

STUDIA
UNIVERSITATIS BABEŞ-BOLYAI

SERIES PHYSICA

FASCICULUS 1

1972

C L U J

REDACTOR ȘEF: Prof. ȘT. PASCU, membru corespondent al Academiei

**REDACTORI ȘEFI ADJUNCȚI: Acad. prof. ȘT. PÉTERFI, prof. GH. MARCU,
prof. A. NEGUCIOIU**

**COMITETUL DE REDACȚIE AL SERIEI FIZICĂ: Prof. AL. BÓDI, prof. Z. GÁBOS
(redactor responsabil), prof V. MERCEA, membru corespondent al Academei,
prof. I. POP, lect. I. BARBUR (secretar de redacție)**

STUDIA

UNIVERSITATIS BABEŞ-BOLYAI

SERIES PHYSICA

FASCICULUS 1

Redacția: CLUJ, str M Kogălniceanu, 1 • Telefon 1 34 50

SUMAR – СОДЕРЖАНИЕ – CONTENTS – INHALT – SOMMAIRE

G. Г ЧЕМЕРЕСЮК, Отрицательная фотопроводимость в селениде кадмия, обусловленная уменьшением подвижности свободных носителей • Fotoconductivitatea negativă în seleniura de cadmii cauzată de micșorarea mobilității purtătorilor liberi. • Negative Photoconductivity of Cadmium Selenide Caused by the Decrease of Mobility of the Current free Carriers	3
V. ZNAMIROVSKI, Fracționarea izotopică a hidrogenului în sistemul H ₂ O—OH • Изотопное фракционирование водорода в системе H ₂ O—OH • Isotopic Fractionation of Hydrogen in H ₂ O—OH System	23
Z. GÁBOS, Die kovariante Polarisationsmatrix für Tensor- und Rarita-Schwinger-Felder • Matricea covariantă de polarizare pentru cimpuri tensoriale și Rarita-Schwinger • Ковариантная поляризационная матрица для тензорных полей и для полей Рарита–Швингера	29
M. CRIȘAN, M McNEIL, V CRIȘAN, Spin Waves Spectrum for the b c c Ferromagnetic Systems • Spectrul undelor de spin pentru sisteme feromagnetice cu volum central • Спектр спиновых волн для ферромагнитных о ц к систем	41
V. M. SOUNDALGEKAR, D. D. HALDAVNEKAR, On the Slow MHD Flow between two Non-Parallel Plates • Despre scurgerea MHD lenta între două plăci neraiale • О медленном МГД течении между двумя непараллельными пластинками	47
V. ZNAMIROVSKI, O. COZAR, R. E. S a ionului Cu(II) în complecși parțial covalenți formați în soluții amoniacale și alcoolice la 77°K • ЭПР иона Cu(II) в частично ковалентных комплексах, образованных в аммиачных и спиртовых растворах при 77°K • La R. E. S de l'ion Cu(II) dans les complexes partiellement covalents formés dans des solutions ammoniacales et alcooliques à 77°K	53
M. CRISTEA, Unde electromagnetice de înaltă frecvență într-o placă slab ionizată • Высокочастотные электромагнитные волны в слабоионизированной плазме • Ondes électromagnétiques de haute fréquence dans un plasma faiblement ionisé	59
F. KOCH, ST. TAMÁS, Quencherscheinung bei der Flussigkeitsszintillationszählung • Extincția la scintilatori lichizi • Экстинкция у жидких сцинтилляторов	65
I. STAN, Establishment of Concentration Profile for the Flow Near a Rotating Disk with Chemical Reactions • Stabilirea profilului concentrației la scurgerea în ariporieștea unui disc în rotație cu reacții chimice • Определение профиля концентрации при течении жидкости в окрестности врачающегося диска в случае химических реакций	71

I. POP, P. ȘTEȚIU, Comportarea magnetică a compușilor intermetalici CoSb, CoSb ₂ și NiSb • Магнитное поведение интерметаллических соединений CoSb, CoSb ₂ и NiSb • Le comportement magnétique des composés intermétalliques CoSb, CoSb ₂ et NiSb	77
S. COLDEA, On the Calculation of the Shear Viscosity for Binary Dense Mixtures • Asupra calculului vîscozității de strat a amestecurilor binare dense • О вычислении слоевой вязкости плотных двойных смесей	81
Note – Заметки – Notizen – Notes – Notes	
T. I. LĂSZLÓ, G. LAZAR, Field-Strength Measurements Taken in Cluj During the Partial Solar Eclipse of February 25, 1971 • Măsurători de intensitate de cîmp făcute la Cluj cu prilejul eclipsei parțiale solare din 25.02.1971 • Измерения напряженности поля, проведённые в Клуже во время частичного солнечного затмения 25-II 1971 г	87
In memoriam	
VICTOR MARIAN	91
Cronică – Хроника – Chronik – Chronicle – Cronique	
Participări la manifestări științifice internaționale	93
Participări la manifestări științifice din țară	93
Sedinte de comunicări	94
Vizite	95

ОТРИЦАТЕЛЬНАЯ ФОТОПРОВОДИМОСТЬ В СЕЛЕНИДЕ ҚАДМИЯ, ОБУСЛОВЛЕННАЯ УМЕНЬШЕНИЕМ ПОДВИЖНОСТИ СВОБОД- НЫХ НОСИТЕЛЕЙ

Г. Г. ЧЕМЕРЕСЮК (Одесса)

1. Введение. Освещение полупроводника в некоторых случаях приводит не к увеличению, как обычно, а к уменьшению его электропроводности. Эффект уменьшения проводимости под действием света получил название отрицательной фотопроводимости. Это своеобразное гашение темнового тока наблюдается сравнительно редко, сообщения о нем время от времени появляются в литературе. Отрицательная фотопроводимость обнаружена в ряде веществ: селене [1—5], стибните [6], молибдените [7], сернистом серебре [8, 9], галогенидах серебра [10—14], купrite (закиси меди) [15—19], окиси цинка [20—21], селениде цинка [22], сульфиде кадмия [23], германии [24—30] и др.

Анализ работ [1—39] показывает, что отрицательная фотопроводимость обладает рядом характерных черт. Как правило, этот эффект наблюдается после введения примесей [2, 9, 16, 24, 25, 29, 30] или в результате проведения различных обработок [26, 28]. Максимум его находится либо в области собственного поглощения полупроводника [2, 6, 7, 10, 22, 24, 28], либо сразу же за длинноволновым краем собственного поглощения [3, 23, 26, 35, 38]. Отрицательная фотопроводимость проявляется в некотором интервале температур [18, 19, 28, 35, 38, 39] и интенсивностей возбуждающего света [7, 17, 18, 24, 29], переход за пределы которого вызывает появление положительного эффекта.

Важным фактором, существенно влияющим на возникновение отрицательной фотопроводимости, является электрическое поле. В работах [7, 8, 12, 16, 22—24, 39] отмечается, что отрицательный эффект наблюдается лишь при достаточно больших напряженностях поля, в то время как при слабых полях имеет место обычный положительный фотоэффект. При этом обнаруживается нелинейность вольтамперных характеристик [17, 24, 30].

Весьма характерным является своеобразный вид кривых релаксации фототока при наблюдении отрицательной фотопроводимости

[4, 7, 8, 10, 11, 16, 17, 24, 30], указывающих на наложение двух процессов: положительного и отрицательного. При этом второй процесс значительно медленнее первого. В некоторых работах [19, 28, 40] отмечается, что явление отрицательной фотопроводимости существенно зависит от состояния поверхности полупроводника.

В настоящее время нет единого мнения относительно природы отрицательной фотопроводимости [31—33]. Возможно механизм этого эффекта для разных веществ различен.

В случае наблюдения отрицательного фотоэффекта уменьшение проводимости полупроводника может происходить либо вследствие спада концентрации свободных носителей, либо за счет уменьшения их подвижности при освещении. Распространенным является мнение, что именно уменьшение концентрации носителей приводит к возникновению отрицательной фотопроводимости. Для объяснения такого уменьшения концентрации свободных носителей под действием света Волькенштейн [41], Жузе и Рывкин [42] предложили схему электронных переходов, предполагающую примесное поглощение света и сложный характер рекомбинации. Позже этот механизм был детально проанализирован Штокманом [26].

В полупроводниковых кристаллах с большой концентрацией заряженных примесных атомов подвижность свободных носителей должна зависеть от рассеяния на этих атомах [43]. В соединениях группы A_2B_6 с сильно развитыми процессами захвата роль рассеивающих центров могут играть заряженные ловушки. При этом заполнение ловушек может меняться в широких пределах при изменении положения квазиуровня Ферми в запрещенной зоне с помощью температуры и освещенности.

Взаимодействие свободного электрона с заполненными ловушечными центрами, концентрация которых равна n_i , можно характеризовать поперечным сечением рассеяния S^* , определяемым очевидным равенством

$$S^* = \frac{1}{\bar{\Lambda} n_i}, \quad (1)$$

где $\bar{\Lambda} = v\tau^*$ — средняя длина свободного пробега электрона, v — тепловая скорость, τ^* — время, прошедшее между двумя соседними актами рассеяния. Время τ^* связано с подвижностью известной формулой

$$\mu = \frac{e}{m} \tau^* \quad (2)$$

Здесь e и m — заряд и масса свободного электрона, соответственно.

Эффективность ловушки как рассеивающего центра зависит от ее зарядового состояния. Если центр захвата в свободном состоянии является нейтральным, но при заполнении электронами приобретает отрицательный заряд и начинает действовать как эффективный центр

рассеяния, то подвижность свободных электронов может быть представлена в виде

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_0} + \alpha n_i, \quad (3)$$

где μ_0 — подвижность, зависящая от всех других видов рассеяния, $\alpha = \frac{v_m S^*}{e}$ — коэффициент пропорциональности, показывающий относительное изменение подвижности носителей в результате увеличения концентрации рассеивающих центров на единицу. Формула (3) будет справедлива и в том случае, когда однократно отрицательно заряженный в темноте центр приобретает двойной отрицательный заряд при фотовозбуждении.

Уменьшение подвижности свободных электронов в результате изменения интенсивности возбуждающего света наблюдалось экспериментально [44]. При этом в сульфиде кадмия μ менялось более, чем в 6 раз, а в CdSe в 20 раз.

Настоящая работа посвящена исследованию отрицательной фотопроводимости в селениде кадмия, обусловленной уменьшением подвижности свободных носителей вследствие рассеяния их на ловушках, подвергнутых оптической перезарядке.

2. Возникновение отрицательной фотопроводимости в селениде кадмия. Эффект отрицательной фотопроводимости наблюдается на монокристаллах селенида кадмия после обработки их поверхности газовым разрядом. Методика обработки и техника измерений описаны в работе [45].

До обработки газовым разрядом монокристаллы CdSe имеют высокое темновое сопротивление (10^{10} — 10^{11} ом · см) и обладают резко выраженным

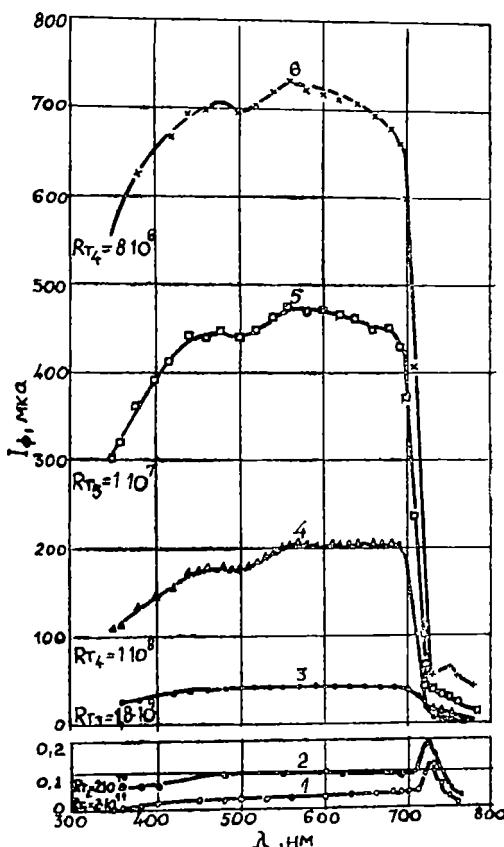


Рис. 1. Спектральное распределение фототока монокристалла CdSe 1-до обработки газовым разрядом, 2-после обработки в течение 1,5 сек, 3-после дополнительной обработки в течение еще 3 сек, 4-еще 3 сек, 5-еще 10 сек, 6-еще 10 сек.

максимумом фоточувствительности в области 720 нм (см рис. 1, кривая 1). В результате обработки происходит значительное увеличение темнового тока (темновое сопротивление образцов до и после обработки показано цифрами слева от соответствующих кривых спектрального распределения фотопроводимости на рис. 1), а также резкое возрастание фоточувствительности монокристаллов CdSe, причем особенно сильно в области собственного поглощения (рис. 1, кривые 2—6). Предполагается, что обработка в плазме газового разряда вызывает образование на поверхности кристаллов вакансий селена, которые с одной стороны, являясь донорами, повышают проводимость образцов, а с другой — идут на образование комплексов вакансий V_{Cd} , V_{Se} [46]. Эти комплексы, либо еще более сложные образования [47] могут играть роль медленного канала рекомбинации [32]. Благодаря этому уменьшается скорость поверхностной рекомбинации, увеличивается время жизни свободных носителей, а следовательно повышается фоточувствительность в коротковолновой области спектра. Как показали измерения термостимулированной проводимости [48], проводимая обработка вызывает повышение концентрации ловушек в приповерхностном слое кристалла. По данным ТСП их энергетическая глубина составляет 0,5 эв.

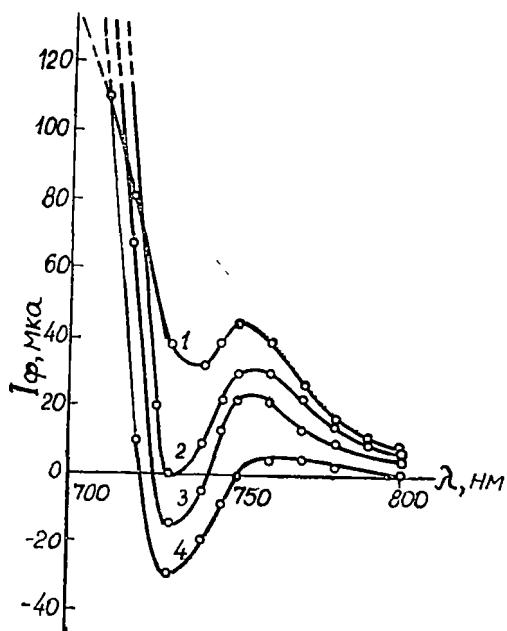


Рис 2. Возникновение отрицательной фотопроводимости в монокристаллах селенида кадмия после обработки газовым разрядом 1-кристалл обработан в течение 10 сек, 2-дополнительно обработан в течение 1 сек, 3-еще 1 сек, 4-еще 1 сек

В случае продолжительной обработки газовым разрядом на краю собственного поглощения монокристаллов селенида кадмия появляется минимум фотопроводимости (рис. 1, кривая 6). С дальнейшим увеличением времени обработки минимум становится более выраженным (рис. 2, кривые 1, 2) и после достаточно длительных обработок в этой области спектра возникает отрицательная фотопроводимость (рис. 2, кривые 3, 4). Этот эффект у большинства образцов проявляется в спектральном интервале 720—770 нм. В отдельных образцах этот интервал просчитывается и далее в сторону длинных волн. Максимум отрицательной фотопроводимости во всех случаях наблюдается при $\lambda = 730$ нм [49].

Возникновение отрицательного фотоэффекта в значительной мере зависит от степени обработки кристалла.

Длительная бомбардировка поверхности образца ионами и электронами в условиях тлеющего разряда может привести к уменьшению этого эффекта или даже к полному его исчезновению.

Отрицательная фотопроводимость, обнаруженная на монокристаллах CdSe после обработки их поверхности газовым разрядом, может сохраняться в течение нескольких месяцев при хранении образцов в атмосфере воздуха. Со временем этот эффект уменьшается и по истечении продолжительного промежутка времени совершенно исчезает. При этом фотоэлектрические характеристики образцов становятся близкими соответствующим характеристикам необработанных кристаллов. Проводя новые циклы обработок, можно вновь добиться появления отрицательной фотопроводимости. Во время измерений образец находится в вакууме ($\phi \sim 10^{-5}$ мм рт.ст.). В этом случае его фотоэлектрические и электрические характеристики практически не меняются со временем.

Исследования, проведенные при освещении образцов узким световым зондом, показали, что наблюдаемый эффект отрицательной фотопроводимости не является отражением приконтактных явлений.

3. Механизм явления. Обработка поверхности монокристаллов селенида кадмия газовым разрядом, вызывающая появление отрицательной фотопроводимости, приводит к существенному изменению вида вольтамперных характеристик. До обработки они линейны во всем интервале применяемых напряжений. После обработки линейный участок темновой вольтамперной характеристики (рис. 3, кривая 1) сохраняется лишь при начальных напряжениях. Затем зависимость тока от напряжения становится сублинейной, достигая насыщения. При достаточно высоких электрических полях она переходит в зависимость вида $I \sim V^n$ где $n > 2$. При освещении кристалла (рис. 3, кривая 2) светом с $\lambda = 740$ нм зависимость $I_\Phi(V)$ сохраняет все особенности предыдущей кривой. Характерным является то, что при указанной подсветке в некотором интервале напряжений

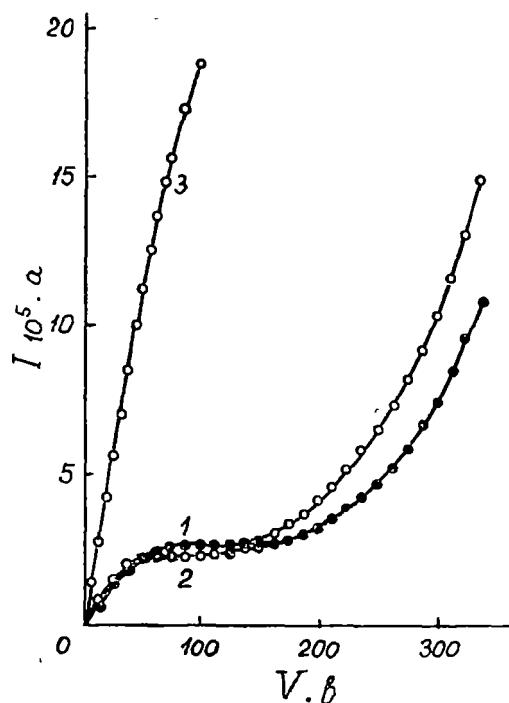


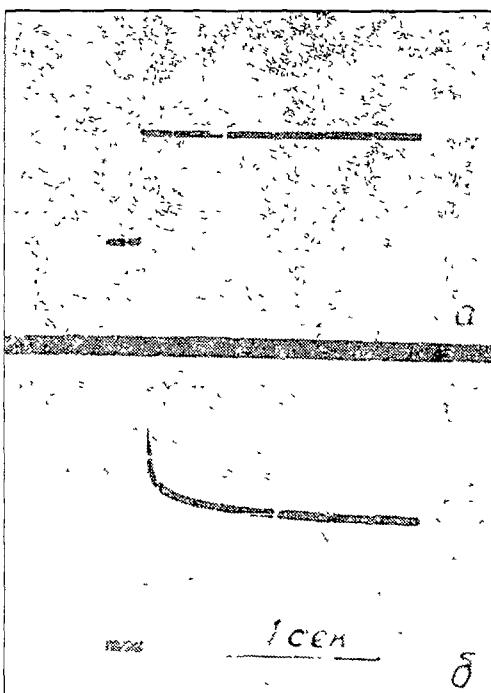
Рис. 3 Вольтамперные характеристики монокристалла CdSe, обработанного газовым разрядом.
1-в темноте, 2-при освещении светом с $\lambda = 730$ нм,
3-при освещении светом с $\lambda = 500$ нм.

кривая 2 проходит ниже кривой 1, т.е. ток, измеренный при возбуждении кристалла светом, оказывается меньшим темнового. При подсветке излучением из глубины полосы собственного поглощения ($\lambda = 500$ нм) характеристика почти спрямляется в широкой области напряжений (рис. 3, кривая 3).

Как отмечалось выше, обработка газовым разрядом поверхности кристаллов селенида кадмия, наряду с уменьшением поверхностной рекомбинации, приводит к созданию большой концентрации электронных ловушек в приповерхностном слое. Это должно вызвать не только резкое возрастание инерционности фототока, что действительно наблюдается на опыте, но и уменьшение подвижности свободных носителей за счет дополнительного рассеяния их на заполненных электронами ловушках [48]. Перезарядка ловушек может происходить как фотовозбужденными [44, 50, 51], так и инжектированными в кристалл электронами [52]. Учитывая это, сублинейность и насыщение вольтамперных характеристик можно объяснить уменьшением подвижности за счет возрастания с увеличением напряжения концентрации инжектированных в образец электронов, заполняющих ловушки в приповерхностном слое кристалла. Последующее быстрое возрастание тока с ростом напряжения может быть объяснено процессами, приводящими к размножению свободных носителей с помощью электрического поля (освобождение мелких ловушек полем или ударная их ионизация быстро движущимися электронами).

О решающей роли процесса захвата на ловушки в наблюдаемом явлении говорят кинетические измерения фотопроводимости [53]. Перед обработкой поверхности фототок безинерционно следовал изменениям напряженности поля (рис. 4а). Однако после обработки (рис. 4б) подключение к освещенному кристаллу напряжения из области насыщения вольтамперной характеристики приводит к скачкообразному возрастанию фототока, сменяющемуся медленным спадом, обусловленным захватом электронов на ловушки.

Рис. 4 Осциллограммы, показывающие релаксацию фототока при подключении напряжения к образцу. а-до обработки, б-после обработки поверхности кристалла в газовом разряде.



Уменьшение тока ниже темнового при освещении кристалла светом из области 730 нм можно интерпретировать как следствие увеличения числа рассеивающих центров при подсветке. Это может соответствовать заполнению ловушек фотоэлектронами или подъему электронов непосредственно из валентной зоны на уровни дефектов [26]. Сравнение:

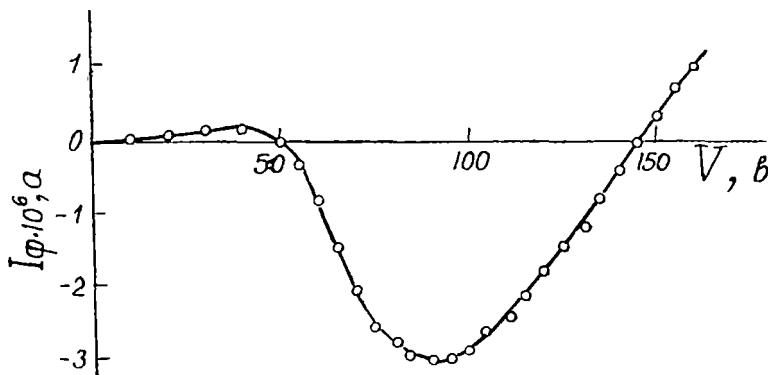


Рис. 5. Зависимость отрицательной фотопроводимости от приложенного напряжения

кривых 1 и 2 рисунка 3 показывает, что существует некоторая область напряжений, где ток, измеренный при освещении, имеет меньшую величину, чем соответствующий темновой ток. Это может произойти в результате настолько значительного уменьшения подвижности свободных носителей, что возрастание их концентрации в результате фотовозбуждения оказывается недостаточным для увеличения световой проводимости по сравнению с темновой. Вышеуказанная область напряжений и есть область существования отрицательной фотопроводимости. Зависимость отрицательного фотоэффекта от напряжения приведена на рис. 5. Возрастание эффекта с увеличением электрического поля связано с повышением концентрации рассеивающих центров, вследствие заполнения ловушек электронами. Однако, при достаточно больших полях начинает сказываться ударная ионизация ловушек. Максимум отрицательной фотопроводимости достигается как результат равновесия между этими двумя эффектами.

В случае возбуждения кристалла сильно поглощаемым светом фототок создается в тонком приповерхностном слое, что соответствует высокой плотности свободных носителей. Тогда ловушки уже полностью насыщены электронами и инжектированные полем носители не меняют их зарядового состояния. При такой ситуации сублинейность зависимости фототока от напряжения проявляется слабо (рис. 3, кривая 3).

Зависимость отрицательной фотопроводимости от интенсивности света носит своеобразный характер (рис. 6). Эта зависимость также находит свое объяснение в терминах изменения подвижности свободных

носителей. С ростом интенсивности возбуждающего света возрастает плотность как свободных, так и связанных электронов; при малых интенсивностях света преобладающим оказывается процесс уменьшения подвижности свободных носителей тока, и лишь при больших световых

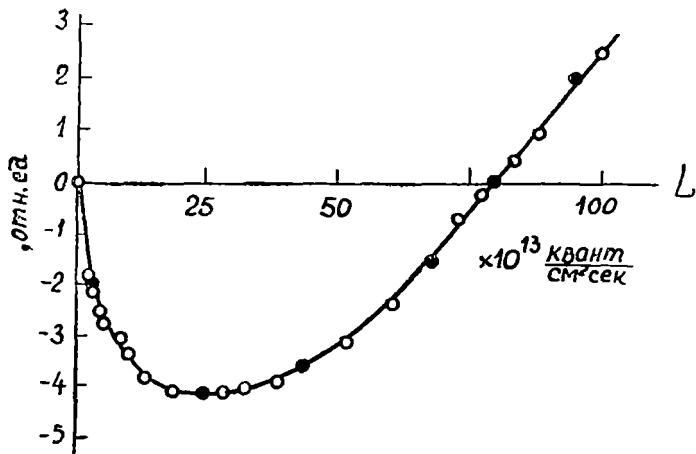


Рис. 6. Люксамперная характеристика

потоках происходит насыщение ловушек, т.е. μ больше не уменьшается с ростом интенсивности возбуждения. Начиная с этой интенсивности света, наблюдается постепенный переход отрицательной фотопроводимости в положительную, обусловленную возрастанием концентрации свободных носителей.

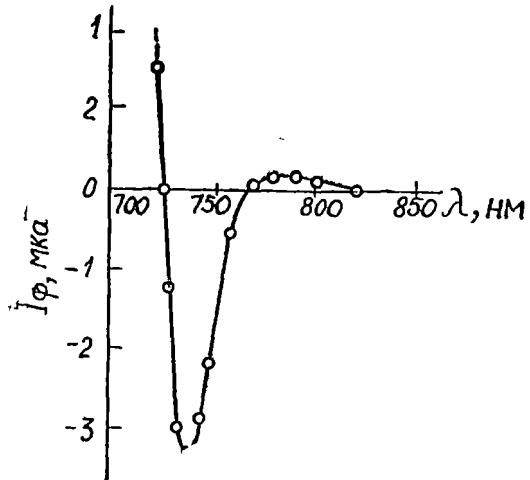
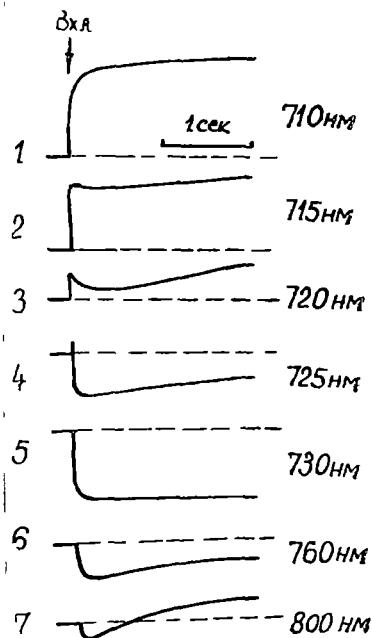


Рис. 7. Спектральное распределение отрицательной фотопроводимости

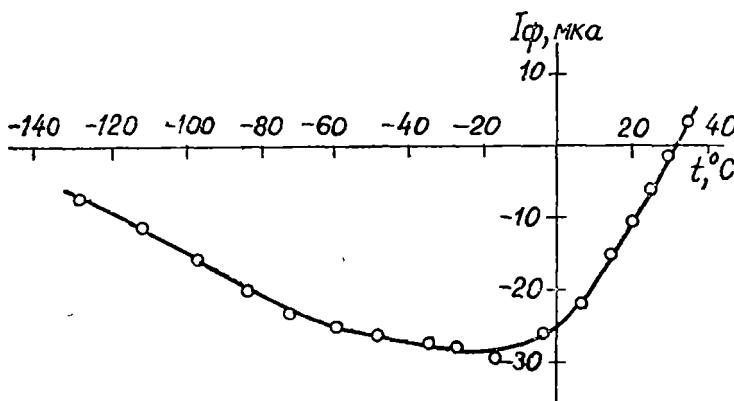
Спектральное распределение отрицательной фотопроводимости характеризуется узким максимумом у края собственного поглощения (рис. 7). Полуширина максимума не превышает 20—30 нм. Резкая зависимость эффекта от длины волны возбуждающего света показывает, что здесь существенную роль играет глубина проникновения света, т.е. зависимость коэффициента поглощения CdSe от длины волны возбуждающего света. При этом нужно учитывать, что обработка монокристалла газовым разрядом вызывает повышение концентрации ловушек

в тонком приповерхностном слое. Поэтому существование положительной или отрицательной фотопроводимости в данном случае зависит от соотношения глубины проникновения возбуждающего света в образец и глубины распространения рассеивающих центров. Если свет полностью поглощается в очень тонком поверхностном слое, то это соответствует случаю высокой плотности возбуждения, уже рассмотренному выше, когда положительный эффект превосходит отрицательный. При проникновении возбуждающего света на большую глубину в кристалл свободные носители рождаются во всем объеме полупроводника, где плотность ловушек не повышенена обработкой. Это снова приводит к стимулированию фототока. Наиболее благоприятным случаем для возникновения отрицательной фотопроводимости можно считать совпадение глубины проникновения света с глубиной расположения ловушек. Тогда рассеивающее действие заряженных ловушек на поток электронов проявляется наиболее эффективно. Эти соображения наглядно иллюстрируются приведенными на рисунке 8 осциллограммами кинетики фототока в области 710–800 нм.

