)}, \ \rho_{l}^{(k)} = \frac{(k+l)(k+l+\alpha)}{l} \rho_{l-1}^{(k)}, \ l=1,2,\ldots$$

$$d_{k} = (-1)^{k}$$

in the Laguerre case.

5. Programs

The programs are written in FORTRAN programming language and are run on the CDC 3300 computer of SZTAKI, Budapest. The main programs are not specified, they should be freely constructed by the user. The input arguments, of course, should be defined in and transferred from the main program. Except for the series transforming one the programs use the subroutine DGELG from the IBM Scientific Subroutine Package which solves the system of simultaneous linear equations by Gauss elimination. Full listings will be supplied upon request.

5.1. The program CHPAMN

It computes the M,N *Chebyshev-Padé* approximant and its maximal error to a given function which is defined by its *Chebyshev* series. (See section 2.1)

5.1.1. SUBROUTINE CHPAMN (A, P, Q, M, N, MNN, ERROR, TOL)

It is invoked by the CALL statement from the main program. Input arguments:

- A
- a double precision vector of length MNN which contains the series expansion coefficients
- M,N integers which define the degree of the numerator and the denominator of the Padé approximant respectively
- MNN an integer which is equal to the number of coefficients A (MNN=M+N+1+the number of error tag coefficients)
- TOL a real variable into which the tolerance for the error approximation is to be read

Output arguments:

- P,Q double precision vectors of length M+1 and N+1 respectively in which the coefficients of the numerator and the denominator in the Padé approximant will be stored (they are ordered in terms of x powers)
- ERROR a double precision variable in which the approximated error will be stored

Subroutines called by CHPAMN: DGELG, ERR, CHORD.

The subroutine CHORD orders the polynomial in the approximant in terms of x powers by means of subroutines SZEGYU and SZCSTA. CHORD,SZEGYU and SZCSTA are adopted from the program package PRAKA written by G. Németh [7]. CHORD corresponds to RENDZ3 in PRAKA.

5.1.2. SUBROUTINE ERR (GAMMA, A, B, MN1, MNN, ERROR, TOL)

It gives the approximated ERROR with the tolerance TOL. Input arguments:

GAMMA - a double precision vector filled in CHPAMN by the quantities γ_i,j=0,1,...,N in equation (2.1.2)

A	-	see section 5.1.1
MN 1	-	an integer variable which is equal to M+N+1
MNN	-	see section 5.1.1
TOL	-	see section 5.1.1

Output arguments:

B - a double precision vector in which the coefficients
 A; will be stored
 ERROR - see section 5.1.1

5.2. The program LEPAMN

It gives the M,N *Legendre*-Padé approximant and the coefficients of error tag to a function defined by its *Legendre* series. (See section 2.2.)

5.2.1. SUBROUTINE LEPAMN (A, B, P, Q, M, N)

It should be called in the main program with the following arguments.

Input arguments:

A - a double precision vector in which the series expansion coefficients is to be read

M,N - see section 5.1.1

Output arguments:

B - a double precision vector in which the quantities will be stored

P,Q - see section 5.1.1

Subroutine called by LEPAMN: DGELG, ORDER.

5.2.2. SUBROUTINE ORDER (A, B, M, N)

It orders the polynomials in the approximant in terms of x powers.

Input arguments:

A	-	a	double	precision	vector	filled	by	the	coefficients
		to	be tra	ansformed					

M,N - integers which define the indexes of the coefficients to be transformed (from M to N)

Output arguments:

B - a double precision vector in which the transformed coefficients will be returned

Subroutine called by ORDER: COEF.

5.2.3. SUBROUTINE COEF (KF, KF2, N, M)

It computes the factorial N and/or semi-factorial 2M+1. Input arguments:

N,M - integers which are equal to -1 if it is not necessary to compute factorial and semi-factorial respectively Output arguments:

KF,KF2 - integer vectors which will contain the value of required factorials and semi-factorials respectively

5.3. The program HEPAMN

It defines the M,N Hermite-Padé approximant to a given function given by its Hermite series. (See section 3.1.)

5.3.1. SUBROUTINE HEPAMN (A, P, Q, M, N)

It is called by the main program. Input arguments:

A - a double precision vector in which the series expansion coefficients are to be read (its length is M+N+3)

M,N - see section 5.1.1

Output arguments:

P,Q - see section 5.1.1

Subroutines called by HEPAMN: DGELG, COEF.

5.4. The program LAPAMN

It computes the M,N Laguerre-Padé approximant to a function defined by its Laguerre series. (See section 3.2.)

5.4.1. SUBROUTINE LAPAMN (A, P, Q, M, N)

It is called by the main program. Input arguments:

A - see section 5.3.1

M,N - see section 5.1.1

Output arguments:

P,Q - see section 5.1.1

Subroutines called by LAPAMN: DGELG, COEF.

5.5. The program CONV

It converts the Taylor series expansion coefficients of a function to one of the *Chebyshev*, *Legendre*, *Hermite* or *Laguerre* series expansion coefficients depending on the value of IND. (See section 4.)

5.5.1. SUBROUTINE CONV (A, B, N, M, IND)

It is called by the main program. Input arguments:

A

- a double precision vector of length M which contains the Taylor series expansion coefficients
- N an integer which defines the number of transformed coefficients

М

IND

- an integer which defines the number of coefficients to be transformed (M is equal to 2N at least)

 integer which defines the kind of transformed coefficients: IND = 0 Chebyshev case

- = 1 Legendre case
 - = 2 Hermite case
 - = 3 Laguerre case

Output arguments:

B

- a double precision vector of length N in which the transformed coefficients will be returned

Subroutine called by CONV: COEF.

6. Examples

6.1. Chebyshev-Padé Case

We investigate the *Chebyshev*-Padé approximation to the function ln(1+x) which was considered numerically in [3]. The function ln(1+ax) for |a|<1 has the convergent *Chebyshev* expansion:

$$\ln(1+ax) = c_0 + k = 1 c_k T_k^{*}(x),$$

$$c_0 = 2 \ln \frac{1 + \sqrt{1 + a}}{2}$$
, $c_k = \frac{2a}{k} (-1)^{k-1} \beta^k$; $\beta = \frac{a}{(1 + \sqrt{1 + a})^2}$.

Here we consider the case M=N=n. It is possible to get the *Chebyshev*-Padé approximant in closed form exactly. We can solve the equations for the coefficients taking into account (2.1.3)

$$\sum_{j=0}^{n} \gamma_j^c |i-j|^{=0}, \quad i=n+1,\ldots,2n.$$

The solution for γ_i is

$$\gamma_{j} = \frac{(-n)_{j}(-n)_{j}}{j!(-2n)_{j}} \beta^{j}$$
.

We can also get coefficients $p_{\,j}$ and $q_{\,j}$ with the aid of $\gamma_{\,j}\,,$ explicitly. The error term in (2.1) is as follows

$$E_{n,n}(x) = f(x) - S_{n,n}(x) = \frac{2n!^2}{(1/2)_n (3/2)_n} \left[\frac{-\varepsilon}{(1+\sqrt{1-\varepsilon})^2} \right]^{2n+1} [1+0(\frac{1}{n})]$$

$$n \to \infty,$$

where

$$\varepsilon = \frac{a}{\left(1 + \sqrt{1 + a}\right)^2}$$

For a=1 we get

$$\varepsilon = 3 - 2\sqrt{2} = 0.17157...,$$

$$\frac{\epsilon}{(1+\sqrt{1-\epsilon})^2} = 0.04702...$$

The convergence rate of the rational approximation is

 $q^2 = 0.00221...,$

which is in complete agreement with that given by Clenshaw and Lord in their numerical table of [3].

6.2. Laguerre-Padé Case

This example shows the advantage of using generalized Padé approximation instead of "common" Padé approximation. Let us consider the plasma dispersion function [9]

$$Z(s) = \Pi^{-\frac{1}{2}} \int^{+\infty} dt exp(-t^{2})(t-s)^{-1} = -\infty$$

= $i\sqrt{\Pi} e^{-s^{2}} - 2 e^{-s^{2}} \int_{0}^{s} e^{-u^{2}} du$.

We approximate the function

$$f(x) = e^{-x^2} \int_0^x e^{u^2} du$$

only. Its power series is

$$f(x) = x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x^2)k}{(3/2)k}$$

We have computed the n-1, n "common" Padé and Laguerre-Padé approximants to f(x) for n=1,2,3. The plots of approximations are given in Figure 1. and Figure 2.

In Figure 1 one can see the approximants have quite wrong agreement with the function for moderate values of the argument. This fact follows from slow convergence of the Padé approximants. Here we shall establish the Padé approximants have not geometric convergence to the function f(x) in the interval $(0,\infty)$.

Denoting the Padé approximants by $R_n(x)$ we get the error term

$$f(x)-R_{n}(x)=(-1)^{n}\Gamma(3_{2}) \frac{x^{2n}\int_{0}^{1}u^{n}(1-u)^{n-\frac{1}{2}}e^{-xu}du}{\int_{0}^{\infty}u^{n-\frac{1}{2}}(x+u)^{n}e^{-u}du}$$

It is obvious that

$$\max_{0 \le x \le \infty} |f(x) - R_n(x)| \ge I_n = |f(n^2) - R_n(n^2)|$$
,

where

$$I_{n} = \Gamma(3_{2}) \frac{n^{4n} \int_{0}^{1} u^{n} (1-u)^{n-\frac{1}{2}} e^{-n^{2} u} du}{\int_{0}^{\infty} u^{n-\frac{1}{2}} (n^{2}+u)^{n} e^{-u} du}$$

We can determinate the asymptotic form of these integrals by Laplace's method. By simple calculations we obtained

$$I = \frac{O(n^{3n}e^{-n}n^{-3/2})}{O(n^{3n}e^{-n})} = O(n^{-3/2}), n \to \infty,$$

which is the required result. Next, by contrast we shall show the generalized Padé approximations to the function f(x) have geometric convergence for all positive values of the argument. Let us denote the generalized Padé approximants by $R_{h}^{*}(x)$, we will investigate its

$$E_{n}(x) = f(x) - R_{n}^{*}(x) = \frac{S_{n}(x)}{Q_{n}(x)},$$

where

error $E_n(x)$

$$Q_{n}(x) = \frac{n!^{2}}{(2n)!} \frac{1}{2\Pi i} \oint \frac{(1+u)^{-\frac{1}{2}}}{u^{n+1}(1-u)^{n+\frac{1}{2}}} e^{2x\frac{u}{1+u}} du,$$

$$|u| = \varepsilon > 0$$

and

$$S_{n}(x) = \frac{(-1)^{n+1}}{2^{n+1}} \frac{n!(n+1)!}{(2n+1)!} \Gamma(3_{2}) \frac{1}{2\Pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{(p-1)^{2n}}{p^{n+3_{2}}(p+1)^{n+2}} e^{dp} dp.$$

We consider the asymptotic representations for $n \rightarrow \infty$. Applying the Laplace's method we get

$$\left| E_{n}(x) \right| = An^{a} \left[\frac{(1-p)^{2} u(1-u)}{2p(1+p)} \right]^{n \times (p - \frac{2u}{1+u})} e^{[1+0(\frac{1}{n})]}, n \to \infty$$

where u is that root of the equation

$$2 \frac{x}{n} u(1-u) = (1-2u)(1+u)^{2}$$

for which $u \sqrt{\frac{n}{x}}$ when $x \rightarrow \infty$, and p is that root of the equation

$$\frac{x}{n} p(p^2-1)+3p+1 = 0$$

for which $p \sim 2\frac{n}{x}$ when $x \rightarrow \infty$. The maximal value of the function







 $E_n(x)$ occurs if $p = \frac{2u}{1+u}$, therefore

$$\max_{\substack{n \in \mathbb{N} \\ 0 \le x \le \infty}} |\mathsf{E}_n(x)| = \operatorname{An}^a \{h(x)\}^n \{1 + O(\frac{1}{n})\}, n \to \infty.$$

It is not difficult to show

$$h(x) = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{13n}{2x} + O(\frac{n^2}{x^2}) \right] ,$$

from which it follows

$$\lim_{n \to \infty} \max_{0 \le x \le \infty} |E_n(x)| = \frac{1}{4} .$$

This result shows our approximations have geometric convergence rate type \mathcal{V}_{4} n roughly, which manifests the striking superiority of the generalized Padé approximations over the "common" Padé approximations. Finally we mention to this example the approximations in the Figure 1 are

$$\frac{3x}{3+2x^2}$$
 (n=1),

$$\frac{105x-10x^{3}}{105+60x^{2}+12x^{4}}$$
 (n=2),

$$\frac{3465x-420x^{3}+84x^{5}}{3465+1890x^{2}+420x^{4}+40x^{6}}$$
 (n=3),

The generalized Padé approximations in Figure 2 are

$$\frac{3x}{2+4x^2}$$
 (n=1),

$$\frac{39x+10x^{3}}{42+24x^{2}+24x^{4}}$$
 (n=2),

 $\frac{1395x+60x^{3}+84x^{5}}{1380+1080x^{2}+240x^{4}+160x^{6}} \quad (n=3)$

The third approximant coincides with the exact curve.

References

- [1] G. A. Baker, Jr., Essentials of Padé Approximants (Academic Press, New York, 1975)
- [2] E. W. Cheney, Introduction to Approximation Theory (McGraw-Hill Book Company, New York, 1966)
- [3] C. W. Clenshaw, K. Lord, Rational Approximations from Chebyshev Series (in "Studies in Numerical Analysis" edited by B. K. P. Scaife, Academic Press, London, 1974)
- [4] J. Fleischer, Nucl. Phys. B37 (1972) 59
- [5] J. Fleischer, J. Math. Phys. 14 (1973) 246
- [6] J. T. Holdeman, Jr., Math. Comp. (1969) 275
 [7] G. Németh, Rept. of Central Research Institute for Phys., KFKI-75-2, Budapest
- [8] A. Ralston, A First Course in Numerical Analysis (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [9] B. D. Fried, C. L. Hedrick and J. McCune, Phys. Fluids 11 (1968) 247

Referee: E. Gesztelyi

ATOMKI Közlemények 22 (1980) 301-319

GETTING COINCIDENCE INFORMATION FROM ANALYSIS OF SUM PEAKS IN SINGLES Ge(Li) SPECTRA

(THE TEST EVALUATION AND IMPROVEMENT OF THE METHOD)
I. TÖRÖK, I. URAY, P. BORNEMISZA-PAUSPERTL, AND P. KOVÁCS
Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of
Sciences, Debrecen, H-4001, Pf. 51.

Analysis of sum peaks from singles spectra obtained by a large volume Ge(Li) detector in many cases gives more coincidence information than traditional two-detector gamma-gamma coincidence measurements do. Approximate methods are given to obtain and use coincidence information from sum peaks of a single spectrum. The method gives coincidence count numbers of several order of magnitude higher than the traditional two detector methods do, without the use of sophisticated multiparameter analysis equipment and during comparable time. The sum peak analysis method requires much less instrumentation and memory capacity, than the traditional methods, and also multiple coincidences can be measured with rather good efficiency. The possibilities and limitations of the sum peak analysis method are discussed, illustrated by different measurements as examples.

KOINCIDENCIA INFORMÁCIÓ EGYETLEN Ge(LI) DETEKTORRAL FELVETT SPEKTRUM ÖSSZEG-CSÚCSAINAK VIZSGÁLATÁBÓL. (Egy módszer tesztelése, értékelése és javitása). Egy nagy térfogatu Ge(Li) detektorral felvett spektrum összeg-csúcsainak vizsgálata sok esetben több koincidencia információt ad, mint a hagyományos két detektort használó koincidencia mérések. Közelitő módszert adunk, hogyan lehet a spektrumban található összeg-csúcsokból koincidencia információt nyerni. A hagyományos két detektoа ros módszerekhez képest néhány nagyságrenddel nagyobb koincidencia impulzus számot ad az összeg-csúcsok vizsgálata, bonyolult sokparaméteres analizátor rendszer nélkül, hasonló időfelhasználás mellett. Az összeg-csúcsok vizsgálatának módszere jóval kevesebb mérőberendezést és számológép memóriakapacitást igényel, mint a hagyományos módszerek, és még a többszörös koincidenciákat is meglehetősen jó hatásfokkal lehet vele mér-ni. Az összeg-csúcsok vizsgálatának, mint módszernek a lehetőségeit és alkalmazhatóságának határait tárgyaljuk, mérési példákkal illusztrálva.

ПОЛУЧЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ О ГАММА-ГАММА СОВПАДЕНИЯХ ИЗ АНАЛИЗА СУММАРНЫХ ПИНОВ СПЕНТРОВ, СНЯТЫХ ОДНИМ Ge(Li) ДЕТЕНТОРОМ. Аналиэ суммарных пиков в гамма спектрах получаемых одним Ge(Li) детектором большого объема, в многих случаях дает больше информации о гамма-гамма совпадениях, чем традиционные измерения гамма-гамма совпадений, используюшие два детектора. Дан приближенный метод для получения информаций о гамма-гамма совпадениях из суммарных пиков в простых спектрах. С помощью описанного метода за данное время может быть получено на несколько порядок больше число импульсов гамма-гамма совпадений, чем традиционным методом, причем не требуется спожного аппаратурного обесиечения и большой емкости памяти ЭВМ. Метод позволявт измерять с высокой эффективностью и многократные совпадения. Возможности и ограничения метода обсуждаются разными примерами измерения.

1. Introduction

The high efficiency of large volume Ge(Li) detectors combined with a large solid angle source-detector geometry results in considerable summing effects, if the source, even at relatively low count rates, gives gamma rays in a cascade (in true coincidence). The detector may "see" a single event in-stead of the real two or more, with the amplitudes summed. By this way real "sum peaks" occur in the spectra at the energy sum of the components. Because all the summed signals are missing from the photopeaks, different methods were developed for the correction against summing effect losses in the single photopeaks (e.g.[1-4]). In current nuclear physics measurements sum peaks are generally used only for corrections against the above mentioned "unavoidable" and "useless" effect, despite of the known fact, that they comprise also coincidence [5-17], source activity [18-22], cross-over fraction [23], efficiency [24-26], decay mode, life time [27] and probably even further information. As it is seen from the literature cited above, the basic concept to get coincidence information from the sum peaks is not new, but the method is not yet in general use, even many nuclear physicists do not know about it. Why is it not a generally accepted method? The early attempts to use it in the scintillation counter era might have failed because of the limited energy resolution. Another explanation might be that it seemed to be difficult to distinguish a small sum peak from small peaks of other origin. A further possible explanation: the advantages and limitations of the method were not considered thoroughfully.

Based on our experience in sum peak corrections, in this paper we should like to show that the analysis of the sum peaks is possible with simple methods, and one can obtain some new information of the kind mentioned above, e.g. coincidence information with a similar if not better accuracy than with the traditional, highly sophisticated two detector methods.