Зависимость отрицательной фотопроводимости от температуры показана на рис. 9. Из рисунка видно, что в некотором температурном интервале (от +40 до –20°) эффект возрастает с понижением темпера-



Р и с. 8 Осциллограммы изменения фототока при включении света различных длин волн.



Р и с. 9 Температурная зависимость отрицательной фотопроводимости.

туры. Это, вероятно, связано с уменьшением термической ионизации заполненных электронами ловушек. При дальнейшем снижении температуры (ниже -20°C) отрицательная фотопроводимость начинает уменьшаться вследствие увеличивающейся роли положительного фототока „освободившегося“ от температурного гашения.

4. Условия существования эффекта отрицательной фотопроводимости. Используя предложенный механизм отрицательной фотопроводимости, оценим концентрацию ловушек, необходимую для возникновения этого эффекта [54]. Пусть фотовозбуждение изменяет проводимость кристалла от темнового значения $\sigma = e\mu_0 n_0$ до значения $\sigma = e\mu n$, где $n = n_0 + \Delta n$, n_0 — темновая концентрация электронов, Δn — концентрация свободных электронов, возбужденных светом, μ_0 и μ — подвижности электронов в темноте и при освещении, соответственно.

Изменение проводимости под действием света

$$\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0 = e\mu(n_0 + \Delta n) - e\mu_0 n_0 \quad (4)$$

Считая, что μ изменяется только за счет оптического образования новых рассеивающих центров (заполнение ловушек фотоэлектронами), для подвижности при освещении, используя (3), можно записать

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \alpha\mu_0 n_t}, \quad (5)$$

где n_t — прирост концентрации заполненных ловушечных центров за счет фотовозбуждения. Коэффициент α , рассчитанный по формуле Конвелл-Вайскопфа, равен $3 \cdot 10^{-18}$ в.см.сек.

Очевидно

$$n_t = \frac{(n_0 + \Delta n)N_t}{n_0 + \Delta n + N_{et}} - \frac{n_0 N_t}{n_0 + N_{et}}, \quad (6)$$

где $N_{et} = N_e e^{-\frac{E_t}{kT}}$, N_e — эффективная плотность состояний в зоне проводимости, N_t — концентрация ловушек, E_t — их энергетическая глубина.

Подставляя значения μ и n_t из выражений (5) и (6) в формулу (4) для $\Delta\sigma$, после упрощений получим

$$\Delta\sigma = e\mu_0 \frac{\Delta n^2 + \Theta\Delta n}{\xi\Delta n + \eta}, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \Theta &= \frac{n_0^2 + n_0 N_{et}(2 - \alpha\mu_0 N_t) + N_{et}^2}{n_0 + N_{et}}, \\ \xi &= \frac{n_0 + N_{et} + \alpha\mu_0 N_t N_{et}}{n_0 + N_{et}}, \\ \eta &= n_0 + N_{et} \end{aligned}$$

Из (7) видно, что отрицательное значение $\Delta\sigma$ может быть обеспечено лишь за счет коэффициента Θ при Δn в числите, т.к. знаменатель — заведомо положительная величина. Кривая зависимости $\Theta(n_0)$ имеет минимум в точке с координатами

$$n_0^{min} = N_{et} (\sqrt{\alpha \mu_0 N_t} - 1), \quad (8)$$

$$\Theta_{min} = N_{et} \sqrt{\alpha \mu_0 N_t} (2 - \sqrt{\alpha \mu_0 N_t}). \quad (9)$$

Величина Θ_{min} для ловушек заданной глубины определяется концентрацией центров прилипания N_t . Зависимость $\Theta_{min}(N_t)$, рассчитанная по формуле (9) для значений подвижности $\mu_0 = 10^2$ см²/в. сек и глубины залегания ловушек $E_t = 0,52$ эв [55], представлена на рис. 10. Из графика следует, что в интервале плотностей ловушек $0 < N_t < N_t^0$ величина Θ_{min} принимает положительные значения. Она становится отрицательной при концентрациях ловушек, превышающих N_t^0 .

Таким образом, наблюдение отрицательной фотопроводимости возможно, если плотность центров захвата, влияющих на подвижность, превысит некоторое предельное значение N_t^0 . Это значение может быть найдено из условия $\Theta_{min} = 0$:

$$N_t^0 = \frac{4}{\alpha \mu_0}. \quad (10)$$

Для исследуемых кристаллов селенида кадмия, рассчитанное по формуле (10), $N_t^0 = 1,3 \cdot 10^{16}$ см⁻³.

В образцах CdSe, не подвергавшихся обработке газовым разрядом, концентрация ловушек, по-видимому, недостаточна для возникновения отрицательной фотопроводимости. Обработка, повышающая концентрацию ловушек в приповерхностном слое, создает условия, когда $N_t < N_t^0$.

При постоянном значении N_t коэффициент Θ является функцией концентрации темновых носителей тока n_0 . Рассчитанная для случая $N_t > N_t^0$ ($N_t = 10^{17}$ см⁻³) кривая зависимости $\Theta(n_0)$ приведена на рис. 11. Как видно из рисунка, коэффициент Θ может быть

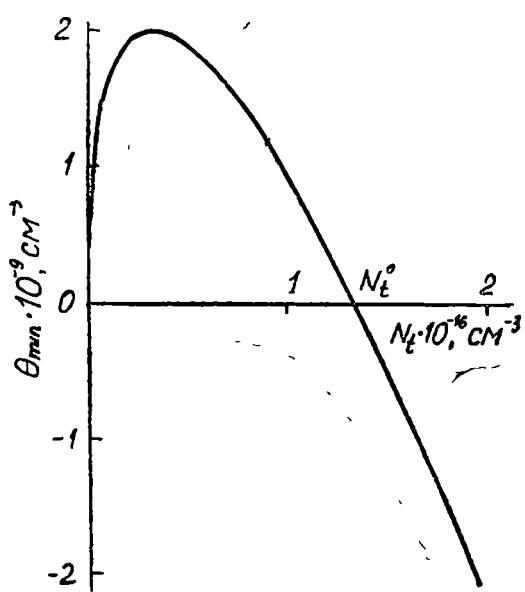


Рис. 10. Зависимость Θ_{min} от плотности ловушек N_t .

отрицательным лишь в некотором интервале значений темновой концентрации свободных носителей (от n_{01} до n_{02}). Величина этого интервала увеличивается с повышением плотности ловушек. Для значения $N_s = 10^{17} \text{ см}^{-3}$: $n_{01} = 8 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$, $n_{02} = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$.

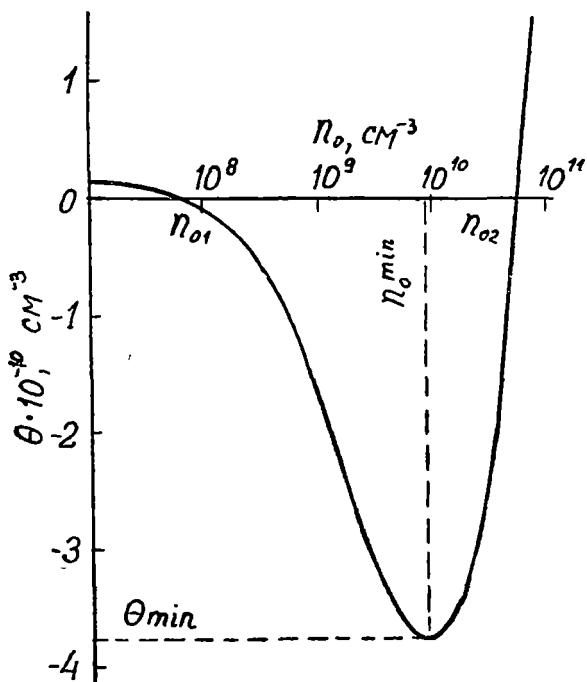


Рис. 11 Зависимость θ от темновой концентрации свободных электронов.

ходит за счет инжекции и полевого освобождения ловушек.

Пользуясь формулой (7), можно найти для заданных значений N_s и n_0 зависимость отрицательной фотопроводимости от интенсивности возбуждающего света. При этом нужно учесть, что $\Delta n = Lx\beta\tau$, где L — интенсивность возбуждения, x — коэффициент поглощения, β — квантовый выход, τ — время жизни электронов. Люксамперная характеристика, рассчитанная для значений $N_s = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $n_0 = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ приведена на рис. 12 (кривая 1). Соответствующая экспериментальная зависимость представлена кривой 2 этого же рисунка.

Как следует из рисунка 12, при некоторой интенсивности света наблюдается переход отрицательной фотопроводимости в положительную. Эта интенсивность (когда $\Delta\sigma = 0$) определяется из условия

$$\Delta n = -\theta$$

или

$$L = -\frac{\theta}{x\beta\tau}. \quad (11)$$

Таким образом, обработка газовым разрядом способствует возникновению отрицательной фотопроводимости не только вследствие повышения плотности ловушек N_s , но и благодаря возрастанию темновой концентрации электронов до значения n_{01} . Вместе с тем слишком длительная обработка может вызвать исчезновение эффекта, когда темновая проводимость возрастет настолько, что n_0 станет больше n_{02} . Аналогичной причиной объясняется тот факт, что отрицательная фотопроводимость наблюдается в некотором интервале напряженностей электрического поля. В этом случае изменение темновой концентрации электронов в пределах от n_{01} до n_{02} проис-

По люксамперной характеристике отрицательной фотопроводимости, используя (11), можно определить концентрацию ловушек в N_t , кристалле. Необходимое при этом значение n_0 определяется по величине темнового тока.

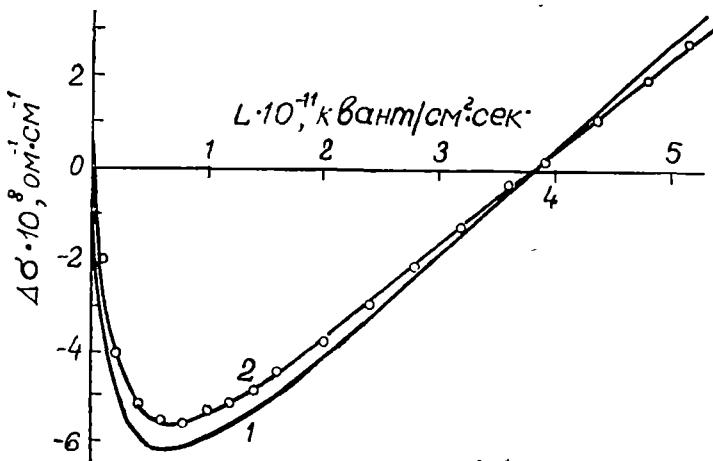


Рис. 12. Зависимость отрицательной фотопроводимости от интенсивности возбуждающего света. 1 — теоретическая кривая, 2 — экспериментальная кривая.

5. Экспериментальное подтверждение механизма. Несмотря на то, что на основе рассмотренного механизма удалось объяснить большинство характеристик явления, представляет интерес непосредственное измерение подвижности носителей в условиях отрицательной фотопроводимости. Такие измерения были проведены на образцах CdSe до и после обработки газовым разрядом.

На рис. 13 показаны результаты измерений фототока и подвижности электронов в зависимости от напряжения, приложенного к кристаллу. Из рисунка видно, что до обработки, когда фототок линейно возрастает с напряжением (рис. 13а, кривая 1), подвижность не зависела от величины электрического поля и составляла $450 \text{ см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$ (рис. 13а, кривая 2). После обработки в газовом разряде на вольтамперной характеристике появляется область насыщения (рис. 13б, кривая 1), а подвижность уменьшается по абсолютной величине и существенно падает с ростом напряженности электрического поля (рис. 13б, кривая 2). Это служит подтверждением того, что уменьшение наклона зависимости фототока от напряжения связано с уменьшением подвижности свободных электронов.

Из выражений (5) и (6) следует, что подвижность носителей при освещении

$$\mu = \frac{\mu_0}{1 + \frac{\alpha \mu_0 N_t N_{it}}{n_0 + N_{it}} \cdot \frac{\Delta n}{n_2 + N_{it} + \Delta n}}. \quad (12)$$

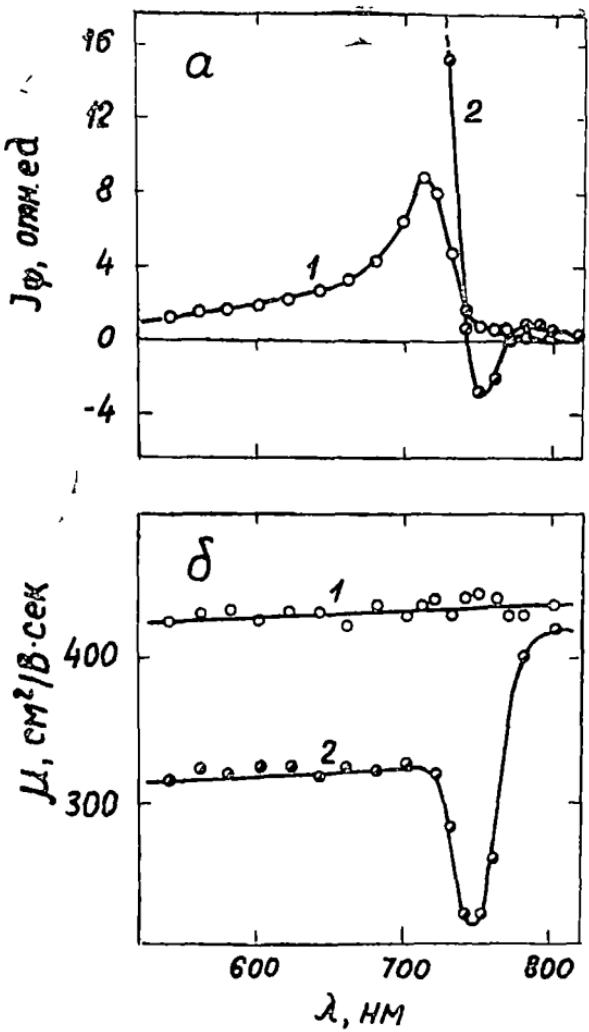


Рис 13 Зависимость фототока (кривые 1) и холловской подвижности (кривые 2) от напряжения, приложенного к присталлу. а — до обработки газовым разрядом, б — после обработки.

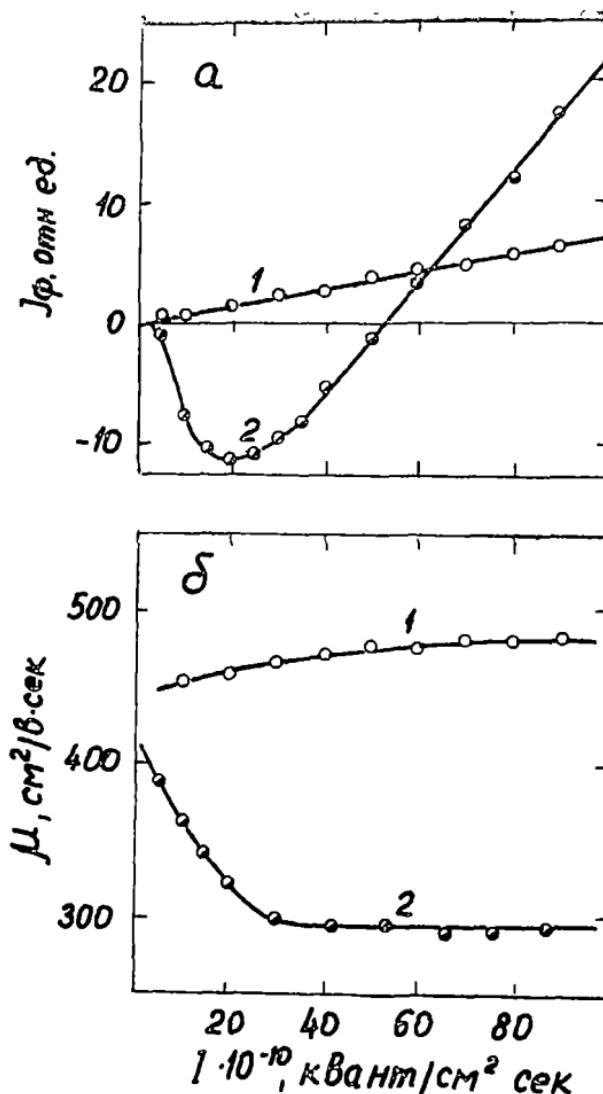


Рис 14 Зависимость фототока (а) и подвижности (б) от интенсивности возбуждающего света. 1 — в исходном состоянии, 2 — после обработки.

В случае независимости времени жизни электронов от уровня возбуждения, концентрация фотоэлектронов Δn будет возрастать пропорционально интенсивности света L . Согласно формуле (12), при малых L , когда $\Delta n < n_0 + N_\mu$, подвижность μ должна уменьшаться с ростом интенсивности и достигать насыщения, когда $\Delta n > n_0 + N_\mu$. При малой плотности ловушек, когда

$$\frac{\alpha \mu_0 N_t N_{\mu}}{n_0 + N_\mu} < 1,$$

влияние перезарядки ловушек на подвижность не должно проявляться.

Этот вывод хорошо согласуется с экспериментальной зависимостью $\mu(L)$, приведенной на рис. 14б. Здесь кривая 1 измерена до обработки поверхности кристалла газовым разрядом. Ход этой кривой соответствует низкой концентрации ловушек, когда влияние их на подвижность несущественно. При этом фототок линейно зависит от интенсивности света (рис. 14б, кривая 1). Кривая 2 рисунка 14б измерена после обработки. Здесь заметно существенное снижение подвижности с ростом интенсивности фотовозбуждения. Соответствующая зависимость $I_\phi(L)$ приведена на рис. 14а (кривая 2). При сравнении кривой 2 рис. 14б с люксамперной зависимостью (рис. 14а, кривая 2) обращает на себя внимание совпадение области снижения подвижности с областью уменьшения фототока, что свидетельствует о наличии связи между этими явлениями.

На рис. 15б изображены зависимости μ от длины волны возбуждающего света. Как видно из рисунка, до обработки заметного изменения под-

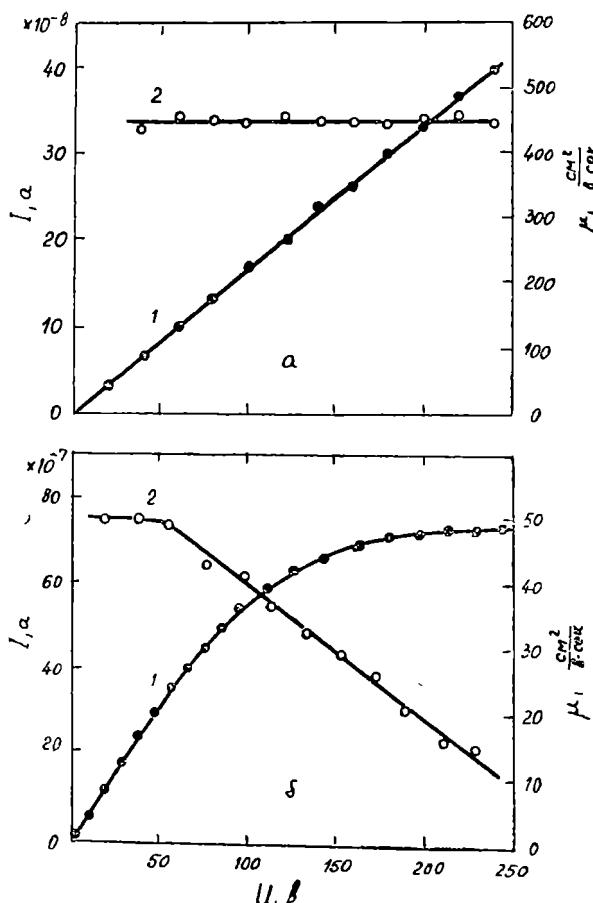


Рис. 15. Зависимость фототока (а) и подвижности (б) от длины волны возбуждающего света. 1 — до обработки, 2 — после обработки разрядом.

вижности в приведенной спектральной области не наблюдается (рис. 15б, кривая 1). Отрицательная фотопроводимость при этом также отсутствует (рис. 15а, кривая 1). После обработки разрядом в области 720—740 нм заметно уменьшение фототока ниже темнового уровня (рис. 15а, кривая 2). В этой же области спектра на кривой возникает минимум (рис. 15б, кривая 2).

Зависимость подвижности от длины волны возбуждающего света может быть рассчитана теоретически с учетом рассеяния электронов на оптически заряженных ловушках [56]. Выделим часть объема кристалла, заключенную между холловскими электродами (см. вставку к рисунку 16). Разобъем ее на элементарные слои толщиной dx . Рассматривая эти слои, как параллельно включенные источники Э.Д.С. Холла, можно найти на-

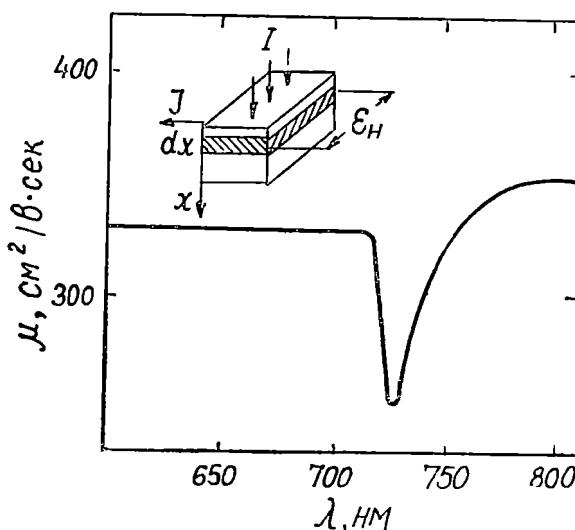
Рис. 16. Расчетная кривая зависимости подвижности носителей от длины волны возбуждающего света.

прижение, создаваемое ими на сопротивлении измерительного прибора, подключенного к холловским электродам. Этим устанавливается связь между средней величиной подвижности $\bar{\mu}$, вычисленной обычным способом по величине измеряемого холловского напряжения, с одной стороны, и истинным распределением подвижности $\mu(x)$ и концентрации свободных электронов $n(x)$ по глубине кристалла, с другой. Эта связь описывается выражением

$$\bar{\mu} = \frac{\int_0^d n(x) \mu^2(x) dx}{C + \int_0^d n(x) \mu(x) dx}. \quad (13)$$

Здесь $n(x) = n_0 + \Delta n(x)$, $\mu(x)$ — подвижность, определяемая формулой (12), d — толщина кристалла, C — константа, учитывающая размеры холловских электродов и входное сопротивление измерительного прибора. Распределение концентрации фотоэлектронов по глубине кристалла определяется известной формулой [57]:

$$\Delta n(x) = L \tau \frac{\kappa}{1 + \kappa^2 L} \left[e^{-\alpha x} - \frac{L(1 + \kappa L_s)}{L + L_s} e^{-\frac{x}{L}} \right], \quad (14)$$



где L — интенсивность света; τ — время жизни электронов, χ — коэффициент поглощения, L_s — диффузионная длина, L_s — коэффициент, учитывающий поверхностную рекомбинацию и диффузию носителей. По формуле (10) была рассчитана зависимость $\mu(x)$. На основе этой зависимости и известного спектрального распределения коэффициента поглощения селенида кадмия [58, 59] построена зависимость $\mu(\lambda)$, представленная на рис. 16. Видно, что теоретическая кривая хорошо согласуется с полученной экспериментальной зависимостью (рис. 15б, кривая 2).

6. Заключение. Проведенные исследования отрицательной фотопроводимости в селениде кадмия позволили изучить основные закономерности этого явления. Установлено, что отрицательный фотоэффект проявляется лишь в определенном интервале температур, интенсивностей света и напряженностей электрического поля. Он может быть вызван не только изменением концентрации свободных носителей, но и уменьшением их подвижности при освещении. Явление отрицательной фотопроводимости в селениде кадмия тесно связано с состоянием поверхности полупроводника и обусловлено оптической перезарядкой ловушек в приповерхностном слое кристалла, влияющей на рассеяние электронов проводимости. Таким образом, хорошо изученная концентрационная фотопроводимость не исчерпывает всего многообразия эффектов взаимодействия света с полупроводниковыми кристаллами.

(Статья поступила в редакцию 15 IV 1971 г.)

ЛИТЕРАТУРА

1. Ries, C, Z. Phys. **9**, 569, 1908, **2**, 480, 1911.
- 2 Brown, F, Z Phys., **11**, 482, 1910, **11**, 859, 1912, **2**, 153, 1913.
- 3 Dresner, J, J Chem Physics, **35**, 1628, 1961.
- 4 Бойцов, Б. В., Тазенков, Б. А., ФТТ, **6**, 3164, 1964
- 5 Беляев, И. П., Тазенков, Б. А. Уч зап. Ленинградского пед. ин-та им А. И. Герцена, **384**, 111, 1969.
- 6 Elliot, S, Phys Rev, **5**, 53, 1915.
- 7 Coblenz, W., Kahler H Phys Rev., **14**, 535, 1920.
- 8 Coblenz, W Phys Rev, **19**, 532, 1922.
- 9 Миселюк, Е. Г., Мертенс, Э. Б., Изв АН СССР, сер. физ., **16**, 115, 1952.
10. Кириллов, Е. А., Укр фіз. зап, **2**, 23, 1928
11. Kirillow, E A Z, Wis Plot, **28**, 367, 1931.
12. Борщевский, Б. И., ЖФХ, **21**, 1007, 1947.
13. Yamada, K, Oka, S, Naturwiss, **43**, 175, 1956
- 14 West, W *Fundamental Mechanisms of Photographic Sensitivity*, 1951
15. Иоффе, А. В., Иоффе, А. Ф., ЖЭТФ, **6**, 737, 1936; Sov Phys, **11**, 241, 1937
16. Борзяк, П. Г. Укр фіз зап, **6**, 288, 1937
17. Кронгауз, А. Н., Ляпидевский, В. К., ЖЭТФ, **32**, 1012, 1957; сб „Физика тверд. тела”, ч. 1, стр 130, 1959
18. Кронгауз, А. Н., Ляпидевский, В. К., Деев, Ю. С., ЖЭТФ, **26**, 115, 1954.
19. Касман, М. С., Несмелова, Л. И., ФТТ, **4**, 2608, 1962.
20. Богисов, М., Карапев, С., Z Phys Chem, **205**, 1955.