We tested and generalized the basic formula taken from literature. We found that the basic formula, without any correction works even under rather poor circumstances. Our generalization permitted us to find a quadruple summing peak in a spectrum, which has not been reported, to our best knowledge, in literature. We found that the absolute activity of the source and the coincidence information can be tested against each other (to decide whether it is a real sum peak!) and thus a strong argument can be obtained from the sum peak analysis for coincidence. Even in the case, when the absolute activity is not known, but the isotope in question emits several cascades, the constancy of the K value (see later) gives an argument for coincidence. At last we compared the traditional and sum peak analysis coincidence methods in our own experiments, investigating the decay of the new 206mTl isomeric state. We made several absolute activity measurements too, with good results, but their discussion is the subject of another paper. We do not say that sum peak analysis is the only or the best

We do not say that sum peak analysis is the only or the best method to obtain coincidence information, but its simplicity and other inherent advantages - as e.g. the fact that significant sum peaks are in most cases present in a singles spectrum of cascade emitting gamm ray sources - makes easy to utilize the additional information contained in these sum peaks which information must not be thrown away. With a slight modification of the experimental geometry, the measurements can be easily optimised for the sum peak formation.

We have to mention that in contrary to the single-detector and single-spectrum "sum peak analysis" method described here, there is another completely different method, the "sum coincidence" method of Hoogenboom [28-31] which uses two detectors, thus only the names of the methods are similar.

1.1. Basic formulae for summing gamma rays of a cascade

In our several nuclear spectroscopy measurements on fast neutron produced radioactive nuclei by using high resolution Ge(Li) gamma spectroscopy, we found empirically that the ratio of the product of the count numbers I_iI_j in the single gamma peaks of a gamma cascade of energies of E_i and E_j to the count number I_{ij} in the corresponding true summing coincidence peak with energy E_i+E_j is constant in a single measurement. For a given isotope emitting several gamma rays in a cascade, the value K_{ij} must be about the same for every pair of these gamma rays.

$$K_{ij} = \frac{I_{i}I_{j}}{I_{ij}} = K_{12} = \frac{I_{1}I_{2}}{I_{12}} = K_{13} = \frac{I_{1}I_{3}}{I_{13}} = K_{23} = \frac{I_{2}I_{3}}{I_{23}} = \dots$$
(1)

In 1963 Brinkman et al. [18] for NaJ/Tl/ scintillation counters gave the formula:

$$N = \frac{A_1 A_2}{A_{12}} + T = R + T$$
(2)

303

for the absolute activity of radioisotopes emitting two gamma rays in coincidence, where N is the absolute activity, A_1 and A_2 are the areas under the photopeaks of the two gamma rays respectively, A_{12} is the area under the sum-peak, and T is the area under the whole spectrum, all normalized to unit time. (Later different authors applied this formula to Ge(Li) and other solid state detectors as well.)

For radioisotopes emitting more than two gamma rays in a cascade, the R value calculated for any combination of these gamma ray pairs will be the same, as the absolute activity and T are the same for a given single measurement [18]:

$$R_{12} = \frac{A_1 A_2}{A_{12}} = R_{23} = \frac{A_2 A_3}{A_{23}} = R_{13} = \frac{A_1 A_3}{A_{13}} = \dots = R_{ij} = \frac{A_i A_j}{A_{ij}}$$
(3)

This is similar to the formula (1) used by us. The only difference is that we used the total count numbers, instead of the count rate A.

We have to emphasize that for practical work the experimentalist must thoroughfully analyse the measured peak at energy E_i+E_j, because it may be combined of components of different origin:

1) The true summing coincidence, the random summing peak and a possible crossover transition appear exactly at the same energy.

The random summing can be kept negligibly low by choosing low count rates, if not, special corrections are needed, which corrections will not be discussed in this paper.

Where a cross-over transition exists, the measured I; j will be respectively larger and so K will be smaller for such peaks. If the statistics is good, one can estimate the relative intensity of the cross-over peak. The crossover intensities should be calculated as

 $I_{cross} = \frac{I_{1}I_{2}}{K_{12}} - \frac{I_{1}I_{2}}{K_{ij}}$ (4)

where I_{cross} is the crossover component of the intensity at E_1+E_2 , K_{12} is the K value obtained from the measured intensity (I_{12}) at E_1+E_2 , K_{ij} is the K value for the clean sum peak (e.g. obtained from any other coinciding pair in the spectrum of the same isotope without crossover).

2) Because of the finite energy resolution of the detector used, the true coincidence sum peak and a peak of other origin (e.g. contamination, background) may remain unresolved. The K_{ij} value for such peaks differs in most cases from the K_{ij} value for the clean sum peaks, and this difference changes with the measurement geometry. The value of K is very sensitive to these disturbing effects,

The value of K is very sensitive to these disturbing effects, but fortunately, in many cases it is possible to distinguish between the above effects, by using the formulae (1) and (2), and in most measurements the disturbing effects can be more or less eliminated and the experimental conditions can be optimized for the sum peak analysis. For the combinations of gamma rays, where at the energy $(E_{i} + E_{j} + ...)$ there is no detectable sum peak, this fact may indicate the lack of the coincidence or simply the unsatisfactory statistics of the measurement at this energy. In such cases only lower limits can be calculated for K_{ij} from the fluctuation of the spectrum around the expected energy value. The maximum intensity of the peak, which may be hidden in the fluctuation, gives the upper limit for I_{ij}, and using this value we obtain from formula (1) the lower limit of K. These lower limits may be spread over a wide range of orders of magnitude. Their meaning from the point of view of coincidence information is the following:

- a) For all the limits higher than the K values for true sum peaks plus their errors: a true coincidence is very improbable.
- b) For all the limits positioned near K values for true sum peaks: there is no definite argument for or against true coincidences.
- c) For all the limits positioned below K values for true sum peaks: the situation is similar as in case b, but also a crossover transition may exist, for which an intensity limit can be calculated. In cases like b and c, the traditional two detector coincidence method cannot say anything either.

To illustrate the constancy of K_{ij} for true coincidence sum peaks we took the gamma ray spectrum of ⁵²Mn from the spectrum catalogue of Heath [32] and calculated K_{ij} for the five marked sum peaks, using approximate values for I; and I; deduced from the peak heights. The result is given in Table 1.

Table 1.

Sum peak energy	Components (keV)	K
(keV)		
1446	935+511	3.8x10 ⁹
1679	935+744	5.1x10°
1945	1434+511	4.2x109
2178	1434+744	5.2x10 ⁹
2369	1434+935	5.2x10 ⁹

The constancy is true within a factor of $K_{max}/K_{min}=1.4$. In this case a four-stage cascade was considered for several evaluable sum peaks.

Similar calculations were made by us on the spectrum of ⁵⁶Ni from the same spectrum catalogue. Here the decay scheme contains also crossover transitions. The results for different pairing combinations of the single photopeaks are given in Figure 1. The estimated errors were calculated as



Fig. 1. $K_{ij} = I_i I_j / I_{ij}$ values for a gamma ray spectrum of ⁵⁶Ni vs. energy.

$$\Delta = \frac{K_{ij}}{\sqrt{I_{ij}}} = \frac{I_i I_j}{I_{ij}} \times \frac{\sqrt{I_{ij}}}{I_{ij}}$$

The true sum-peaks are ordered again in a band of a factor of 1.65, whereas \tilde{K}_{ij} -s of the cross-overs are by one or two orders less than in the case of clean true sum peaks. The upward arrows show lower limits for other possible combinations of gamma rays.

Formula (1) is comfortable as it uses just the measured peak areas. In the case of a cascade the K values of the true sum peaks lie in a band as seen above. Consequently, if the K values for several pairs of gamma rays for a measured spectrum lie in such a band, probably these gamma rays are in a cascade. The existence of such a band alone, however, is a weak argument for the existence of the cascade. As the number of K values in a band (i.e. the number of observed gamma-ray pairs in a cascade) grows, the argument becomes stronger and stronger. Anyhow, the argument needs more support, e.g. if the absolute activity of the source measured is known, the K value can be tested against the activity through (2). This can be done even in the case of a source giving only a two-member cascade, which means that the "band" of $K_{i\,i}$ values is restricted to a single point. So the weak argument turns into a rather strong one.

(5)

1.2. Summing of more than two gamma rays

For the case of three member cascades Brinkman et al.[18-22] gave also a formula like (1), with the proper definition of R and T:

$$R = \frac{A_1 A_2}{A_{12}} = \frac{A_2 A_3}{A_{23}} = \frac{A_1 A_3}{A_{13}} = \frac{A_{12} A_{23} A_{13}}{(A_{123})^2} = N - T$$
(6)

where A_{123} is the intensity of the triple sum peak $(E_{123}=E_1+E_2+E_3)$.

The same R is defined here with the three pair summing (A_{ij};i,j=1,2,3) and the single triple summing (A₁₂₃). For the triple summing case we rearrange formula (6), substituting A.A.

$$A_{ij} = \frac{1}{N-T} \sqrt{\frac{A_1 A_2 A_3}{A_{123}}} = N-T=R$$
 (7)

Considering the triple sum peak, this form of the formula for R is more convenient for calculation because

- a) it contains the single photopeak areas instead of those of the double sum peaks, and according to the better statistics the relative errors are smaller,
- b) it can be easily generalized for multiple summing, e.g. for an n-fold summing:

$$R = \sqrt{\frac{A_{1}A_{2}\cdots A_{(n-1)}A_{n}}{A_{1}\cdots A_{n}}}$$
(8)

Formula (8) can be obtained also directly from the following approximation:



and $A_{1...n} \simeq N \varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_n$ for the n-fold sum peak. So

$$\frac{A_1 A_2 \cdots A_n}{A_1 \cdots n} = \frac{N^n \varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_n}{N \varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_n} = N^{n-1} \simeq R^{n-1}$$
(9)

Here ε_i is the total detection efficiency including the intrinsic efficiency of the detector, all absorption factors (selfabsorption in the sample, absorption in the detector house, and absorption in any other absorber between the source and detector), the solid angle (geometry) and also the probability of the considered gamma ray in the decay. It can be seen that the resulting formula does not depend on these factors, therefore it is very useful. All these considerations are valid in the case of simple cascades. In the case of branching at certain levels, the branching ratios should be taken into consideration [2,3,4].

On the other hand, formula (9) is valid for the case when T << R, a condition generally fulfilled for Ge(Li) detectors.

The expression (8) is normalized to unit time. As in the case of double coincidence (3) we may use the total count numbers during the measurement time in the formula for n-fold coincidence

$$K = \sqrt{\frac{I_1 I_2 \cdots I_n}{I_1 \cdots n}}$$
(10)

which is again constant for a given measurement, and for any combination of double, triple, quadruple, or n-fold sum peaks.

As an illustration for the wide-range usefulness of this method, a gamma ray spectrum from a neutron activation measurement of osmium isotopes will be presented [33]. Among others, the isotope ^{190m}Os was produced in the activation. This isomer decays by a five-member gamma cascade with 38.9; 616.5; 502.5; 361.2; 186.7 keV energies. All possible combinations of



Fig. 2. K values for a gamma ray spectrum of ^{190m}Os. K values were calculated for all double, triple and quadruple sum peaks.

double and triple sum peaks were found in the spectrum with considerably large count numbers for the latter four energies. Even at the energy of the quadruple sum peak we could find 247 counts above the background, of course with a high error value for K. The actual value, however, is in the order of the K values obtained from the double and triple summing. (The 38.9 keV transition did not give significant sum peaks because at this low energy the absorption factors and the high conversion rate strongly decreases the detection efficiency.)



Fig. 3. Single spectrum vs. multiparameter analysis in the case of ¹⁹⁰mOs, for getting coincidence information. (See text for explanation)

Figure 2 shows the K values as the function of the energy of the sum peaks. Up to triple summing we have a factor 1.2 illustrating the constancy of K. In Figure 3 we made an illustration how the summing effect simplified the possible multiparameter experiment for the above ^{190m}Os isomer.

On the left and on the bottom of the figure a simplified, bar-type gamma ray spectrum on a logarithmic intensity scale can be seen (twice), which was actually taken once with a single Ge(Li) detector. At the top and on the right part of figure the right angle representation of the two-dimensional address field of a possible dual parameter measurement using two Ge(Li) detectors of identical parameters is shown. The vertical and horizontal lines in Fig. 3 represent the single and sum peak energies using the same address-energy scale as in the single spectra. Along the 135° lines the sum of the energies of the gamma rays detected in the two detectors are constant. At the crossings the possible coincidence peaks are marked. In our case the single spectrum was taken in 2048 channels, the dual parameter measurement would need 2048² = 4 194 304 channels supposing that the traditional online two parameter method would have been applied. If one stores the address pairs of the coincidence events and later generates the spectrum, the memory need would be again in the order of several million words. (Though here the memory is e.g. a magnetic tape, the evaluation of the data is a rather time consuming task, regarding both the computer time and the physicist's work.) It can be seen that the information on multiple coincidences can be extracted from the several possible summing peaks in one of the detectors of the multiparameter experiment and this is in coincidence with a single or another sum peak in the other detector. It also can be seen from the figure, that in the dual parameter address network - an inherently small number of coincidence events (caused by the disadvantageous geometry) is distributed among a great number of possible address pairs. Every double coincidence is separated into two places, the triple coincidences into 6 places for each, the quadruple coincidence - with even much less probability - already into 14 places, giving more and more hopelessly small peaks at a given place. On the contrary, a single measurement can be performed by using much more advantageous geometrical arrangement, and on the other hand, the coincidences at a given energy will be automatically summed up into a single peak, and that is the reason that even the multiple coincidences are measurable. It is remarkable that the count numbers in the n-fold sum peaks (n=1,2,3,4; where 1 stands for the single peaks) is decreasing with only about an order of magnitude, with increasing order of summing, which is not common in the case of traditional two detector experiments.

1.3. Investigation of the ²⁰⁶^mTl decay

Several measurements have been performed in our neutron generator laboratory for getting coincidence information on the gamma transitions in the de-excitation of ²⁰⁶MTl produced by fast neutron activation from ²⁰⁹Bi [34,35]. Here we applied the formula (1) for a formerly unknown spectrum.
Traditional gamma-gamma coincidence measurements have been made by using a 100 cm³ Ge(Li) and a 30 cm³ Ge(Li) for testing the results. In both branches high resolution semiconductor detectors should be used, because of the rather close vicinity of the gamma lines in the single spectrum, not well resolved by NaI(T1). Because of absorption, geometry and backscattering reasons only a 7.50 gr (cca 0.70 mm x \emptyset 36 mm disc) piece of the activated material could be used in the geometry shown on Fig. 4.a. The bismuth disc itself served as a shielding against



Fig. 4. a, Two-detector Ge(Li) - Ge(Li) coincidence arrangement for measuring ²⁰⁶mTl.

b, The raw, uncorrected coincidence spectrum obtained with the shown arrangement with gate at 265.7 keV.

backscattered gamma rays. One of the raw, uncorrected coincidence spectra (gate at 265.7 keV) obtained in a three-days run with periodic activation is shown in Fig. 4 b. (The gating 265.7 keV peak is of much lower intensity relative to other peaks in the single spectrum.)

On the other hand, single spectra have been taken with the 100 cm^3 Ge(Li) detector and analysed on the base of the formula (1). The geometry of the single measurements was the arrangement shown in Fig. 5 a. Here a large mass (43.35 g) of Bi in annular shape was arranged around the aluminium housing of the detector. The single elements were 1 mm thick cca. 30 mm x 12 mm sheets of Bi metal placed in pockets on a polyethylene band. A single spectrum taken in 6-days run, with about the same specific activity is shown in Fig. 5 b.



Fig. 5.a, Arrangement of a big amount of active sample around the Ge(Li) detector. b, The single gamma ray spectrum of ^{206m}Tl. (Reproduced from ref. 35 with the written permission of the copyright owner Springer Verlag, Heidelberg)

The proposed decay scheme of ^{206m}Tl is given in Fig. 6. For all possible combinations of the strong gamma transitions, not



Fig. 6. The proposed decay scheme of the ^{206m}Tl. (Reproduced from ref. 35 with the written permission of the copyright owner Springer Verlag, Heidelberg)

disturbed by confusing single peaks originated from contaminations, the \bar{K}_{ij} -s were calculated and these values are plotted vs. the energy of the sum peaks in Fig. 7. In Table 2 we give the combinations of the single peaks and the K values calculated from them.(Above 1330 keV no measurements were performed.) The K values of the real coincidence sum peaks are positioned in a band around 1.7×10^7 , despite of the fact that they were calculated from the raw, measured count numbers, without any correction for the rather divergent transition probabilities and internal conversion coefficients, also given in Table 2. The sum-peaks, where a crossover exists, are placed under this band. The upward arrows of lower limits for other possible combinations of gamma rays spread over a wide range.

In our measurements the count rate was rather low (a few hundred counts/secundum), so random summing from pile-up was not disturbing.

The constancy of K_{ij}-s in this case is true within a factor of 2.8 but regarding the errors it is remarkable that 15 out of the 16 analyzed sum-peaks have the value of 1.7×10^7 inside the $\pm \frac{3}{\sqrt{1_{ij}}}$ error limit of their K_{ij} and the only exception at



Fig. 7. \bar{K}_{ij} values for ^{206m}Tl.

Table 2.