- 21 Борисов, М., Кынев, С., Докл. Болгарской АН, **7**, 21, 1954, **7**, 25, 1954.
- 22 Жолкевич, Г. А., Уч зап Вологодского пед ин-та, сер физ-мат, **17**, 37, 1956; ФТТ, **2**, 2480, 1960
- 23 Бибик, В. Ф., Борзяк, П. Г., ФТТ, **4**, 296, 1962
- 24 Newsham, R., Phys Rev, **94**, 278, 1954
- 25 Tyler, W., Newsham, R., Woodbury, H., Phys Rev, **97**, 669, 1955, **98**, 461, 1955.
- 26 Stockmann, F., Z Phys, **143**, 348, 1955
- 27 Доброго, В. П., Рывкин, С. М., ФТТ, **4**, 553, 1962
- 28 Борзяк, П. Г., Катрич, Г. А., Сарбей, О. Г., ФТТ, **7**, 2803, 1965
- 29 Каримова, И. З., Сондаевский, В. П., Стafeев, В. И., ФТТ, **8**, 280, 1966
- 30 Романычев, А. Д., ФТТ, **8**, 1645, 1966
- 31 Bube, R. H., *Photoconductivity of Solids*, 1960
- 32 Rose, A., *Concepts in Photoconductivity and Allied Problems*, 1963
- 33 Вавилов, В. С., *Действие излучений на полупроводники*, стр 112, 1963
- 34 Лейдерман, А. Ю., Изв АН УзССР, сер физ-мат. наук, **2**, 58, 1959
- 35 Мурыгин, В. И., Сб. *Фотоэлектрические и оптические явления в полупроводниках*, стр. 191, 1959
36. Стafeев, В.И., ФТТ, **3**, 2513, 1961.
37. Карагеоргий-Алкалаев, П.М., Изв. АН УзССР, сер физ-мат. наук, **5**, 35, 1960.
- 38 Карагеоргий-Алкалаев, П.М., Изв АН УзССР, сер физ-мат. наук, **6**, 13, 1958.
- 39 Григорович, Г.М., Рувинский, М.А., Шнейдер, А.Д., ФТП, **3**, 1969
- 40 Gutsche, R., Spiegelberg, F., Voigt, J., Phys stat sol, **17 K11**, 1966
- 41 Волькенштейн, Ф.Ф., УФЖ, **28**, 389, 1946; *Электропроводность полупроводников*, стр. 340, 1947.
42. Жузе, В.П., Рывкин, С.М., ДАН СССР, **68**, 673, 1949; ЖЭТФ, **20**, 152, 1950.
43. Sonwell, E. M., Weisskopf, V. F., Phys Rev, **77**, 388, 1950
- 44 Bube, R. H., McDonald, H. E., Phys Rev, **121**, 473 1961
45. Сера, Т.Я., Чемересюк, Г.Г., ФТТ, **6**, 128, 1964
- 46 Niekisch, E. A., Z Phys. Chem., **217**, 110, 1961
- 47 Boeg, K. W., Kepnedy, C. A., Phys stat sol, **19**, 203, 1967
- 48 Чемересюк, Г.Г., Сердюк, В.В., ФТП, **1**, 389, 1967
- 49 Сера, Т.Я., Чемересюк, Г.Г., Дульдиер, В.Н., ФТТ, **6**, 3754, 1964.
- 50 Фридрих Х., Шнеевольф, Э., Сысоев, Л.А., Тиссен, К., *Пр Межд Конф по физике полупроводников*, стр. 711, 1969
51. Парицкий, Л.Г., Рывкин, С.М., ФТП, **1**, 718, 1967
- 52 Парицкий, Л.Г., Розенталь, А.И., ФТП, **1**, 265 1967
53. Сердюк, В.В., Чемересюк, Г.Г., Старостин, И.А., ФТТ, **10**, 2797, 1968.
54. Старостин, И.А., Чемересюк, Г.Г., Сердюк, В.В., ФТП, **4**, 1978, 1970
55. Чемересюк, Г.Г., Сердюк, В.В., ФТП, **3**, 396, 1969
56. Старостин, И.А., Чемересюк, Г.Г., Сердюк, В.В., Укр физ журн — в печати.
- 57 Пикус, Г. Е., *Основы теории полупроводниковых приборов*, 1965.
- 58 Wardzinski, W., Proc Roy Soc, A **260**, 370, 1961
- 59 Parsons, P. B., Wardzinski, W., Ioffe, A. D., Proc Roy Soc, A **262**, 120, 1961

FOTOCONDUCTIVITATEA NEGATIVĂ ÎN SELENIURA DE CADMIU CAUZATĂ
DE MICȘORAREA MOBILITĂȚII PURTĂTORILOR LIBERI

(Rezumat)

În lucrare sunt prezentate date privind fotoconductivitatea negativă în monocristale de seleniură de cadmu. Acest efect apare după tratarea suprafeței cristalelor cu o descărcare în gaz care conduce la creșterea concentrației de capcane în stratul superficial al semiconducatorului.

Sunt considerate condițiile de apariție ale fotoconductivității negative și sunt studiate caracteristicile ei staționare și cineticice. Este discutat mecanismul acestui fenomen. Se arată că un rol esențial în apariția fotoconductivității negative îl joacă capcanele de neutroni în stratul superficial al cristalului care acționează ca centri suplimentari de împrăștiere pentru electroni liberi. Dacă aceste capcane sunt încărcate cu fotoelectroni, atunci secțiunea eficace transversală crește și mobilitatea purtătorilor liberi poate să se micșoreze atât de mult încât conduce la micșorarea conductivității electrice în compoziție cu valoarea ei de echilibru. Pe baza mecanismului propus sunt explicate toate proprietățile fenomenului observat.

Sunt date rezultatele experimentale referitoare la măsurarea directă a purtătorilor în condițiile existenței fotoconductivității negative, ceea ce verifică mecanismul considerat.

NEGATIVE PHOTOCONDUCTIVITY OF CADMIUM SELENIDE CAUSED BY THE DECREASE OF MOBILITY OF THE CURRENT FREE CARRIERS

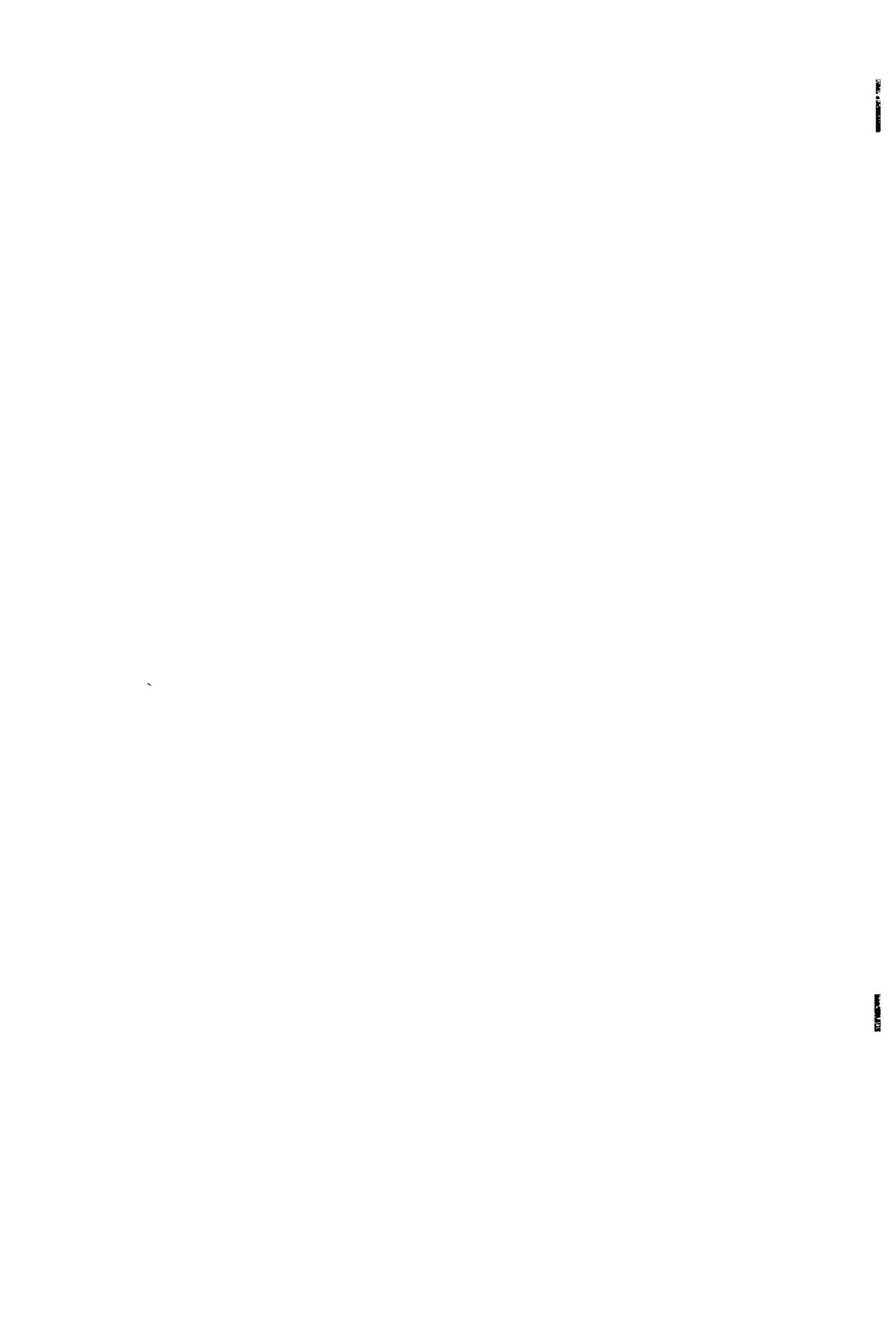
(Summary)

This paper contains some data concerning the phenomenon of negative photoconductivity in cadmium selenide single crystals. The effect appears after surface treatment of cadmium selenide in a gas discharge which increases the density of electron traps at the surface layer of the semiconductor.

The conditions for the appearance of the negative photoconductivity have been studied as well as its basic steady state and kinetic characteristics. The mechanism of this phenomenon is discussed.

It has been shown that the negative photoconductivity is caused by the electron traps in the near surface layer of the crystal, which act as effective scattering centers for free carriers. Having been charged photoelectrons these traps increase their scattering cross section which influences the mobility of the free carriers. It produces a decay of the conductivity below its equilibrium value. This mechanism can explain all the features of the phenomenon.

The direct measurement of the mobility in a crystal, when there is a negative photoconductivity, verify this mechanism.



FRACTIONAREA IZOTOPICĂ A HIDROGENULUI ÎN SISTEMUL H_2O-OH

V. ZNAMIROVSCHI

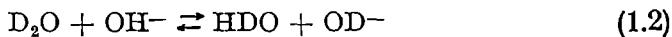
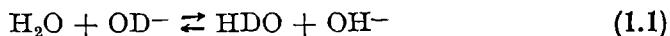
Sistemul H_2O-OH poate fi luat în considerare sub două aspecte: atunci cînd OH se află liber sub formă ionică, ceea ce se realizează în cazul soluțiilor bazice sau atunci cînd OH este legat sub forma ROH în cazul soluțiilor alcoolice.

În acest context ne propunem stabilirea curbei de echilibru a conținutului de deuteriu pentru ambele sisteme H_2O-OH^- și H_2O-ROH .

1. Soluțiile bazice (H_2O-OH^-). Dacă considerăm o soluție bazică realizată într-un amestec de apă ușoară și apă grea, în aceasta vor exista următoarele specii izotopico-moleculare în echilibru :

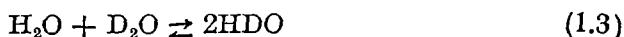
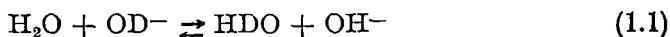


Între aceste specii izotopico-moleculare vor putea avea loc următoarele reacții de schimb izotopic :



avînd constantele de echilibru, K_1 , K_2 și K_3 .

Deoarece $K_1K_2 = K_3$, independente vor fi numai următoarele reacții :



Notând concentrațiile speciilor izotopico-moleculare astfel:

$[H_2O] = x_1$; $[HDO] = x_2$; $[D_2O] = x_3$; $[OH^-] = y_1$; $[OD^-] = y_2$, constantele de echilibru se vor putea scrie sub forma:

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{[HDO][OH^-]}{[H_2O][OD^-]} = \frac{x_2 y_1}{x_1 y_2} \\ K_3 &= \frac{[HDO]^2}{[H_2O][D_2O]} = \frac{x_2^2}{x_1 x_3} \end{aligned} \quad (1.4)$$

De asemenea vor fi satisfăcute și următoarele două relații:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1 \quad (1.5)$$

$$y_1 + y_2 = 1$$

Cunoașterea constantelor de echilibru ne permite calculul concentrațiilor diferențelor specii izotopico-moleculare în funcție de un parametru arbitrar λ .

Punind,

$$\frac{x_1}{x_2} = \frac{y_1}{y_2 K_1} = \lambda \quad (1.6)$$

vom obține următoarele expresii pentru concentrațiile respective:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{\lambda}{1 + \lambda + \frac{1}{\lambda K_3}}; \quad x_2 = \frac{1}{1 + \lambda + \frac{1}{\lambda K_3}}; \quad x_3 = \frac{\frac{1}{\lambda K_3}}{1 + \lambda + \frac{1}{\lambda K_3}} \\ y_1 &= \frac{\lambda K_1}{1 + \lambda K_1}; \quad y_2 = \frac{1}{1 + \lambda K_1} \end{aligned} \quad (1.7)$$

Concentrațiile totale ale deuteriului pe care le vom nota cu n în apă și cu N în ion, vor fi date de expresiile:

$$n = \frac{1}{2} x_2 + x_3 = \frac{\frac{1}{2} + \frac{1}{\lambda K_3}}{1 + \lambda + \frac{1}{\lambda K_3}}; \quad N = y_2 = \frac{1}{1 + \lambda K_1} \quad (1.8)$$

Ecuația generală a curbei de echilibru va fi:

$$n = \frac{\frac{1}{2} + \frac{N}{1 - N} \cdot \frac{K_1}{K_3}}{1 + \frac{1 - N}{N} \cdot \frac{1}{K_1} + \frac{N}{1 - N} \cdot \frac{K_1}{K_3}} \quad (1.9)$$

Luând în considerare valorile $K_1 = 4,2$ [1] și $K_3 = 3,78$ [2] pentru temperatura de $13,5^\circ\text{C}$ s-a putut trasa curba de echilibru $N = f(n)$ reprezentată în fig. 1.

Se constată că deuteriul se concentrează cu precădere în apă în dauna ionului de OH. Această preferință a deuteriului față de apă este mai accentuată decât în cazul sistemului $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_3\text{O}^+$ [3].

Datorită faptului că valorile constantelor de echilibru ce se găsesc în literatură sunt foarte împrăștiate [1] se impune căutarea altor posibilități de stabilire a curbei de echilibru fără a face apel la acestea. Astfel, curba de echilibru poate fi trasată dacă se cunoaște factorul de fracionare α , pe baza relației :

$$N = \frac{\alpha n}{1 - n + \alpha n} \quad (1.10)$$

obținută direct din relația de definiție a factorului de fracionare. Aceasta a fost determinat prin R.M.N. a soluțiilor bazice deuterate obținindu-se valoarea aproximativă de 0,8 [4].

2. Soluțiile alcoolice ($\text{H}_2\text{O}-\text{ROH}$). În cazul soluțiilor alcoolice realizate într-un amestec de apă obișnuită și apă grea vor exista următoarele specii izotopico-moleculare în echilibru :



Între aceste specii izotopico-moleculare vor putea avea loc următoarele reacții de schimb izotopic rapid :



având constantele de echilibru K_1 , K_2 , K_3 .

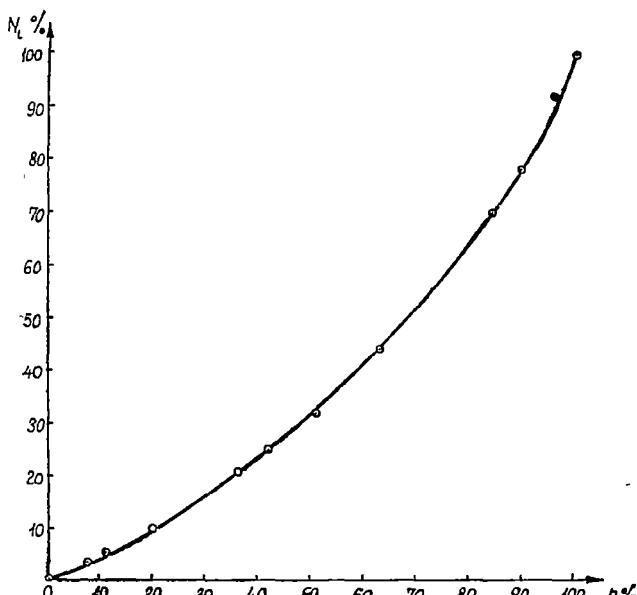


Fig. 1 Curba de echilibru izotopic în sistemul $\text{H}_2\text{O}-\text{OH}^-$.

Ecuația generală (1.9) stabilită în cazul soluțiilor bazice rămîne valabilă și în acest caz. Curba de echilibru pentru conținutul total de deuteriu în sistemul lichid binar H_2O — ROH s-ar putea trasa cu ajutorul ecuației (1.9) dacă s-ar cunoaște valoarea constantei de echilibru a reacției (2.1). Deoarece constanta de echilibru K_1 nu se cunoaște din literatură, s-a trecut la determinarea factorului de fracționare α definit astfel:

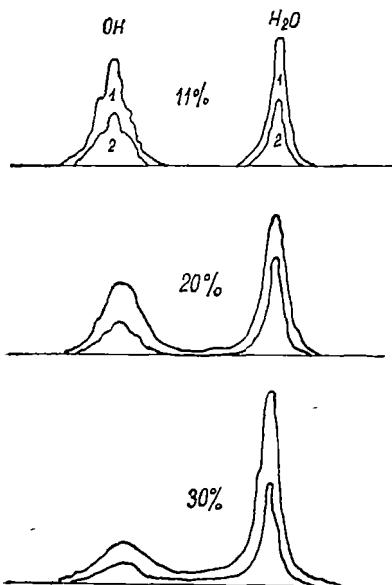


Fig. 2 Semnalele R.M.N. protonice ale OH-ului etilic și ale apăi în cazul soluțiilor obișnuite (1) și deuterate (2)

Mai mult, cunoscind factorul de fracționare α , putem determina constanta de echilibru K_1 la o temperatură dată cunoscind valoarea constantei de echilibru K_3 la aceeași temperatură. Pentru aceasta se va trasa graficul de variație a concentrației izotopice în apă în funcție de parametrul λ (fig. 3).

Unei valori oarecare a concentrației izotopice $n = n_0$ îi va corespunde o valoare bine determinată a parametrului $\lambda = \lambda_0$. De asemenea aceleiași valori $n = n_0$ îi va corespunde și o valoare bine determinată $N = N_0$ conform relației:

$$N_0 = \frac{\alpha n_0}{1 - n_0 + \alpha n_0} \quad (2.5)$$

Constanta de echilibru K_1 în acest caz va fi dată de expresia:

$$K_1 = \frac{1 - N_0}{\lambda_0 N_0} \quad (2.6)$$

Determinarea lui experimentală s-a făcut pentru sistemul EtOH— H_2O prin metoda R.M.N. măsurîndu-se suprafețele picurilor OH și H_2O în cazul soluțiilor obișnuite și deuterate (fig. 2) în cazul concentrațiilor de apă 11%, 20%, 30% la 25°C.

Pentru concentrații de apă mai mari nu se mai pot face astfel de măsurători deoarece cele două vîrfuri se contopesc, căci apar asocierile moleculare apă-alcool [5]. Astfel s-a obținut pentru factorul de fracționare valoarea $\alpha = 1,03$.

Cunoscind acum valoarea factorului de fracționare se poate trasa curba echilibrului izotopic în sistemul binar considerat constatîndu-se o atitudine preferențială a deuteriului față de alcoolul etilic.

S-a obținut astfel pentru constanta de echilibru căutată valoarea $K_1 = 1,906$. În consecință $K_2 = 1,993$.

Măsurările au fost făcute la 60 Mc cu spectrometrul de rezonanță magnetică nucleară J.N.M. — ^3H — 60 la înaltă rezoluție.

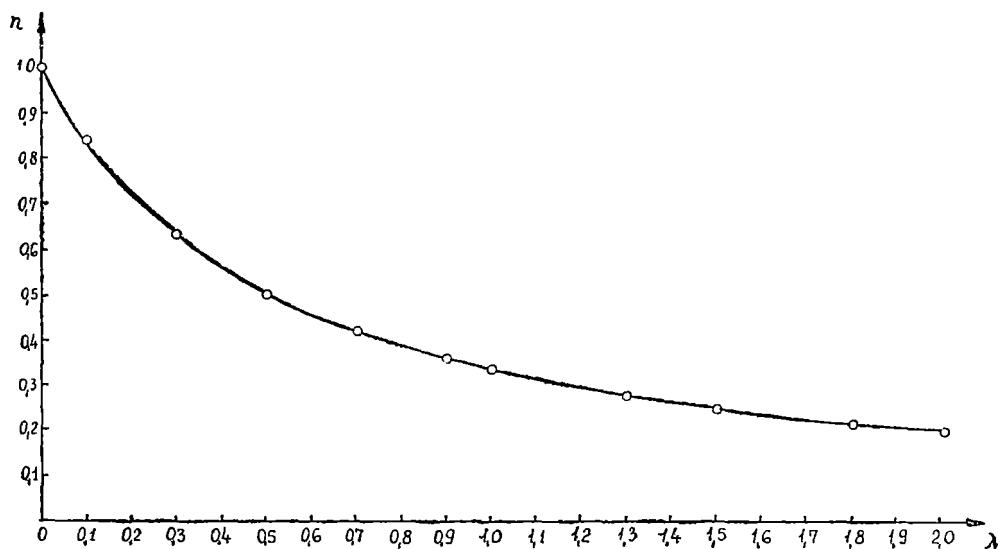


Fig. 3 Variația concentrației izotopice a apei cu parametrul λ

3. Concluzii. S-a stabilit ecuația generală pentru curba de echilibru a conținutului total de deuteriu în sistemul $\text{H}_2\text{O} - \text{OH}$ în cazul cînd se cunosc constantele de echilibru ale reacțiilor izotopico-moleculare independente. Ecuația este valabilă atît în cazul soluțiilor bazice ($\text{H}_2\text{O} - \text{OH}^-$) cît și în cazul soluțiilor alcoolice ($\text{H}_2\text{O} - \text{ROH}$).

În cazul cînd nu se cunosc constantele de echilibru, curba echilibrului izotopic se poate trasa pe baza determinării factorului de fracționare prin metoda R.M.N.

Mai mult, aceste măsurători pot fi utilizate la determinarea valorilor constanțelor de echilibru ale reacțiilor izotopico-moleculare.

(Intrat în redacție la 12 iunie 1971)

B I B L I O G R A F I E

- 1 Heitzinger, K., Weston, R. E., J. Phys. Chem., **68**, 2179 (1964)
- 2 Kirshenbaum, I., *Physical Properties and Analysis of Heavy Water*, McGraw-Hill Co. N. Y. (1951)

3. Znamirovschi, V., Rev roum. phys., 14 (2), 175 (1969).
4. Kresge, A. J., Allred, A. L., J. Am. Chem. Soc., 85, 1541 (1963)
5. Weinberg, I., Zimmerman, J. R., J. Chem. Phys., 23, 748 (1955)

ИЗОТОПНОЕ ФРАКЦИОНИРОВАНИЕ ВОДОРОДА В СИСТЕМЕ H_2O-OH

(Резюме)

Установлено общее уравнение равновесной кривой для всего содержаниядейтерия в двойной системе H_2O-OH , учитывая комплексное изотопное равновесие, которое устанавливается между существующими изотопно-молекулярными видами. Это уравнение можно применить как в случае основных растворов (H_2O-OH^-), так и в случае спиртовых растворов (H_2O-ROH).

Если равновесные константы неизвестны, то равновесную кривую можно провести путём определения фактора изотопного фракционирования с помощью ЯМР.

Более того, эти определения могут служить для установления значений равновесных констант изотопно-молекулярных реакций.

ISOTOPIC FRACTIONATION OF HYDROGEN IN H_2O-OH SYSTEM

(Summary)

The general equation of the equilibrium curve for the deuterium content in H_2O-OH system has been established by taking into account complex exchange equilibrium. This equation may be utilised for basic (H_2O-OH^-) and alcoholic solutions (H_2O-ROH).

When the equilibrium constants are not known, the equilibrium curve may be plotted with the help of the fractionation factor which may be determined by N. M. R. methods.

These measurements may also be utilised for determining the equilibrium constant values of the isotopic molecular reactions.

DIE KOVARIANTE POLARISATIONSMATRIX FÜR TENSOR- UND RARITA-SCHWINGER-FELDER

Z. GÁBOS

Die Form der kovariante Polarisationsmatrix (KPM) für den einfachen Fall des Dirac-Feldes mit Spin 1/2, wurde erstmals von L. Michel und A. S. Wightman [2] angegeben. Das zunehmende Interesse an den Elementarteilchen mit höheren Spinwerten stellte die Aufgabe der Be-
chnung der KPM auch für diese Fälle.

Unlangst verallgemeinerte B. Z. Kopeliovich [15] die Ergebnisse von M. Gourdin, J. Michel [6] und V. Kopeliovich [14], indem er eine Methode für die Berechnung der KPM für beliebige Spinwerte aufstellte. Diese Methode baut auf die Grundeigenschaften der KPM für die Tensor-und Rarita-Schwinger-Felder, und verwendet die Spinoperatoren von L. Michel [4].

In der vorliegenden Arbeit wenden wir, ausgehend von der Kenntnis der Wellenfunktionen der freien Tensor-und Rarita-Schwinger-Felder, ein konstruktives Verfahren, zur Berechnung der KPM an. Zur Verdeutlichung wird die konkrete Form der KPM für Teilchen mit Spinwerten 1,3/2, 2 in der gewöhnlichen- als auch in der Helizitätsdarstellung [5] angegeben.

1°. Die Definition der kovarianten Polarisationsmatrix [6], [13], [15].

A. *Tensor-Felder (Teilchen mit ganzzahligem Spin s = j)*. Die Zustände der Teilchen mit Masse m_0 , Impuls \vec{p} , Spin j und Projektion des Spins auf die Oz Achse gleich mit m können durch ein symmetrisches Tensor-Feld (mit der Eigenschaft dass seine Spur verschwindet) beschrieben werden

$$\epsilon_{\mu_1 \mu_2}^{\mu_j} (\vec{p}, m), \quad \mu_k = \overline{1, 4}, \quad m = \overline{-s, s}. \quad (1)$$

Im Ruhzustand sind nur die räumlichen Komponenten des Tensors (1)

$$\epsilon_{i_1 i_2}^0 (\vec{p}, m), \quad i_k = \overline{1, 3}, \quad (2)$$

von Null verschieden.

Der Übergang von Ruhssystem zu einem bewegten Bezugssystem, in dem das Feld den Impuls \vec{p} besitzt, wird durch eine Lorentztransformation vermittelt.

Im besonderen gilt für ein Teilchen mit Spin 1 im Ruhssystem

$$\vec{\epsilon}^0(1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, -i, 0), \quad \vec{\epsilon}^0(0) = (0, 0, 1), \quad \vec{\epsilon}^0(-1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i, 0), \quad (3)$$

und im Laborsystem

$$\begin{aligned} \epsilon_\mu(\vec{p}, m) &= l_{\mu i} \epsilon_i^0(m), \\ \epsilon_\mu^*(\vec{p}, m) &= l_{\mu i} \epsilon_i^{0*}(m) = \epsilon_i^{0*}(m) l_{\mu i}^{-1}, \end{aligned} \quad (4)$$

mit

$$l_{ik} = l_{ik}^{-1} = \delta_{ik} + (\gamma - 1)e_k e_i, \quad l_{4i} = l_{4i}^{-1} = i\gamma v e_i, \quad (5)$$

wobei

$$e_i = \frac{\vec{p}_i}{|\vec{p}|}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}}.$$

(Die Lichtgeschwindigkeit wird $c = 1$ gesetzt.)

Zwecks Vereinfachung der Schreibweise kürzen wir (1) und (2) zu

$$\epsilon_\mu^j(\vec{p}, m), \quad \epsilon_i^{0j}(m), \quad \text{für } j > 1. \quad (6)$$

Aus Gleichung (4) folgt

$$\epsilon_\mu^j(\vec{p}, m) = \mathcal{L}_{\mu i}^j \epsilon_i^0(m), \quad \epsilon_\mu^{j*}(\vec{p}, m) = \epsilon_i^{0j*}(m) (\mathcal{L}^j)_{i\mu}^{-1}, \quad (7)$$

wobei

$$\mathcal{L}_{\mu i}^j = \prod_{k=1}^j l_{\mu k i k}, \quad (\mathcal{L}^j)_{i\mu}^{-1} = \prod_{k=1}^j l_{i k \mu k}^{-1} \quad (8)$$

Die Funktionen (7) sind mit Hilfe der Rekkurrenzformel

$$\epsilon_i^{0j}(m) = \sum_{m_1, m_2} (j-1 \ 1 m_1 m_2; jm) \ \epsilon_i^{0j-1}(m_1) \epsilon_i^0(m_2), \quad (9)$$

und den Grundvektoren (3) berechenbar.

Für eine kohärente Überlagerung der Grundzustandsfunktionen (1)

$$\epsilon_\mu^j(\vec{p}) = \sum_m c_m \epsilon_\mu^j(\vec{p}, m),$$

definieren wir die KPM durch

$$P_{\mu\nu}^j = \epsilon_\mu^j(\vec{p}) \epsilon_\nu^{j*}(\vec{p}) = \sum_{m, m'} \rho_{mm'} \epsilon_\mu^j(\vec{p}, m) \ \epsilon_\nu^{j*}(\vec{p}, m'), \quad (10)$$

wo $\rho_{mm'}$ die Elemente der Spin-Dichtematrix sind

$$\rho_{mm'} = c_m c_{m'}^*. \quad (11)$$

B. Rarita-Schwinger-Felder $\left(\text{Teilchen mit halbzahligem Spin } j=s+\frac{1}{2} \right)$.

Die Grundfunktionen der Quantenfelder für Teilchen mit Spinwerten $s=j+\frac{1}{2}$ erhält man mit Hilfe der Felder (1) und dem Dirac-Feld. Die Zustandsfunktionen des Rarita-Schwinger Feldes im Ruhsystem ist

$$U_{\alpha i}^{0s}(m) = \sum_{m_1, m_2} \left(j \frac{1}{2} m_1 m_2; j + \frac{1}{2} m \right) \epsilon_i^{0j}(m_1) u_\alpha^0(m_2), \quad (12)$$

mit

$$u^0\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^0\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Die Zustände mit Impuls \vec{p} ergeben sich aus einer Lorentztransformation der Zustände im Ruhsystem

$$U_{\alpha\mu}^s(\vec{p}, m) = \mathcal{L}_{\mu i}^j \mathcal{L}_{\alpha p}^{1/2} U_{\alpha i}^{0s}(m), \quad (14)$$

wo

$$\mathcal{L}^{1/2} = \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}} + \sqrt{\frac{\gamma-1}{2}} (\vec{\alpha}, \vec{e}), \quad \text{mit } \vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Für eine kohärente Überlagerung von Grundzuständen (12)

$$U_{\alpha\mu}^s(\vec{p}) = \sum c_m U_{\alpha\mu}^s(\vec{p}, m),$$

wird die KPM, zum Unterschied von (10), durch

$$P_{\alpha\beta\mu\nu}^s(\vec{p}) = U_{\alpha\mu}^s(\vec{p}) \bar{U}_{\beta\nu}^s(\vec{p}) = \sum_{m, m'} \rho_{mm'} U_{\alpha\mu}^s(\vec{p}, m) \bar{U}_{\beta\nu}^s(\vec{p}, m') \quad (16)$$

definiert. Wo ρ die Spin-Dichtematrix für Rarita-Schwinger-Felder bezeichnet, und

$$\bar{U}_{\beta\nu}^s(\vec{p}, m) = U_{\nu\beta}^{s*}(\gamma_4)_{\alpha\beta}$$

die konjugierte Grundfunktion für $s=3/2$ ist.
Ausserdem gilt

$$\bar{U}_{\beta\nu}^s(\vec{p}, m) = \bar{U}_{\alpha\mu}^{0s}(m) (\mathcal{L}^{1/2})_{\alpha\beta}^{-1} (\mathcal{L}^j)_{\nu}^{-1}. \quad (17)$$

2°. Die Rechemethode. Die kovarianten Polarisationsmatrizen aus (10) bzw. (16) werden nach folgendem Verfahren berechnet.

a) Mit Hilfe der Rekurrensgleichungen (9) bzw. (12), und unter Berücksichtigung der Gl. (3) und (13) erhalten wir die Grundfunktionen

$$\varepsilon_i^{0j}(m), \quad U_{\alpha\mu}^{0s}(m), \quad (18)$$

im Ruhsystem.

b) Die Elemente der Spin-Dichtematrix ρ werden durch die Polarisations-Tensoren

$$t_{i_1 i_2 \dots i_n}, \quad n = \overline{0, 2s}, \quad i_k = \overline{1, 3} \quad (19)$$

ausgedrückt. Diese Tensoren sind symmetrisch und haben die Spur gleich Null:

$$t_{i_1 i_2 \dots i_n} = 0. \quad (20)$$

Die ρ — Matrizen für die Spinwerte $1, 3/2, 2$ sind im Anhang 1. gegeben.

c) Mit den Grundfunktionen (18) und der ρ — Matrix werden folgende Ausdrücke gebildet

$$P_{ik}^{0j} = \sum_{m, m'} \rho_{mm'} \varepsilon_i^{0j}(m) \varepsilon_k^{0j*}(m'), \quad (21)$$

$$P_{\alpha\beta ik}^{0s} = \sum_{m, m'} \rho_{mm'} U_{\alpha i}^{0s}(m) \bar{U}_{\beta k}^{0s}(m'). \quad (22)$$

d) Abschliessend erhalten wir — nach Anwendung einer Lorentztransformation — die kovarianten Polarisationsmatrizen (10) bzw. (16), für Zustände mit Impuls \vec{p} :

$$P_{\mu\nu}^j = \mathcal{L}_{\mu i}^j P_{ik}^{0j} (\mathcal{L}_k^j)^{-1}, \quad (23)$$

$$P_{\alpha\beta\mu\nu}^s = \mathcal{L}_{\mu i}^j \mathcal{L}_{\alpha\beta}^{1/2} P_{\alpha\beta ik}^{0s} (\mathcal{L}_{ik}^{1/2})^{-1} (\mathcal{L}_k^j)^{-1}. \quad (24)$$

3°. KPM für Teilchen mit Spin 1,3/2,2.

A) *Spin 1.* Wir führen die durch

$$M_{ik}(m, m') = \varepsilon_i^0(m) \varepsilon_k^{0*}(m')$$

definierten Matrizen $M(m, m')$ ein, die durch die Matrizen J_p :

$$(J_p)_{ik} = -i \varepsilon_{pik}, \quad (25)$$

aufgebaut sind. ε_{pik} ist der vollkommen antisymmetrische Einheitstensor dritter Stufe. Die Matrizen $M(m, m')$ sind im Anhang 2. gegeben.

Mit $\rho_{mm'}$ für den Ruhzustand gilt

$$\mathfrak{A}^{01} = \sum_{m, m'} \rho_{mm'} M(m, m') = \frac{1}{3} \bar{I} + \frac{1}{\sqrt{2}} t_p J_p + \frac{1}{2} t_{pq} (J_p J_q + J_q J_p), \quad (26)$$

(\bar{I} ist die Einheits-Matrix).

P_{ik}^{01} sind die Elemente der Matrix (26). Mit (25) und

$$(J_p J_q + J_q J_p)_{ik} = 2\delta_{pq}\delta_{ik} - \delta_{pi}\delta_{qk} - \delta_{pk}\delta_{qi}, \quad (27)$$

folgt

$$P_{ik}^{01} = \frac{1}{3} \delta_{ik} - \frac{i}{\sqrt{2}} \epsilon_{pik} t_p - t_{ik}. \quad (28)$$

Aus Gl. (23) folgt schliesslich

$$P_{\mu\nu}^1 = l_{\mu i} P_{ik}^{01} l_{kv}^{-1} = \frac{1}{3} \Theta_{\mu\nu} - \frac{i}{\sqrt{2}} s_{\mu\nu}^{(1)} - s_{\mu\nu}^{(2)}. \quad (29)$$

Θ ist der Behrends-Fronsdal Matrizenoperator für Teilchen mit spin 1 [3]

$$\Theta_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \frac{1}{m_0^2} p_\mu p_\nu, \quad (30)$$

und

$$s_{\mu\nu}^{(1)} = \Phi_{p\mu\nu} t_p, \quad \Phi_{p\mu\nu} = \epsilon_{pik} l_{\mu i} l_{vk}, \quad (31)$$

$$s_{\mu\nu}^{(2)} = l_{\mu i} l_{vk} t_{ik}. \quad (32)$$

B) Spin 3/2. Anhand der Gl. (12) und (22) haben wir im Ruhssystem:

$$\mathcal{Q}^{03/2} = \sum_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \left(1 \frac{1}{2} m_1 m_2; \frac{3}{2} m \right) \left(1 \frac{1}{2} m'_1 m'_2; \frac{3}{2} m' \right) \varphi_{mm'} M(m_1, m'_1) \otimes \mathcal{Q}^{01/2}(m_2, m'_2). \quad (33)$$

Die durch

$$\mathcal{Q}_{\alpha\beta}^{01/2}(m, m') = u_\alpha^0(m) \bar{u}_\beta^0(m') \quad (34)$$

definierten Matrizen $\mathcal{Q}^{01/2}$ sind im Anhang 2. gegeben.

Anhand von (33) und Anhang 2. erhält man durch einfache Rechnungen:

$$\mathcal{Q}^{03/2} = \frac{1}{4} (I + \gamma_4) \overline{\mathcal{Q}^{03/2}},$$

mit

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{Q}^{03/2}} &= \frac{1}{3} I \otimes \bar{I} + \frac{2}{3\sqrt{5}} t_p \Sigma_p \otimes \bar{I} + \frac{\sqrt{5}}{3} t_p I \otimes J_p + \frac{1}{6} \Sigma_p \otimes J_p + \\ &+ \frac{1}{3\sqrt{5}} t_q \Sigma_p \otimes (J_p J_q + J_q J_p) + \sqrt{\frac{1}{6}} t_{pq} I \otimes (J_p J_q + J_q J_p) + \\ &+ \sqrt{\frac{2}{3}} t_{pq} \Sigma_p \otimes J_q + \frac{1}{\sqrt{2}} t_{pqr} \Sigma_p \otimes (J_q J_r + J_r J_q). \end{aligned} \quad (35)$$

I bzw. \bar{I} sind die 4×4 bzw. 3×3 Einheits-Matrizen.

Der Ausdruck (22) wird aus den Elementen $\tau\sigma$ bzw. τk der in der Gl. (35) vorkommenden Matrizen I , Σ_p bzw. \bar{I} , J_p , $J_p J_q + J_q J_p$ gewonnen:

$$\begin{aligned} P_{\rho\sigma ik}^{03/2} = & \frac{1}{4} (I + \gamma_4)_{\rho\tau} \overline{\mathcal{P}_{\tau\sigma ik}^{03/2}} = \frac{1}{4} (I + \gamma_4)_{\rho\tau} \left\{ \delta_{\tau\sigma} \left[\frac{1}{3} \delta_{ik} - \right. \right. \\ & - \frac{\sqrt{5}}{3} i \epsilon_{pik} t_p - \sqrt{\frac{2}{3}} t_{ik} \left. \right] - i(\gamma_p \gamma_5)_{\tau\sigma} \left[-\frac{i}{6} \epsilon_{pik} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{3\sqrt{5}} (4\delta_{ik} t_p - \delta_{pi} t_k - \delta_{pk} t_i) - \sqrt{\frac{2}{3}} i \epsilon_{rik} t_{pr} - \sqrt{2} t_{pik} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

Aus den Gln. (36), (7), (24) und den Transformationsgesetzen

$$\mathcal{L}^{1/2} \gamma_\mu (\mathcal{L}^{1/2})^{-1} = l_{\nu\mu} \gamma_\nu,$$

$$\mathcal{L}^{1/2} \gamma_5 (\mathcal{L}^{1/2})^{-1} = \gamma_5,$$

(wobei $l_{i4} = -l_{4i}$, und $l_{44} = \gamma$) erhalten wir folgende Form der KPM für Teilchen mit Spin $3/2$

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta\mu\nu}^{3/2} = & \frac{1}{4} \left(I - i \frac{\hat{p}}{m_0} \right)_{\alpha\omega} \left\{ \delta_{\omega\beta} \left[\frac{1}{3} \Theta_{\mu\nu} - \frac{\sqrt{5}}{3} i S_{\mu\nu}^{(1)} - \sqrt{\frac{2}{3}} S_{\mu\nu}^{(2)} \right] - \right. \\ & - i (\gamma_\tau \gamma_5)_{\omega\beta} \left[-\frac{i}{6} E_{\tau\mu\nu} + \frac{1}{3\sqrt{5}} (4\Theta_{\mu\nu} S_\tau^{(1)} - \Theta_{\mu\tau} S_\nu^{(1)} - \Theta_{\nu\tau} S_\mu^{(1)}) - \right. \\ & \left. \left. - \sqrt{\frac{2}{3}} i \Phi_{\tau\mu\nu} \tilde{S}_{\tau r}^{(2)} - \sqrt{2} S_{\tau\mu\nu}^{(3)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (37)$$

Wo neben den vorher eingeführten Bezeichnungen, noch die folgenden hinzugefügt wurden:

$$\begin{aligned} \hat{p} &= \gamma_\mu p_\mu, \quad E_{\tau\mu\nu} = \Phi_{p\mu\nu} l_{\tau p}, \quad S_\tau^{(1)} = l_{\tau p} t_p, \\ \tilde{S}_{\tau r}^{(2)} &= l_{\tau p} t_{pr}, \quad S_{\tau\mu\nu}^{(3)} = l_{\tau p} l_{\mu i} l_{\nu k} t_{pik}. \end{aligned} \quad (38)$$

C) Spin 2. Wegen.

$$\epsilon_{i_1 i_2}^{02}(m) = \sum_{m_1, m_2} (11 m_1 m_2; 2m) \epsilon_{i_1}^0(m_1) \epsilon_{i_2}^0(m_2), \quad (39)$$

und

$$\epsilon_{k_1 k_2}^{02*}(m') = \sum_{m'_1, m'_2} (11 m'_1, m'_2; 2m') \epsilon_{k_1}^{0*}(m'_1) \epsilon_{k_2}^{0*}(m'_2) \quad (40)$$

gilt im Ruhssystem

$$P_{i_1 i_2 k_1 k_2}^{02} = \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m'_1, m'_2}} (11 m_1 m_2; 2m) (11 m'_1 m'_2; 2m') \rho_{mm'} M_{i_1 i_2 k_1 k_2}, \quad (41)$$

wobei

$$M_{i_1 i_2 k_1 k_2} = \frac{1}{2} [M_{i_1 k_1}(m_1, m'_1) M_{i_2 k_1}(m_2, m'_2) + M_{i_1 k_2}(m_1, m'_2) M_{i_2 k_1}(m_2, m'_1)]. \quad (42)$$

In (42) müssen beide Terme in Betracht gezogen werden um die Symmetrie in Bezug auf die Indizes $i_1 i_2$ und $k_1 k_2$ zu sichern.

Durch ersetzen von $M_{i_1 k_1} M_{i_2 k_1}$ oder $M_{i_1 k_2} M_{i_2 k_1}$ durch das Matrizenprodukt $M \otimes M$ in der Komponentengleichung (41) erhalten wir den Matrizenoperator:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{02} &= \frac{1}{15} \bar{I} \otimes \bar{I} + \frac{1}{12} J_p \otimes J_p + \frac{1}{120} (J_p J_q + J_q J_p) \otimes (J_p J_q + J_q J_p) + \\ &+ \frac{1}{8\sqrt{10}} (\delta_{pq} \delta_{rs} + \delta_{pr} \delta_{qs} + \delta_{ps} \delta_{qr}) t_r [J_s \otimes (J_p J_q + J_q J_p) + (J_p J_q + J_q J_p) \otimes J_s] + \\ &+ \frac{7}{4\sqrt{21}} t_{pq} J_p \otimes J_q + \frac{1}{16\sqrt{21}} (\delta_{pq} t_{rs} + \delta_{rs} t_{pq} + \delta_{pr} t_{qs} + \delta_{qs} t_{pr} + \delta_{ps} t_{qr} + \\ &+ \delta_{qr} t_{ps}) (J_p J_q + J_q J_p) \otimes (J_r J_s + J_s J_r) + \frac{1}{4} t_{rpq} [J_r \otimes (J_p J_q + J_q J_p) + \\ &+ (J_p J_q + J_q J_p) \otimes J_r] + \frac{1}{4} t_{pqrs} (J_p J_q + J_q J_p) \otimes (J_r J_s + J_s J_r). \end{aligned} \quad (43)$$

Anhand der Gln. (43), (42) und (41) folgt

$$\begin{aligned} P_{i_1 i_2 k_1 k_2}^{02} &= \frac{1}{10} (\delta_{i_1 k_1} \delta_{i_2 k_2} + \delta_{i_1 k_2} \delta_{i_2 k_1}) - \frac{1}{15} \delta_{i_1 i_2} \delta_{k_1 k_2} - \\ &- \frac{i}{2\sqrt{10}} t_r (\varepsilon_{r i_1 k_1} \delta_{i_2 k_2} + \varepsilon_{r i_2 k_2} \delta_{i_1 k_1} + \varepsilon_{r i_1 k_2} \delta_{i_2 k_1} + \varepsilon_{r i_2 k_1} \delta_{i_1 k_2}) + \\ &+ \frac{1}{2\sqrt{21}} (4\delta_{i_1 i_2} t_{k_1 k_2} + 4\delta_{k_1 k_2} t_{i_1 i_2} - 3\delta_{i_1 k_1} t_{i_2 k_2} - 3\delta_{i_2 k_1} t_{i_1 k_2} - \\ &- 3\delta_{i_1 k_2} t_{i_2 k_1} - 3\delta_{i_2 k_2} t_{i_1 k_1}) + \frac{i}{4} (\varepsilon_{r i_1 k_1} t_{r i_2 k_2} + \varepsilon_{r i_2 k_2} t_{r i_1 k_1} + \\ &+ \varepsilon_{r i_1 k_2} t_{r i_2 k_1} + \varepsilon_{r i_2 k_1} t_{r i_1 k_2}) + t_{i_1 i_2 k_1 k_2}. \end{aligned} \quad (44)$$

Für den Zustand mit Impuls \vec{p} gilt nach Gl. (23):

$$\begin{aligned} P_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2}^2 &= \frac{1}{10} (\Theta_{\mu_1 \nu_1} \Theta_{\mu_2 \nu_2} + \Theta_{\mu_1 \nu_2} \Theta_{\mu_2 \nu_1}) - \frac{1}{15} \Theta_{\mu_1 \mu_2} \Theta_{\nu_1 \nu_2} - \\ &- \frac{i}{2\sqrt{10}} (\Theta_{\mu_1 \nu_1} S_{\mu_2 \nu_2}^{(1)} + \Theta_{\mu_1 \nu_2} S_{\mu_2 \nu_1}^{(1)} + \Theta_{\mu_2 \nu_1} S_{\mu_1 \nu_2}^{(1)} + \Theta_{\mu_2 \nu_2} S_{\mu_1 \nu_1}^{(1)}) + \\ &+ \frac{1}{2\sqrt{21}} (4\Theta_{\mu_1 \mu_2} S_{\nu_1 \nu_2}^{(2)} + 4\Theta_{\nu_1 \nu_2} S_{\mu_1 \mu_2}^{(2)} - 3\Theta_{\mu_1 \nu_1} S_{\mu_2 \nu_2}^{(2)} - 3\Theta_{\mu_1 \nu_2} S_{\mu_2 \nu_1}^{(2)} - \\ &- 3\Theta_{\mu_2 \nu_1} S_{\mu_1 \nu_2}^{(2)} - 3\Theta_{\mu_2 \nu_2} S_{\mu_1 \nu_1}^{(2)}) + \frac{i}{4} (\Phi_{r \mu_1 \nu_1} S_{r \mu_2 \nu_2}^{(3)} + \Phi_{r \mu_1 \nu_2} \tilde{S}_{r \mu_2 \nu_1}^{(3)} + \\ &+ \Phi_{r \mu_2 \nu_1} \tilde{S}_{r \mu_1 \nu_2}^{(3)} + \Phi_{r \mu_2 \nu_2} \tilde{S}_{r \mu_1 \nu_1}^{(3)}) + S_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2}^{(4)}, \end{aligned} \quad (45)$$

wobei

$$\begin{aligned} \bar{s}_{r\mu_1\nu_1}^{(3)} &= l_{\mu_1 i_1} l_{\nu_1 k_1} t_{r i_1 k_1}, \\ s_{\mu_1 \mu_2 \nu_1 \nu_2}^{(4)} &= l_{\mu_1 i_1} l_{\mu_2 i_2} l_{\nu_1 k_1} l_{\nu_2 k_2} t_{i_1 i_2 k_1 k_2}. \end{aligned} \quad (46)$$

4°. Helizitätsdarstellung. In den vorhergehenden Rechnungen wurde nach der Oz Achse gequantelt. Im folgenden gehen wir zu der Helizitätsdarstellung über, dh. als Quantenachse wird die Richtung des Impulses gewählt. Zu diesem Zweck drehen wir das Ruhssystem mit dem Winkel ϑ um eine Achse gekennzeichnet durch den Einheitsvektor \vec{n} ($\sin \varphi, -\cos \varphi, 0$). Die Winkel ϑ, φ sind die sphärischen Koordinaten der Richtung des Impulses \vec{p} :

$$\vec{p}(\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta). \quad .$$

Der Drehoperator R hat für das Diracfeld folgende Form:

$$R^{1/2} = \cos \frac{\vartheta}{2} I + i \sin \frac{\vartheta}{2} (\vec{\Sigma}, \vec{n}), \quad (47)$$

somit

$$u(\vec{e}) = R^{1/2} u^0, \quad \bar{u}(\vec{e}) = \bar{u}^0 (R^{1/2})^{-1}.$$

Ausserdem gilt

$$R^{1/2} \gamma_4 (R^{1/2})^{-1} = \gamma_4, \quad R^{1/2} \Sigma_j (R^{1/2})^{-1} = r_{jk} \Sigma_k, \quad (48)$$

mit [8]

$$r = \begin{pmatrix} \cos \vartheta \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi & (\cos \vartheta - 1) \sin \varphi \cos \varphi & -\sin \vartheta \cos \varphi \\ (\cos \vartheta - 1) \sin \varphi \cos \varphi & \cos \vartheta \sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi & -\sin \vartheta \sin \varphi \\ \sin \vartheta \cos \varphi & \sin \vartheta \sin \varphi & \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (49)$$

Für die Matrix (49) gelten die Orthogonalitäts-Beziehungen

$$r_{ip} r_{kp} = r_{pj} r_{pk} = \delta_{ik}. \quad (50)$$

Im Fall des Spins 1 ist der Drehoperator gleich mit

$$R^1 = \vec{I} + i \sin \vartheta (\vec{J}, \vec{n}) + (\cos \vartheta - 1) (\vec{J}, \vec{n})^2. \quad (51)$$

Man beweist einfach dass

$$J'_i = R^1 J_i (R^1)^{-1} = r_{ik} J_k. \quad (52)$$

Wir bezeichnen die Polarisations-tensoren in der Helizitätsdarstellung mit

$$t'_{i_1 i_2} \quad \dots \quad (53)$$

Wir beabsichtigen Beziehungen zwischen den Polarisationstensoren (53) und (19) herzustellen. Die Lösung dieses Problems legt in der Drehinvarianz der Gln. (26), (35) und (43). Also

$$P^{0s}(t, \Sigma, J) = P^{0s}(t', \Sigma', J'). \quad (54)$$

Mit den Beziehungen aus (48), (52) und (50) bemerken wir, dass die geforderte Invarianz sich einstellt, wenn

$$t_{i_1 i_2 \dots i_n} = r_{p_1 i_1} r_{p_2 i_2} \dots r_{p_m i_n} t'_{p_1 p_2 \dots p_n} \quad (55)$$

oder

$$t'_{i_1 i_2 \dots i_n} = r_{i_1 p_1} r_{i_2 p_2} \dots r_{i_n p_n} t_{p_1 p_2 \dots p_n}. \quad (56)$$

Anhang 1. Die Spin-Dichtematrix für Teilchen mit $s = 1, 3/2, 2$ [12].
Da die ρ — Matrix selbstadjungiert ist, genugt es die Elemente mit $m \geq m'$ anzugeben.

Es werden folgende vereinfachende Bezeichnungen eingeführt:

$$A_{33}^{(1)} \quad 3 = t_{133} \quad 3 - it_{233} \quad 3,$$

$$A_{33}^{(2)} \quad 3 = t_{1133} \quad 3 - t_{2233} \quad 3 - 2it_{1233} \quad 3,$$

$$A_{33}^{(3)} \quad 3 = t_{11133} \quad 3 - 3t_{12233} \quad 3 + it_{22233} \quad 3 - 3it_{11233} \quad 3.$$

Spin 1.

$$\rho_{11}, \rho_{-1-1} = \frac{1}{3} \pm \frac{1}{\sqrt{2}} t_3 + \frac{1}{2} t_{33}, \quad \rho_{00} = \frac{1}{3} - t_{33},$$

$$\rho_{10}, \rho_{0-1} = \frac{1}{2} A^{(1)} \pm \frac{1}{\sqrt{2}} A_3^{(1)}, \quad \rho_{1-1} = \frac{1}{2} A^{(2)}.$$

In dem Symbol \pm bezieht sich das obere Zeichen auf das erste Element, das untere auf das zweite.

Spin 3/2.

$$\rho_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}, \rho_{-\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} = \frac{1}{4} \pm \frac{3}{2\sqrt{5}} t_3 + \frac{3}{2\sqrt{6}} t_{33} \pm \frac{\sqrt{2}}{4} t_{333},$$

$$\rho_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \rho_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \pm \frac{1}{2\sqrt{5}} t_3 - \frac{3}{2\sqrt{6}} t_{33} \mp \frac{3\sqrt{2}}{4} t_{333},$$

$$\rho_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}, \rho_{-\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} A^{(1)} \pm \frac{\sqrt{2}}{2} A_3^{(1)} + \frac{3}{2} \sqrt{\frac{1}{6}} A_{33}^{(1)},$$

$$\rho_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}, \rho_{\frac{1}{2}-\frac{3}{2}} = \frac{\sqrt{2}}{4} A^{(2)} \pm \frac{3}{2} \sqrt{\frac{1}{6}} A_3^{(2)},$$

$$\rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{5}} A^{(1)} - \frac{3}{2\sqrt{2}} A_{33}^{(1)}, \quad \rho_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}} = \frac{\sqrt{2}}{4} A^{(3)}.$$

Spin 2.

$$\rho_{22}, \quad \rho_{-2-2} = \frac{1}{5} \pm \frac{2}{\sqrt{10}} t_3 + \frac{3}{\sqrt{21}} t_{33} \pm \frac{1}{2} t_{333} + \frac{1}{4} t_{3333},$$

$$\rho_{11}, \quad \rho_{-1-1} = \frac{1}{5} \pm \frac{1}{\sqrt{10}} t_3 - \frac{3}{\sqrt{21}} t_{33} \mp t_{333} - t_{3333},$$

$$\rho_{00} = \frac{1}{5} - \frac{3}{\sqrt{21}} t_{33} + \frac{3}{2} t_{3333}, \quad \rho_{1-1} = \frac{3}{2\sqrt{21}} A^{(2)} - A_{33}^{(2)},$$

$$\rho_{21}, \quad \rho_{-1-2} = \frac{1}{\sqrt{10}} A^{(1)} \pm \frac{3}{\sqrt{21}} A_3^{(1)} + \frac{3}{4} A_{33}^{(1)} \pm \frac{1}{2} A_{333}^{(1)},$$

$$\rho_{10}, \quad \rho_{0-1} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} A^{(1)} \pm \sqrt{\frac{1}{14}} A_3^{(1)} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} A_{33}^{(1)} \mp \sqrt{\frac{3}{2}} A_{333}^{(1)},$$

$$\begin{aligned} \rho_{20}, \quad \rho_{0-2} &= \sqrt{\frac{1}{14}} A^{(2)} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} A_3^{(2)} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} A_{33}^{(2)}, \quad \rho_{2-1}, \quad \rho_{1-2} = \\ &= \frac{1}{4} A^{(3)} \pm \frac{1}{2} A_3^{(3)}, \end{aligned}$$

$$\rho_{2-2} = \frac{1}{4} (t_{1111} + t_{2222} - 6t_{1122} + 4it_{1222} - 4it_{1112}).$$

Anhang 2. Die Matrizen $M(m, m')$ und $\mathfrak{D}^{01/2}(m, m')$.
Es gilt

$$M(1, 1) = \frac{1}{2} J_3 (J_3 + \bar{I}), \quad M(1, 0) = \frac{1}{2\sqrt{2}} (J_+ + J_3 J_+ + J_+ J_3),$$

$$M(1, -1) = \frac{1}{2} J_+ J_+, \quad M(0, 1) = \frac{1}{2\sqrt{2}} (J_- + J_3 J_- + J_- J_3),$$

$$M(0, 0) = \bar{I} - J_3^2, \quad M(0, -1) = \frac{1}{2\sqrt{2}} (J_+ - J_3 J_+ - J_+ J_3),$$

$$M(-1, 1) = \frac{1}{2} J_- J_-, \quad M(-1, 0) = \frac{1}{2\sqrt{2}} (J_- - J_3 J_- - J_- J_3),$$

$$M(-1, -1) = \frac{1}{2} J_3 (J_3 - \bar{I}), \quad \text{mit} \quad J_\pm = J_1 \pm iJ_2,$$

und

$$\mathfrak{D}^{01/2} \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{4} (I + \gamma_4)(I + \Sigma_3), \quad \mathfrak{D}^{01/2} \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) = \frac{1}{4} (I + \gamma_4)(\Sigma_1 + i\Sigma_2),$$

$$\mathfrak{D}^{01/2} \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{4} (I + \gamma_4)(\Sigma - i\Sigma_2), \quad \mathfrak{D}^{01/2} \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) = \frac{1}{4} (I + \gamma_4)(I - \Sigma_3).$$

LITERATUR

1. Rarita, W., Schwinger, J., Phys. Rev., **60**, 61 (1941)
- 2 Michel, L., Wightman, A. S., Phys. Rev., **98**, 1190 (1955)
3. Behrends, R. E., Fronsdal, C., Phys. Rev., **106**, 345 (1957).
- 4 Michel, L., Nuovo Cimento, Suppl., **14**, 95 (1959)
5. Jacob, M., Wick, G. C., Ann. of Phys., **7**, 404 (1959)
- 6 Gourdin, M., Michel, J., Nuovo Cimento, **40**, 225 (1965)
- 7 Frishman, Y., Gotsman, E., Phys. Rev., **140**, B, 1151 (1965)
- 8 Gábos, Z., Simon, E., Studia Univ. Babeş-Bolyai, ser. Math — Phys., fasc. 1, (1965), 115.
- 9 Auvil, P. R., Brehm, J. J., Phys. Rev., **145**, 1152 (1966).
10. Raszillier, I., Nuovo Cimento, **48**, A, 635 (1967).
11. Novacu, V., Raszillier, I., Nuovo Cimento, **48**, A, 645 (1967).
12. Gábos, Z., Studia Univ. Babeş-Bolyai, ser. Math -Phys., fasc 2, (1968), 85.
- 13 Florescu, V., Minnaert, P., Phys. Rev., **168**, 1662 (1968).
14. Kopeliovich, V., Iadernaia Fizika, **8**, 524 (1968).
- 15 Kopeliovich, B. Z., Iadernaia Fizika, **12**, 1286 (1970).