Sum peak energy [keV]	Components [keV]	Transition probability of the com- ponents [%]	Internal con- version coef- ficient of the components	$K = \frac{I_1 I_2}{I_{12}}$
463.6 482.1 669.7 673.6 700.5 719.0 722.9 780.6 829.9 902.9 910.5 933.7 952.2 1237.9	216.4+ 247.2 216.4+ 265.7 216.4+ 453.3 216.4+ 457.2 247.2+ 453.3 265.7+ 453.3 265.7+ 457.2 216.4+ 564.2 216.4+ 564.2 216.4+ 686.5 453.3+ 457.2 247.2+ 686.5 265.7+ 686.5 216.4+1021.5	97 14 97 100 97 94 97 25 14 94 100 94 100 94 100 25 97 12 100 12 97 92 94 25 14 92 100 92 97 73 97 73	0.28 0.66 0.28 0.15 0.28 0.01 0.28 0.13 0.66 0.01 0.15 0.13 0.28 1.15 0.15 1.15 0.28 0.01 0.01 0.13 0.66 0.01 0.15 0.01 0.28 0.06 0.28 0.06	$(1.33\pm0.21) \times 10^{7}$ $(1.59\pm0.05) \times 10^{7}$ $(1.74\pm0.08) \times 10^{7}$ $(1.94\pm0.20) \times 10^{7}$ $(2.10\pm0.21) \times 10^{7}$ $(2.26\pm0.22) \times 10^{7}$ $(2.26\pm0.22) \times 10^{7}$ $(3.75\pm2.52) \times 10^{7}$ $(3.35\pm1.69) \times 10^{7}$ $(1.77\pm0.11) \times 10^{7}$ $(2.27\pm0.21) \times 10^{7}$ $(1.68\pm0.27) \times 10^{7}$ $(1.58\pm0.05) \times 10^{7}$ $(1.52\pm0.08) \times 10^{7}$
1237.9 1250.7 1287.2	216.4+1021.5 564.2+ 686.5 265.7+1021.5	97 73 12 92 100 73	0.28 0.06 1.15 0.01 0.15 0.06	$(1.52\pm0.08) \times 10^{7}$ $(1.96\pm0.42) \times 10^{7}$ $(2.46\pm0.10) \times 10^{7}$

1287.2 keV in only 1.45 times higher than this value. The K value was tested against the activity (measured in other ways) with an agreement of the results within the error limits. In the case of ^{206m}Tl, evaluable sum peaks of gamma rays of nearly 100 % relative intensity with about 5×10⁵ pulses in their photopeaks with a coinciding gamma ray of about 10 % relative

γ-ray energy	Coincidence peak areas from two	Eyen Curafren Sinn Bruckhundlen under	Sum peak areas with γ -rays of energy in keV								
[keV]	detector $\gamma-\gamma$ coincidence, gate at 265.7 keV	216.4	247.2	265.7	453.3	457.2	564.2				
216.4	174 ± 24	< 259		gangan gungan gungan yang ngan							
247.2	24 ± 18	1800 ± 280	< 256								
265.7	0 ± 21	15838 ± 517		< 167							
453.3	185 ± 19	11353 ± 547	1016 ± 209	13274 ± 320	< 94						
457.2	38 ± 12	2472 ± 250		2418 ± 240	1885 ± 170	< 96					
564.2	8 ± 7	265 ± 178		337 ± 170			< 80				
686.6	107 ± 12	7387 ± 449	843 ± 138	9418 ± 283			299 ± 64				
1021.5	9 ± 5	4457 ± 237		3128 ± 130							
1139.9	4 ± 2	-									
511	127 ± 20	< 135		< 135	< 82	< 82	< 80				
Measurement time [s]	43 680	,	мма «алары») на манаризунка маалаа	49 3	280		9.4959699944999999				
Neutron monitor [times 10 ⁶ counts]	96.65	an curation and an and an	an to with a first of the first of the second s	153.2	28	ar na Gwel Gwel Gwel Gwel Gwel Gwel Gwel Gwel	ann Christeine in mar an Anna Sanainne an Anna an Anna Anna Anna Anna Anna				

Table 3.



Fig. 8. Coincidence information obtained from a Ge(Li) - Ge(Li) coincidence measurement and from sum peak analysis of a single Ge(Li) spectrum.

intensity could be obtained. Table 3 gives an impression on the intensity gain obtained by using sum-peak analysis, vs. a two detector coincidence measurement. For intercomparison Fig. 8 summarizes the coincidence informations drawn from the above mentioned traditional two detector coincidence measurement and from the sum peak analysis of the single spectrum. As it can be seen from the measuring times and numbers of neutron monitor counts the two measurements were made well inside a factor of two, regarding the specific activities of the sample. In the sum peaks, however, we found counts almost two order of magnitude more than in the corresponding coincidence peaks obtained with two detectors.

2. Conclusions

2.1. Traditional two-detector coincidence measurements vs. sum peak analysis

The data above suggest that the sum peak analysis has some advantages in several cases:

1. It needs only a single detector, electronic amplifier chain and power supply. All instruments necessary to perform the two-detector coincidence measurement (analogue and digital delays, coincidence units) and also the second detector chain can be spared. This is a big spare mainly in setting time and in avoiding measurement ambiguities not mentioning the costs.

All these measurements can be performed not only in a well type but also with usual coaxial large volume Ge(Li) detectors. 2. If some gamma rays are in coincidence with anothers, the sum peak analysis may supply this information in many cases (often enough to decide between possible decay schemes), and it does it at once, in the same run. So a lot of normalizations can be spared, together with a lot of accelerator time. The traditional coincidence techniques either make successive coincidence measurements with different gatings, or use expensive and complicated multiparameter analysis instruments, with big memory requirements.

As the information is accumulated for all possible coincidences in the same run, the long-time stability requirements on the electronic analogue system are less strict.

Also multiple (triple, quadruple) coincidences can be measured with rather good efficiency.

3. Traditional coincidence measurements are very sensitive to geometry, they often give backscattered phantom peaks, and need special shielding between the detectors. In the case of the sum peak analysis of a single spectrum, the source can be placed as close to the detector as possible. This results in a more convenient solid angle, and thus in improved detection efficiency. So the method is usable in the case of difficult to produce, low activity, short half-life sources. The necessity of shielding between the detector is also avoided in the sum peak analysis case.

4. From the same single measurement one can get source activity information and distinguish to a certain extent between true sum coincidences and crossovers. Generally this method leads to an order-of-magnitude esti-

mation, but in several cases an accuracy of about 10 % or even better may be obtained.

5. In the range of the resolving time of the analyser system excited level life-time information can be obtained [27].

6. In the case of samples with low specific activity the sum-peak analysis method permits the use of a big quantity of material contrary to the case of the two-detector coincidence method.

2.2. Limitations of the method:

1) It needs a large volume, high efficiency Ge(Li) detector. 2) The evaluation of the spectra in several cases needs the determination of areas of small peaks on a high background with appropriate accuracy, which task requires special spectrum analyzing computer codes.

3) Statistical error of photo and sum peaks, strongly influenced by the statistical error of background under them (mainly at the sum peaks).

4) Disturbing peaks from background or from contamination near the interesting photo or sum peaks.

5) A possible high degree of angular correlation between the coinciding gamma-rays [26]. The larger the solid angle is, the smaller the error originated from these effects is.

6) In the case of very high count rates the effect of random summing distorts the sum peaks and this requires special corrections.

References

[[1] 2]	J. C. Verplanke, Nucl. Instr. and Meth. 96 (1971) 557 D. S. Andreev, K. I. Erokhina, V. S. Zvonov and I. Kh.
Γ	3]	G. J. McCallum, G. E. Coote, Nucl. Instr. and Meth. 130 (1975) 189
Γ	4]	R. J. Gehrke, R. G. Helmer and R. C. Greenwood, Nucl.
[[5] 6]	D. C. Lu, M. L. Wiedenbeck, Phys. Rev. 34 (1954) 501 D. C. Lu, W. H. Kelly and M. L. Wiedenbeck, Phys. Rev.
Γ	7]	D. C. Lu, W. H. Kelly, and M. L. Wiedenbeck, Phys. Rev. 95 (1954) 1533
Γ	8]	D. C. Lu, W. H. Kelly and M. L. Wiedenbeck, Phys. Rev. 97 (1955) 139
Γ	9]	V. E. Scherrer, W. R. Faust and B. A. Allison, Phys. Rev. 98 (1955) 224A
[1	0]	W. R. Faust, V. E. Scherrer, and B. A. Allison, Phys. Rev. 98 (1955) 224A
	1] 2] 3] 4]	 R. K. Gupta, S. Jha, Nucl. Phys. 1 (1956) 2 P. Shapiro, R. W. Higgs, Phys. Rev. 108 (1957) 760 R. K. Girgis, R. van Lieshout, Nucl. Phys. 12 (1959) 672 G. B. Vingiani, S. Monaro, Nucl. Instr. and Meth. 14 (1961) 138
[1	5]	S. Santhanam, S. Monaro, Nucl. Instr. and Meth. 76 (1969) 322
[1	6]	S. Santhanam, P. P. Webb and S. Monaro, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-16 (1969) 75
[1	7]	F. P. Brauer, W. A. Mitzlaff, IEEE Trans. Nucl. Sci. NS-25 (1978) 398.
[1	8]	G. A. Brinkman, A. H. W. Aten, Jr. and J. Th. Veenboer, Int. J. Appl. Rad. Isotopes 14 (1963) 153
[1	9]	G. A. Brinkman, A. H. W. Aten, Jr. and J. Th. Veenboer, Int. J. Appl. Rad. Isotopes 14 (1963) 433
[2	0]	G. A. Brinkman, A. H. W. Aten Jr., Int. J. Appl. Rad. Isotopes 14 (1963) 503
[2	1]	G. A. Brinkman, A. H. W. Aten, Jr. and J. Th. Veenboer, Int. J. appl. Rad. Isotopes 16 (1965) 15
[2	2]	G. A. Brinkman, A. H. W. Aten, Jr., Int. J. Appl. Rad. Isotopes 16 (1965) 177
[2 [2 [2	3] 4] 5]	 P. Shapiro, R. W. Higgs, Rev. Sci. Instr. 28 (1957) 939 W. D. Schmidt - Ott, Z. Phys. 154 (1959) 294 W. Mannhardt, H. Vonach, Nucl. Instr. and Meth. 151
[2	6]	A. Lunkko, P. Holmberg, Nucl. Instr. and Meth. 65
[2	7]	L. M. Taff, J. van Klinken, Nucl. Instr. and Meth. 151
[2 [2	8] 9]	A. M. Hoogenboom, Nucl. Instr. and Meth. 3 (1958) 57 Gy. Máthé, D. Berényi, and T. Scharbert, Nucl. Instr. and Meth. 14 (1961) 209
[3	0]	J. Kantele, R. W. Fink, Nucl. Instr. and Meth. 15 (1962) 69

- [31] A. Egan, N. M. Spyron, Anal. Chem. 48 (1976) 1959
- [32] R. L. Heath, Gamma-ray spectrum catalogue, Ge(Li) and Si(Li) spectrometry. Third edition Vol. 2 of 2. ANCR-1000-2 (1974)
- [33] P. Kovács, Thesis, Kossuth University, Debrecen, 1974
- [34] I. Uray, I. Török, P. Bornemisza-Pauspertl and L. Végh, Int. Symp. on High-spin States and Nuclear Structure, Dresden, 19-24 Sept. 1977. Contributed papers ZfK-336. p. 58 (1977) [35] I. Uray, I. Török, P. Bornemisza-Pauspertl and L. Végh,
- Z. Phys. A287 (1978) 51

Referees: I. Kádár J. Gulyás



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 321-333

PROTON INDUCED X-RAY EMISSION AS A TOOL FOR ANALYSING BIOLOGICAL AND ATMOSPHERICAL SAMPLES⁺

I. KISS*, E. KOLTAY*, GY. SZABÓ*, Á. MÉSZÁROS**, S. LÁSZLÓ**

AND

S. GŐDÉNY***

A survey is given on the possible applications of PIXE method for trace element analysis on biological and atmospherical samples. Results obtained in ATOMKI are used for illustrating the capability of the method.

PROTONOK ÁLTAL KELTETT RÖNTGEN-SUGÁRZÁS, MINT BIOLÓGIAI ÉS ATMOSZFÉRIKUS MINTÁK ANALIZISÉNEK ESZKÖZE. Áttekintjük a PIXEmódszer biológiai és atmoszférikus minták nyomelem-analizisére való alkalmazásának lehetőségét. Az ATOMKI-ben végzett vizsgálatok eredményeit használva szemléltetjük a módszer teljesitőképességét.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА "PIXE" В АНАЛИЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ И АТМОС-ФЕРНЫХ ОБРАЗЦОВ. В статье дан обзор о возможных применениях метода "PIXE" в анализе рассеянных элементов биологических и атмосферных образцов. Результаты, полученные в "ATOMKI", используются для иллюстрации применимости метода.

*Institute of Nuclear Research of the Hung. Acad. of Sci., Debrecen, Hungary

**Institute for Atmospheric Physics, Budapest, Hungary

***Dept. of Obstetrics and Gynaecology Medical University Debrecen, Hungary.

Lecture given at the XIth Annual Meeting of European Society of Nuclear Methods in Agriculture. Debrecen, Hungary, 26. August, 1980.

1. Introduction

The elemental analysis has become a tool of great importance of present day fundamental investigations and applied research in a number of fields. Science and technology reached the level in many cases where problems can be solved only on the basis of detailed knowledge of the concentration of all the components - both basic constituents and trace elements present in the system to be treated. Intense investigations have been started to clear up the role of trace elements in the wide scope of biological processes. It can be expected that in the coming years the determination and control of trace element concentrations in human organism will play an important role in the diagnostics and therapy of human diseases. Following the effect of genetic and plant breeding methods in increasing the nutritional value of agricultural products as well as soil analyses can be performed by the methods of elemental analysis. Careful and systematic measurements of bio-environmental samples are necessary in environmental protection for clearing up the local and global anthropogenic sources of pollutions.

Analyses of aerosol samples give detailed data on the deposition and transport of atmospheric aerosols important for clearing up environmental effects as well as for investigating physical processes in the Earth's atmosphere. Elemental analysis also may be of importance for geology in prospecting for minerals. Solid state electronic industry needs new types of material with special parameters controlled by well determined amounts and structure of special components. Even history can get help in clearing up the origin of archeological samples.

The above few examples on the possible applications may convince anybody that there is an increasing need to develop methods of elemental analysis to fulfil the following demands:

- applicability in the widest possible range of atomic number,
- possibility of absolute determination of the amounts of sample components,
- easy methods for sample preparations,
- high sensitivity allowing trace element determination in small volume samples,
- high speed in the preparations and measurements,
- eventual possibility of measuring concentrations as a function of lateral coordinates,
- easy ways for automation of the measurements and evaluations to a convenient level.

The rapidly developing analytical method called PIXE meets all the above requirements. The Particle Induced X-ray Emission process, which can be generated in low energy particle accelerators available in a number of nuclear laboratories, serves as the physical basis of this method. Due to the particle bombardment of the sample, characteristic X-radiation is emitted with quantum energies strictly determined by the atomic number of the constituents present. X-ray spectra taken by an energy sensitive X-ray detector are stored and evaluated for element concentrations by multichannel pulse analyzers and computers, respectively. The detailed treatment of the technical questions of the PIXE method will not be given here. For these details we refer to the review article of Johansson and Johansson [1]. The possibilities of the method will be illustrated here by the help of Fig. 1. showing the minimum detectable element concentration in a sample as the function of atomic number and bombarding energy. As it can be clearly seen, concentrations of ppm level and in the sub-ppm range can be determined for all the elements of Z>12. The effective sensitivity can be enhanced at least by a factor of 10 by physical and chemical enrichment procedures used in sample preparation.



Fig. 1. Minimum detectable concentration as a function of atomic number and bombarding energy (collected beam charge 10 μ C, target thickness 0.1 mg/cm²).

In the following the applications in solving biological and environmental problems will be shortly reviewed. PIXE analytical work going on on the proton beam of the electrostatic accelerator in ATOMKI will be introduced by presenting some measurements on biological and environmental samples.

2. Applications to biological samples

Constituents of living matter are usually devided into groups as bulk elements, essential trace elements and toxic elements. The separate groups are shown in Fig. 2 [2].

Bulk elements are easily detectable by classical methods due to their high concentrations. PIXE can be used only for bulk elements like Mg, P, S, Cl, K and Ca. For elements of lower Z nuclear reactions and Rutherford scattering methods are available.

Trace elements are essential for life because of their role as key components of enzyme systems and of proteins. For man and domestic animals there are very narrow permitted concentration intervals of the different trace elements necessary to

		-		Bu	lk e	leme	ents	in	livin	g m	atte	r					
			Essential trace elements in mammals											He			
Li			Toxic elements B									Ne					
				AL SI								Ar					
		Sc	Ti	X	Û			Co			Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb		Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In		Sb	Te		Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	0s	Ir	Pt	Au		Τl		Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra																

La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu Ac Th Pa St No Polancu Ge Cf Es Fm Md No Lw

Fig. 2. Elements of essential role in living matter.

the normal life functions. Both deficiencies and excesses may result in a number of diseases. This is why trace element analysis became highly important as research and diagnostic tool in medicine. Trace element requirements of plants are completely different from those established in the case of man and animals. Except fluorine all trace elements can be measured well by PIXE method.

Few other elements are known to be toxic even at extremely low concentration. PIXE is often used for the clinical detection of poisoning by heavy metals.

2.1. Elemental analysis of blood samples

A strong variety in the concentration of the constituent elements of blood samples taken from different individuals makes trace element analysis of blood of central importance in view of its possible use in diagnostics. As it was pointed out by Valkovic [3] among the 15 or more trace elements to be found in blood samples here are only four ones (Cu, Fe, Sr, Zn) present in every case. Concentration values to be found for the different elements are in definite correlations with the pathological and physiological conditions. Comparative measurements performed on whole blood as well as on blood serum and plasma of the same individual makes diagnostics more specific and permit to clear up the mechanism of different processes resulting in changes of the blood composition. For example, the increase in copper concentration in plasma is regular in cases of infections, during pregnancies, under the influence of oral contraceptives, in cases of leukemia and hyperthyroidism. Subnormal plasma zinc level is observable in patients with malignant tumor, etc. As it was observed, by the PIXE measurements on blood samples taken from animals after gamma irradiation the decrease of red blood cell count is accompanied by changes in a number of trace element concentrations. Among others iron level is increased by a factor of 80 in blood plasma [4]. This observation turns the attention to the importance of the trace element analyses of different blood fractions in following the effect of irradiation on patients undergoing radiation therapy.

A program of elemental analysis on blood samples taken during normal and pathological pregnancies as well as on maternal and newborn blood samples has been started by the authors. The aim of the present investigations is to search for positive correlations between irregular concentrations of essential trace elements or toxic elements and the occurence of premature or low weight birth. The number of samples analyzed up to now is over one hundred and a high number of them is under investigation. We cannot report on results as yet. Experimental method sample preparation and data treatment will be outlined instead.

Proton beam accelerated by the 5 MV Van de Graaff accelerator here is deflected into a PIXE chamber by elements of the beam transport system [5].

As it is shown in Fig. 3 in the chamber the beam cut by slits is made diffuse by a scatterer foil, and through a collimator it is led to the samples to be put one by one in the beam by a 24 step target ladder. X-ray spectra taken by a KeVex Si(Li) detector are analysed and stored by a multichannel analyzer. PDP-8 and PDP-11 computers are used for primary data handling and evaluation, respectively. Blood plasma and red cells as well as whole blood were used as samples. The targets to be bombarded were prepared on the following way: a measured quantity of $Y(NO_3)_3$ solution to be used as an internal standard was added to the samples of given mass.



Fig. 3. Schematic design of PIXE chamber on the 5 MV Van de Graaff accelerator of ATOMKI.

The marked samples were then lyophilized, powdered and pressed into pellets. Pellets glued on a strip of hostaphan foil were mounted on the target ladder. Typical spectra obtained on red cell and blood plasma samples of the same individual are shown in Fig. 4. Peaks drawn on logarithmic scale are evaluated by computer code FORGAMMA [6] to get the concentration values for the separate elements on the basis of internal standard technique.