MATRICEA COVARIANTĂ DE POLARIZARE PENTRU CÎMPURI TENSORIALE ȘI RARITA-SCHWINGER

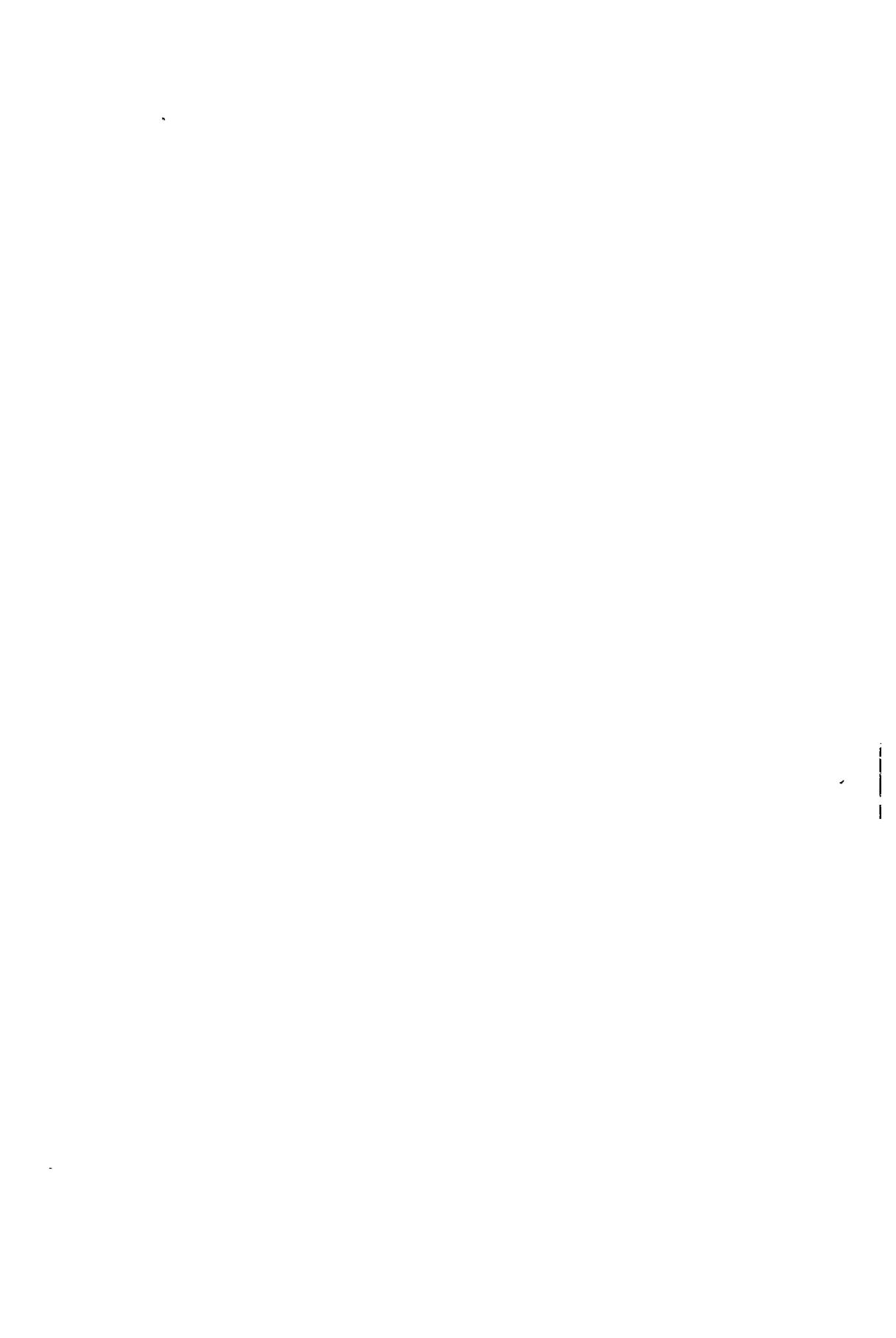
(Rezumat)

În lucrare se dă o metodă pentru stabilirea matricei covariante de polarizare pentru cîmpuri tensoriale și Rarita-Schwinger cu spin arbitrar. Metoda se bazează pe cunoașterea funcției de undă în sistemul de referință de repaos. Pentru a ilustra aplicabilitatea metodei se dau matricele covariante de polarizare pentru particulele cu spinul 1,3/2 și 2

КОВАРИАНТНАЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННАЯ МАТРИЦА ДЛЯ ТЕНЗОРНЫХ ПОЛЕЙ И ДЛЯ ПОЛЕЙ РАРИТА-ШВИНГЕРА

(Резюме)

В статье дается метод определения ковариантной поляризационной матрицы для тензорных полей и для полей Рарита-Швингера с произвольным спином. Метод основан на познании волновой функции в неподвижной системе отчета. Для иллюстрации применимости метода даются ковариантные поляризационные матрицы для частиц со спинами 1, 3/2 и 2.



SPIN WAVES SPECTRUM FOR THE B.C.C. FERROMAGNETIC SYSTEMS

M. CRİŞAN, M. MCNEIL (Mississippi State University) and V. CRİŞAN

1. Introduction. In recent years experimental research of transition metal alloys by means of inelastic neutron scattering gave the possibility to obtain the spin wave dispersion at long wavelengths.

Calculations of the spin wave spectrum for the ferromagnetic f.c.c. structure have been reported by Leoni and Nataoli [1] by means of the equation of motion method.

A variational method has been used by Elk [2] in order to obtain the spin waves spectrum for the b.c.c. Fe-Al system with ferromagnetic coupling between Fe atoms.

It is the purpose of this paper to report the detailed calculations of spin waves spectrum in R.P.A. approximation.

These calculations will be performed using a general Heisenberg Hamiltonian containing the interactions between atoms from the same sublattice (J_{AA} and J_{BB}) and between the two different sublattices (J_{AB}).

The numerical results obtained with the computer are presented in the last part of the paper.

2. The Hamiltonian for b.c.c. ferromagnetic system. We shall consider the b.c.c. all and if the corner sites and the center sites were called with A and B respectively the Hamiltonian of the ferromagnetic interactions may be written as :

$$\mathcal{H} = \mu g_A \sum_i \vec{H} \vec{S}_i^A - \mu g_B \sum_j \vec{H} \vec{S}_j^B - 2J_{AB} \sum_{<ij>} S_i^A S_j^B - J_{AA} \sum_{<i,i'>} S_i^A S_{i'}^A - J_{BB} \sum_{<j,j'>} S_j^B S_{j'}^B \quad (2.1)$$

where : J_{AA} is the exchange integral in the A sublattice ;

J_{BB} is the exchange integral in the B sublattice ;

J_{AB} is the exchange integral between the magnetic atoms of A and B sublattices

and : H is the magnetic field.

In the b.c.c. latice the number of neighbors for each kind of magnetic atoms are :

$$Z_{AA} = 6 \quad Z_{BB} = 6 \quad Z_{AB} = Z_{BA} = 8$$

and the vectors of the primitive all will be :

$$\vec{a}_1 \equiv a(1, 0, 0) \quad \vec{a}_2 \equiv a(0, 1, 0) \quad \vec{a}_3 \equiv a(0, 0, 1)$$

Now we can write down the atomic positions in b.c.c. all as :

$$\vec{r}_1 = \frac{a}{2} (1, 1, 1) \quad \vec{r}_2 = 0$$

and the general location of the sistes will be :

$$\vec{r}_n = \vec{R}_n + \vec{r}_\beta \quad \beta = 1 \text{ for } B \text{ sistes}$$

where :

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad \beta = 2 \text{ for } A \text{ sistes}$$

$$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$$

$$n_i = 1, 2 \dots N \quad i = 1, 2, 3$$

In order to diagonalise the Hamiltonian (2.1) we use the following Holstein-Primakoff transform :

$$\begin{aligned} S_{(r_\beta)}^+ &= (2S_\beta)^{\frac{1}{2}} a_{r_\beta}^+ = \left(\frac{2S_\beta}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_k b_{k_\beta}^+ \exp(-ik \vec{r}_\beta) \\ S_{(r_\beta)}^- &= (2S_\beta)^{\frac{1}{2}} a_{r_\beta}^+ = \left(\frac{2S_\beta}{N}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_k b_{k_\beta}^+ \exp(ik \vec{r}_\beta) \\ S_{(r_\beta)}^z &= S_\beta - a_{r_\beta}^+ a_{r_\beta}^- = S - \frac{1}{N} \sum_k b_{k_\beta}^+ b_{k_\beta}^- \exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \vec{r}_\beta] \end{aligned} \quad (2.2)$$

with the condition :

$$\sum_n \exp[i(\vec{k} - \vec{k}') \vec{R}_n] = N \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$$

If the equations (2.2) are substituted in (2.1) the simple terms of the Hamiltonian (2.1) become :

$$\begin{aligned} \sum_{<i, i'>} S_i^{A+} S_{i'}^{A+} &= NZ_{AA} S_A^2 - 2Z_{AA} S_A \sum_i b_{k_i}^+ b_{k_i}^- \\ \sum_{<i, i'>} S_i^A S_{i'}^A &= 2S_A Z_{AA} \sum_k \gamma_k b_{k_1}^+ b_{k_2}^+ \\ \sum_{<i, j>} S_i^{A+} S_j^{B+} &= S_A S_C NZ_{AB} - S_A Z_{BA} \sum_k b_{k_1}^+ b_{k_2}^- - S_B Z_{BA} \sum_k b_{k_2}^+ b_{k_1}^- \\ \sum_{<i, j>} S_i^{A+} S_j^{B-} &= 2(S_A S_B)^{\frac{1}{2}} \sum_k X_k b_{k_1}^- b_{k_2}^+ \end{aligned}$$

where :

$$X_k = \sum_{\delta=1}^8 \exp i \vec{k} \cdot \vec{\tau}_{12}^{\delta} \quad \gamma_n = \frac{2}{Z_{AA}} \sum_{i=1}^3 \exp i \vec{k} \cdot \vec{a}$$

$$R_e X_k = 8 - k^2 a^2 \quad \operatorname{Re} \gamma_n = 6 - k^2 a^2$$

$$\operatorname{Im} \gamma_n = 0$$

and the vectors $\vec{\tau}_{12}^{\delta}$ are given by :

$$\vec{\tau}_{12}^{\delta} = \frac{2}{a} [(1, 1, 1); (1, -1, 1); (1, -1, -1); (1, 1, -1); (-1, -1, -1) \\ (-1, 1, -1); (-1, 1, 1); (-1, -1, -1)]$$

Finally, collecting all these terms the Hamiltonian becomes :

$$\mathcal{H} = C_0 - \sum [C_2 b_{k_1}^+ b_{k_2}^- + C_3 b_{k_1}^- b_{k_2}^+ + C_1 b_{k_1}^+ b_{k_1}^- + C_4 b_{k_1}^- b_{k_1}^+ + \\ + C_5 (b_{k_1}^- b_{k_1}^+ + b_{k_2}^+ b_{k_2}^-)]$$

where :

$$C_0 = -\mu g_A N H S_A - \mu g_B N H S_B - J_{AA} N Z_{AA} S_A^2 - J_{BB} N Z_{BB} S_B^2 - \\ - 2 J_{AB} N Z_{AB} S_A S_B$$

$$C_1 = -\mu g_B H + S_A Z_{BB} J_{BB} \gamma_k^{\rightarrow} - 2 J_{AB} Z_{BA} S_A - 2 J_{BB} S_B Z_{BB}$$

$$C_2 = -\mu g_A H_B + S_B Z_{AA} J_{AA} \gamma_k^{\rightarrow} - 2 J_{AB} Z_{BA} S_B - 2 J_{AA} S_A Z_{AA}$$

$$C_3 = J_{AA} S_A Z_{AA} \gamma_k^{\rightarrow}$$

$$C_4 = J_{AB} S_B Z_{BB} \gamma_k^{\rightarrow}$$

$$C_5 = 2 J_{AB} (S_A S_B)^{1/2} X_k^{\rightarrow}.$$

3. Equation of motion. This method is well known in the many body problems being successfully applied in magnetism by Anderson [3] in order to obtain the spectrum of spin waves of the antiferromagnetics.

For our problem the equation of motion :

$$i \frac{db(t)}{dt} = [\mathcal{H}, b]_- \quad (3.1)$$

will be used in the Fourier transform :

$$\omega b = [b, \mathcal{H}] \quad (3.2)$$

with the operator b defined as :

$$C_{k\lambda} = \sum_{\mu}^2 \alpha_{\lambda\mu} b_{k\mu} = \alpha_{\lambda 1} b_{k1} + \alpha_{\lambda 2} b_{k2} \quad (3.3)$$

In the matrix form the equation (3.2) with the operator (3.3) becomes:

$$\begin{pmatrix} C_1 + C_4, & C_5 \\ C_5 ; & C_2 + C_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\lambda 1} \\ \alpha_{\lambda 2} \end{pmatrix} = -\omega_{\lambda}(k') \begin{pmatrix} \sigma_{\lambda 1} \\ \sigma_{\lambda 2} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

The spectrum of spin waves is obtained as the solutions of equation:

$$\begin{vmatrix} C_1 + C_4 + \omega_{\lambda} & C_5 \\ C_5 ; & C_2 + C_3 + \omega_{\lambda} \end{vmatrix} = 0 \quad (3.5)$$

and explicitly the roots will be.

$$\begin{aligned} 2\omega_1 &= -(C_1 + C_2 + C_3 + C_4) - [(C_1 + C_2 + C_3 + C_4)^2 - \\ &\quad - 4(C_1 + C_4)(C_2 + C_3) - 4C_5^2]^{\frac{1}{2}} \\ 2\omega_2 &= -(C_1 + C_2 + C_3 + C_4) + [(C_1 + C_2 + C_3 + C_4)^2 - \\ &\quad - 4(C_1 + C_4)(C_2 + C_3) - 4C_5^2]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

The particular behaviour of these roots has been discussed by V. Crişan and M. Crişan [4] for the case: $J_{AB} \gg J_{BB} \gg J_{AA}$ and: $J_{AA} \gg J_{BB}$ the dispersion law being a quadratic one.

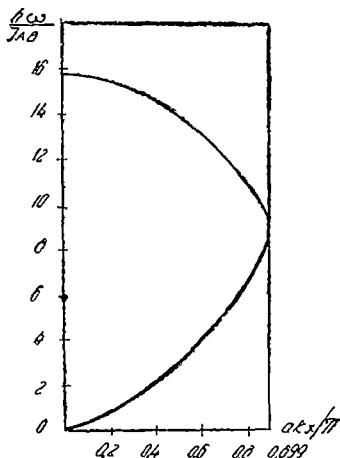


Fig 1

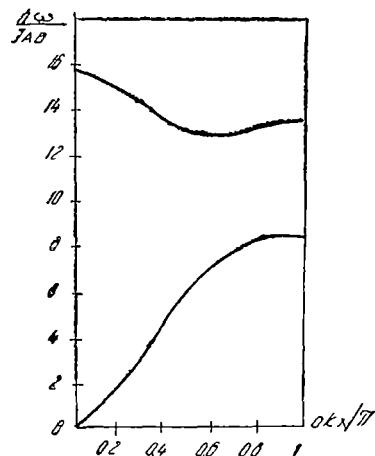


Fig 2

Now we shall discuss the general relation (3.6) for the different directions in the unit cell.

4. Numerical calculations. We shall consider that $\frac{J_{AA}}{J_{AB}} = \frac{J_{BB}}{J_{AB}} = J$ and the relation (3.6) becomes :

$$\frac{\hbar\omega_{1,2}}{J_{AB}} = \frac{17}{2} - \frac{1}{2} \left[\cos^2 \frac{ak_x}{2} - \sin^2 \frac{ak}{2} \right] \mp \left[\sin^2 \frac{ak_x}{2} + 64 \cos^2 \frac{ak_x}{2} - 2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.1)$$

— for the direction [1, 0, 0]

$$\frac{\hbar\omega_{1,2}}{J_{AB}} = 9 - \cos \frac{ak_x}{2} + \sin^2 \frac{ak_x}{2} \pm \left[4 \sin^2 \frac{ak_x}{2} + 64 \cos^2 \frac{ak_x}{2} - 2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.2)$$

— for the direction [1, 1, 0]

$$\frac{\hbar\omega_{1,2}}{J_{AB}} = \frac{19}{2} - \frac{3}{2} \left[\cos^2 \frac{ak_x}{2} - \sin^2 \frac{ak_x}{2} \right] \pm \left[9 \sin^2 \frac{ak_x}{2} + 64 \cos^2 \frac{ak_x}{2} - 2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

— for the direction [1, 1, 1]

The numerical calculations have been performed using a I. B. M. - 360/40 computer at Mississippi State University the results being shown in fig. 1, 2 and 3.

It is not difficult to see that for the direction [1, 0, 0] the value $\frac{\hbar\omega_{1,2}}{J_{AB}}$ has an imaginary part between the values : 0,899 and 1 of the wave vector

$$Z = \frac{ak_x}{\pi}$$

This result is in agreement with Elk's [2] calculations and is connected with the spin waves amortization.

The authors thank prof. Iuliu Pop for helpful discussion on the subject.

(Received August 16, 1971)

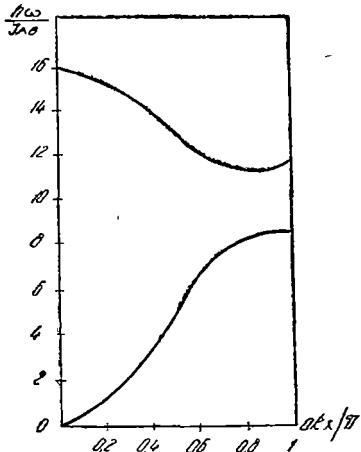


Fig. 3.

REF E R E N C E S

1. Leoni, F., Nasoli, C., Nuovo Cimento. **LV**, B, 21, 1968
- 2 Elk, F., Phys. Status solidi, **38**, 297, 1970.
- 3 P W. Anderson, Solid. state Phys., **V**, 14, 1963
4. Crişan, V., Crişan, M., Studia Univ Babeş-Bolyai ser. Physica, **2**, 69, 1971.

**SPECTRUL UNDELOR DE SPIN PENTRU SISTEME FEROMAGNETICE
CU VOLUM CENTRAT**

(Rezumat)

Se obține prin metoda ecuației de mișcare spectrul undelor de spin pentru interacțiile feromagnetice în sisteme cubice cu volum centrat

Rezultatele obținute sunt calculate numeric cu o mașină electronică I.B.M. 340/60

**СПЕКТР СПИНОВЫХ ВОЛН ДЛЯ ФЕРРОМАГНИТНЫХ О.Д.К. СИСТЕМ
(Резюме)**

Методом уравнения движения получен спектр спиновых волн для ферромагнитных взаимодействий в о.д.к. системах.

Полученные результаты вычислены с помощью электронной машины I.B.M. 340/60.

ON THE SLOW MHD FLOW BETWEEN TWO NON PARALLEL PLATES

V. M. SOUNDALGEKAR and D. D. HALDAVNEKAR (Bombay)

1. Introduction. The flow of a steady, two dimensional incompressible laminar motion between two non-parallel plates has been described in Schlichting [1]. However the numerical solution for the velocity and temperature field has been given by Millsaps and Pohlhausen [2] for different values of the Reynolds number. Recently the slow motion of such a flow has been discussed by Terrill [3]. Terrill considered suction at one wall and blowing at the other wall. The object of the present note is to discuss the effect of the magnetic field on the slow motion of an electrically conducting, incompressible, viscous fluid between two non-parallel plates. Series solution is obtained for small values R , the Reynolds number, and velocity profiles are shown in case of both convergent and divergent flows for different values of the Hartmann number. The velocity profiles are observed to be positive at small R in the presence of the magnetic field. The case of large R will be presented soon in a separate paper, for which the numerical calculations are in progress.

2. Mathematical Analysis. If the velocity field and magnetic field are given as $\vec{V}(u_r, 0, 0)$, $\vec{H}(0, H_\theta, 0)$ then in cylindrical polar coordinates, neglecting the induced magnetic field, the equation of motion can be derived from the modified Navier-Stokes equation, Maxwell's equations and Ohm's law as follows

$$u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\sigma \mu_e^2 H_\theta^2}{\rho r} u_r = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + v \left(\Delta^2 u_r - \frac{u_r}{r^2} \right), \quad (1)$$

$$0 = - \frac{1}{\rho r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{2v}{r^2} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}. \quad (2)$$

The equation of continuity in polar coordinates is

$$\frac{d}{dr} (r u_r) = 0. \quad (3)$$

If the boundaries of the channel are given by

$$\theta = \pm \alpha, \quad (4)$$

then the no-slip boundary condition at the boundaries is

$$u_r = 0 \quad \text{when} \quad \theta = \pm \alpha. \quad (5)$$

We can assume the form of velocity satisfying (3) as

$$u_r = \frac{AF(\theta)}{r}, \quad (6)$$

where A is constant and assumed equal to νR , where $R = u_0 r_0 / \nu$ is the Reynolds number of the flow and u_0, r_0 are the characteristic velocity and length respectively.

We can assume for radial magnetic field as

$$H_\theta = 2C/r. \quad (7)$$

Then equations (1) and (2), in virtue of the relations (6) and (7), become

$$-R^2 F^2 + 4M^2 RF = -\frac{r^3}{\rho v^2} \frac{\partial p}{\partial r} + RF'', \quad (8)$$

$$0 = -\frac{2}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{2\nu^2}{r^2} RF', \quad (9)$$

where $M = \mu_c C (\sigma/\rho \nu)^{1/2}$ is the Hartmann number. Integrating (9) with respect to θ , we get

$$p = \frac{2\rho v^2}{r^2} RF + \frac{2K_1 \rho v^2}{r^2} + C_1, \quad (10)$$

where K_1 and C_1 are arbitrary constants. Eliminating p from equations (8) and (10) and simplifying, we get

$$F'' - 4(M^2 - 1)F + RF^2 = K, \quad (11)$$

where K is an arbitrary constant. From (5) and (6) the boundary conditions on F are

$$F(\pm \alpha) = 0 \quad (12)$$

A third condition is necessary to determine the constant K . For this purpose, we relate $F(0)$ with the quantity of fluid entering the channel, and, by convention, take the magnitude of the velocity at the centre line to be unity. Thus

$$F(0) = \pm 1, \quad (13)$$

the positive sign being for the diverging and the negative sign for the converging channel.

As equation (11) cannot be solved in closed form, we follow the method of series expansion. If the fluid motion is assumed to be very slow, then we can assume the Reynolds number $R \ll 1$. Hence we can expand F in powers of R in the form

$$F = F_0(\theta) + RF_1(\theta) + \dots, \quad (14)$$

where squares and higher powers of R are neglected. Substituting for F from (14), in equation (11), and equating terms of like powers of R , we get

$$F_0'' - 4(M^2 - 1)F_0 = K, \quad (15)$$

$$F_1'' - 4(M^2 - 1)F_1 + F_0^2 = 0. \quad (16)$$

The solution of equation (15) subject to the boundary conditions (21) is

$$F_0(\theta) = \frac{K_1}{m^2} \left(\frac{\cosh m\theta}{\cosh m\alpha} - 1 \right), \quad (K = K_1 \text{ for } M \neq 1), \quad (17)$$

where $m^2 = 4(M^2 - 1)$ and $M \neq 1$.

The constant K_1 is now determined from (17) and (13) as

$$\frac{K_1}{m^2} \left(\frac{1}{\cosh m\alpha} - 1 \right) = \pm 1. \quad (18)$$

When $M = 1$, the solution of (15) is

$$F_0(\theta) = \frac{K_2}{2} (\theta^2 - \alpha^2), \quad (19)$$

and K_2 is given by ($K = K_2$ for $M = 1$)

$$-\frac{K_2 \alpha^2}{2} = \pm 1. \quad (20)$$

Substituting (17) in (16), we get for $M \neq 1$

$$F_1'' - m^2 V_1 + \frac{K_1^2}{m^4} \left(\frac{\cosh^2 m\theta}{\cosh^2 m\alpha} - \frac{2 \cos h m\theta}{\cosh m\alpha} + 1 \right) = 0. \quad (21)$$

Hence the solution of (21), in virtue of (12), is now given by

$$\begin{aligned} F_1(\theta) &= \frac{K_1^2}{m^4} \left(\frac{3 - \cosh 2m\theta}{6m^2 \cosh^2 m\alpha} + \frac{1}{m^2} - \frac{\theta \sinh m\theta}{m \cosh m\alpha} \right) - \\ &- \frac{K_1^2}{m^4} \left(\frac{3 - \cosh 2m\alpha}{6m^2 \cosh^2 m\alpha} + \frac{1}{m^2} - \frac{\alpha \sinh m\alpha}{m \cosh m\alpha} \right) \frac{\cosh m\theta}{\cosh m\alpha}, \end{aligned} \quad (22)$$

and K_1 is given by (18). When $M = 1$, we have from (16)

$$F_1'' + F_0^2 = 0. \quad (23)$$

Substituting for F_0 from (19) in (23), integrating twice we get on determining constants

$$F_1(\theta) = \frac{K_2^2}{m^2} (11\alpha^6 - \theta^6 + 5\alpha^4 - 15\alpha^4\theta^2), \quad (24)$$

and K_2 is given by (20). Hence the complete solution of equation (11) to $O(R)$ is given by

1) For $M \neq 1$

$$F(\theta) = \frac{K_1}{m^2} \left(\frac{\cosh m\theta}{\cosh m\alpha} - 1 \right) + R \left[\frac{K_1^2}{m^4} \left(\frac{3 - \cosh 2m\theta}{6m^2 \cosh^2 m\alpha} + \frac{1}{m^2} - \frac{\theta \sinh m\theta}{m \cosh m\alpha} \right) - \frac{K_1^2}{m^4} \left(\frac{3 - \cosh 2m\alpha}{6m^2 \cosh^2 m\alpha} + \frac{1}{m^2} - \frac{\alpha \sinh m\alpha}{m \cosh m\alpha} \right) \frac{\cosh m\theta}{\cosh m\alpha} \right], \quad (25)$$

and K_1 is given by (18).

2) For $M = 1$

$$F(\theta) = \frac{K_2}{2} (\theta^2 - \alpha^2) + \frac{RK_2^2}{120} (11\alpha^6 - \theta^6 + 5\alpha^4\theta^4 - 15\alpha^4\theta^2), \quad (26)$$

and K_2 is given by (20).

3. Conclusions. The velocity profiles from (25) in case of divergent and convergent flow for $R = 0, 0.2$ and $m = \sqrt{12}, \sqrt{60}$ ($M \neq 1$) are shown in Figs. 1 and 2 respectively for $\alpha = 10^\circ$. We can conclude from these figures that an increase in M , the Hartmann number, leads to an increase in the velocity for the same R . The values of $F(\theta)$ derived for $M = 1$ from (26) are entered in table 1. $F(\theta)$ increases with increasing R .

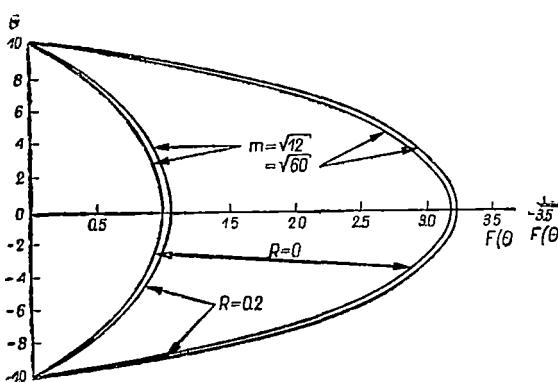


Fig. 1.

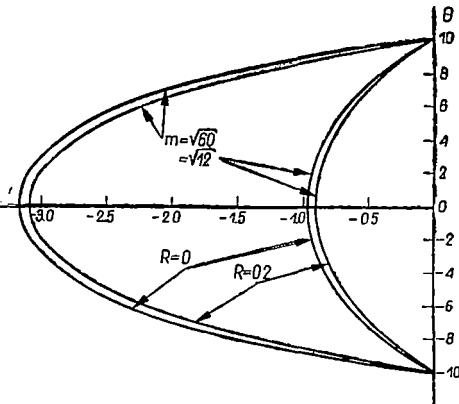


Fig. 2.

Table 1

Values of $F(\theta)$, $M = 1$

Divergent flow				Convergent flow		
θ/R	0	0.1	0.2	0	0.1	0.2
8	0.050	0.0508	0.052	-0.050	-0.0492	-0.0480
4	0.7500	0.7516	0.7532	-0.7500	-0.7484	-0.7468
0	1.0000	1.0007	1.0015	-1.0000	-0.9993	-0.9985

(Received August 19, 1971)

REFERENCES

1. Schlichting, H., *Boundary Layer Theory*, Mc Graw Hill Book Co. Inc. (1960), 89.
- 2 Millsaps, K., and Pohlhausen, K., J. Aero Sci., **20** 1953, 187.
- 3 Terrill, R. M., Z angew Math Phys., **16**, 1965, 306

DESPRE SCURGEREA MHD LENTĂ ÎNTRE DOUĂ PLĂCI NEPARALELE

(Rezumat)

Se face o analiză a scurgerii unui fluid viscos, incompresibil și conductor electric între doi pereți neparaleli. Se obțin soluții sub formă de serii după puterile lui R , unde R este numărul lui Reynolds presupus $\ll 1$, pentru profilul de viteză în cazul unui canal convergent și divergent. Se reprezintă grafic profilul vitezei și se observă că o creștere a numărului Hartmann M conduce la o creștere a vitezei fluidului.

О МЕДЛЕННОМ МГД ТЕЧЕНИИ МЕЖДУ ДВУМЯ НЕПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ ПЛАСТИНКАМИ

(Резюме)

Проводится анализ течения вязкой, несжимаемой и электропроводящей жидкости между двумя непараллельными стенами. Получены решения в виде рядов по степеням R , где R – число Рейнольдса, предполагаемое $\ll 1$ для скоростного профиля в случае сходящегося и расходящегося канала. Авторы дают графическое изображение скоростного профиля и отмечают тот факт, что увеличение числа Гартманна M приводит к повышению скорости жидкости.

R.E.S. A IONULUI Cu (II) ÎN COMPLECȘII PARȚIAL COVALENȚI FORMATI ÎN SOLUȚII AMONIACALE ȘI ALCOOLICE LA 77° K

V. ZNAMIROVSCHI și O. COZAR

1. Introducere. Stabilitatea complecșilor de Cu (II) formați prin disolvarea CuSO_4 (anhidru) în soluții amoniacale și alcoolice este determinată atât de atracția electrostatică dintre ionul central și moleculele dipolare de ligand, cât și de prezența unor legături covalente de tip σ și π între ionul metalic și ligand [1][2]. Aceste legături covalente afectează constanta de cuplaj spin-orbită λ , factorul g și constanta de structură hiperfină A, datorită dislocării electronului $3d$ de la ionul-părinte Cu (II).

Prin studiul unor complecși organici de formă plană $[\text{CuX}_4]^{2+}$ s-au dedus formulele care stabilesc legătura între parametrii R.E.S. ($g_{||}$, g_{\perp} , $A_{||}$, A_{\perp}) și coeficienții de amestec (α , α' , β , β_1) ce caracterizează tăria legăturilor covalente de tip σ și π [3] [4] [5].

Presupunând că legăturile π influențează puțin spectrul R.E.S. al acestor complecși, în cele ce urmează se va insista numai asupra legăturii de tip σ din planul xOy și deci asupra coeficienților α și α' .

În această lucrare ne propunem evaluarea coeficienților α , α' pentru complecșii $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ și formele lor deuterate, a constantei de cuplaj spin-orbită λ și a despiciarilor energetice $\Delta_{||}$, Δ_{\perp} , care apar datorită deformării axiale a acestor complecși.

2. Legătura covalentă și parametrii R.E.S. Forma complecșilor studiați se presupune plan-patrată, ionul de cupru fiind înconjurat în planul xOy de patru molecule de ligand. În cazul soluțiilor amoniacale ligandul este NH_3 , iar în soluțiile alcoolice H_2O . Simetria acestor complecși poate fi descrisă ca aceea a unui „octaedru” distorsionat de-a lungul axei z , simetria cîmpului cristalin fiind D_{4h} [6].

Conform teoriei cîmpului cristalin, nivelul fundamental 2D al ionului Cu(II) va fi despăgubit sub influența cîmpului tetragonal în patru subnivele, cărora le corespund orbitalii atomici: $d_{x^2 - y^2}$, $d_{3z^2 - r^2}$, d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} [7], ultimul fiind dublu degenerat. Energia relativă a acestor orbitali atomici depinde puternic de tipul deformării axiale și de interacțiunea ionului central cu liganzii imediat vecini [6].

Cu ajutorul orbitalilor atomici și ai liganzilor din planul xOy , se pot forma orbitalii moleculari de antilegătură corespunzători energiei electronului $3d$ în complecșii considerați [4] [8] [9]:

$$\psi_{B_{1g}} = \alpha d_{x^2-y^2} - \frac{1}{2} \alpha' [(-\psi_x^{(1)} + \psi_y^{(2)} + \psi_z^{(3)} - \psi_y^{(4)})_\sigma] \quad (1a)$$

$$\psi_{B_{3g}} = \beta d_{xy} - \frac{1}{2} (1 - \beta^2)^{1/2} [(\psi_x^{(1)} + \psi_x^{(2)} - \psi_y^{(3)} - \psi_z^{(4)})_\pi] \quad (1b)$$

$$\psi_{A_{1g}} = \alpha_1 d_{3z^2} - r^2 - \frac{1}{2} (1 - \alpha_1^2)^{1/2} [(\psi_x^{(1)} + \psi_y^{(2)} - \psi_z^{(3)} - \psi_y^{(4)})_\sigma] \quad (1c)$$

$$\psi_{E_g} = \begin{cases} \beta_1 d_{xz} - \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - \beta_1^2)^{1/2} [(\psi_x^{(1)} - \psi_z^{(3)})_\pi] \\ \beta_1 d_{yz} - \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - \beta_1^2)^{1/2} [(\psi_z^{(2)} - \psi_z^{(4)})_\pi] \end{cases} \quad (1d)$$

Orbitalii moleculari $\psi_{B_{1g}}$, $\psi_{A_{1g}}$ reprezintă legătura σ , $\psi_{B_{3g}}$ legătura π în planul xOy , iar ψ_{E_g} legătura π în afara planului xOy . Orbitalul molecular $\psi_{A_{1g}}$ nu afectează proprietățile magnetice ale stării fundamentale $\psi_{B_{1g}}$.

Funcțiile de undă hibride:

$$(\psi_j^{(*)})_\sigma = n P_j^{(*)} \pm (1 - n^2)^{1/2} S^{(*)} \text{ unde } 0 \leq n \leq 1 \quad (2)$$

și $(\psi_j^{(*)})_\pi = P_j^{(*)}$

reprezintă orbitalii atomilor de azot sau oxigen ai liganzilor din planul xOy [7].

Dacă se consideră că suprapunerea orbitalilor atomici ai ionului Cu(II) și orbitalilor de ligand are loc numai în starea fundamentală B_{1g} , atunci din condiția de normare a orbitalului molecular $\psi_{B_{1g}}$ rezultă [5] [4]:

$$\alpha^2 + \alpha'^2 - 2\alpha\alpha' S = 1 \quad (3)$$

unde S este integrala de suprapunere, având forma:

$$S = 2 \langle d_{x^2-y^2} | -\psi_x^{(1)} \rangle \quad (4)$$

și valoarea 0,076 și 0,093 în cazul oxigenului, respectiv azotului [4].

Hamiltonianul de spin corespunzător stării B_{1g} este de forma [4] [5]:

$$\hat{H} = \beta_0 [g_{||} H_z S_z + g_{\perp} (H_x S_x + H_y S_y)] + A I_z S_z + B (I_x S_x + I_y S_y). \quad (5)$$

Parametrii R.E.S. ($g_{||}$, g_{\perp} , $A_{||}$, A_{\perp}) sunt afectați de legătura covalentă cation-ligand, având expresiile [8] [9]:

$$g_{||} = 2,0023 - \frac{8\lambda_0\alpha^2\beta^2}{\Delta_{||}} \quad (6)$$

$$g = 2,0023 - \frac{2\lambda_0\alpha^2\beta_1^2}{\Delta_{\perp}} \quad (7)$$

$$A_{||} = P \left[-\alpha^2 \left(\frac{4}{7} + K_0 \right) + (g_{||} - 2,0023) + \frac{3}{7} (g_{\perp} - 2,0023) \right] \quad (8)$$

$$A_{\perp} = P \left[\alpha^2 \left(\frac{2}{7} - K_0 \right) + \frac{11}{14} (g_{\perp} - 2,0023) \right] \quad (9)$$

unde $\lambda_0 = -828 \text{ cm}^{-1}$ reprezintă constanta de cuplaj spin-orbită pentru ionul liber Cu(II), $K_0 = 0,43$ — termenul de contact Fermi, $P = 0,036 \text{ cm}^{-1}$ [10] [11], iar $\Delta_{||}$ reprezintă diferența de energie $E(B_{2g}) - E(B_{1g})$ și Δ_{\perp} diferența $E(E_g) - E(B_{1g})$.

Coeficientul α poate fi evaluat cu ajutorul relației [4] [5]:

$$\alpha^2 = -\frac{A_{||}}{P} + (g_{||} - 2) + \frac{3}{7} (g_{\perp} - 2) + 0,04 \quad (10)$$

Cind $\alpha^2 = 1$ legătura σ este pur ionică, iar dacă $\alpha^2 = 0,5$ este pur covalentă. Prin urmare acest coeficient arată gradul de interferență al orbitalului $d_{x^2-y^2}$ al ionului Cu(II) cu orbitalii liganzilor din planul xOy , electronul $3d$ găsindu-se ca aparținând fiecărei molecule de ligand cu probabilitatea $1/4(1 - \alpha^2)$ [2].

Dislocarea electronului $3d$ de la ionul—părinte duce la micșorarea cuplajului spin-orbită, având pentru complecși valoarea $\lambda = \alpha^2\lambda_0$ [2].

3. Rezultate și discuții. Cu ajutorul relației (10) în care s-au introdus valorile $g_{||}$, g_{\perp} și $A_{||}$ obținute experimental din spectrele R.E.S. ale ionului de cupru (II) în soluții amoniacale [12] și alcoolice [13] s-a putut evalua coeficientul α^2 , ce caracterizează tăria legăturii σ în planul xOy . Rezultatele obținute sunt trecute în tabelul 1.

Tabel 1

Complexul	$g_{ }$	g_{\perp}	$A_{ }(\text{cm}^{-1})$	α^2	$\lambda(\text{cm}^{-1})$	$\Delta_{ }(\text{cm}^{-1})$	$\Delta_{\perp}(\text{cm}^{-1})$
$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	2,167	2,107	-0,0182	0,76	-629,3	30 510	11.980
$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ 30% alcool	2,266	2,143	-0,0117	0,69	-571,3	17 310	8.110
$[\text{Cu}(\text{NH}_x\text{D}_y)_4]^{2+}$ $x + y = 3$	2,243	2,036	-0,0169	0,77	-637,5	21.160	37 500
$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ 50% alcool	2,356	2,067	-0,0123	0,77	-637,5	14 410	19 610

Se observă că în cazul complecșilor hidrațați în soluții alcoolice tăria legăturii covalente σ scade cu creșterea concentrației de alcool. Aceasta se poate explica prin mecanismul asocierilor moleculare apă-alcool [14], care tinde să îndepărteze moleculele de apă de lîngă ionul de cupru. În același timp apare și o modificare a constantei de cuplaj spin-orbită λ , care crește cu concentrația de alcool.

Substituția izotopică H — D nu aduce modificări semnificative în ceea ce privește tăria legăturii covalente σ , valoarea lui α^2 fiind practic aceeași pentru complecșii deuterați și nedeuterați.

Cunoscind valorile integralei de suprapunere S [4] și tolosind relația (3) s-a estimat coeficientul α' , care arată contribuția orbitalilor de ligand la orbitalul molecular $\psi_{B_{2g}}$ (tabel 2).

Tabel 2

Complexul	S	α	α'
$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	0,093	0,87	0,57
$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ 30% alcool	0,076	0,83	0,62
$[\text{Cu}(\text{NH}_x\text{D}_y)_4]^{2+}$ $x + y = 3$	0,093	0,88	0,56
$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ 50% alcool	0,076	0,88	0,55

Modificarea interacțiunii Cu(II) — ligand oglindită în variația legăturii covalente, precum și deformarea complecșilor formați în soluțiile alcoolice și amoniacale, se reflectă și asupra despărțirilor energetice $\Delta_{||}$ și Δ_{\perp} (tabel 1). Estimarea diferențelor energetice s-a făcut cu relațiile (6) și (7) în aproximarea că legăturile π sunt neglijabile. Astfel se obține $(\Delta_{||})_{max}$ dacă se negligează legătura π din planul xOy ($\beta = 1$) și $(\Delta_{\perp})_{max}$ dacă se negligează legătura π din afara planului xOy ($\beta_1 = 1$).

Se observă (tabel 1) că în cazul complecșilor $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ în soluții alcoolice 50% și $[\text{Cu}(\text{NH}_x\text{D}_y)_4]^{2+}$, $\Delta_{||} < \Delta_{\perp}$, adică nivelul energetic B_{2g} este situat sub nivelul E_g (fig. 1 a).

Pentru complecșii $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ în soluții alcoolice 30% și $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, $\Delta_{||} > \Delta_{\perp}$, aceasta indicând că nivelul energetic B_{2g} este situat deasupra

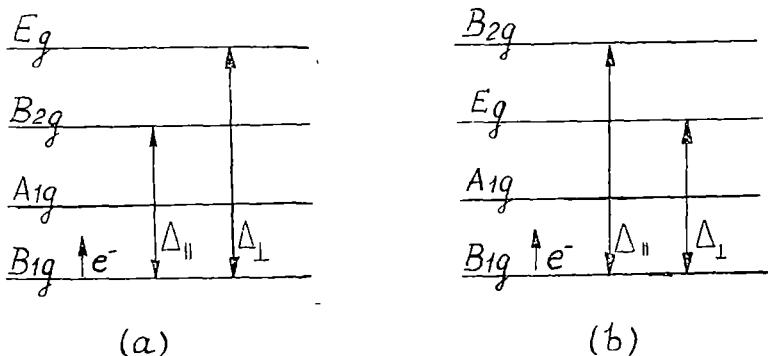


Fig 1 Nivelele energetice corespunzătoare orbitalilor moleculari de antilegătură pentru electronul 3d al ionului Cu(II) în soluții amoniacale și alcoolice.

lui E_g (fig. 1b). O dispunere similară a nivelelor energetice de antilegătură s-a observat în cazul etioporfirinei de cupru [9], aceasta datorindu-se existenței în acești complecși a unei slabe legături π în afara planului xOy ($\beta_1 \leq 1$) [6] [9].

(Intrat în redacție la 17 septembrie 1971)

BIBLIOGRAFIE

- 1 Owen, J, Proc Roy Soc, A **227**, 183, (1955)
 - 2 Nicula, A I Stud, cerc fiz, **3**, 257 (1965)
 - 3 Maki, A H., McGarvey, B R, J Chem Phys, **29**, 31 (1958)
 - 4 Kivelson, D, Neiman, R, J Chem Phys, **35**, 149 (1961)
 - 5 Gersmann, H R, Swalen, J D, J Chem. Phys., **36**, 3221 (1962)
 - 6 Assour, J M, J Chem Phys, **43**, 2477 (1965)
 - 7 Ursu, I, Nicula, A I Nistor, S, Cristea, G, Studia Univ. Babeş-Bolyai, ser. Math -Phys, fasc 2, 139 (1965)
 - 8 McGarvey, B R, J Phys. Chem., **60**, 71 (1956)
 - 9 Robert, E. M., Koski, W S, J. Am Chem. Soc., **82**, 3006 (1960)
 - 10 Abragam, A., Pryce, M. H. L., Proc. Roy. Soc., A **205**, 135 (1951).
 - 11 Abragam, A., Pryce, M.H. L., Proc. Roy. Soc., A **230**, 206 (1951).
 - 12 Znamirovschi, V., Cozari, O., Nicula, A I, Isotopenpraxis, **1**, 29, (1972).
 - 13 Znamirovschi, V., Cozari, O., Acta Phys Pol. (sub tipar).
 - 14 Weinberg, I, Zimmermann, J. R, J Chem Phys, **23**, 748 (1955).

ЭПР ИОНА Cu(II) В ЧАСТИЧНО ҚОВАЛЕНТНЫХ КОМПЛЕКСАХ, ОБРАЗОВАННЫХ В АММИАЧНЫХ И СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ ПРИ 77°К

(Pensione)

Устойчивость комплексов меди в аммиачных и спиртовых растворах обусловлена как электростатическим притяжением, так и присутствием ковалентных связей типа σ и π между центральным ионом и молекулами лиганда.

Предполагая, что эти комплексы имеют плоскую форму $[\text{CuX}_4]^{2+}$, авторы вычислили с помощью параметров ЭПР коэффициент α , характеризующий силу ковалентных связей в комплексах $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ и $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$, а также в их deutерированных формах. Определены также энергетические расщепления $\Delta_{||}$ и Δ_{\perp} , возникающие благодаря аксиальной деформации этих комплексов

LA R E S DE L'ION Cu(II) DANS LES COMPLEXES PARTIELLEMENT
COVALENTS FORMÉS DANS LES SOLUTIONS AMMONIACALES ET
ALCOOLIQUES À 77°K

(Résumé)

La stabilité des complexes de courbe dans les solutions ammoniacales et alcooliques est déterminée aussi bien par l'attraction électrostatique que par la présence de liaisons covalentes de type σ et π entre l'ion central et les molécules de liant.

En supposant que ces complexes sont de forme plane $[\text{CuX}_4]^{2+}$, on a évalué à l'aide des paramètres R E S le coefficient α qui caractérise la force de la liaison covalente dans les complexes $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ et $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ ainsi que dans leurs formes deutérées.

On a déterminé de même les décompositions énergétiques $\Delta_{||}$ et Δ_{\perp} qui apparaissent par suite de la déformation axiale de ces complexes.

UNDE ELECTROMAGNETICE DE ÎNALȚĂ FRECVENTĂ ÎNTR-O PLASMĂ SLAB IONIZATĂ

M. CRISTEA

Studiul teoretic al propagării undelor în plasmă se reduce, în esență, la stabilirea unei ecuații de dispersie și la rezolvarea acestei ecuații.

Ecuația de dispersie a undelor electromagnetice într-o plasmă magnetooactivă, poate fi scrisă sub forma [1]:

$$|(c^2 k^2 - \omega) \delta_{ij} - c^2 k_i k_j - 4\pi i \omega \sigma_{ij}(\vec{k}, \omega)| = 0 \quad (1)$$

unde \vec{k} și ω reprezintă respectiv vectorul de undă și frecvența undei electromagnetice, iar σ_{ij} — tensorul conductivității electrice a plasmei.

În general, rezolvarea ecuației (1) constituie o problemă extrem de dificilă, întrucât fiecare componentă σ_{ij} reprezintă o sumă de mai mulți termeni, fiecare termen fiind, la rîndul său, o serie infinită [2].

Într-o lucrare anterioară [3], am determinat componentele tensorului σ_{ij} în cazul unei plasme slab ionizate, situată în cîmpuri constante, electric și magnetic, reciproc perpendicular. În această lucrare vom particulariza rezultatele obținute în [3], împunînd anumite condiții restrictive referitoare la proprietățile plasmei și limitîndu-ne la analizarea undelor ale căror frecvențe nu sunt mai mici decît frecvența ciclotronică a electronilor plasmei. Se realizează astfel o simplificare considerabilă a expresiilor componentelor tensorului conductivității electrice. Introducînd aceste expresii în ecuația (1), obținem o ecuație de dispersie relativ simplă, ale cărei soluții ne furnizează spectrul oscilațiilor ce se propagă în plasmă.

Admitem că sunt îndeplinite toate condițiile specificate în [3] și, în plus presupunem că

$$\begin{aligned} |\beta_e| &\ll 1 \\ k_{||} v_{Te} &\gg \omega \geqslant |\Omega_e| \gg v_e \end{aligned} \quad (2)$$

unde $k_{||}$ este componenta vectorului de undă paralelă cu cîmpul magnetic extern, v_{Te} — viteza termică a electronilor, Ω_e — frecvența ciclotronică

a electronilor, v_e — frecvența ciocnirilor electronilor cu particulele neutre. β_e are expresia

$$\beta_e = \frac{\omega - n\Omega_e + iv_e}{k_{||}v_{\perp e}}$$

n fiind un număr întreg. Considerăm de asemenea că

$$k_{\perp}^2 \rho_e^2 \ll 1 \quad (3)$$

condiție îndeplinită în majoritatea cazurilor practice. Aici k_{\perp} este componenta vectorului \vec{k} , perpendiculară pe câmpul magnetic, iar ρ_e este raza Larmor pentru electroni

$$\rho_e = \frac{v_{Te}}{\Omega_e}.$$

În domeniul frecvențelor foarte înalte, de care ne ocupăm, contribuția ionilor poate fi neglijată, fiind justificată aproximarea plasmei electronice.

Tinând seamă de condițiile (2), componentele tensorului calculate în lucrarea [3], se reduc la următoarele expresii simplificate

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}v_{Te}} \left(1 + \frac{i}{k_{\perp}\rho_e} q_y + \frac{1}{2k_{\perp}^2\rho_e^2} q^2 \right) \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{yx} \simeq 0 \\ \sigma_{xz} &= \sigma_{zx} \simeq 0 \\ \sigma_{yy} &= \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}v_{Te}} \left(1 + \frac{1}{2k_{\perp}^2\rho_e^2} q^2 \right) \\ \sigma_{yz} &= \sigma_{zy} \simeq 0 \\ \sigma_{zz} &= -\frac{1}{4\pi} i \omega \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}^2 v_{Te}^2} \end{aligned} \quad (4)$$

unde \vec{q} reprezintă raportul dintre viteza de drift și viteza termică a electronilor, iar ω_{Le} este frecvența proprie a plasmei electronice, definită prin relația

$$\omega_{Le}^2 = \frac{4\pi e^2 N_e}{m}.$$

Componentele nediagonale nu sunt riguros egale cu zero, însă în mod aproximativ le putem considera nule, ele fiind infiniti mici de ordin superior în raport cu elementele diagonale.

În cazul considerat, ecuația de dispersie (1) devine

$$\begin{vmatrix} c^2 k_{||}^2 - \omega^2 - 4\pi i \omega \sigma_{xx} & 0 & -c^2 k_{\perp} k_{||} \\ 0 & c^2 k^2 - \omega^2 - 4\pi i \omega \sigma_{yy} & 0 \\ -c^2 k_{\perp} k_{||} & 0 & c^2 k_{\perp}^2 - \omega^2 - 4\pi i \omega \sigma_{zz} \end{vmatrix} = 0 \quad (5)$$

Dezvoltînd determinantul, se obține

$$\begin{aligned} & (c^2 k^2 - \omega^2 - 4\pi i \omega \sigma_{yy}) \times \\ & \times [(c^2 k_{||}^2 - \omega^2 - 4\pi i \omega \sigma_{xx})(c^2 k_{\perp}^2 - \omega^2 - 4\pi i \omega \sigma_{zz}) - c^4 k_{\perp}^2 k_{||}^2] = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Această egalitate se poate descompune în două ecuații independente. Egalînd cu zero prima paranteză, obținem ecuația

$$\omega^2 + i\omega \sqrt{\frac{\pi}{2} \frac{\omega_{L_e}^2}{k_{||} v_{T_e}}} \left(1 + \frac{1}{2k_{\perp}^2 \rho_e^2} q^2 \right) - c^2 k^2 = 0 \quad (7)$$

Pentru a discuta natura rădăcinilor acestei ecuații, ne vom referi la două cazuri limită:

Cazul a. Presupunem că

$$ck \gg W \quad (8)$$

unde prin W am notat cantitatea

$$W = \sqrt{\frac{\pi}{2} \frac{\omega_{L_e}^2}{k_{||} v_{T_e}}} \left(1 + \frac{1}{2k_{\perp}^2 \rho_e^2} q^2 \right) \quad (9)$$

În acest caz, rădăcinile ecuației (7) pot fi scrise sub forma

$$\omega = \frac{1}{2} \left(-iW \pm 2ck \sqrt{1 - \frac{W^2}{4c^2 k^2}} \right) \quad (10)$$

Observînd că datorită inegalității (8) radicalul diferă foarte puțin de unitate, putem scrie aproximativ

$$\begin{aligned} \omega_1 &= ck - \frac{i}{2} W \\ \omega_2 &= -ck - \frac{i}{2} W \end{aligned} \quad (11)$$

Ambele rădăcini au partea imaginară negativă; prin urmare, aceste soluții corespund unor oscilații amortizate ale plasmei.

Cazul b. Presupunem că este valabilă inegalitatea inversă

$$ck \ll W \quad (12)$$

În acest caz, rădăcinile ecuației (7) au forma

$$\omega = \frac{1}{2} \left(-iW \pm iW \sqrt{1 - \frac{4c^2 k^2}{W^2}} \right) \quad (13)$$

Dezvoltînd în serie radicalul și reținînd numai primii doi termeni, obținem

$$\begin{aligned} \omega_1 &= -i \frac{c^2 k^2}{W^2} \\ \omega_2 &= -iW \left(1 - \frac{c^2 k^2}{W^2} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

Ambele soluții sunt pur imaginare, negative, deci vor corespunde unor mișcări aperiodice, amortizate în timp.

Așadar, pentru ambele cazuri limită considerate, soluțiile ecuației (7) reprezintă mișcări amortizate în timp.