Fig. 4. Typical X-ray spectra taken on blood red cells and blood plasma of the same patient.

2.2. Elemental analysis of tissue samples

Measurements on the concentrations of elemental constituents in human and animal tissues are of special importance because of the well established effect of the accumulation of some metals in different organs in malignant diseases. Among others selenium and gallium are concentrated in tumors. Osteogenic sarcoma is characterized by the increased levels of Fe, Zn, Cu and Mn as compared with those in normal bones.

Low cancer death rate in places of high selenium levels in nature together with the above mentioned accumulation effect may lead us to the conclusion that changing trace element concentrations in food for example, could be a helpful method in cancer therapy.

High molibdenum - to - copper ratios were found to be typical for liver tissue samples in case of deteriorated liver functions. In other cases, the concentration ratio for iron present in spleen and liver, respectively, was found to be extremely high in diabetic patients [7].

The absence of cadmium in the kidney of newborn infants contrasted to the well detectable cadmium level in the organism of their mothers or the variation of trace element levels with age in human kidney are good examples to show that different mechanism of living organs can be investigated by the help of elemental analysis.



Fig. 5. Typical X-ray spectrum taken on biopsy sample of human liver.

The high sensitivity of the PIXE method makes it possible to analyze samples of very low mass. Fig. 5 shows the results of tissue analysis performed by our group on biopsy samples of human liver taken for normal diagnosis. Our aim here is to find the irregularities of trace element concentrations in the case of liver diseases.

Plant tissues are widely used as samples for bioenvironmental measurements. Mapping elemental distributions over the length or surface of plant structures related to rate of growth or stage of development of the structure considered can be of interest for botanists.

2.3. Elemental analysis of hair samples

Hair analysis is considered to be a unique tool of diagnostic value in medicine.

Element concentrations in hair have been observed by early workers by using the classical ways of analysis. Besides the typical bulk constituents more than twenty trace elements have been identified with concentrations between 0,1 and 100 ppm by present day techniques. Average concentrations can be simply measured with the photon-excited X-ray emission method. Extensive investigations are being continued on this basis in ATOMKI by the group of Bacsó [8]. Fine resolution measurements on the elemental distribution along hair samples may have a high additional value in getting information on the history of medical events. Length variation of the elemental composition are namely correlated with the metabolic changes of the respective elements in the past. Low metabolic activity of hair tissues themselves acts in conserving momentary elemental composition. Time scale is determined by the average speed of hair growth. The possibility of translating hair samples in

small longitudinal steps across the fine proton beam typical for PIXE measurements makes this method extremely well fitted to such type of measurements. Negligible variation of sulphur with length has been established by a number of authors therefore, as a first approximation, the measurements can be evaluated simply relative to the sulphur concentration. Sometimes zinc is used as a basis, too. However, seasonal changes of zinc detected by Alfrey [9] and the eventual variation of both zinc and sulphur observ ed in the cases of different individuals make the determination of absolute elemental concentration values necessary where accurate statistical values representative for a group of population are needed.

Environmental effects, the course of poisoning by heavy metals, the effect of changes in nutritional conditions, physiological changes produced by infections can be easily followed in the function of time. Changes in the concentrations of given trace elements may serve as diagnostic aids in a number of diseases and physiological processes. For example calcium to zinc ratio shows up regular variations during events influencing the calcium balance of human organism (e.g. pregnancy, regeneration in fracture of bones, etc). In Fig. 6 length distribution taken by PIXE measurements here is shown for hair



Fig. 6. Typical X-ray spectrum taken on hair sample from a patient with spinal complaints.

sample taken from a patient with spinal complaints [10]. A correlation is claimed to be found between the concentration ratio and the events of the disease. According to case-history the maximum appearing at 10 cm length coordinate corresponds to sympton-free status while strong decrease in calcium concentration reflects an ingravescent period.

3. Elemental analysis of atmospheric aerosol samples

The increasing pollution of air by the emissions of heavily industrialized areas turned the attention of scientists working in the field of environmental protection to the importance of measuring the composition and particle size distribution of atmospheric aerosols. Ecological and toxical effects are mainly governed by the concentrations of different components, while atmospheric residence time and transport distance from the source to the point of deposition depend on the size distribution of the particulate matter [11].

Both natural and antropogenic sources contribute to the origin of aerosols. The first component appears as a result of erosion of soils and spraying sea water. In order to be able to measure the sources of the second component accurately, the determination of natural atmospheric level of aerosol constituents is of basic importance. Therefore a world-wide activity has been started to make multielemental analyses on aerosol samples separated into particle size classes. A comparison of the composition of samples taken at different geographical sites with those of most abundant crustal rocks and sea water may facilitate the separation of the above mentioned components. The same measurements can be used also for investigating physical processes of the atmosphere itself.



Fig. 7. Typical X-ray spectrum taken on atmospheric aerosol sample. Elemental concentrations are given relative to the iron present in the sample. PIXE analyses of samples collected by pumping air of a given volume through a cascade impactor [12] is the basic method for present day aerosol measurements. The impactor foils covered with the layers of deposited particle fractions of respective sizes can be directly put in the beam - no additional preparation is needed.

The typical X-ray spectrum obtained in our measurements by using this techniques is shown in Fig. 7 with concentration values relative to iron in the table. Relative concentrations of the constituent elements plotted as a function of particle size are presented in Fig. 8. "Integral" data were taken by using a sample collected on a "NUCLEPORE" filter of pores of 0,4 µm diameter.



Fig. 8. Relative concentrations of constituent elements of atmospheric aerosol samples with size distribution and X-ray energies indicated. Elemental concentrations are given relative to the iron present in the respective size fractions.

The different characters of the size distribution curves for separate elements can be seen well. A strong increase in sulphur particles in the 0.25-0.5 µm class resulting in long residence time and transport distance of this dangerous pollution element should be emphasized. Table 1 contains the results available in the literature [11], [13] for a number of sites all over the world, compared with the results of our measurements. Chacaltaya data taken at an altitude of 5200 meter and Bermuda data corrected for the effect of sea water components

Flomant	LOCATION and reference								
LIENEIIC	BUDAPEST	VELEN	LANDSKRONA	ST. LOUIS	SAO PAULO	NORTH-WEST	CHACALTAYA	BERMUDA	SOUTH POLE
	HUNGARY	SWEDEN	SWEDEN	USA	BRASIL	CANADA	BOLIVIA		
	a	Ъ	b	Ъ	b	b	С	С	b
S Cl K Ca Ti V Cr Mn Fe Ni Cu Zn Br Pb	3.29 0.42 0.75 4.14 0.1 - 0.02 0.03 1 - 0.012 0.029 0.009 0.009 0.019	9.0 1.8 0.72 0.90 0.06 0.03 0.023 0.07 1 0.01 0.025 0.23 0.03 0.2	1.26 0.8 0.37 0.90 0.057 0.01 0.002 0.03 1 0.003 0.013 0.013 0.009 0.26	6.5 - 0.43 2.06 0.62 - - 1 - 0.39 - 0.92	1.28 0.20 0.27 0.47 0.053 0.016 0.007 0.067 1 0.011 0.04 0.7 0.093 0.53	- 0.12 0.76 0.56 0.074 0.003 0.0083 0.02 1 0.028 0.013 0.053 0.007 -	2.11 - 0.51 0.46 0.082 - - 0.012 1 - 0.02 0.082 - 0.057	10 0.6 1.8 1 0.14	- 0.35 0.59 - 0.002 0.0063 0.012 1 - 0.042 0.036 0.75 0.75

Table 1. Relative elemental composition of aerosol samples

- a present work
- b H.O. Lannefors, et al. N.I.M. (1977) 105
- c J.W. Winchester, N.I.M. 142 (1977) 85

331

Particle	Fe g/m³		S/Fe		K/Fe		Ca	'Fe	Zn/Fe	
size class	Bermuda	Budapest	Bermuda	Budapest	Bermuda	Budapest	Bermuda	Budapest	Bermuda	Budapest
integral 1. >4 µm 2. 2-4 µm 3. 1-2 µm 4. 0.5-1 µm 5. 0.25-0.5 µm	58 27.7 16.1 8.3 4.0 2.1		10 - 2.5 3.3 40 160	8.29 0.71 0.71 2.50 9.42 133.2	0.6 0.5 0.5 0.8 1.6	0.75 0.73 - 0.95 0.61 1.25	1.8 2.5 1.6 1.0 0.8 0.4	4.14 3.88 4.16 3.73 3.37 2.96	0.14 - 0.30 0.50 1.0 4	0.029 0.016 0.003 - 0.008 0.008

Table 2. Size fractionated elemental composition of aerosol samples

BERMUDA DATA: J.W. Winchester, N.I.M. 142 (1977) 85

BUDAPEST DATA: present work (preliminary)

are normally considered as reflecting natural atmospheric level of aerosol constituents. No resolution for particle size is contained. Table 2 compares the size distribution data observed in Budapest samples with those for Bermuda. Detailed evaluation of the data and widening the scope of this type of investigations is being continued here.

Recently volcanic ash samples collected during the eruption of volcano St. Helen in the United States are being analyzed by PIXE in our laboratory.

4. Summary

The investigations briefly reported in this lecture represent the basic directions of our activity in PIXE elemental analysis. At present the actual measurements are only margin-ally related to the problems of agriculture. However, we are convinced that a number of analytical works of direct agricultural importance can be performed on the technical basis available. Therefore any remarks or suggestions concerning these open problems in this field will be most welcomed.

References

- [1] S. A. E. Johansson, T. B. Johansson, Nucl. Instr. Meth. 137 (1976) 473
- 2] H. J. Annegarn, Proc. Intnat. Conf. on Dynamical Γ Properties of Heavy - Ion Reactions Johannesburg (1978). Vol 3. 112. Report NPRU 79/7
- 3] V. Valkovic, Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 151.
- 4] R. C. Bearce, C. E. Burns, D. A. Close and J. J. Malanify Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 143
- 5] For references see A. Kiss, E. Koltay, G. Nagy, E. Somorjai, ATOMKI Közlemények 20 (1978) 263.
- 6] G. Székely, ATOMKI Közlemények 16 (1974) 355.
- 7] N. F. Mangelson, M. W. Hill, K. N. Nielson and J. F.
- Ryder, Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 133 [8] J. Bacsó, P. Kovács and S. Horváth, Radiochem-, and Radioanal. Letters 33 (4) (1978) 273
- [9] Alfrey A. C., Nunnelly L. L. Rudolph H., and Snythe, W. R. Advances in X-Ray Analysis 19 (1975) 497
- [10] J. Bacsó, E. L. Sarkadi and E. Koltay, preparation for publishing
- [11] J. W. Winchester, Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 85
 [12] H. O. Lannefors, T. B. Johansson, L. Granat and B. Rudal, Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 105
- [13] J. J. Wesolowski, W. John, W. Devar, T. A. Cahill, P. J. Feeney and R. Flocchini, in X-Ray Fluorescence Analysis of Environmental Samples. Edited by Thomas G. Dzubay. 1977 Ann Arbar Science Publishers. p. 121.

Referee: J. Bacsó



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 335-338 INVESTIGATION OF THE K/Ca RATIO IN HEALTHY AND MILDEWY TOBACCO LEAVES*

J. BACSÓ*, J. DÁNIEL** AND G. KALINKA*

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

**Food Industrial Specialized Secondary School, H-4024 Debrecen, Irinyi u. l. Hungary

Major and trace elements in tobacco leaves were analysed by isotope excited X-ray fluorescence spectrometry. The concentration values of elements S, Cl, K, Ca, Mn, Fe, Cu, Zn, Br and Sr were determined in ashed leaf samples. The concentration of K and Ca, which is in the focus of the present work, depend on different factors in healthy leaves. Therefore healthy and mildewy leaves, grown under the same circumstances, were compared and significant differences were observed in the K/Ca ratios (1.6+0.3 and 8.3+1.5 respectively)

K/Ca ARÁNY VIZSGÁLATA EGÉSZSÉGES ÉS PERONOSZPÓRÁS DOHÁNY-LEVELEKBEN. Dohányleveleket vizsgáltunk izotópos gerjesztésü röntgenfluoreszcencia analizissel. A hamvasztott levélmintákból a S, Cl, K, Ca, Mn, Fe, Cu, Zn, Br és Sr koncentrációit határoztuk meg. Egészséges dohánylevelekben a K és Ca koncentrációi, amelyek a jelen munka középpontjában álltak, erős függést mutattak különböző tényezőktől. Ezért azonos körülmények között nőtt egészséges és peronoszpórás dohányleveleket hasonlitottunk össze és megállapitottuk, hogy a K/Ca arányban jelentős eltérés tapasztalható (1.6+0.3 illetve 8.3+1.5).

ИССЛЕДОВАНИЕ ОТНОШЕНИЯ К/Са В ЗДОРОВЫХ И ЗАРАЖЕННЫХ ПЕРОНОС-ПОРОЙ ТАБАЧНЫХ ЛИСТЬЯХ. Макро- и микроэлементы в табачных листьях были анализированы с помощью рентгенфлюоресцентной спектрометрии изотопным возбуждением. Нонцентрации элементов S, C&, K, Ca, Mn, Fe, Cu, Zn, Br и Sr были определены в пеплах листьев. В здоровых листьях для концентраций К и Ca, которые были в фокусе настоящей работы, обнаружена сильная зависимость от разных факторов. Поэтому здоровые и зараженные пероноспорой листья, выращенные в тех же условиях, были сравнены и значительная разница наблюдалась в отношениях К/Са (1.6+0.3 и 8.3+1.5 соответственно).

*Paper presented at the XIth Annual Meeting of European Society of Nuclear Methods in Agriculture, Debrecen, August 25-30, 1980.

1. Introduction

In accordance with the increasing vehicle traffic, there is an increase in the lead amount spread by the exhaust-gases of combustion engines. Originally we examined this environmental pollution by analysing the lead content of different plants grown along highways with X-ray fluorescence method [1]. Tobacco was also among the investigated plants. Although the X-ray fluorescence analysis enabled us to determine simultaneously the concentrations of all the elements which are present in the sample with atomic number higher than 13. In the present work we should like to report only on the K and Ca content, observed in healthy and mildewy (infected by "Peronospora tabacina Adam") tobacco leaves.

2. Sample collection

The tobacco leaves (so called pick- and sand-type leaves) were collected from 7 different sorts of mainly Hungarian selected tobacco (Burley and Kállai, Pálmonostori, Kerti, Szabolcsi, Delcrest, Nyirségi 159). The plants, each at the same stage of ripeness were grown on different tobacco fields of Hungarian co-operative farms, both by the side and inside of the tobacco plots.

3. Preparation of the samples

The surface dust contamination of the leaves was washed off with tap-water first, then the leaves were rinsed with distilled water. After this cleaning procedure the leaves were dried: for 2 weeks in the air and for 2 hours at 80°C. Whole leafe samples were ground to fine powder and homogenized in a plastic mill.

In order to preconcentrate the inorganic constituents, the leaf samples were ashed at 600°C, which proved to be the optimum temperature. From the ash pellets of 300 mg with diameter of 12 mm were pressed to fit the best to our measuring circumstances. The careful preparation prevented the samples from any contamination.

4. Measurement

The characteristic X-rays of the elements in the sample were excited with ¹²⁵I and ⁵⁵Fe radioactive isotopes. As it is known, the energy of the excited radiation is related to the atomic number, while the intensity to the concentration of the element. The emitted radiation was measured with a Si(Li) semiconductor detector X-ray spectrometer. The X-ray spectra were recorded with an ICA-70 1k multichannel analyser, and processed on a TPA-i 16k minicomputer. The concentration values were determined by the "addition method" [2].

5. Results

In the present paper, as it has been mentioned already, we concentrated only on the K and Ca content and their ratio of healthy and mildewy tobacco leaves.

Examining healthy leaves, it was established that the K and Ca concentration values (and the K/Ca ratio as well) depend on

- the distance of the leaf from the root (position), i.e. on the age of the leaf,
- the distance of the tobacco plant from the road, that is from the side of the plot,
- the growing field,
 - the sort of tobacco.

These mean for example that:

- In older leaves the K and Ca concentration can be by 10 and 30 % higher, respectively, than in younger ones.
- By the side of the plot the K concentration can be by 30 % higher, and the Ca by 30 % lower than inside. At present there is no explanation for this difference.
- For the same sort of tobacco (Burley), grown in different co-operative farms, 11-45 % has been found for the K concentration, 8-26 % for the Ca, while the K/Ca ratio changes between 0.5-5.
- In seven different sorts of tobacco, grown on the same field, the concentration ranges are: for K 22-45 %, for Ca 8-12 %, and for K/Ca 1.5-6. Consequently, for the sake of reliable comparison, the same type (pick-) of healthy and mildewy leaves were collected from 5-5 plants respectively
- from the same sort of tobacco (Szabolcsi),
- from the same plot (Téglás, near Debrecen) and
- from the same place (side) of the plot.

Although several other elements were also analyzed (S, Cl, Mn, Fe, Cu, Zn, Pb, Br, Sr), as it was expected on the basis of a previous test, only the K and Ca content showed significant changes. For the 5-5 ash samples the following mean values have been found (Table 1.):

Table 1. Analytical results for K and Ca in the ash of healthy and mildewy tobacco leaves.

	Diburtine and		6xx2x2x-2x-2x2x2x2x2x42x42x42x42x42x42x42x42x42x42x			
		K	Ca	K/Ca		
Healthy	0 Alfred Clans	28+ 4 %	17+2%	1.6+0.3		
Mildewy		43+ 7 %	5.2+1%	8.3+1.5		

It must be noted, that we performed a control measurement for leafe samples collected from inside of the plot as well, and similar result was found for the K/Ca ratio (1.6 and 6.2).

6. Conclusions

- As it can be seen from the table, in average, the K concentration is significantly higher, while the Ca content is significantly lower in the ash of mildewy tobacco, than in that of healthy tobacco. The opposite changes, which can be explained by the antagonistic features of the two elements, caused remarkable difference between the K/Ca ratios (1.6+8.3). [3].

- Since we have not found considerable differences between the K/Ca ratio of mildly and strongly infected leaves, it might be concluded, that not peronospora itself changes the K/Ca ratio, but the higher K/Ca ratio in the plant makes tobacco leaves more liable to the infection by peronospora.

- It must be emphasized however, that we have reported here only preliminary results, which were only byproducts of other investigations [1]. Therefore further examinations are still necessary to decide, whether really the high K/Ca ratio is responsible for the peronospora infection, and if excessive K fertilization has any role in the peronospora infection or not. For such investigations (measuring a lot of samples) the XRF method is especially advantageous.

References

- [1] Dániel Péterné, Dohánylevelek elemi összetételének röntgenemissziós analitikai vizsgálata. Report on scholarship work performed in ATOMKI.
- [2] Bertin E. P., Principles and Practice of X-Ray Spectrometric Analysis, Plenum Press, New York, London, 1975.
- [3] Szalay I., Növényélettan. Tankönyvkiadó, Budapest, 1968.

Referee: Z. Sámsoni

MŰHELYÜNKBŐL, LABORATÓRIUMUNKBÓL ATOMKI Közlemények 22 (1980) 339-343 USING CDC USER TERMINAL 200 FROM PDP-11 UNDER RSX-11M

G. SZÉKELY, GY. ASZTALOS

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

A software to perform the communication between a PDP-11 system and a CDC UT200 terminal station is described. The program works under the RSX-11M operating system and is able to transfer files between the PDP-11 system and the UT200 devices as well as to use the display of UT200 as a terminal of PDP-11 with some restrictions.

A CDC UT200 TERMINÁLJÁNAK HASZNÁLATA PDP-11 GÉPRŐL RSX-11M OPERÁCIÓS RENDSZERBEN. A PDP-11/40 rendszer és a CDC UT200 terminál közötti együttmüködést végző rendszerprogramot irjuk le. A program RSX-11M operációs rendszerben müködik, file-ok átvitelére képes a PDP-11 rendszer és az UT200 berendezései között, valamint lehetővé teszi az UT200 képmüjének egy korlátozott értékü PDP-11 terminálként való használatát.

ПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМИНАЛОМ СОС UT200 С ЭВМ PDP-11 В СИСТЕМЕ RSX-11M. Описывается программное обеспечение для коммуникации между системой PDP-11/40 и устройством терминала CDC UT200. Программа работает в операционной системе RSX-11M и способна передать файлы между системой PDP-11 и устройствами UT200 и использовать дисплей как терминал PDP-11 с несколькими органичениями.

I. Introduction

There is a CDC User Terminal 200 (UT200) at this Institute for submitting jobs to the central-site computer CDC-3300 and for getting back the results of the jobs. The terminal is linked with the CDC-3300 only in a limited period of the day. Thus it is possible to use the terminal in our PDP-11/40 system too. From the hardware point of view the connection between PDP-11 and UT200 can be constructed simply through the synchronous line interface DU-11 (fig. 1).

This paper describes the software which makes use of the possibilities of such a link. The two elements of the software are the driver and a MACRO-11 utility program.



Fig. 1. Logical connection of UT200 and PDP-11

II. The driver (XUDRV)

The driver supplied by the Digital Equipment Corp. for the DU-11 interface cannot be used without any changes, because it does not support the principle of UT200 protocol. By the protocol each request to the UT200 consists of a "write" instruction immediately followed by a "read". We have made the driver to be able to service read-after-write requests, thus we have eliminated the problems of synchronization. The driver modified by us services I/O request only via IO.WLB function and the control is returned to the caller program after completing a "write" and a "read". It was not necessary to change the function mask words in the device parameter block [2].

The driver writes a required number of bytes and reads until the first occurrance of value 3. It is the end-of-message on the UT200.

III. The utility program (USEUT)

Main functions of the utility program (later referred to as "program") are the following:

- initiate data transfers between PDP-11 and the devices of UT200
- 2. satisfy the rules of UT200 protocol
- 3. assemble and service user commands

1. Data transfer initiation

Data transfer between the UT200 devices and the program is carried out via QIO requests of the following type:

1. Data transfer initiation

Data transfer between the UT200 devices and the program is carried out via QIO requests of the following type:

QIOW\$S #IO.WLB, #1, #1,, #IOSB,, <#BUFF, #BUFS>

where BUFS can be less than (or equal to) 1000 (the display capacity), whereas BUFF means the address of the common input/output buffer. The effect of the above request is described in the third chapter. The program transfers data between its buffer and the RSX files via PUT\$ and GET\$ I/O commands. Several GET\$ or PUT\$ can be done between two QIOW\$S requests, because the program collects or accepts a whole screen of information one time.

2. Rules of UT200 protocol

The UT200 connected to a computer plays a passive role. Only the computer can initiate a dialogue and the UT200 always answers immediately. Nevertheless, the communication with the UT200 requires some syntactic and semantic demands to fulfill. The syntactic ones are the usage of special character codes and message format - there is no problem to incorporate them into the utility program USEUT. The semantic rules are the fixed sequence of the different messages. The UT200 accepts only 'POLL', 'WRITE', 'ALERT' and answers only 'ACKNOWLEDGE', 'REJECT', 'READ' messages. The present version of the code USEUT has been developed after a lot of experiments to achieve maximum speed and security in the data transfer. The logic of the printing process is demonstrated in fig. 2 as an example.

Here the rules of the UT200 are described only briefly, for more details we refer to [1].

3. User commands

Only the following types of commands are legal for the utility program:

PR:=file-spec DP:=file-spec file-spec=CR: file-spec=DP: MCR>command to MCR

The first four commands are standard statements, like those in RSX (see for example commands for the PIP utility) and PR:, DP: and CR: mean the printer, display and card reader of the UT200, respectively. In the fifth command any legal command can be written to the Monitor Console Routine after the string 'MCR>'. The name 'file-spec' means the standard file specification in RSX-11M.

3.1. PR:=file-spec

Any existing ASCII-file of the RSX-11M can be listed on the UT printer. First the display buffer is loaded from the user buffer, then this information is transferred from the display buffer to the printer buffer and then, during the physical printing procedure (fig. 2.) the loading of the display buffer is started again. The listing procedure can be stopped by pressing the 'BREAK' key and sending a 'SP' message on the UT display.



Fig. 2. Process of printing one block

3.2. DP:= file-spec

This command directs the program to list one screen information from the specified file for examination, and when the user presses the 'RETURN' key, the subsequent part of the file is listed. The user can stop the listing on the same way described in 3.1.

3.3. File-spec=CR:

The effect of this command is that the content of the UT card reader buffer is transferred to the display buffer (i.e. displayed) and is copied to the user buffer, and the subsequent cards are read into the CR: buffer simultaneously, and so on. If there are no more cards in the hopper, the program examines whether the last card was an end-of-file card. If not, it displays a 'CR NOT READY' measage and waits for more cards. The information is copied from the cards to the specified file.

3.4. File-spec=DP:

This command enables the user to create, open, fill and close an ASCII-file in RSX-11M system from the UT display. After typing this command an 'INPUT:' message appears on the screen of the UT display and arbitrary text, program or data can be typed to the display buffer (i.e. to the screen). When the required text is all typed or the screen is full, it has to be sent (press 'SEND' key). The program copies the display buffer to the file and displays the 'INPUT:' message again. Pressing the 'SEND' key immediately after the 'INPUT:' the specified file is closed.

3.5. MCR>command to MCR

While the previous four commands carry out file transfer between the RSX FILES-11 system and the UT200 devices, this type of command makes possible to submit any legal command for the Monitor Console Routine from the UT display. Thus the DP: can be used as a terminal of the PDP-11/40, but it is only a virtual one. If the program, activated by the MCR command wants to use the submitting terminal as an input or output device, the user has to go also to the terminal where the utility program was started from, because the command refers to that very terminal. Except such commands, the others work on the normal way.

IV. Conclusion

A system program has been worked out and the XU driver has been modified to use UT200 from RSX system. The program is able to transfer files between the PDP-11 system and the UT200 devices, as well as to use the display of UT200 as a terminal of PDP-11 with some restrictions. Thus the resources of UT200 can be shared between a remote and a local computer by a simple manual switch.

References

- [1] 200 User Terminal, Hardware Reference Manual, Control Data Corporation (1969) Pub. No.: 82128000
- [2] RSX-11M Guide to Writing and I/O Driver, Digital Equipment Corporation (1977) Order No. AA-2600D-TC.

Referee: J. Vegh



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 345-351

TAPASZTALATOK Y ÉS X IRÁNYBAN IS SÚLYOZOTT LEGKISEBB NÉGYZETES MÓDSZEREKKEL

ILLÉS GÁBOR* ÉS SZÉKELY GÉZA

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51; 4001

A min $S(x,p) = \min_{i=1}^{n} \{ d_{yi}^{-2} [Y_i - f(x_i,p)]^2 + d_{xi}^{-2} (X_i - x_i)^2 \}$ feladat megoldását végző módszereket vizsgáltuk, ahol $p = (p_1, \dots, p_m)$ -ben és $x = (x_1, \dots, x_n)$ -ben keressük a minimumot, a többi változó értéke ismert. A legjobbnak talált módszerekre FORTRAN programokat ismertetünk.

EXPERIENCE WITH LEAST SQUARES METHODS, WEIGHTED BOTH IN y AND x. Methods for solving the problem min $S(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \min_{i=1}^{n} \{d_{yi}^{-2} [Y_i - f(x_i,\mathbf{p})]^2 + d_{xi}^{-2} (X_i - x_i)^2\}$ were examined. The variables $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_m)$ and $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ were to be searched, the others were known. FORTRAN programs on the methods found to be the best are described.

ОПЫТ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДОВ НАИМЕНШИХ КВАДРАТОВ ВЗВЕШАННЫХ В НАПРАВЛЕНИЯХ у И ТАКЖЕ х. Изучались методы для решения задачи min $S(\mathbf{x},\mathbf{p}) = \min_{i} \sum_{j=1}^{n} \{ d_{yi}^{-2} [Y_{i} - f(x_{i},\mathbf{p})]^{2} + d_{xi}^{-2} (X_{i} - x_{i})^{2} \}$, где минимум ишется в $\mathbf{p} = (p_{1}, \dots, p_{m})$ и $\mathbf{x} = (x_{1}, \dots, x_{n})$ и значения остальных переменных известны. Для наилучших методов излагаются программы на языке ФОРТРАН.

1. Bevezetés

Legyenek adottak egy mérés eredményei a következő módon:

$$(i = 1, ..., n),$$
 (1)

ahol X_i, Y_i mért értékek és d_{Xi}, d_{yi} ezek hibái. Elméleti meggondolásokból tudjuk, hogy x és y között y=f(x,p) jellegü függvénykapcsolat van, ahol $p=(p_1,p_2,\ldots,p_m)$ ismeretlen para-

*KSH Adatfeldolgozó Központ, Debrecen

métervektor. Feladatunk az, hogy megtaláljuk p-nek azon p* értékeit, melyek legjobban jellemzik mérésünket. (Intézetünkben ilyen feladat például kőzetek izokron módszerrel való kormeghatározásánál fordul elő, de számos más esetben is szükség van a független változó hibájának figyelembe vételére.)

A legkisebb négyzetek módszere - mely 1806-ból, A. M. Legendre-tól származik - a

min S(p)=min_i
$$\sum_{i=1}^{n} d_{yi}^{-2} (Y_i - f(x_i, p))^2$$
 (2)

feladat megoldásával szolgáltatja a paraméterek p* becslését d_{xi}=0 (i=1,...,n) esetén. A d_{xi}≠0 eset megoldására 1878-ban R.J. Adcock javasolta azt, hogy az elméleti függvénynek a mérési pontoktól való távolságát minimalizálják. E feladat megoldására a ma is használatos legkisebb négyzetes függvényt először W.E. Deming közölte 1943-ban

min S(x,p)=min_{i=1} {
$$d_{yi}^{-2}(Y_i - f(x_i,p))^2 + d_{xi}^{-2}(X_i - x_i)^2$$
} (3)

ahol x_i a X_i-nek megfelelő, f(x_i,p) a Y_i-nek megfelelő elméleti értékek közelitései.

Könnyen belátható [5], hogy (3) megoldásaként kapott (x^*, p^*) minimumhely egybeesik a maximum likelihood módszerrel nyert becsléssel, ha feltételezzük, hogy az ($X_1, \ldots, X_n, Y_1, \ldots, Y_n$) vektor egy olyan ($\xi_1, \ldots, \xi_n, n_1, \ldots, n_n$) valószinüségi vektorváltozóra vonatkozó mérés, melynek együttes eloszlása 2n dimenziós normális eloszlás, várható érték vektora ($x_1^*, \ldots, x_n^*, f(x_1^*, p^*)$), $\ldots, f(x_n^*, p^*)$), kovariancia-mátrixa pedig diagonális (a főátlóban rendre d $^2_{x1}, \ldots, d^2_{xn}, d^2_{y1}, \ldots, d^2_{yn}$). A továbbiakban a (3) feladat megoldására szolgáló módsze-

A továbbiakban a (3) feladat megoldására szolgáló módszereket vizsgáljuk, először p-ben és x-ben lineáris f-et feltételezve, majd a nemlineáris f esetével foglalkozunk. Számitásainkat PDP 11/40 számitógépen végeztük.

2. Egyenes illesztése

A (3)-ban szereplő f függvény itt $f(x,p_1,p_2)=p_1+p_2x$ alaku (m=2). Ha részletesen kiirnánk ebben az esetben a

$$\frac{\partial S}{\partial p_{j}} = 0 \quad (j = 1, \dots, m) \tag{4}$$

$$\frac{\partial S}{\partial x_{i}} = 0 \quad (i = 1, \dots, n) \tag{5}$$

normálegyenleteket, látható lenne, hogy ez az egyenletrendszer az x₁,...,x_n,p₁,p₂ ismeretlenekben nem lineáris, tehát megoldása csak közelitő módszerrel lehetséges. Az is kitünne, hogy nagyszámu mérési pont esetén igen nagy egyenletrendszerrel kellene dolgoznunk. Szerencsére (5)-ből az x₁-k kifejezhetők, és igy ezeket (4)-be helyettesitve csak egy 2x2-es nemlineáris egyenletrendszert kell megoldanunk. York és Williamson kihasználta azt, hogy a $\partial S/\partial p_1 = 0$ egyenletből p₁ kifejezhető, és ezt a $\partial S/\partial p_2 = 0$ egyenletbe helyettesitve a
$$g(p_2) = \frac{\partial S}{\partial p_2}$$

függvénynek kell a zérushelyeit megkeresni. York [1] egy harmadfoku, Williamson [2] egy elsőfoku egyenletet old meg minden iterációban és igy kap p₂-re egyre pontosabb értéket. (6)-ban p₂ jóval bonyolultabb formában szerepel, g(p₂) csak ugy tekinthető p₂ polinomjának, ha megengedjük, hogy az együtthatók is függjenek p₂ előző iterációban kapott értékétől. Southwell [3] megelégedett az x_i-k kiküszöbölésével és az

Southwell [3] megelégedett az x_i -k kiküszöbölésével és az igy kapott 2x2-es nemlineáris egyenletrendszert oldja meg Newton-Raphson módszerével, amely ekvivalens az x_i -ktől megtisztitott (3) feladat

min S(p)=min
$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - f(X_i, p))^2 (d_{y_i}^2 + p_2^2 d_{x_i}^2)^{-1}$$
 (7)

Gauss-Newton módszerrel való megoldásával.

A (3) feladat természetesen megoldható olyan módszerekkel is, amelyek nem használják ki f lineáris voltát, de nyilvánvalóan nem lehetnek versenyképesek az előbbi egyszerű módszerekkel.

Vizsgálatainkban a Southwell által 1969-ben közölt és 1976ban módosított módszerre [6] irt programunkat hasonlitottuk össze Williamson programjával, mivel az utóbbi szerző kimutatta, hogy módszere gyorsabb, pontosabb és megbizhatóbb York módszerénél. Mindkét program a (2) feladatot oldja meg első lépésben, igy nem igényelnek kezdőértéket (p₁,p₂)-re. Eredményként megadják a (p^{*}₁,p^{*}₂)-ot, ezek becsült szórását, az S(p^{*}₁,p^{*}₂) kifejezés értékét és a közelités lépéseinek számát. A többezer próbafutás során a generált mérési adatok fokoza-

A többezer próbafutás során a generált mérési adatok fokozatos rontásával kiderült, hogy Williamson módszere stabilabb, Southwell módszere gyorsabb. Adatainkat a következő módon generáltuk:

X_i=gauss (i,xfac) d_{×i}=xfac Y_i =gauss(i,yfac*√i) d_{vi}=yfac*√i (i=1,n) (n=2,...,100),

ahol az xfac és yfac paraméterek növelésével rontottuk a bemenő adatokat, a gauss (u,v) jelölés pedig N(u,v) -u várható értékü, v szórásu normális - eloszlásu véletlen számot jelent.

Az 1. táblázatban xfac és yfac függvényében tüntetjük fel a W (Williamson) és az S (Southwell) módszerek viselkedését, 99 próbafutást tekintve egy-egy xfac,yfac értékpárhoz. A táblázatban a div jelölés a 30-nál kevesebb lépésben nem konvergens esetek számát, az iter jelölés pedig a konvergens esetek átlagos iterációszámát jelenti. xfac=2 és yfac=3 esetben például Williamson módszere csak kétszer, Southwellé ötször nem konvergált, viszont az átlagos iterációszám az utóbbi módszernél csaknem fele (5.6) az előbbinek (10.4).

yfac	xfac	= W	l S	= : W	2 S	= W	3 S	=1 W	+ S	= ! W	5 S
=1	div iter	0 4.5	04.3	1 4.9	2 4.7	0 5.3	4 5.1	0 5.8	3 5.5	0 6.3	3 5.8
=2-	div	0	1	1	3	1	1	0	5	1	6
	iter	6.3	4.5	7.1	5.3	7.4	6.1	7.9	6.2	8.1	6.7
=3	div	2	0	2	5	3	7	2	8	2	6
	iter	8.3	4.8	10.4	5.6	10.5	6.3	10.1	6.9	9.8	7.2
=4	div	3	4	6	7	1	17	3	18	1	20
	iter	9.2	4.8	13.4	6.7	13.4	6.9	11.9	7.7	11.1	8.0
=5	div	4	3	12	7	5	17	0	21	0	27
	iter	8.9	4.9	14.5	6.6	15.8	7.4	13.9	7.9	11.8	8.4

1. táblázat. Williamson és Southwell módszerének összehasonlitása az iterációszám és a divergenciák száma alapján.

Pontosabb mérések esetén – azaz a táblázatban közöltnél kisebb xfac és yfac esetén – mindkét program gyorsan (3-4 iteráció) és megbizhatóan müködött.

3. Nemlineáris görbe illesztése

Ha a (4), (5) egyenletrendszerből nem lehet az x_i -ket kiküszöbölni, az előző fejezet egyszerű módszerei nem használhatóak. Kézenfekvőnek látszik erre az esetre (7) feladat valamilyen **általánositása ugy**, hogy a nevezőben p₂ helyett valamilyen közelitést használunk. Ilyen általánositás Deming módszere, amely p₂ helyett az elsőfoku tag együtthatóját veszi f x-szerinti Taylor sorfejtésében, és a

min S(p)=min_i
$$\sum_{i=1}^{n} (Y_i - f(X_i, p))^2 (d_{y_i}^2 + (\frac{\partial f}{\partial \times}|_{X_i})^2 d_{\times i}^2)^{-1}$$
 (8)

feladatot oldja meg. A gyakorlatban e módszerrel 3-4 jegy pontossággal meghatározhatók \mathbf{p} értékei.