A doua ecuație care rezultă din (6) prin egalarea cu zero a parantezei drepte, are forma

$$\begin{aligned} \omega^4 - \omega^2 c^2 k^2 - 4\pi i \omega c^2 k_{||}^2 \sigma_{zz} + 4\pi i \omega^3 \sigma_{zz} - \\ - 4\pi i \omega c^2 k_{\perp}^2 \sigma_{xx} + 4\pi i \omega^3 \sigma_{xx} - (4\pi)^2 \omega^2 \sigma_{xx} \sigma_{zz} = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

În această ecuație se poate neglija termenul care conține în factor k_{\perp}^2 , deoarece componenta perpendiculară a vectorului de undă este mult mai mică decât componenta acestui vector paralelă cu cîmpul magnetic. Aceasta rezultă direct din relațiile (2) și (3) și anume, după (2), $k_{||} v_{Te} \gg |\Omega_e|$, iar inegalitatea (3) este echivalentă cu $k_{\perp} v_{Te} < |\Omega_e|$. Din aceste două relații rezultă imediat

$$k_{\perp} \ll k_{||}$$

Suprimind așadar în ecuația (15) termenul proporțional cu k_{\perp}^2 și înlocuind $ck_{||}$ prin ck , obținem

$$\begin{aligned} \omega^4 \left(1 + \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}^2 v_{Te}^2}\right) - \omega^2 c^2 k^2 \left(1 + \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}^2 v_{Te}^2}\right) + \\ + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \omega^3 \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||} v_{Te}} \left(1 + \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}^2 v_{Te}^2}\right) \left(1 + \frac{i}{k_{\perp} \rho_e} q_y + \frac{1}{2k_{\perp}^2 \rho_e^2} q^2\right) = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Se vede imediat că această ecuație are două rădăcini nule, prin urmare rămîne de rezolvat numai o ecuație de gradul doi. După simplificarea cu factorul

$$1 + \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||}^2 v_{Te}^2}$$

care este cu siguranță diferit de zero, se obține ecuația

$$\omega^2 + i \sqrt{\frac{\pi}{2}} \omega \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||} v_{Te}} \left(1 + \frac{i}{k_{\perp} \rho_e} q_y + \frac{1}{2k_{\perp}^2 \rho_e^2} q^2\right) - c^2 k^2 = 0 \quad (17)$$

Rădăcinile acestei ecuații sunt de forma

$$\omega = \frac{1}{2} (-iW_1 \pm \sqrt{4c^2 k^2 - W_1^2}) \quad (18)$$

unde

$$W_1 = \sqrt{\frac{\pi}{2} \frac{\omega_{Le}^2}{k_{||} v_{Te}}} \left(1 + \frac{i}{k_{\perp} \rho_e} q_y + \frac{1}{2k_{\perp}^2 \rho_e^2} q^2\right) \quad (19)$$

Se observă imediat asemănarea dintre ecuațiile (7) și (17). Pe baza unor considerații analoge cu cele din cazul precedent, vom ajunge la soluții de aceeași formă cu (11) și (14), în care, în locul mărimii W apare W_1 . Toate rădăcinile ecuației (17) vor avea de asemenea partea imaginară negativă; prin urmare, toate undele se vor amortiza în timp. Singura deosebire față de cazul precedent constă în faptul că soluțiile analoge cu (14) nu vor fi pur imaginare, ci complexe, mărimea W_1 fiind complexă. Așadar, aceste unde vor fi periodice, partea reală a frecvențelor lor fiind determinată de termenul $\frac{1}{k_{\perp P_s}} q_y$.

În concluzie, ecuația de dispersie (6) are atât soluții periodice, cât și soluții aperiodice; însă toate soluțiile se amortizează în timp. În acest domeniu al frecvențelor nu sunt posibile instabilități ale plasmei. Acest rezultat coincide cu cel obținut în lucrarea [4], în care s-a studiat cazul unei plasme omogene și izotrope. Prin urmare, se poate afirma că în domeniul undelor de frecvență foarte înaltă, plasma magnetoactivă se comportă ca și plasma izotropă.

(Intrat în redacție la 20 septembrie 1971.)

B I B L I O G R A F I E

1. Pytte, A., Phys. Rev., **179**, 138, 1969.
2. Stix, T. H., *The theory of plasma waves*, New York, 1963.
- 3 Cristea, M., Studia Univ. Babeș-Bolyai, Series Physica, fasc. 1, 29, 1971.
- 4 Milić, B., Rukhadze, A. A., Jurn. Tekhn. Fiziki, **38**, 229, 1968.

ВЫСОКОЧАСТОТНЫЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ВОЛНЫ В СЛАБОИОНИЗИРОВАННОЙ ПЛАЗМЕ

(Р е з ю м е)

Установлено уравнение дисперсии высокочастотных волн в слабоионизированной плазме, находящейся в перекрестных полях. Путем приближенного решения данного уравнения показывается, что в этой области частот магнитоактивная плазма является устойчивой.

ONDES ÉLECTROMAGNETIQUES DE HAUTE FRÉQUENCE DANS UN PLASMA FAIBLEMENT IONISÉ

(R é s u m é)

On établit l'équation de dispersion des ondes de haute fréquence dans un plasma faiblement ionisé, situé dans des champs entrecroisés. La résolution approximative de cette équation permet de montrer que, dans ce domaine des fréquences, le plasma magnéto-actif est stable.



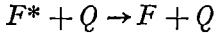
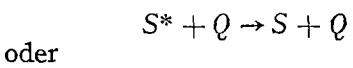
QUENCHERSCHEINUNG BEI DER FLÜSSIGKEITSSZINTILLATION-SZAHLUNG

F. KOCH und ST. TAMAS

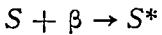
Reynolds und Kann haben im Jahre 1950 gezeigt, daß die Lösungen einiger fluoreszenten Substanzen unter dem Einfluss ionisierender Strahlungen in aromatischen Flüssigkeiten eine Lichtemission zeigen. Diese Flüssigkeitsszintillatoren sind für die Messung weicher β Strahlung geeignet. Nachdem Ergebniss einer Umfrage [1] ist die Lumineszenzlösung (Quencheffekt) ein Hauptproblem bei der Anwendung von Flüssigkeitsszintillatoren. Es ist sinnvoll bei der Loschkorrektion auch ein maschinelle Rechenverfahren zu verwenden. Es gibt verschiedene Programme für die Auswertung von Zählergebnisse [2], [3].

Für die Untersuchung des Wesens (Natur) dieser Lösung sind verschiedene Versuche gemacht worden [4] und es wurde festgesetzt, daß chemische Lösung erfolgt, so dass ein Lösungsmolekül, auf Grund der Brownischen Molekularbewegung, sich in die Nähe des angeregten Leuchstoff (F)-oder Lösungsmittelmoleküls (S) bewegt und dessen Energie einfangt [5].

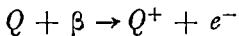
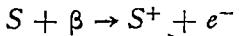
Schematisch



Wir haben ohne Zweifel aber auch im Primärprozess



noch andere Möglichkeiten



Es wurde gezeigt [6], dass bei der hochenergetischen Röntgen Strahlung, der Anregungsmechanismus des Szintillators Ionenrekombination enthält

und darum ist die Löschung bei optischer Anregung nicht ganz ähnlich. Ahnliche Ergebnisse (mit UV Messung) finden wir auch bei M. Jaffé [4] und anderen Autoren [5].

Tatsächlich, die β und γ Strahlungen haben viel starker Wechselwirkungen als das Licht und zerstören die Szintillationsfähigkeit in einer Zeitspanne [7].

Die Löschung ist eine komplexe Erscheinung und es wurden empirische Regeln gesucht und zwar mit Benutzung von ähnlichen aber anderen Molekülen Q als Q' . Es wurde festgestellt, dass Aceton, Wasser sehr stark die Luminescenz löschen. Die Versuche haben gezeigt, dass verschiedenen Alkohole die Szintillatoren verschiedenartig loschen [4], [8].

Es ist bekannt dass in optischen Versuchen eine Deuterierung die Luminescenzerscheinungen beeinflusst [10]. In Verbindung mit dieser Tatsache haben wir die Szintillatorlösung mit leichtem und schwerem Wasser bei Anwendung schwacher Strahler wie ^2H , ^{14}C , ^{35}S versucht. Die Versuche geschahen mit der Vorstellung, dass die Molekulareigenschaften (wie Dissoziationsenergie) verschieden bei schwerem und leichtem Wasser sind.

Arbeitsmethode. Es sind die Isotopen ^3H (18 keV), ^{14}C (155 keV) und ^{35}S (167 keV) in folgenden markierten Verbindungen benutzt worden: $\text{HTO} \left(\text{Lösung mit } \frac{10\mu\text{ Ci}}{\text{ml}} \right)$, Stearinsäure-1- ^{14}C (wasserige Lösung mit $\frac{1\mu\text{ Ci}}{\text{ml}}$)

DL-Methionin- ^{35}S (wasserige Lösung mit $5\mu\text{Ci}/\text{ml}$), alle der Firma Isocommerz. Die Messungen sind mit einem Flüssigkeitsszintillatorzähler NE 8307 gemacht worden. Als Szintillator verwendeten wir die Flüssigkeit NE 240, mit Dioxan. Von der Szintillatorlösung NE 240 haben wir 3 ml in ein Quarzgefäß eingeführt, dazu fügten wir 0,1 ml radioaktiver Lösung bei und stufenweise Löschsubstanz (Wasser in Menge von 0,1 ml). Es wurde die Bedingung für die Anpassung an die Dunkelheit berücksichtigt ($\sim 30'$), die Flüssigkeit war nicht entgast. Die Messungen sind bei Temperatur der Wasserleitung ($12-15^\circ\text{C}$) gemacht worden.

Die Mischungsmöglichkeit der Flüssigkeit NE 240 mit Wasser ist 20%, also wenn wir 0,6 ml wasserige Lösung zu 3 ml Szintillator zugeben, so gelangen wir an die Grenze, wo noch Flüssigkeit transparent ist.

Elektronische Daten für alle Messungen: Hochspannung 900 V Pegelspannung $DJ = 1,1$ V. Die Breite des Kanals 0,5 V, Verstärkung 100X für ^3H und 50X für ^{14}C und ^{35}S . Diese Parameter sind so bestimmt, dass wir optimale Bedingungen für die Messung haben (d.h. daß der Faktor $\frac{\text{Signal}}{\text{Rausch}}$ maxim.). Die Werte sind auf 10'' gemessen, 5-10 mal und wir haben dann einen Mittelwert benutzt.

Die Spektren sind durch multiplizieren mit \sqrt{A} (wo A ist Impulsamplitude) der gemessenen Werten berechnet worden.

Ergebnisse. Die ersten Messungen sind im Integralregim gemacht. Die Tabelle 1 enthält die Ergebnisse.

Tabelle 1.
Integralmessung mit $1\mu\text{Ci}$ HTO(0,1 ml)

ml	H_2O		$\text{D}_2\text{O}(100\%)$	
	imp/10 sec	%	imp/10 sec	%
0	64513	100	66512	100
0,1	59526	92,2	62423	93,8
0,2	54140	84,0	56406	84,9
0,3	48387	75,1	50272	75,6
0,4	43160	67,0	45194	68,0
0,5	38381	59,5	40828	61,3

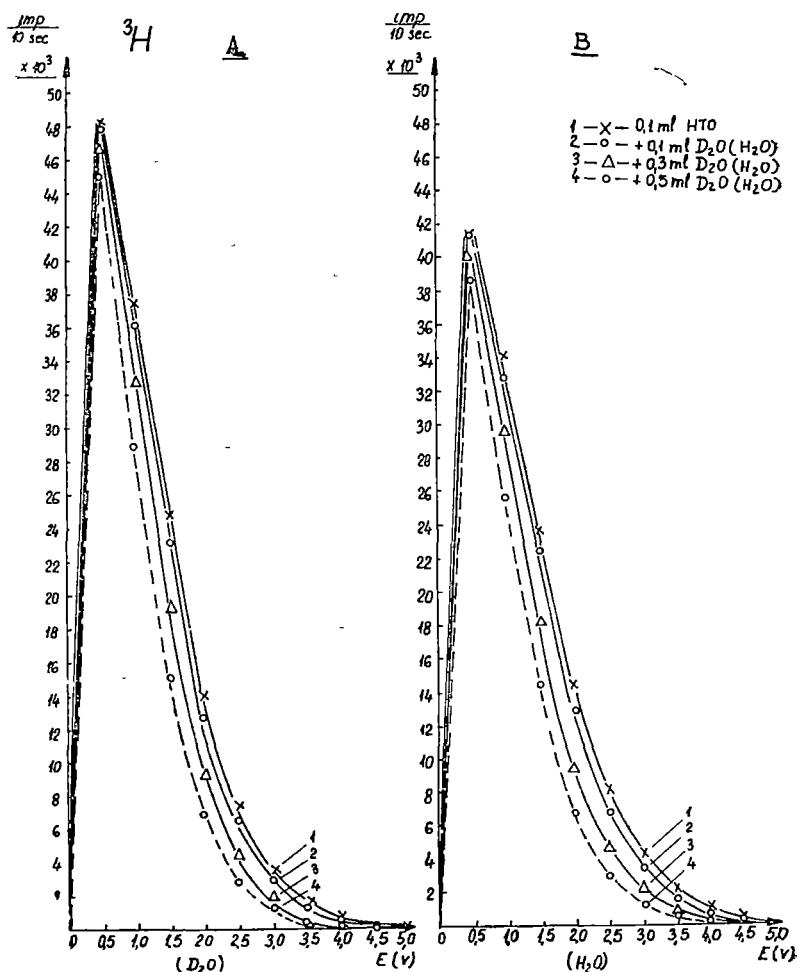


Abb. 1.

Diese Messungen zeigen, dass die Löschung in schwerem Wasser mit ungefähr 1% kleiner ist.

Die Integralmessung gibt uns nicht einen vollkommenen Überblick über die Löschung. Die folgende Abbildungen zeigen, dass die Löschung bei verschiedenen Energien verschieden ist.

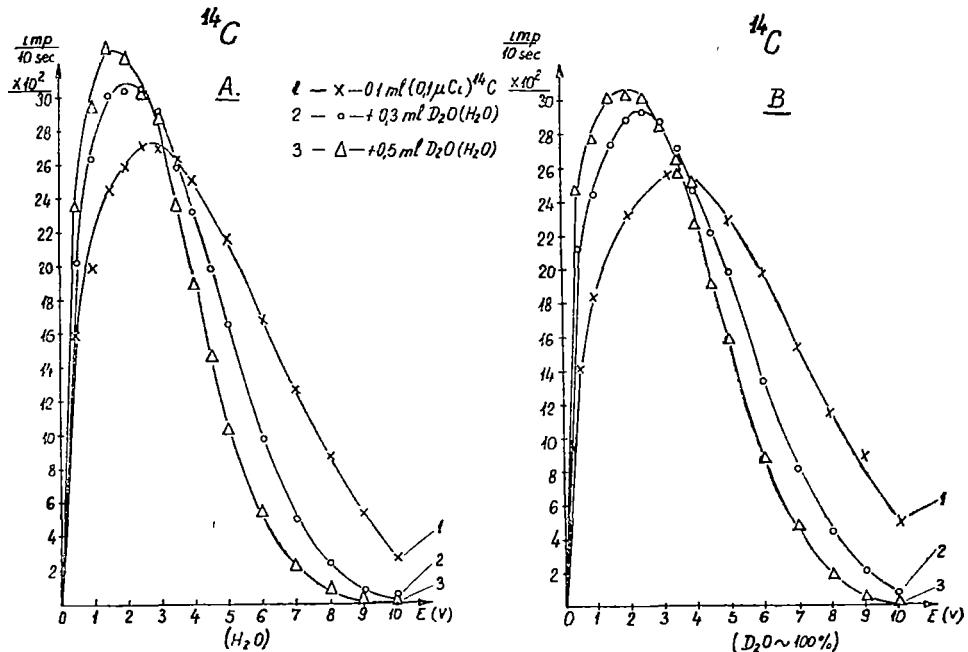


Abb. 2

In Abb. 1. sind die Spektren für ${}^3\text{H}$ eingetragen. Diese Ergebnisse sind in Zusammenhang mit Ergebnissen von der Arbeit [9] für das Wasser. Für verschiedene Energien ist die Löschung für leichtes und schweres Wasser ungefähr identisch.

In Abb. 2 und 3 sind die Spektren für ${}^{14}\text{C}$ und ${}^{35}\text{S}$ in Abwesenheit von 100%/50%/D₂O oder H₂O eingetragen. Es ist ersichtlich, dass es ein Energiegebiet gibt wo die Löschung minim ist (bei ~3,5 V). Die verschiedenen Löschungsgrade kann man an einer bestimmten Energie (Pegel) sehen (z.B. bei 6 V für D₂O ist 56% und für H₂O ist ~70%). Man kann so feststellen, dass für energiereiche Elektronen die Isotopsubstitution sich so besser aussert. Das lässt uns vermuten, dass der Ionisationsanteil des Szintillatorprozesses vergrossert ist. Andernfalls ist die Szintillatorlösung mit deuterierten Substanzen ähnlich wie bei Lumineszanzversuchen (optische Lösung) mit deuterierten Substanzen [10] [11].

(Eingegangen am 22 September 1971)

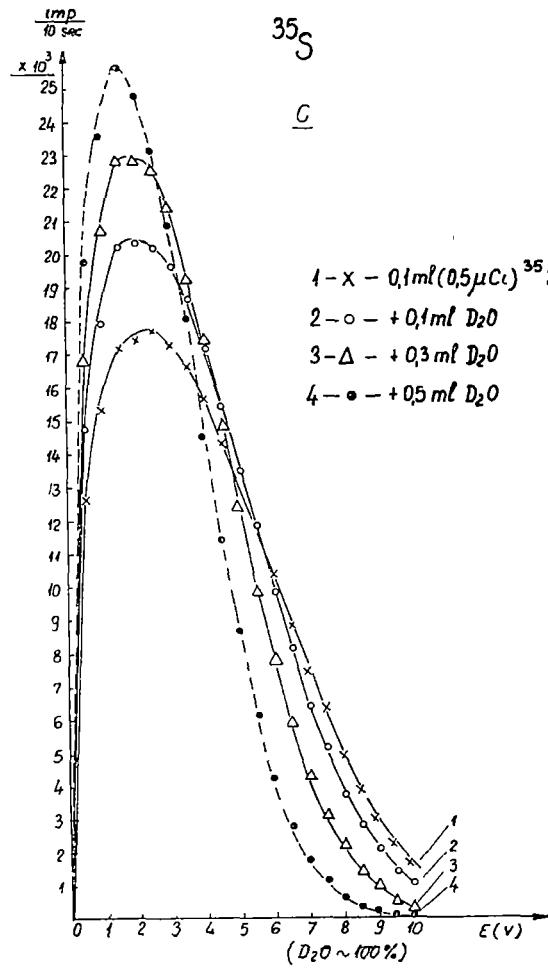
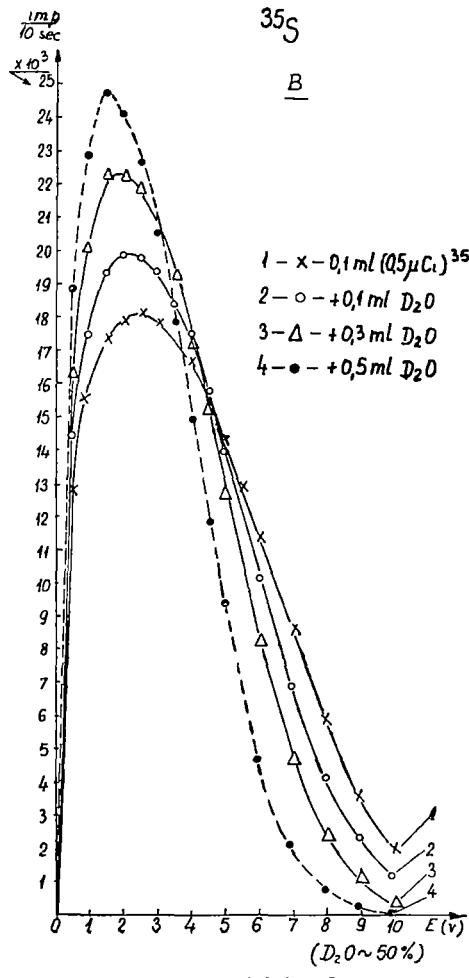
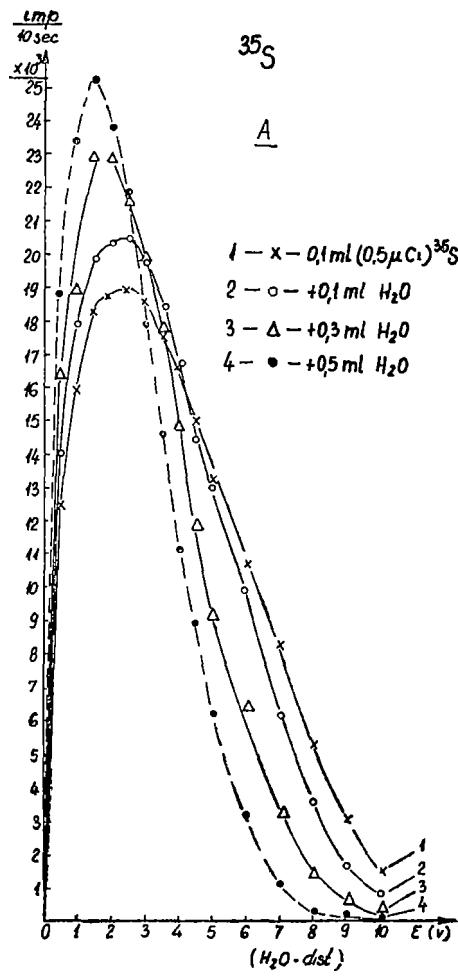


Abb. 3

LITERATUR

1. Simon, H., Rauschenbach, P., Int. J. Appl. Radiat., (1969) **20**, 725
2. Winkler, K. et al., Isotopenpraxis, (1968) **5**, 187.
3. Carroll, C. O., Houser, T. J., Int. J. Appl. Radiat., (1970) **21**, 261
4. Jaffe, M., Ford, L. A., Int. J. Appl. Radiat., (1970) **21**, 49
5. Bell, C. G., *Liquid Scintillation Counting*, Pergamon Press, 1958, 237
6. Ludwig, P. K., Huque M. M., J. Chem. Phys., (1968) **49**, 805
7. Tibu, M., Munteanu, Z., Tereja, E., Anal. St. Univ Iași, (1969) **XV**, 193.
8. Findeis, A. F., Lubkowitz, J. A., Molec. Crystals, (1968) **4**, 385
9. Kaczmarczyk, N., Atompraxis, (1970) **16**, 11
10. Helman, W. P., J. Chem. Phys., (1969) **51**, 354
11. Eisinger, J., Navon, G., J. Chem. Phys., (1969) **50**, 2069.

EXTINȚIA LA SCINTILATORII LICHIZI

(Rezumat)

Spectrul radiației beta de la izotopii ^3H , ^{14}C , ^{35}S se măsoară cu ajutorul scintilatorilor lichizi. Se cercetează extincția dată de H_2O și D_2O și se stabilește că extincția este mai mică pentru apă grea. Diferența dintre extincțiile date de H_2O și D_2O este constantă pentru ^3H și are un minim pentru ^{14}C și ^{35}S .

ЭКСТИНКЦИЯ У ЖИДКИХ СЦИНТИЛЛЯТОРОВ

(Резюме)

Спектр β -излучения у изотопов ^3H , ^{14}C , ^{35}S измеряется с помощью жидкых сцинтилляторов. Изучается экстинкция, данная H_2O и D_2O , и устанавливается, что экстинкция меньше у тяжелой воды. Разность между экстинкциями, данными H_2O и D_2O , является постоянной для ^3H и имеет минимум для ^{14}C и ^{35}S .

ESTABLISHMENT OF CONCENTRATION PROFILE FOR THE FLOW NEAR A ROTATING DISK WITH CHEMICAL REACTIONS

IOAN STAN

The flow over a surface is often accompanied by chemical processes in which generally the surface retains its structure and geometric characteristics. In this process the diffusion of the components to and from surface plays an important part. In the immediate vicinity of the surface the velocity drops to zero forming a hydrodynamic, laminar or turbulent, boundary layer depending on the Reynolds number and the free stream characteristics.

Far from the surface the fluid contains the reactants in their original concentration, but in the neighbourhood of the surface the concentration varies due to the reaction. In this domain the diffusion of the reactants through the reaction products have an important role.

Recent papers have investigated the flow over surfaces with chemical reaction taking into account only the ordinary mass diffusion in the boundary layer. It is the aim of the present paper to study the pressure effect on the diffusion. As it has been pointed out [1, 2, 3] the pressure diffusion (barodiffusion) effect is the physical agent which, together with the mass diffusion, causes modifications in the concentration profile of the reactants.

We establish the concentration profile for the flow around a flat disk, which rotates about an axis perpendicular to its plane, taking into account the pressure effect, in the case of an inviscid incompressible and two components fluid.

The Governing Equations. The equation of continuity for an incompressible fluid is

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (1)$$

where \vec{v} denotes the velocity. The equations of motions are the Navier-Stokes equations

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta \vec{v} \quad (2)$$

where p is the pressure, η dynamical and ν kinematic viscosity and ρ the density.

If we denote c to be the concentration or species density of one component, the equation of continuity for that component is

$$\frac{dc}{dt} = -\nabla \vec{i} \quad (3)$$

where \vec{i} is the mass flux of that component. The mass flux is given by $\vec{i} = -\alpha \nabla \mu$, where μ is the chemical potential, which for liquids is $\mu = \mu(c, p, T)$. In that case

$$\vec{i} = -\alpha \left[\frac{\partial \mu}{\partial c} \nabla c + \frac{\partial \mu}{\partial p} \nabla p + \frac{\partial \mu}{\partial T} \nabla T \right]. \quad (4)$$

Under isothermal condition and for incompressible fluids, the coefficients are constant and $\frac{\partial \mu}{\partial p}$ can be shown to be negative. Denoting $\alpha \frac{\partial \mu}{\partial c}$ by D and $\alpha \frac{\partial \mu}{\partial p}$ by $-k$, we have

$$\vec{i} = -[D \nabla c - k \nabla p] \quad (5)$$

Substitution of (5) into (3) yields

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) C = D \Delta C - k \Delta p, \quad (6)$$

which is the species conservating equations with mass and pressure diffusion.

Flow Near The Rotating Disk. We consider now the flow around a flat disk which rotates about an axis perpendicular to its plane, with uniform angular velocity ω in a fluid otherwise at rest. The layer near the disk is carried by it through friction and is thrown outwards, compensated by particles which flow in axial direction towards the disk.

To solve the problem we shall use cylindrical co-ordinates r, θ, z , the disk being at $z = 0$. Taking in account rotational symmetry we have for the hydrodynamic flow the equations

$$\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_z}{\partial t} = 0, \quad (7a)$$

$$v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} = \nu \left(\frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_r}{r^2} \right), \quad (7b)$$

$$v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} = \nu \left(\frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial r} - \frac{v_\theta}{r^2} \right), \quad (7c)$$

$$v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) \quad (7d)$$

The non slip condition at the wall gives the following boundary conditions

$$z = 0, v_r = 0, v_\theta = \omega r, v_z = 0; z \rightarrow \infty, v_r = 0, v_\theta = 0.$$

The solutions of these systems were given by C o c h r a n [4]. In order to integrate the systems (7) it is convenient to introduce a dimensionless-distance from the wall

$$\zeta = \sqrt{\frac{\omega}{v}} z.$$

Further, the following assumptions are made for the velocity components and pressure

$$v_r = r\omega F(\zeta), v_\theta = r\omega G(\zeta), v_z = \sqrt{\omega v} H(\zeta), p = -\rho\omega v P(\zeta) \quad (8)$$

Inserting these equations into (7) we obtain a system of four simultaneous-ordinary differential equations for F , G , H and P

$$2F + H' = 0 \quad (9a)$$

$$F^2 + F'H - G^2 - F'' = 0 \quad (9b)$$

$$2FG + HG' - G'' = 0 \quad (9c)$$

$$P' + HH' - H''' = 0 \quad (9d)$$

with the boundary conditions

$$\zeta = 0, F = 0, G = 1, H = 0; \zeta \rightarrow \infty, F = 0, G = 0, H \rightarrow -C.$$

We are interested in the calculation of H . With a good approximation we have

$$H = -a\zeta^2, \text{ for } \zeta < \zeta_0, H = -c \text{ for } \zeta \rightarrow \infty, \quad (10)$$

(where $a = 0,51$ and $c = 0,89$) which correspond to the inside and outside of the layer of fluid rotating with the disk, of thickness $\zeta_0 = 3,6$.