O'Neill és társai 1969-ben közöltek egy olyan módszert, amely polinomiális f esetén megoldja a (3) feladatot. Lényegében e módszernek az általánositását adja Powell és Macdonald [4] 1972-ben. A Deming módszerrel viszonylag pontos kezdőértékhez jutnak, majd e kezdőérték körül Taylor sorba fejtik a (4), (5)-öt az elsőfoku tagig, és igy egy

$$\begin{pmatrix} A & C \\ C^{\mathsf{T}} B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{p} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g \\ g \\ \mathbf{y} \end{pmatrix}$$
(9)

alaku lineáris egyenletrendszerhez jutnak, ahol

$$A = (A_{ij}) = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial p_i \partial p_j}\right), \quad B = (B_{ij}) = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial x_j}\right), \quad C = (C_{ij}) = \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x_i \partial p_j}\right),$$

 δp és δx a p és x soronkövetkező javitása, g_p és g_x az S p illetve x szerinti gradiense. Látható, hogy B diagonális, ha szokás szerint feltételezzük a mérések függetlenségét. Ha C-t elhanyagolhatónak tekintjük, akkor az n+m méretű feladat egy m méretű feladatra (δp =-A⁻¹g_p) és n darab osztásra (δx_i =-g_x_i/B_{ii}) redukálódik minden iterációban. Ezen az elven működik Powell és Macdonald programja, az NLLS, amely a fel-használótól csak az f értékeit számoló rutin megirását kivánja meg, és numerikus deriváltakkal dolgozik. Számos programozási fogást alkalmaznak a numerikus deriváltak használatakor általában fellépő buktatók elkerülésére, valamint az elhagyott C mátrix hatásának bizonyos figyelembe vételére.

Britt és Luecke [5] az y=f(x,p) függvény helyett F(z,p)=0alaku implicit kapcsolatot is megenged a mért változók között, ahol F n-dimenziós vektorfüggvény [esetünkben $F=(y_1-f(x_1,p),$ $\dots, y_n - f(x_n,p))$] és $Z=(y_1, x_1, \dots, y_n, x_n)^T$ a $Z=(Y_1, X_1, \dots, Y_n, X_n)^T$ mérési vektor becslése az F modell szerint. Ha Z szórásait egy R diagonális kovariancia-mátrixba irjuk, akkor a (3) feladat igy fogalmazható át:

$$\min(\mathbf{Z}-\mathbf{z})^{\mathsf{T}}\mathsf{R}^{-1}(\mathbf{Z}-\mathbf{z}) \tag{10}$$

$$F(z,p)=0.$$
 (11)

Britt és Luecke a (ll) helyett annak első fokuig csonkitott Taylor-sorát veszi, és a (l0), (ll) feltételes minimumkeresési feladatra a Lagrange-féle multiplikátor módszert alkalmazza. Algebrai átalakitások után a

$$p^{(\ell+1)} - p^{(\ell)} = -\{F_{p}^{\mathsf{T}}(F_{z}RF_{z}^{\mathsf{T}})^{-1}F_{p}\}^{-1}F_{p}(F_{z}RF_{z}^{\mathsf{T}})^{-1}[F+F_{z}(z-z^{(\ell)})]$$

$$z^{(\ell+1)} - z^{(\ell)} = z - z^{(\ell)} - RF_{z}^{\mathsf{T}}(F_{z}RF_{z}^{\mathsf{T}})^{-1}[F+F_{p}(p^{(\ell+1)} - p^{(\ell)}) + F_{z}(z-z^{(\ell)})]$$

iterációs képletekre jutnak, ahol a felső (l) és (l+1) indexek az iteráció sorszámát jelölik, F_z és F_p pedig az F z illetve p szerinti Jacobi-mátrixát jelentik a $(z^{(l)}, p^{(l)})$ helyen. Tekintve, hogy esetünkben F_z és R is diagonális, iterációnként elegendő egy m ismeretlenes szimmetrikus, lineáris egyenletrendszert megoldani. A módszerre irt programunk (LSF) a felhasználótól várja az f, F_z és F_p számitását végző programrész megirását.

Az NLLS és LSF programokkal a következő függvényekre végeztünk ellenörző számitásokat, minden esetben a Deming-módszerrel kapott értékeket használva kezdőértékek gyanánt:

- 1. $y=p_1+p_2x+p_3x^2+p_4x^3$, n=10, $d_{xi}=1$, $d_{vi}=1$ (lásd [4],[5],[6]).
- 2. $y=p_1(p_3\sqrt{1+p_3\times p_2^{-1}})^{-1}$, n=14, $d_{xi}\neq 0$, $d_{yi}=0$ (lásd [4], [6]).
- 3. y=(1+exp(p₁+p₂x+p₃x²+p₄x³))⁻¹, n=22, d_{xi}=0, d_{yi}≠0. Az adatok intézetünkben végzett mérésből származnak.
- 4. Három Gauss-görbe exponenciális háttérrel, n=65, m=11, $d_{xi}=0.1$, $d_{vi}=\sqrt{Y_i}$ (lásd [7]).
- 5. x²pī²+y²pī²-1=0, implicit módon megadott ellipszis, n=42, d_{xi}=gauss(X_i,0.2), d_{yi}=gauss(Y_i,0.2). A gauss(u,v) jelentését lásd az első fejezetben.
- Az 1. függvény illesztését az 1. ábrán szemléltetjük.



1. ábra. Az 1. próbafüggvény illesztése d_{xi}=0 és d_{xi}≠0 esetben.

A két programot az iterációszámok alapján hasonlitja össze a 2. táblázat, és itt látható a Deming-módszerrel kapott paraméter-értékek átlagos relativ eltérése a másik két módszerrel kapott értékektől.

függvény program	1.	2.	3.	4.	5.
NLLS	3	4	9	div	-
LSF	7	3	4	6	4
DEMING	1.84 %	0.02 %	0.18 %	0.02 %	0.09 %

2. táblázat. A Powell-Macdonald-, Britt-Luccke- és Deming-módszer összehasonlitása.

A div a táblázatban azt jelöli, hogy a módszer nem konvergált.

Tapasztalataink szerint az NLLS használata kényelmesebb, viszont a felhasználó által az LSF-nél befektetett jóval több programozási munka sokkal gyorsabb futást eredményez. A Demingmódszer által szolgáltatott megoldás pontossága számos gyakorlati esetben kielégitő lehet.

Southwell 1976-ban közölt módszerével is próbálkoztunk, azonban ugy tünik, hogy irreálisan sok derivált számitását igényli a felhasználó által irt programrésztől. Az ugyanebben a cikkben található egyszerű numerikus módszer pedig nem eléggé kimunkált, a numerikus deriváltak számitása sokkal finomabb közelitést igényelne.

A két táblázat adatait szolgáltató programokat, mint az eljárások alkalmazására szolgáló páldákat kérésre szivesen rendelkezésre bocsájtjuk.

Hivatkozások

[1]	D.	York, Can. J. Phys. 44 (1966) 1079
[2]	J.	H. Williamson, Can. J. Phys. 46 (1968) 1845
[3]	W.	H. Southwell, J. Comp. Phys. 4 (1969) 465
[4]	D.	R. Powell, J. R. Macdonald, Comp. J. 15 (1972) 148
[5]	Η.	I. Britt, R. H. Luecke, Technometrics 15 (1973) 233
[6]	W.	H. Southwell, Comp. J. 19 (1976) 69
[7]	Μ.	R. Osborne, J. Australian Math. Soc. Ser.B 19 (1976) 343

Lektor: Zolnai László



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 353-363 ELEKTRONIKUS PROGRAMOK PDP-11/40 SZÁMITÓGÉPRE

GÁSPÁR ANDRÁS

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51.

Tájékoztatást adunk az ATOMKI Elektronikus Osztályán készült elektronikus célu programok alkalmazásának első lépéseiről, az elkészült programok ismertetésével és használatuk bemutatásával.

ELECTRONIC PROGRAMS TO PDP 11/40 COMPUTER. A preliminary information is given on the programs developed for electronic purposes in the Electronic Dept. of ATOMKI with a guide and running examples to the programs.

ПРОГРАММЫ НА РОР 11/40 ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЭЛЕНТРОННЫХ ПРОБЛЕМ. В сьатье описываются программы, разработанные для решения электронных проблем, появляющихся в АТОМКІ.

Fejlesztés és felhasználás elektronikus célokra; lehetőségek és eszközök

Az ATOMKI számitóközpontjának PDP 11/40-es számitógépén 1979. juliusától RSX-11M többfelhasználós rendszer üzemel. A rendszer egyik terminálja az Elektronikus Osztályra került, és igy a számitógép az osztály kutatói számára mindig kéznél levő. közvetlen munkaeszközzé válhat.

E lehetőségből adódik az elektronikus fejlesztési munkában egyszerüen, de sokoldaluan felhasználható programkészlet kialakitásának igénye. A programkészlet fejlesztésével célunk kettős: részben az elektronikus tervezés során felmerülő rutinszámitások által lekötött idő felszabaditása, részben pedig olyan számitástechnikai eszközök alkalmazása, amelyek segitségével a kézi uton nem, vagy csak nagyobb nehézségek árán megoldható elektronikus problémák is kiértékelhetők (pl. modellkisérletek, szimuláció).

A fejlesztés során tekintetbe kell venni, hogy a számitástechnikában járatlan elektronikus felhasználó a lehető legkevesebb időt kiván forditani mind a gép kezelésének megismerésére, mind programozási nyelvek elsajátitására. Ezért célszerű a programok adat be- és kivitelének egységesitése (amennyire csak ez lehetséges), a bemenő adatok kisebb csoportokban, rugalmas bemeneti formátumban való interaktiv bevitele, továbbá futtatás alatt hivható kezelési utasitás beépitése a programokba.

2. Az eddigi eredményekről

Ez év során néhány egyszerű program kifejlesztése már megtörtént. A következőkben ezek közül négyet ismertetünk. A programok és nyilvántartásuk az "ELEKTRA" hajlékony mágneslemezen találhatók, [300,100] UIC (felhasználó azonositó kód) alatt.

2.1. TRAFO

A TRAFO program 220 V primer feszültségü 50 Hz-es hálózati transzformátorok méretezésére alkalmas. A bemenő adatok az 1. táblázatban találhatók, futtatási példát az 1. ábra mutat.

A bemenő adat jelentése	tipusa	formátuma
A szekunder tekercseken maximális terhelés alatt fellépő feszültség és áram effektiv értéke		F8.0,F8.0
A megengedett maximális indukció (nem feltétlen szükséges megadni) - vagy <cr></cr>	egész vagy valós	E9 0
A kiirandó terv sorszáma – vagy CTRL/Z – vagy <cr></cr>		10.0

1. táblázat. A TRAFO program bemenő adatai

A program EI alaku szabványos lemezmaglap-csomagokra tervez. A bemenő adatokból számolt szekunder oldali teljesitmény alapján kiválaszt néhány vastipust, amelyekre a tervezést végezni fogja. Tipusonként, a magállandó és a rézállandó katalógus adatai alapján, a vas anyagára jellemző veszteségi szám-indukció függvény alapján, a teljesitményből meghatározza azt az indukció értéket, amelynél a veszteségi teljesitménynek minimuma van. (Ha maximális indukciót adunk meg, és a veszteségi teljesitmény minimuma e korlát fölé esik, a korlátot veszi a további számitások alapjául.)

Az igy kiszámolt indukcióból, a tekercsek feszültségéből és a vasmag keresztmetszetéből – a vaskitöltési tényezőt, a vasés rézveszteségeket is számitásbe véve – kiszámolja a menetszámokat.

A réz fajlagos ellenállásával, a rézkitöltés katalógus adata, a szabványos zománchuzalátmérő táblázat alapján ugy adja meg a huzalátmérőket, hogy a tekercs a rendelkezésére álló ablakkeresztmetszetet kitöltse. Ez a számitási módszer egyuttal

azt is eredményezi, hogy a tekercsek összes rézvesztesége a már korábban, a veszteségi teljesitmény optimalizálásakor kiszámolt érték lesz [1].

Végül kiszámolja az egyes tekercsekhez szükséges rézhuzal tömegét, a teljes terhelés során a környezethez képest fellépő hőfoknövekedés maximális értékét, megadja a hatásfokot, a vasés rézveszteséget, az ablak és a tekercs keresztmetszetét, és az indukciót.

> ># Pelda a futtatasra: >run trafo

HALOZATI TRANSZFORMATOR MERETEZESE

\$\$ 1.SZEK.FESZ.(V).ARAM (A) : 500.025
\$\$ 2.SZEK.FESZ.(V).ARAM (A) : 5.2.
\$\$ 3.SZEK.FESZ.(V).ARAM (A) : 12.1.
\$\$ 4.SZEK.FESZ.(V).ARAM (A) :

** MEGENGEDETT INDUKCIO, Vs/m**2 : 1.2

!! OPTINUM A NEGADOTT KORLATON FOLUL : 1. EI 78/26 VASON: B= 1.25 Vs/m##2

++ JAVASOLT MAGOK ++ ++ JAVASOLT MAGOK 1. EI 78/26 2. EI 84/28 !! 3. EI 92/32 4. EI 92/30 5. EI 106/32

** KIIRANDO SORSZAMA : 2

	2. EI	84/28	VASON		
	FESZ	ARAM	MENET	ATNERO	SULY
1	220.00	0.175	1227	0.300	0.15
2	500.00	0.025	3080	0.150	0.15
3	5.00	2.000	30	1.000	0.05
4	12.00	1.000	73	0.700	0.05

NYUGALMI PRIMER ARAM MAX.= 0.009 A

INDUKCIO = 1.06 Vs/m##2 HATASFCK =90.02 % DELTAMOFCK =29.4 C VASVESZT.= 2.01 W REZVESZT.= 1.81 W ABLAK = 5.88 CM##2 TEKERCS = 6.40 CM##2 !!

** KIIRANDO SORSZAMA : 3

	3. EI	92/32	VASON		
	FESZ	ARAM	MENET	ATHERO	SULY
1	220.00	0.175	1515	0.350	0.32
2	500.00	0.025	3753	0.150	0.22
3	5.00	2.000	37	1.500	0.15
4	12.00	1.000	90	0.900	0.12

NYUGALMI PRIMER ARAM MAX.= 0.008 A

INDUNCID = 0.92 Vs/m3#2 HATASFOK =91.28 X DELTAHOFOK =23.5 C VASVESZT.= 1.74 W REZVESZT.= 1.54 W ABLAK =11.73 CM##2 TEKERCS =10.68 CM##2

** KIIRANDO SORSZAMA : "Z

1. ábra. Példa a TRAFO program futtatására

2.2. PITE

A PITE program valós lezárások között müködő illesztett "π", illetve az azzal ekvivalens "T" feszültségosztó méretezését végzi. A bemenő adatok formátumát a 2. táblázat, egy futtatási példát a 2. ábra mutat.

A bemenő adat jelentése	tipusa	formátuma
Generátor ellenállás		
Lezáró ellenállás		
A kivánt feszültségosztás (a le- zárt generátor feszültségéhez képest)	egész vagy valós	F8.0
A tervezés folytatására vonatko- zó kérdés (1= igen, 0= nem)		

2. táblázat. A PITE program bemenő adatformátuma

A program a számitás során vizsgálatot végez arra vonatkozóan, hogy a kivánt osztás illesztetten megvalósitható-e. Ha nem, jelzés történik, de a tervezés folytatódhat ugy, hogy vagy a generátor oldalon, vagy a fogyasztó oldalon nem valósul meg az illesztés; a " π ", illetve a "T" osztó elemeinek némelyi-ke szakadássá, illetve rövidzárrá fajul [4].

/		
>#Pelda a futtatasra:		
>run pite		
ILLESZTETT FESZULTSEGOSZ	TO	TERVEZESE
** GENERATOR ELLENALLAS		: 100
## LEZARO ELLENALLAS	[R]	: 47.

0.	13	1
3.	46	J
[R]:	1:	10
	3. [R]:	3.46 [R]: 1:

++	MEGOLDAS	• 1 •	TAGRA	++	
		.07		00	

		11 LA	RG-	100.00	
I	I	I	R1=	74.88	
RG	R2	RT	R2=	43.72	
I	I	I	R3=	12.02	
寒-	\$-	*	RT=	47.00	

++ MEGOLDAS "PI" TAGRA ++

寒		R2-#-	*	RG=	100.00	
I	I	I	I	R1=	390.91	
RG	R1	R3	RT	R2=	107.50	
I	I	I	I	R3=	62.76	
\$			#	RT=	47.00	

2. ábra. Példa a PITE program futtatására

2.3. INVLAP

Az INVLAP program racionális törtfüggvények inverz Laplace transzformáltját határozza meg. Futtatási példát a 3. és 4. ábrán láthatunk, a bemeneti adatokat a 3. táblázat mutatja.

3. táblázat. Az INVLAP program adatformátumai

A bemenő adat jelentése	tipusa	formátuma
A számláló polinom fokszáma (k)	egész valós	D10.0
A számláló polinom együtthatói rendre, a legmagasabb foku tag együtthatójával kezdődően	valós egész	(k+1)D10.0
A nevező polinom fokszáma (m)	egész valós	D10.0
A nevező polinom együtthatói rendre, a legmagasabb foku tag együtthatójával kezdődően	egész valós	(m+1)D10.0
A rajzolandó időintervallum kezdőpontja, a rajzolt pontok száma, az intervallum vég- pontja	egész valós	D10.0

Első lépésben megkeressük a számláló és a nevező polinom gyökeit. (A számláló és a nevező fokszáma maximálisan 19-19 lehet.) Ezután meghatározzuk a gyökök multiplicitását. A multiplicitás megállapitásakor két gyököt azonosnak tekintünk, ha különbségük abszolut értéke <10⁻³, és ezek átlagával számolunk tovább [3]. Meghatározzuk a reziduumokat, amelyekből kiszámol-

> > Pelds a futtatasra: > run invlap SZAMLALO FOKSZAMA: 3 EGYUTTHATOK, RENDRE: 1,3,3,1 NEVEZO FOKSZAMA: 5 EGYUTTHATOK, RENDRE: 1,2,3,2,1,0 INTERVALLUM KEZDOPONTJA: 0 INTERVALLUM VEGPONTJA: 20 RAJZOLT PONTOK SZAMA: 50 TOVABBI RAJZOLAST [1=IGEN,0=NEM] : 0 >

hatók az időfüggvény zárt alakjának konstansai és az időfüggvény adott intervallumokban való tabellázásához szükséges mennyiségek. Végül a tabellázott értékpárokat kirajzoltatjuk [2]. (Az összes kimeneti adat a sornyomtatóra kerül.)

3. ábra. Az INVLAP futtatása

2.4. ANASIM

Az ANASIM program analóg áramköri rendszerek szimulációját végző FORTRAN program előállitására alkalmas. Az itt bemutatásra kerülő első változat a FORTRAN programot az un. indirekt processzornak adott parancsok segitségével az interaktiv módon definiálható kötéslistából és egyéb bemenő adatokból épiti fel és aktivizálja (4. táblázat).

ILAILA**ILA**I	LA++IL	A++ILA+	ILA	+ILA++I	LA**ILA*	+ILA++ILA+	+ILA	+ILA++ILA	+ILA++IL	A++ILA++ILA	++ILA++ILA++
ILA **ILA **ILA		PHUGRAM	FOR	INVERSE	LAPLACE	THANSFORM	*	22-007-80	09106144		ILA++
1LA1LA**1LA**1 **1LA**1LA**1LA**1	LA++II	AILA.	ILA	+ILA++I	LA++ILA+	·ILA··ILA·	ILA.	• ILA •• ILA	**ILA**IL	A++IL+++ILA+ A++ILA++ILA+	+ILA++ILA++

NUMERATOR			DENOMINATON
1.00000000000000	Pee	0	0.000000E-01
3.0000000E+00	Pee	1	1.0000000E+00
3.0000000E.00	Pee	2	2.000000E+00
1-0000000E+00	Pee	3	3.0000000E+00
	Pee	4	2.0000000E+00
	Pee	5	1.000000UE +00
	NUMER& TOR 1 1=00000000E+00 3=0000000E+00 3=0000000E+00 1=0000000E+00	NUMERATOR: 1.0000000E+00 P++ 3.000000E+00 P++ 3.0000000E+00 P++ 1.0000000E+00 P++ P++ P++	NUMERATORI 1.0000000000000 Pee 0 3.00000000000 Pee 1 3.000000000000 Pee 2 1.000000000000 Pee 3 Pee 5

3 2F	P051		5 PC	LESI			
MULT	REAL PART	INAGINARY PART	HULT	REAL PART	INAGINARY PART		
3	-1.000000E.00	0.0000008-01	2	-5.000008-01	-5.660254E-01		
			2	-5.000000E-01	8.660254E-01		
			1	0-00000F-01	0.0000001-01		

THE ANALYTIC TIME FUNCTIONS

2.00E+00 *T *EXP(-5.00E=01*T) *(-1.67E-01*CO5(-8.66E=01*T) - 2.80E=01*SIN(-8.66E=01*T)) 2.00E+00 *EXP(-5.00E=01*T) *(-5.00E=01*CO5(-8.66E=01*T) - 4.81E=01*SIN(-8.66E=01*T)) 1.00E+00

TIME FUNCTION PLOTTED AT TIME INTERVAL 0.00E-01 / 2.00E+01 IN 50 POINTS

Tlint	OUTPUT					
0 1.0 01 1.1	2 1276 10					
0.0012-01	r.127F-10					
4.00000-01	4.5898-01	1	•			
8.0008-01	9.504E-01	1		•		
1.2002+00	1. 1946 + 00	1			•	
1.0004.00	1. TONE +00	1				
5+0001+00	1. #678. +00	1				
5 ** C. CE+00	1. HH2F+00	1				
5 . HCOF +00	1.7778.00	1				
3.200E+00	1.5941+00	1				
3.600E+00	1.3762+00	1			•	
4.0CCE+00	1.1546 +00	1		•		
4.4C0E+00	9.737E-01	1		•		
4.800E+00	8.366E-01	1				
5.20GE+00	7.541E-01	1				
5.600E+00	7.2348-01	1				
6.000E+00	7.3542-01	1				
6.4008+00	7.776E-01	1				
0. #0 JE +00	8.367E-01	I				
7.2COF +00	4.005E-01	I				
7.00 16 +00	9.597E-01	ī				
H- ULOF +00	1.0081 +00	i				
N-406E+00	1.0421.00	i				
8. 4005.00	1.0615.00	i				
9.200E+00	1.0675+00	î				
9-0005-00	1.0631.00	î				
1.0005.001	1.0525+00	;				
1.0405.01	1.0385.00	î				
1.0466+01	1.0236.00	;				
1.0402.01	1.0005.00	1				
1 1606+01	9. 4856-01	1				
1.1016+01	0.0005-01					
1.2032+01	9.9097-01	1				
1.24.2+01	Y	1				
1.2.4.1.401	0. 44 36 - 01	1				
1.37 36 +01	9.0036-01	1				
1.35.12+01	9.00/E-01	1				
1.4006+01	4.4195-01	1				
1.44 12+01	9.4506-01	1				
1.4405+01	4.4/4E-01	1				
1.5225+01	1.0000 +00	1				
1.500E+01	1.0026.00	1				
1.0031+01	1.0036+00	1				
1.640E+01	1.0036.00	1				
1.6HUE+01	1.003E+00	1				
1.720E+01	1.0026.00	1				
1.760E+01	1.0056+00	1				
1.900E+01	1.001E+00	1				
1.44 36 + 01	1.000E+00	1				
1.853E+01	1.0006+00	1				
1. 45.E+01	9.997E-01	1				
1. 4005. 01	4.495E-01	1				
	************			 ***************	*****************	

4. ábra. A példa eredményei

4. táblázat. Az ANASIM program bemeneti formátuma

and a state of a second state of the second st	
tipusa	formátuma
szöveg	2-9 betü karakter vagy "ESCAPE"
520VCB	2-20 betü karakter vagy "ESCAPE"
egész	1-50
	BN.INT=[IN],NUM1,NUM2, BN.INT=[IN],[TN],NUM2,
	BN.DIF=[IN],NUM1, BN.DIF=[IN],[TN],
szöveg	BN.FUN=f(TI,[BN1],)
	BN.RND=NUM1,NUM2, BN.RND=NUM1,NUM2,*,
	BN.RNG=NUM1,NUM2, BN.RNG=NUM1,NUM2,*,
szöveg	BN, BN,BN,BN,BN,
	TAB PLT PLT/PAG
logikai	Y,YES vagy N,NO, <cr></cr>
valós v. egész	D10.0
egész	16
	tipusa szöveg egész szöveg szöveg logikai valós v. egész

359

A program minden blokk-definiciót szintaktikai vizsgálatnak vet alá, és hiba esetén a hiba tipusának jelzése után ismét kéri az aktuális blokk definicióját. A beirható blokkok száma maximálisan 50. Ezután a bemenő adatok karater-csoportjait belső változókhoz rendeli, rendezi és ezek segitségével egy előre megadott séma szerinti FORTRAN programot állit össze.



^{5.} ábra. A példában szereplő oszcillátor blokkvázlata

A FORTRAN program a futtatás alkalmával kéri a szimulációs lépésköz, nyomtatási lépésköz és szimulációs idő, illetve nyomtatási idő adatokat; elvégzi a szimulációt és a kimeneti pont/ok/ időfüggvényét tabellázza és/vagy kirajzolja [5], [6].

Bár e program rendkivül csekély áramköri blokk-készlettel rendelkezik, a függvényblokk rugalmassága folytán számos nemlineáris sőt idővariáns áramköri rendszer szimulációját lehetővé teszi, megtartva emellett a felhasználó által igényelt egyszerű kezelhetőséget is.

> ># Pelda a futtatasra: / ♥@nasim >} 22-SEP-80 18:01:32 ANALOG SYSTEM HOUNTING PROGRAM NAME [S R:2.-9.]: parosc USER NAME [S R:2.-20.]: elektronikus X.Y. DLO:[300,100] parosc.FTN, .DAT, .RES USER: elektronikus X.Y. >* NUMBER OF BLOCKS [D R11.-50.]: 6 1. BLOCK [S]: 1.RNG=0.,.01, 2. BLOCK [S]: 2.FUN=DSIGN(500.,[1]-[5])#DSGRT(DADS(([1]-[5]))) 3. BLOCK [S]: 3.INT=(2],[6]+0., 4. BLOCK [S]: 4.INT=[3],[6]+0., 5. BLOCK [S]: 4.INT=(4),[6]+0., 6. BLOCK [S]: 6.FUN=0.1+DMIN1(0.2#TI,0.9) >\$ ># ENTER OPTION [S]: PLT ># OUTBLOCK NUMBER [1 ONLY] [S]: 3, > FORTRAN COMPLETE FOR DL0:[300,100] parosc=DL0:[300,100] parosc >FUN BL01:2300:1001 Parosc >TKB 00L01:2300:1001 Parosc ># RUNHT (Y/N)1wes >RUNHT (Y/N)1wes >RUN BL01:2300:1001 Parosc.0BJ/0:.CMD10/DE >RUN BL01:2300:1001 Parosc >/ >@ <EOF> AMALOG SYSTEM SIMULATION SEPRINTING TIME HIWIMUM (0 88 PRINTING STEP (.1 88 TIME MAXIMUM (10, 88 IINIYIAL TIME (0, 88 ENTRE ERROR (5 170 -- STOP Parosc 88 88 88 ## FT0

6. ábra. Példa az ANASIM program segitségével végzett szimulációra

A futtatási példán (6. és 7. ábra) egy időben változó időállandóju, nemlineáris elemmel határolt amplitudóju fázistolós oszcillátor modelljének szimultációja látható. Az 5. ábra az oszcillátor blokkvázlatát mutatja be.

DL0:1300.1	001 PAROSC	80	ILT BY SANASING				
USERI ELEN	TRONIKUS X.Y.	07136	22-558-84				
DASE . PARE	30. FTN 10.	01134	22-327-00				
ERRCODE: 1	PON= 0.3330-02		PAGE 1				
THE OL	1 03.						
00000-01 -1	94770+01						
.00000-01 2.	50880+02						
8.00000-01 -5.	96690+02				٠	I	
.00000-01 9	70490+02					I. ·	
.00000-01 -2	09050+03					I	
.00000-01 -1.	09340+03				•	1	
0.00000-01 1.	9699D+03					I *	
000000-01 3.	90890+03					I ·	
.10000+00 -1.	17390+03				•	I	
.20000+00 -4.	16950+03				•	1	
.30000+00 -5	90270+03			•		I	
.50000+00 -1.	5855D+03					Ĩ	
.60000+00 1.	99950+03					1 .	
.70000+00 5	02100+03					I	•
.90000008	29010+03					ž	
2.00000+00 7.	60970+03					1	
2.10000+00 4.	4157D+03					I	• .
-30003+00 -2.	35230+03					1	
-40000-5	22700+03					I	
	5666D+03		•			1	
-70003+00 -1	03600+03					1	
2.80000+00 -1	05890+04					X	
2.90000+00 -9	2188D+03		•			I	
3.000000+00 -6	37390+03			•		1	
3.20000+00 -3.	24710+02					Ĩ	
.30000+00 2.	48490+03					I •	
.40000+00 5.	02710+03					1	•
-600000+00 7	12660+03					1	•
8.70000+00 1.	06280+04					1	
.80000+00 1.	17360 • 04					I	
.90000+00 1.	24270+04					1	
.10000+00 1	22790+04					1	
.20000+00 1.	04550+04					I	
.30000+00 8.	06840+03					I	
.50000+00 3.	04190+03					E P	
.60000+00 5.	75490+02					Io	
.70000+00 -1.	81510+03				٠	I	
	08720+03				•	I I	
5.00000000 -8	13970+03					Ĩ	
5.10000+00 -9.	86260+03		•			1	
-20000+00 -1	13490+04		•			1	
-40000+00 -1.	35130+04					I	
.50000+00 -1.	41310+04					I	
6.60009.00 -1.	43790+04 *	-				I	
- R0000+00 -1.	4161D+04 2889D+04	•		-		I.	
.90000+00 -1.	05460+04					Î	
.00000.00 -7.	9346D+03				1	I	
-10000+00 -5.	22080+03			•		I.	
.30002+00 1.	70140+02						
.40000+00 2.	73230+03				1	• 1	
.50000+00 5.	14860+03				1	I	•
. 70000+00 7.	38540°03 41370°03					1	•
.80000+00 1.	12080+04					I	-
.90000+00 1.	27430+04				1	I	
-100000+00 1.	4941D+04				1	1	
.20000+00 1.	5545D+04				1	1	
.30000.00 1.	57570+04				i	I	
.40000+00 1.	5477D+04					1	
.60000+00 1.	15660+04					1	
.70000+00 8.	76790+03				i	I	
.80000+00 5.	86690+03				1		•
.00000+00 1.	14710+02						
.10000+00 -2.	61730+03				• 1	I	
.20000+00 -5.	19490+03		-	•	1		
	75470+03				1		
.50000+00 -1.	16820 • 04		0		1		
.60000-1.	33420+04	٠			i	I	
.70000+00 -1.	4712D+04 0				1		
.90000+00 -1.	6477D+040						
.00000-1.	6800D+04				1	1	
.10002.00 -1.	6656D+040				1		
-20003+00 -1.	3724D+04 4				1		
.40000+60 -1.	03790+04				1		
.50000+00 -7.	35790+03				1	1	
.60000-00 -4.	30540+03			•	1		
.70000+00 -1.	29900+03				÷ 1		

7. ábra. Az oszcillátor berezgése

361

3. Rajzoló szubrutin

Egy könnyen bővithető, kisméretű rajzoló szubrutint ismertetünk, amely az INVLAP programban használtunk. A szubrutin a főprogramban előzőleg 2-es logikai perifériaszámmal megnyitott bináris file-ról olvassa le a független és függő változó (FVALT, FERT) értékpár-rekordokat, és a COMMON területen megadott FMA, FMI maximális és minimális FERT értékekből számolja a normáló tényezőt. Ha az ábrázolandó függvény előjelet vált, a függvény 0 értékének megfelelő karakterpozicióban, egyébként pedig a minimális értékéhez tartozó karakterpozicióban "I" karaktert nyomtat. A függvény pontjait *-gal ábrázolja, 100 karakteres mezőszélességben. A kimenő adatokat (a rajz az értékpárokkal) a rutin a főprogramban előzőleg 1-es logikai perifériaszámmal megnyitott file-ra viszi. A rutin kihasználja a PDP-FORTRAN un. "object time format" lehetőségét: a bemeneti és a kimeneti formátum a futtatás alatt tetszőlegesen változtatható [7]. A szubrutin listáját mutatja be a 8. ábra.



8. ábra. A rajzoló szubrutin listája

4. Fejlesztések a jövőben

Az elkövetkezendő időben az eddig elkészült programok továbbfejlesztésén tulmenően további programok készülnek. Részben már elkészült a FIT program, amely alkalmas lesz terminálról definiált, FORTRAN-szintaxis szerint megadott többváltozós függvény interpretálására és megadott tartománybeli tabellázására, illetve görbeseregek rajzolására. Terveinkben szerepel egy, a MIMIC szimulációs processzorhoz [6] hasonló, egyszerű és a gép kapacitásához illesztett forditó kidolgozása, továbbá egy maximális laposságu, Csebisev, illetve derivált szürő szintézisét végző programrendszer kialakitása [5].

Hivatkozások

- [1] Alkatrészek. Takács Ferenc, BME egyetemi jegyzet (Tankönyvkiadó, Budapest, 1974.)
- [2] Dr. Fodor György: Elméleti elektrotechnika II. (Tankönyvkiadó, Budapest, 1970.) 254-258 [3] Dr. Csáki Frigyes: Lineáris szabályozási rendszerek
- analizise (Programozás és Elektronika, Müszaki Könyvkiadó, 1976.) 77-93
- [4] Dr. Géher Károly: Lineáris hálózatok (Müszaki Könyv-
- kiadó, 2. kiad. Budapest, 1972.) 287-291
 [5] Automatika II. Dr. Németh Gábor. Egyetemi jegyzet
 (Tankönyvkiadó, Budapest, 1975.) 21-40
- [6] Yaohan Chu, Folytonos rendszerek digitális szimulációja (Müszaki Könyvkiadó, Budapest, 1977.) [7] DEC, PDP-11 FORTRAN Language Ref. Man. (Maynard, 1975)
- chapter 6,6-18.

Juhász Katalin Lektorok: Gál János



ATOMKI Közlemények 22 (1980) 365-368

ÁLLANDÓ ARÁNYÚ IDŐZITŐ EGYSÉG CAMAC MECHANIKÁBAN

BIBOK GYÖRGY, GÁL JÁNOS

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51.

A cikk CAMAC mechanikában megépitett állandó arányu időzitő egységet ismertet, amely szcintillációs számlálókhoz és félvezető detektorokhoz egyaránt alkalmazható.

CONSTANT FRACTION TIMING UNIT IN CAMAC MODUL. The article presents a constant fraction timing unit fitting into a CAMAC crate, which can be used for both scintillation and semiconductor detectors.

УСТРОЙСТВО ВРЕМЕННОЙ ОТМЕТКИ МЕТОДОМ ПОСТОЯННОЙ ФРАКЦИИ В СТАНДАРТЕ НАМАК. В работе описывается устройство временной отметки, исползующее метод постоянной фракции. Прибор может быть использован как для сцинтилляционных счетчиков так и полупроводниковых детекторов. Прибор построен в стандарте НАМАК.

1. Bevezetés

A CAM 5.03-80 Allandó arányu időzitő diszkriminátor alkalmas a bemenetére érkező analóg impulzusok keletkezési idejének a meghatározására.

Alkalmas szcintillációs számlálók, és a beépitett időzitőszürő erősitőjének köszönhetően, töltésérzékeny előerősitők jeleinek közvetlen feldolgozására.

A készülék kiváló időzitő tulajdonságokkal rendelkezik, annak köszönhetően, hogy az időzitő impulzus kiváltása mindig a bemenőjel amplitudójának adott százalékánál történik. Az alkalmazott – kombinált szélesség és amplitudó diszkrimináción alapuló – zajszürési eljárás igen széles amplitudódinamikát tesz lehetővé.

Az állandó arányu időzités céljaira formált és felerősitett analóg bipoláris jel ellenőrzési célokra az előlapra ki van vezetve. Az időzitő jel a CAMAC előirásoknak eleget tevő logikai impulzus. A CAM 5.03-80 Állandó arányu időzitő egység müködési elvét az l. ábrán látható idődiagram és a 2. ábrán látható blokkvázlat szemlélteti.



1. ábra. Az állandó arányu időzitő egység időzitési diagramja.

Az előerősitőből vagy közvetlenül a szcintillációs számlálóból érkező jelet egyrészt differenciáljuk és változtatható faktorral osztjuk (a), másrészt azonos időállandóval differenciáljuk és integráljuk (b). Az igy kapott b és a jelek különbségét képezve a c bipoláris jelet kapjuk. Ennek a jelnek a nullátmenetét használjuk időreferencia pontnak.

A nullátmenet detektálása egy nulla voltra előfeszitett komparátor segitségével történik. A komparátor jele a d ábra szerinti. A d jelnek a nullátmenet időpontjában bekövetkező éle hordozza az idő információt.

A nulla feszültségre előfeszitett komparátor jelszünetben zajok hatására egyik állapotból a másikba billen, igy kimenőjelében a pozitiv él ilyenkor is jelentkezik. Ezeket a hamis éleket egy kombinált amplitudó és impulzusszélesség diszkrimináció segitségével szürjük ki. A szélesség diszkrimináció alapja az, hogy a hasznos jelek szélesség eloszlása eltér a zajok szélesség eloszlásától: a hasznos jelek szélessége általában nagyobb, mint a zajoké [1]. Igy a komparátor valódi jelek esetén hosszabb ideig tartózkódik pozitiv állapotban, mint zajok esetén. Az időzitő komparátor kimenőjele (d) egy kapuzott integrátorba kerül, melynek kimenetén az e jelet kapjuk. Ezt a jelet egy ujabb komparátorral amplitudó szerint diszkrimináljuk. A diszkriminációs szint változtatásával a jel-zaj diszkriminációt tudjuk változtatni: növelve a diszkriminációs szintet a C2 komparátor zajoktól származó billenéseinek a száma gyorsabban csökken, mint a valódi jelektől származóké. A komparátor jelének (f)pozitiv élét a kimenő formáló monostabil multivibrátor inditására használjuk, melynek kimenőjele (g)az időzitő jel.



2. ábra. Az állandó arányu időzitő egység blokkvázlata.

Mivel csupán szélesség diszkrimináció alapján teljes jelzaj szeparáció még nagy amplitudóju jelek esetén sem valósitható meg (ugyanis bizonyos számban a zajok között is előfordulnak olyan széles impulzusok, mint amilyenek a hasznos jelek), a szélesség diszkriminációt egy olyan amplitudó diszkriminációval kombináltuk, amely nem okoz amplitudó függő "walking"-ot.

Az amplitudó diszkrimináció megvalósitása a következő: az integrátor kimenőjelét arányosan leosztva visszavezetjük az első komparátor bemenetére. Igy ez a komparátor a bipoláris jel nullátmenete után egy emelkedő fürészfeszültséggel hasonlitja össze a bipoláris jel második szakaszát. Ezzel a módszerrel azt vizsgáljuk, hogy a triggerelést kiváltó jel a nullátmenet után adott idővel egy adott amplitudónál nagyobb-e. Ez a kombinált amplitudó és szélesség diszkriminációt alkalmazó módszer igen hatékony jel-zaj szeparációt tesz lehetővé [2].

A berendezés blokkvázlatát a 2. ábrán láthatjuk. A bemenőjel az EF₁ emitterkövetőn keresztül a D jelü CR differenciáló körbe kerül. A differenciált jelet egyrészt a differenciált jel leosztását meghatározó potenciométerre (P₂), másrészt az EF₂ jelü emitterkövetőn keresztül az I jelü RC integráló körbe vezetjük. Az integráló kör és a P₂ potenciométer csuszkáján levő jel az A differenciálerősitőbe jut, amely a két jel különbségét erősiti. Az erősités a P₁ potenciométerrel szabályozható. Az A erősitőnek két kimenete van, amelyeken a bipoláris jelet ellentétes fázisban kapjuk meg. A bipoláris jel az S polaritáskapcsoló állásától függően vagy az egyik, vagy a másik kimenetről eljut egyrészt a C₁ komparátorhoz, másrészt az EF₃ kimeneten keresztül az ellenőrző kimenetre. A P₃ potenciométerrel, amely az amplitudó függő "walking" beállitására szolgál, a bipoláris jel nullátmenetét érzékelő C₁ komparátor referencia feszültségét lehet változtatni. A C₁ komparátor kimenetét a GI kapuzott integrátorra vezetjük, melynek kimenőjelét a C₂ komparátor segitségével amplitudó szerint diszkrimináljuk. A C₂ komparátor másik bemenete egy állandó pozitiv feszültségre csatlakozik. A kapuzott integrátor kimenőjele ugyanakkor az R_F ellenálláson és a P₄ potenciométeren keresztül leosztva visszajut a C₁ komparátorra, megvalósitva ezzel a szélességfüggő amplitudó diszkriminációt. A C₂ kimenőjele az MMV monostabil multivibrátort inditja, melynek kimenőjelei az EF₄ emitterkövetőn át a lassu feszültségkimenetre, illetve az FD₁ és FD₂ gyors kimeneti meghajtó fokozatokon át a gyors áramkimenetekre kerülnek.

A D differenciáló kör, az I integráló kör és a GI kapuzott integrátor időállandójának a váltása egyidejüleg történik a T kapcsoló segitségével.

A berendezés lényegesebb müszaki paraméterei a következők:

Formáló időállandó: 25 ns, 50 ns, 100 ns (kapcsolóval váltható).

"Walking" : < 2ns, 1:100 dinamikus tartományban és 50 ns-os formáló időállandónál.

Erősités (névleges):10 -200 között folyamatosan szabályozható.

Részletes müszaki adatokat tartalmazó adatlap az ATOMKI Elektronikus Osztályától szerezhető be.

Hivatkozások

[1] J. Deroche, Proc. 6th Int. Symp. on Nuclear electronics, Warsaw (1971) p.83.

[2] J. Gál, Gy. Bibok, Nucl. Instr. and Meth. 163 (1979) 535.

Lektor: Török István

ATOMKI Közlemények 22 (1980) 369-373

MIKROPROCESSZOROS RENDSZER FOLYAMATIRÁNYITÁSI, ADATGYÜJTÉSI ÉS FELDOLGOZÁSI FELADATOKHOZ

MOLNÁR JÓZSEF, PAÁL ANDRÁS ÉS SEPSY KÁROLY

MTA Atommagkutató Intézete, Debrecen, Pf. 51, 4001

A cikk ismerteti az Intézetben kifejlesztett mikroproceszszoros moduláris rendszert, amely elsősorban laboratóriumi adatgyüjtési és feldolgozási feladatok ellátására alkalmas. Ismertetésre kerül egy a modulokat tartalmazó berendezés: egy mágneses tömegspektrométer mérésvezérlő és kiértékelő rendszere.

MICROPROCESSOR BASED SYSTEM FOR CONTROL, DATA ACQUISITION AND PROCESSING. The present paper describes a microprocessor controlled modular system designed at this Institute. The instrument is suitable first of all for data acquisition and processing in laboratory.

A measuring control and evaluation system of a magnetic mass spectrometer is described as an example for using moduls.

УСТРОЙСТВО НА МИНРОПРОЦЕССОРАХ ДЛЯ ЗАДАЧ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕС-СОВ, СБОРА И ОБРАБОТКИ ДАННЫХ. В статье описывается разработанная нами модулярная система на микропроцессоре. Устойство предназначено прежде всего для сбора и обработки данных. Описана упровяющая и разрабатывающая система магнитного масссепаратора, как пример использования модулей.

1. Bevezetés

A mikroprocesszorok alkalmazása Intézetünkben 1976-ban kezdődött kiemelt fejlesztési feladat keretében. A cél az akkor konkrétan felmerülő igények kielégitése

- a REA méréskiértékelő rendszer
- a mágneses tömegspektrométer

mikroprocesszoros berendezésekkel való ellátása volt. Célszerünek látszott egy távlati igényeket is kielégitő rendszer kidolgozása, melynek tervezésekor a következő főbb szempontokat kellett szem előtt tartani:

- a hazánkban gyártott számitástechnikai eszközökkel megvalósitható rendszerekhez képest legyen lényegesen olcsóbb
- legyen univerzális felhasználást lehetővé tevő moduláris felépitésü
- hagyjon lehetőséget a további konstrukciós és technológiai fejlesztés számára
- biztositsa a mikroprocesszorok szélesebbkörü alkalmazásához szükséges tapasztalatok megszerzését.

2. A moduláris mikroprocesszoros rendszer

Az egyes modulok (CPU, ADC-DAC, TTY, TIMER, MEMORY, POWER SUPPLY) tervezésénél a bevezetőben emlitett szempontoknak megfelelően az volt a cél, hogy mint önálló funkcionális egységek épitőkockaként felhasználhatók legyenek más természetű feladatok megoldásához is. A modulok egy buszrendszerhez csatlakoznak, amely fizikailag olyan sokpólusu csatlakozókat jelent, melyek megfelelő kimenőpontjait párhuzamosan kiépitett jelvezetékek kötnek össze. Ezáltal biztosított az, hogy a csatlakozó modulok tetszés szerinti kombinációja egyszerűen megvalósitható legyen. A modulok az ESZR szabvány ajánlásai alapján készültek.

2.1. A központi egység (CPU)

Intel 8080A mikroprocesszort tartalmaz, mely ismert konfigurációban [1] folyamatirányitási, adatgyüjtési és feldolgozási feladatokat láthat el. Tartalmaz óragenerátort, rendszervezérlőt, buszmeghajtót és megszakitás vezérlő logikát.

2.2. Tároló egységek

A csak olvasható (read-only, ROM) memória kártya, melynek kapacitása 4kByte, 2708 tipusu áramköröket tartalmaz. Az olvasható-irható memória (RAM) kapacitása 8kByte, kezdő cime 4kByte-os lépésekben változtatható.

2.3. ADC-DAC modul

Az analóg-digitál átalakitó nagysebességü, szukcessziv aproximációs elven müködő 12 bit felbontásu differenciális bemenettel rendelkezik. A nagy közösmodusu zajelnyomást differenciál bemenete biztositja. Analóg bemenetén bipoláris (±2,5V, ±5V, ±10V), vagy unipoláris jeleket (0-5V, 0-10V) fogadhat. Az ESZR kártyán megépitett modul, melynek fényképét az 1. ábra mutatja egy 8 bites digitál-analóg átalakitót is tartalmaz.



1. ábra. ADC-DAC modul.

2.4. Időzitő modul

Intel 8253 tipusu időzitő áramkörre épül, ami univerzálisan programozható 3 db 16 bites számlálót tartalmaz. Ezek segitségével – külső órajel felhasználásával – időzitési feladatok láthatók el (pl. megszakitáskérés).

Irógép illesztő kártya:

IBM 370 tipusu elektromos irógép illesztésére szolgál, melyen keresztül történhet a mérési paraméterek bevitele, valamint a naplózás.

Tápegység:

220 V 60 Hz-es bemenettel rendelkezik és biztositja a rendszerhez szükséges főbb tápfeszültségeket. Minden egyes stabilizátor tulterhelés és tulfeszültség védelemmel van ellátva.

2.5. TV-illesztő modul

Alkalmazásával a kereskedelmi forgalomban kapható TV készüléken 25 sorban, soronként 40 alfanumerikus karakter jelenithető meg, valamint speciális karaktergenerátora segitségével hisztogram rajzolható fel. A kép frissitése belső memóriából történik.

2.6. Sornyomtató illesztő

A felhasznált nyomtató tipusa SEIKO 101F, ami soronként 21 alfanumerikus karakter kinyomtatására alkalmas. A modul és a nyomtatómechanikával egybeépitett elektronika generálja mindazokat a szinkronimpulzusokat, amelyek a kiszolgáló programok felhasználásával a nyomtatást vezérlik. Ugyanezen modulhoz csatlkaoztatható egy hexadecimális billentyüzet is, amely 8 karakteres hexadecimális display-t tartalmaz. Ennek segitségével irhatók be az adott mérőrendszer aktuális paraméterei, illetve jelenithetők meg a mérés eredményei.

3. A mágneses tömegspektrométer automatizálása

Az alábbiakban bemutatjuk a mágnes tömegspektrométer vezérlő elektronikáját, amely az előző fejezetben ismertetett - és alapkonfigurációhoz szükséges - modulok felhasználásával készült el.

Jelen alkalmazásban a mágneses tömegspektrométer és az azt müködtető egységek feladata K-Ar földtani kormeghatározás [2,3]. Ez a mérendő argonminta tömegspektrumának felvételét és kiértékelését jelenti. A vezérlő elektronika megvalósitása során a következő főbb követelményeket kellett kielégiteni:

- a tömegspektrométer kimeneti jele nagy dinamikáju, ezért a Faraday-kalitkához csatlakozó elektrométer erősitő átviteli függvényét programozottan váltani kell,

- biztositani kell az automatikus tömegkalibrációt,

- a müködés folyamatos ellenőrzése céljából a felrajzolt spektrumon a referencia csucsra vonatkoztatott tömegazonosító markereket kell elhelyezni,

- a spektrumfelvétel folyamán tárolni kell az összetartozó amplitudó- és időpárokat.



2. ábra. A mágneses tömegspektrométer elektronikájának blokkvázlata.

Periodika 1081 / 459 n.

3.1. A tömegspektrométer vezérlőrendszerének programcsomagja

- A programcsomag két egységből áll:
- A mérésvezérlő programrészből, amely a hardware elemeket kiszolgáló handler-ek láncolata az adott feladatnak megfelelően.
- A kiértékelő programrész végzi a tárolt spektrum alapján az izotóparányok és a mérési hiba számitását.

A kiértékelés két, viszonylag kis terjedelmű programmodulon alapul. Az aritmetikai lebegőpontos eljáráscsomag [4] egyszerű numerikus műveletek, valamint decimális-lebegőpontos átalakitások szubrutinjait tartalmazza. A másik programmodul egy lebegőpontos aritmetikai interpreter. Segitségével a mikroszámitógép kalkulátorhoz hasonló üzemmódban működik. Az interpreter a lebegőpontos eljáráscsomagot felhasználva végrehajtja a memóriában kódsorozattal definiált algoritmust. Az interpreter használata a következő előnyökkel jár:

- a részeredmények tárolásáról az interpreter maga gondoskodik, igy a számitások áttekinthetővé válnak,

- az interpreter számára irt program hossza is jelentősen csökken, ami terjedelmesebb aritmetikai program esetén memória megtakaritást eredményez.

Végezetül egy összehasonlitást szeretnénk tenni, amely a mikroszámitógépek gazdasági előnyeit szemlélteti, – a tömegspektrométer vezérlőrendszerét véve alapul – azzal a megjegyzéssel, hogy ezek az arányok a világpiaci áraktól erősen függenek.

A mikroszámitógép szükitett önköltsége:	200	eFt
Az adott feladat megvalósitása CAMAC		
modulok felhasználásával	1	mFt
TPAi kisszámitógéppel	1,5	mFt

Hivatkozások

- [1] INTEL 8080 Microcomputer Systems User's Manual, Santa Clara (1975)
- [2] W. B. Harland, A. G. Smithm és B. Wilcock, The Phanerozic Timescale, Quarterly Jour. Geol. Soc. London 120S (1964) 458.
- [3] Balogh K., ATOMKI Közl. 15 (4) 1974 373
- [4] O. U. E. L. 1123 (75) Floating Point Arithmetic Routines and Macros for an INTEL 8080 Microprocessor (Oxford Univ.)

Lektor: Lőkös Sándor

Az ATOMKI Közlemények negyedévenként jelenik meg. Terjeszti az ATOMKI Könyvtára (Debrecen, Postafiók 51, 4001). Tudományos intézetek és könyvtárak kiadványaikért cserébe vagy ellenszolgáltatás nélkül is megrendelhetik. Kérésre egy-egy számot vagy különlenyomatot magánszemélyek is ingyen kaphatnak.

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

> Törzsszám: 11322 Debrecen, 1980/december Példányszám: 440

> > TUDOMANYOS AKADEMIA

ATONKI сообщения

TOM 22 / №4

СОДЕРЖАНИЕ

HAY	учные сообщения	243
в.	И. Нефедов: Физические основы рентгеноэлектрон- ного анализа состава поверхности	243
Α.	Нруппа: Применение метода СРП в частица-ротационной модели ²⁵ Mg	267
н.	Юухас, Г. Неметх: Приближение паде и его обобщения	281
И.	Терек, И. Ураи, П. Борнемиса-Пауспертл, П. Ковач: Получение информации о гамма-гамма совпадениях из анализа суммарных спектров, снатых одним Ge(Li) де- тектором	301
и.	Ниш, Э. Нолтаи, Д. Сабо, Ш. Месарош, Ш. Ласло, Ш. Гедень: Применение метода "PIXE" в анализе Сиологичес- ких и атмосфенных образцов	321
Й.	Бачо, Й. Даниель, Г. Налинка: Исследование отно- шения К/Са в здоровых и зараженных пероноспорой табачных листьях	335
ПО	МАСТЕРСНИМ И ЛАБОРАТОРИЯМ	339
г.	Секей, Дь. Асталош: Пользование терминалом CDC UT200 с ЭВМ PDP-11 в системе RSX-11M	339
г.	Иллеш, Г. Секей: Опыт использования методов наимен- ших квадратов взвешанных в направлениях у и также х	345
Α.	Гашпар: Программы/ PDP 11/40 для решения электронных проблем	353
Дь	. Бибок, Й. Гал: Устройство временной отметки методом постоянной фракции в стандарте камак	365
Й.	Молнар, А. Пал, Н. Шепши: Устроцство на микропроцес- сорах для задач управления процессов, сбора и обра- ботки ланных	369

ATOMKI BULLETIN

Volume 22/ Number 4

CONTENTS

SCIENTIFIC PAPERS

7.	I. Nefedov: Physical bases of the surface analysis by means of photoelectron spectroscopy	243
1.	Kruppa: Application of the PSE method in the particle-rotor model of ²⁵ Mg	267
Κ.	Juhász, G. Németh: Padé approximation and its generalizations	281
τ.	Török, I. Uray, P. Bornemisza-Pauspertl, P. Kovács: Getting coincidence information from analysis of sum peaks in singles Ge(Li) spectra	301
τ.	Kiss, E. Koltay, Gy. Szabó, Á. Mészáros, S. László, S. Gődény: Proton induced x-ray emission as a tool for analysing biological and atmospherical samples	321
J.	Bacsó, J. Dániel, G. Kalinka: Investigation of the K/Ca ratio in healthy and mildewy tobacco leaves	335
FRO	DM OUR WORKSHOP AND LABORATORY	339
G.	Székely, Gy. Asztalos: Using CDC user terminal 200 from PDP-11 under RSX-11M	339
G.	Illés, G. Székely: Experience with least squares methods, weighted both in y and x	345
Α.	Gáspár: Electronic programs to PDP 11/40 computer	353
Gy.	. <i>Bibok, J. Gál</i> ; Constant fraction timing unit in CAMAC modul	365
J.	Molnár, A. Paál, K. Sepsy: Microprocessor based system for control, data acquisition and processing	369

243