Establishment of concentration profile. The species conservation equation in cylindrical co-ordinates is

$$v_r \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \theta^2} \right) - k \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}, \quad (11)$$

with the boundary conditions

$$z = 0, \quad c = 0; \quad z \rightarrow \infty, \quad c = c_0.$$

In the framework of boundary layer theory we assume that the solution has the form

$$c = c(z).$$

Introducing the new variable ζ in (11) we obtain an ordinary differential equation

$$c'' - ScHc' + KScf(\zeta) = 0, \quad (12)$$

where $Sc = \frac{v}{D}$ is the Schimdt number, $K = k\rho\omega$ and

$$f(\zeta) = P'' = H'^2 + HH'' - H'''.$$
 (13)

The solution of equation (12) is

$$c = a_1 \int_0^\zeta e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} d\xi - K \int_0^\zeta e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} \left(\int_0^\zeta f Sc e^{-\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} d\xi \right) d\xi + Q_2, \quad (14)$$

where a_1 and a_2 are integral constants. For $\zeta = 0$, $a_2 = 0$ and for $\zeta \rightarrow \infty$

$$C_0 = a_1 \int_0^\infty e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} - K \int_0^\infty e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} \left(\int_0^\zeta f Sc e^{-\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} d\xi \right) d\xi. \quad (15)$$

We shall calculate these integrals for the inner and outer part of the boundary layer where are available the approximative solutions (10) with $f(\zeta) = 6a\zeta^2$ for $\zeta < \zeta_0$, and $f = 0$ for $\zeta \rightarrow \infty$.

First integral

$$I_1 = \int_0^{\zeta_0} e^{-\frac{a Sc \zeta_0^3}{3}} d\zeta.$$

for $Sc \gg 1$ is approximately $I_1 \approx \frac{1,61}{\sqrt[3]{Sc}}$

The second integral

$$I_2 = \int_{\zeta_0}^\infty e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} d\xi,$$

is little in comparison with I_1 .

Last integral

$$I_3 = \int_0^{\zeta_0} e^{-\frac{a Sc \zeta^3}{3}} \left(\int_0^\zeta 6 Sc a^2 e^{\frac{a Sc \zeta^3}{3}} d\xi \right) d\zeta$$

gives $I_3 = 11,01$ so that we have finally

$$a_1 = \frac{\sqrt[3]{Sc}}{1,61} c_0 + 6,89 K \sqrt[3]{Sc}.$$

The concentration profile taking in account the pressure effect is given by

$$\begin{aligned} \frac{c}{c_0} = & \left(\frac{\sqrt[3]{Sc}}{1,61} + 6,89 \frac{K \sqrt[3]{Sc}}{c_0} \right) \left[\int_0^\zeta e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} d\xi - \right. \\ & \left. - \frac{k}{c_0} \int_0^\zeta e^{\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} \left(\int_0^\zeta f Sc e^{-\int_0^\zeta Sc \int_0^\xi H d\xi} d\xi \right) d\xi \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Neglecting the pressure effect we have ($k = 0$)

$$\frac{c}{c_0} = \frac{\sqrt[3]{Sc}}{1.61} \int_0^{\zeta} e^{\frac{Sc}{6} H d\zeta} d\zeta$$

solution obtained by Levici [5].

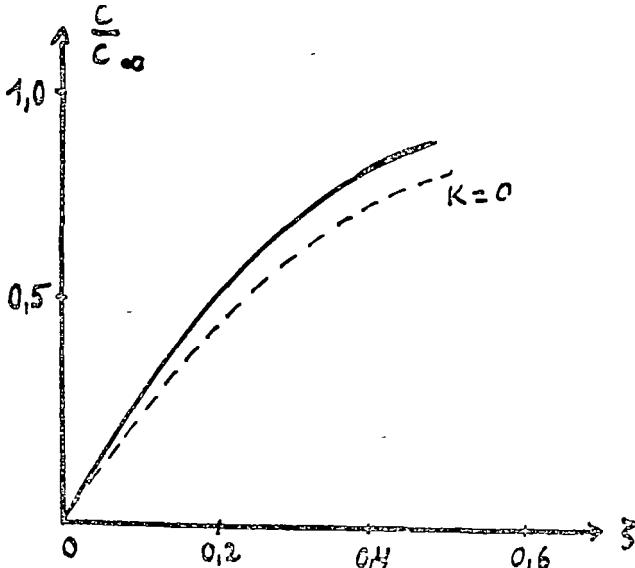


Fig. 1

The concentration profile after solution (16) given by us and those given by Levici ($K = 0$) is plotted in figure for

$$Sc = 100 \text{ and } \frac{K}{c_0} = 0.01.$$

We see from solution (16) that the concentration profile $\frac{c}{c_0}$ has two parts, corresponding to the ordinary mass diffusion, due to a concentration gradient, and to the pressure diffusion (barodiffusion) due to the pressure gradient. In the absence of a pressure gradient $k = 0$, solution (16) reduces to Levici's formula.

(Received September 24, 1971)

R E F E R E N C E S

- 1 Kao, T. W., *The Phys. of Fluids*, **6**, 1261, 1966
- 2 Stan, I., *Studia Univ. Babes-Bolyai, Ser. Physica*, **2**, 33, 1970
- 3 Stan, I., *Sullo scorrimento nello strato limite con reazioni chimiche superficiali* (preprint) Congresso Nazionale di Mecanica Teorica ed Applicata, Udine 1971
- 4 Cochran, W. G., *Proc. Camb. Philos.* **3**, 365, 1934
- 5 Levici, V. G., *Fiziko-himicheskaya gidrodinamika*, Moskva, 1959

**STABILIREA PROFILULUI CONCENTRAȚIEI LA SCURGEREA ÎN APROPIEREA
UNUI DISC ÎN ROTAȚIE CU REACȚII CHIMICE**

(Rezumat)

Se deduce expresia profilului concentrației la scurgerea în apropierea unui disc în rotație în cazul unor reacții chimice între disc și fluid. În acest scop se ia în considerare pe lîngă difuzia datorată gradientului de concentrație și cea datorată efectului barodifuziei. Profilul concentrației (16) este dat de doi termeni, corespunzători difuziei moleculare și barodifuziei. Dacă transportul de substanță ca urmare a gradientului de presiune ($k = 0$) este neglijabil, profilul concentrației se reduce la formula găsită anterior de Levici

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОФИЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИ ТЕЧЕНИИ ЖИДКОСТИ В
ОКРЕСТНОСТИ ВРАЩАЮЩЕГОСЯ ДИСКА В СЛУЧАЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

(Резюме)

Выведено выражение профиля концентрации при течении жидкости в окрестности врачающегося диска в случае химических реакций между диском и жидкостью. Для этой цели учитывается кроме диффузии, обусловленной градиентом концентрации, и диффузия, являющаяся результатом эффекта бародиффузии. Профиль концентрации (16) дан двумя членами, соответствующими молекулярной диффузии и бародиффузии. Если транспорт вещества вследствие градиента давления ($k = 0$) является незначительным, то профиль концентрации сводится к формуле, найденной Левицем

COMPORTAREA MAGNETICĂ A COMPUȘILOR INTERMETALICI CoSb, CoSb₂ și NiSb

IULIU POP și P. ȘTEȚIU

Introducere. Compușii intermetalici echiautomici CoSb și NiSb au structura cristalină de tip NiAs (B8) [12, 3, 4] cu parametrii de rețea $a = 3,874 \text{ \AA}$, $c = 5,193 \text{ \AA}$, respectiv $a = 3,942 \text{ \AA}$, $c = 5,155 \text{ \AA}$. CoSb₂ este izotipic cu FeS₂ (C18) [3], cu $a = 3,21 \text{ \AA}$, $b = 5,79 \text{ \AA}$; $c = 6,43 \text{ \AA}$. Studiul magnetic efectuat pe compușii echiautomici de către Adachi [5] a pus în evidență o comportare antiferomagnetică a compusului CoSb, cu temperatură Néel de $T_N = 40^\circ\text{K}$ și un moment magnetic efectiv de $1,36\mu_B$, punctul Curie paramagnetic fiind $\theta_a = -320^\circ\text{K}$, iar în cazul compusului NiSb a constatat o comportare paramagnetică.

În prezentă lucrare am reluat studiul magnetic al compușilor NiSb, CoSb și CoSb₂, întrucât formează faze de concentrație variabilă ce pot prezenta proprietăți fizice interesante. Compusul CoSb₂ nu a mai fost studiat pînă în prezent din punct de vedere magnetic.

Metodica experimentală. Compușii intermetalici CoSb, CoSb₂ și NiSb au fost sintetizați într-un cuptor de înaltă frecvență, prin topirea componentelor de puritate ridicată în atmosferă de argon, compozitia probelor fiind dată prin sinteză, fără analiză chimică.

După elaborare compușii au fost supuși unui tratament termic suplimentar în vid (la temperatura de 900°K timp de 24 ore) și revenirii la temperatură camerei cu o viteză de 100 grade pe oră. Măsurările magnetice au fost efectuate între 100°K – 700°K cu ajutorul unei balanțe de susceptibilități de tip Weiss și Forrer, avînd o sensibilitate de $1 \times 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{gr}$. [6].

Rezultate experimentale și discuții. Compușii intermetalici NiSb și CoSb₂ au o comportare paramagnetică slab dependentă de temperatură, de tip Pauli, aşa cum rezultă din fig. 1, unde este redată dependența de temperatură a susceptibilității magnetice masice.

Din figură se constată că susceptibilitatea compusului NiSb crește ușor cu creșterea temperaturii, în timp ce compusul CoSb₂ are o susceptibilitate puțin mai mare și care între 100°K – 540°K scade cu creșterea

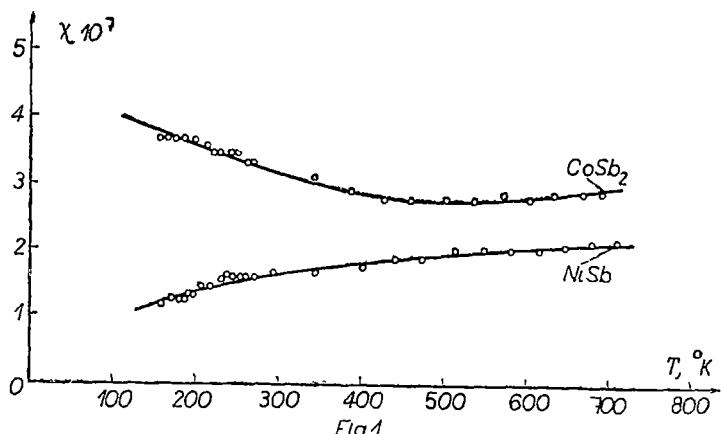


Fig. 1.

temperaturii prezentînd un minim între 450 și 500°K, după care crește ușor pînă la 700°K. La acest compus deci, dependența susceptibilității de temperatură are un caracter patratice (kT^2).

Această comportare a susceptibilității magnetice se datorește unui paramagnetism al electronilor de conductibilitate care indică un fenomen de totală colectivizare a electronilor cu spin necompensat din pătura 3d a nichelului, respectiv a cobaltului.

În totală opozitie cu comportarea magnetică a acestor compuși, compusul echiatomic CoSb are o susceptibilitate magnetică de tip Langevin, provenită de la momente localizate în pătura 3d, aproximativ de 10 ori mai mare, și o puternică dependență de temperatură, așa cum este redată în fig. 2, unde este reprezentată variația termică a susceptibilității magne-

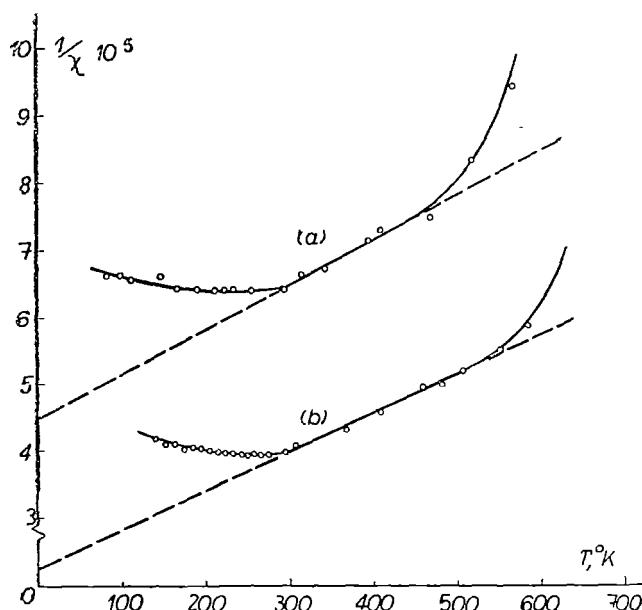


Fig. 2.

tice reciproce pentru probele fără tratament termic (a) și cu tratament termic (b).

Din figură se constată că dependența $1/\chi(T)$ prezintă un minim la 290°K iar între 300 și 500°K are o variație liniară, la temperatură înaltă crescind brusc (curba a).

Temperatura de 290°K a fost interpretată de noi drept punctul de ordine-dezordine antiferomagnetism-paramagnetism, deci temperatura Néel. Prin extrapolarea părții liniare a curbei $1/\chi(T)$ pînă la intersecția cu axa temperaturilor s-a obținut punctul Curie paramagnetic $\theta_a = -370^{\circ}\text{K}$. Din panta porțiunii liniare am determinat constanta Curie și cu ajutorul ei momentul magnetic efectiv $\mu_{ef} = 1,42\mu_B$.

În ce privește influența tratamentului termic aplicat probei, din fig. 2(b) se poate constata că în general caracterul dependenței de temperatură a susceptibilității magnetice reciproce se păstrează, dar valoarea susceptibilității magnetice crește, aproape dublându-se. Temperatura Néel rămîne aceeași, momentul magnetic în schimb suferă o ușoară creștere, ajungînd la

$$\mu_{ef} = 1,58\mu_B, \text{ iar } \theta_a = -390^{\circ}\text{K}.$$

În urma tratamentului termic s-a obținut o bună reproductibilitate a rezultatelor măsurătorilor.

Este interesant faptul că rezultatele lui Adachi [5] asupra compusului CoSb au pus în evidență caracterul antiferomagnetic, însă cu punctul de tranziție mult mai scăzut ($T_N = 40^{\circ}\text{K}$) cu toate că θ_a avea o valoare $\theta_a = -320^{\circ}\text{K}$, apropiată de valoarea determinată de noi. În plus, valoarea momentului magnetic efectiv găsită de Adachi, de $\mu_{ef} = 1,36\mu_B$, este destul de apropiată de cea găsită în prezenta lucrare ($\mu_{ef} = 1,58\mu_B$).

Deși nu s-a făcut o analiză chimică a compozиiei aliajelor după elaborare, se poate afirma totuși că probele puteau avea numai un surplus de cobalt, ceea ce duce la deplasarea compozиiei în domeniul de existență al fazei de concentrație variabilă izostructurală CoSb. Aceasta ar putea explica eventual divergența cu rezultatele lui Adachi

(Intrat în redacție la 24 septembrie 1971)

B I B L I O G R A F I E

1. Oftedal, I., Z physik Chem., **128**, 135–153 (1927)
2. de Jong, W. F. and Willems, H. W., Physica, **7**, 74–79 (1927).
3. Furst, U., Halla, F., Z physik Chem. B**40**, 285–307 (1938).
4. de Jong, W. F., Physica, **5** 241–243 (1925)
5. Adachi, K., J. Phys. Soc. Japan, **16**, 2187 (1961).
6. Pop, Iuliu și Tchetchernikov, V. I., Pribor i tehnika experimenta, **5**, 180 (1964).

МАГНИТНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
CoSb, CoSb₂ и NiSb
(R e з ю м е)

Изучено магнитное поведение интерметаллических соединений NiSb, CoSb и CoSb₂ между 100 и 700°K. Из температурной зависимости магнитной восприимчивости установлено парамагнитное поведение типа Паули для соединений NiSb и CoSb₂, а для соединения CoSb — антиферромагнитное поведение с температурой Нееля T_N = 290°K и эффективным магнитным моментом на атом кобальта 1,58 μ_B .

LE COMPORTEMENT MAGNÉTIQUE DES COMPOSÉS INTERMÉTALLIQUES
CoSb, CoSb₂ ET NiSb
(R é s u m é)

Les auteurs ont étudié le comportement magnétique des composés intermétalliques NiSb, CoSb et CoSb₂ entre 100 et 700° K. Grâce à la dépendance de la susceptibilité magnétique par rapport à la température, on a établi un comportement paramagnétique de type Pauli pour les composés NiSb et CoSb₂, et un comportement antiferromagnétique avec la température Néel T = 290°K pour le composé CoSb ainsi qu'un moment magnétique effectif de 1,58 μ_B par atome de cobalt.

ON THE CALCULATION OF THE SHEAR VISCOSITY FOR BINARY DENSE MIXTURES

SPERANȚA COLDEA

1. There are two approaches to the study of transport phenomena in fluids: the distribution function method and the method of correlation functions. Usually one expresses the transport coefficients in terms of certain correlation formulas.

In his well known paper, Kirkwood [1] has given an expression for the friction coefficient of a fluid, which contains an integral with respect to the time, of a autocorrelation function:

$$\xi = \frac{1}{3kT} \int_0^\infty dt \langle K(0) K(t) \rangle \quad (1)$$

where $K(t)$ is the force at a moment t on an arbitrary molecule, as a result of the action of all other molecules; k is the Boltzmann constant, T is the temperature and the square $\langle \rangle$ means a statistical average with respect to the equilibrium state of the system.

L.A. Rott [2] calculated the shear viscosity of a simple dense fluid, by using the Stokes model:

$$\eta = \frac{\xi}{6\pi r_0} \quad (2)$$

The author takes into consideration the expression (1) of the friction coefficient. Essentially Rott's method consists in writing the integral in (1) as $\langle K^2 \rangle \tau$, where τ is the mean relaxation time of the force K . The average of the square of the force K has been performed [2] by the conditional distribution method [3]. Taking into account a previous calculation for the relaxation time τ [4] he obtained an expression for the shear viscosity of a unicomponent system.

2. In this paper the results derived for simple dense systems [2] are generalised to the case of dense binary mixture, using the Rott's

method. Consider a dense fluid as system of N particles of two kinds (noted A and B) in a given volume V . Let n_A , n_B be the number of molecules of type A , B respectively. Obviously $N = n_A + n_B$. The friction coefficient of the molecule of type A , respectively B , are given by relations analogous to (1) :

$$\xi_A = 1/3kT \int_0^\infty dt \langle K_{AA}(0) K_{AA}(t) + K_{AB}(0) K_{AB}(t) \rangle \quad (3a)$$

$$\xi_B = 1/3kT \int_0^\infty dt \langle K_{BA}(0) K_{BA}(t) + K_{BB}(0) K_{BB}(t) \rangle \quad (3b)$$

The K'_j s ($i, j = A, B$) which appear in these autocorrelation functions are the forces on the molecule A , respectively B , and are results of the action of all other molecules of type A , B respectively. This is why in the autocorrelation functions there are two terms. The integral regarding the time of these autocorrelation functions can be expressed as in [2], by using the relaxation times of forces K'_j .

$$\xi_A = 1/3kT(\langle K_{AA}^2 \rangle + \langle K_{AB}^2 \rangle) \tau_A \quad (4a)$$

$$\xi_B = 1/3kT(\langle K_{BA}^2 \rangle + \langle K_{BB}^2 \rangle) \tau_B \quad (4b)$$

(For a binary system, instead of four relaxation times one utilises only two, namely τ_A and τ_B , which can also be calculated by temperature evaluations : $\tau_{AA} = \tau_{BB} = \tau_A$ and $\tau_{BA} = \tau_{AB} = \tau_B$. It is considered that the relaxation process for the B -type particles parallels that for A -type particles).

The friction coefficient of the considered system is obtained by summing the partial terms corresponding to these two kinds of molecules :

$$\xi = N_A \cdot \xi_A + N_B \cdot \xi_B \quad (5)$$

where $N_i = n_i/N$ ($i = A, B$).

Hence ξ , as we have already pointed out, has been derived [2], [5] by averaging the square of the force K , with the aid of the conditional distribution method [3] :

$$\langle K^2 \rangle = 4\pi/v \int_0^\infty dr [\Phi'(r)]^2 r^2 \phi(r) \quad (6)$$

If generalising this result to the binary system one obtains the following expressions for $\langle K_{ij}^2 \rangle (i, j = A, B)$:

$$\langle K_{AA}^2 \rangle = 4\pi/v \int_{r_0}^{\infty} dr_{AA} [\Phi'(r_{AA})]^2 r_{AA}^2 \varphi(r_{AA}) \quad (7a)$$

$$\langle K_{AB}^2 \rangle = 4\pi/v \int_{r_0}^{\infty} dr_{AB} [\Phi'_{AB}(r_{AB})]^2 r_{AB}^2 \varphi(r_{AB}) \quad (7b)$$

$$\langle K_{BA}^2 \rangle = 4\pi/v \int_{r_0}^{\infty} dr_{BA} [\Phi'_{BA}(r_{BA})]^2 r_{BA}^2 \varphi(r_{BA}) \quad (7c)$$

$$\langle K_{BB}^2 \rangle = 4\pi/v \int_{r_0}^{\infty} dr_{BB} [\Phi'_{BB}(r_{BB})]^2 r_{BB}^2 \varphi(r_{BB}) \quad (7d)$$

where $\Phi_{ij}(r_{ij})$ is the intermolecular potential, r_{ij} the distance between two molecules, and $\Phi'_{ij}(r_{ij}) = d\Phi_{ij}(r_{ij})/dr_{ij}$; $\varphi(r_{ij})$ is the radial distribution function for the binary system and determines the probability to find a B -type molecule in an arbitrary molecular volume, at the distance r_{AB} from the A -type molecule, (which is in the center of the chosen spherical volume), when in each molecular volume there is a molecule of type A or B . (One utilises an analogy with the radial distribution function of the unicomponent system).

The relations (4a)–(4b) contain the relaxation times τ_i , τ_j ($i, j = A, B$) whose calculation has been performed [4] for an unicomponent system:

$$\tau \cong r_0 \sqrt{m/3kT} \quad (8)$$

where m is the molecular mass and r_0 is the radius of the molecular volume ($v = 4/3\pi r_0^3$). For a binary system, the relaxation times, namely τ_A and τ_B , can also be calculated by temperature evaluations:

$$\tau_A \cong r_0 \sqrt{m_A/3kT} \quad (9a)$$

$$\tau_B \cong r_0 \sqrt{m_B/3kT} \quad (9b)$$

By using the expressions (4)–(7) one obtains the following expressions for the friction coefficient:

$$\xi = 1/3kT[N_A\tau_A(\langle K_{AA}^2 \rangle + \langle K_{AB}^2 \rangle) + N_B\tau_B(\langle K_{BA}^2 \rangle + \langle K_{BB}^2 \rangle)] = \quad (10a)$$

$$\begin{aligned} &= 4\pi/3kTv \left[N_A\tau_A \left(\int_{r_0}^{\infty} dr_{AA} [\Phi'_{AA}(r_{AA})]^2 r_{AA}^2 \varphi(r_{AA}) + \int_{r_0}^{\infty} dr_{AB} \times \right. \right. \\ &\quad \times [\Phi'_{AB}(r_{AB})]^2 r_{AB}^2 \varphi(r_{AB}) \Big) + N_B\tau_B \left(\int_{r_0}^{\infty} dr_{BA} [\Phi'_{BA}(r_{BA})]^2 r_{BA}^2 \varphi(r_{BA}) + \right. \\ &\quad \left. \left. + \int_{r_0}^{\infty} dr_{BB} [\Phi'_{BB}(r_{BB})]^2 r_{BB}^2 \varphi(r_{BB}) \right) \right] \end{aligned} \quad (10b)$$

In the first approximation the radial distribution function $\varphi(r_{ij})$ may present a linear dependence [2] as follows:

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} 0 & \text{for } r_{ij} < r_0 \\ \frac{r_{ij} - r_0}{b_{ij} - r_0} & \text{for } r_0 \leq r_{ij} \leq b_{ij} \\ 1 & \text{for } r_{ij} > b_{ij} \end{cases} \quad (i, j = A, B) \quad (11)$$

where [2]: $b_{ij} \cong \varepsilon_{ij}\sigma_{ij}^4/kTr_0^3$, while ε_{ij} and τ_{ij} are the parameters of the Lennard-Jones potential (for repulsive forces):

$$\Phi_{ij}(r_{ij}) = -4\varepsilon_{ij}(\sigma_{ij}/r_{ij})^6 \quad (12)$$

In this case, taking into account the expressions (9) of the relaxation times, the relation (10) can be rewritten as:

$$\begin{aligned} \xi &= 4\pi r_0(24)^2/3kTv \left[N_A \sqrt{m_A/3kT} \varepsilon_{AA}^2 \tau_{AA}^{12} \int_{r_0}^{\infty} dr_{AA} \varphi(r_{AA})/r_{AA}^{12} + \right. \\ &\quad + \varepsilon_{AB}^2 \sigma_{AB}^{12} \int_{r_0}^{\infty} dr_{AB} \varphi(r_{AB})/r_{AB}^{12} (N_A \sqrt{m_A/3kT} + N_B \sqrt{m_B/3kT}) + \\ &\quad \left. + N_B \sqrt{m_B/3kT} \varepsilon_{BB}^2 \sigma_{BB}^{12} \int_{r_0}^{\infty} dr_{BB} \varphi(r_{BB})/r_{BB}^{12} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

Taking into account the Stokes's model (2) and using the relation (11) for $\varphi(r_{ij})$, after an integration with respect to r_{ij} ($i, j = A, B$), one obtains

the following expression for the shear viscosity of the dense binary considered system:

$$\eta = \text{const.} \left[\frac{\sigma_{AB}^8}{k} \frac{N_A \sqrt{M A / T} + N_B \sqrt{M B / T}}{r_0^{10}} + \right. \\ \left. + N_A \sqrt{M A / T} \frac{\epsilon_{AA}}{k} \frac{\sigma_{AA}^8}{r_0^{10}} + N_B \sqrt{M B / T} \frac{\epsilon_{BB}}{k} \frac{\sigma_{BB}^8}{r_0^{10}} \right] \\ (10^{-5} \text{ gr./cm. sec.}) \quad (14)$$

It is interesting to compare our result for the shear viscosity of a binary mixture with the above obtained result [2] for the same transport coefficient of an unicomponent system:

$$\eta' = \text{const.} \left[\epsilon/k \cdot \sigma^8/r_0^{10} \sqrt{\frac{M}{T}} \right] (10^{-5} \text{ gr./cm. sec.}) \quad (15)$$

Our conclusion is that the expression (14) for η has the same form and the same magnitude order as the expression (15) obtained for η' (the shear viscosity of a unicomponent dense system).

Acknowledgements. The author wishes to thank professor dr. doc. M. Drăganu for useful and stimulating discussions.

(Received September 30, 1971)

R E F E R E N C E S

1. Kirkwood, J. G., J Chem Phys, **14** (1946), 180, Fischer, I. Z. Ucr. fiz. J., (U.R.S.S.), **76** (1962), 3
2. Rott, L. A., *K statisticeskoi teorii viazkosti*, in „Primenenie ultraakustiki k issledovaniu vescestva”, Moscova, 1967.
3. Fischer, I. Z., J Fiz. Chim (U.R.S.S.), **36** (1962), 588.
4. Rott, L. A., Ucr. Fiz. J. (U.R.S.S.), **12** (1967), 1.
5. Rott, L. A., *Dokladî na Vsesojuzn. simpoz po kompleks. issled. jidkogo sostorania vescestva NOPI* 1965.

ASUPRA CALCULULUI VÎSCOZITĂȚII DE STRAT A AMESTECURILOR BINARE DENSE

(R e z u m a t)

Plecind de la o formulă de corelare pentru coeficientul de frecare și folosind modelul Stokes, se generalizează expresia coeficientului viscozității de strat la cazul sistemelor binare dense. Pentru a calcula acest coeficient de transport se utilizează o evaluare termică a timpilor de relaxare și o anumită aproximare liniară pentru funcția de distribuție radială. Ca potențial de interacție se consideră potențialul Lennard-Jones.

О ВЫЧИСЛЕНИИ СЛОЕВОЙ ВЯЗКОСТИ ПЛОТНЫХ ДВОЙНЫХ СМЕСЕЙ

(Р е з ю м е)

Исходя из корреляционной формулы для коэффициента трения и используя модель Стокса, автор обобщает выражение слоевой вязкости в случае плотных двойных систем. Для вычисления коэффициента транспорта используется термическая оценка времен релаксации и определённая линейная аппроксимация для функции радиального распределения. В качестве потенциала взаимодействия употребляется потенциал Леннард-Джонса.

NOTE

FIELD-STRENGTH MEASUREMENTS TAKEN IN CLUJ DURING THE PARTIAL SOLAR ECLIPSE OF FEBRUARY 25, 1971

(Preliminary report)

T. I. LÁSZLÓ and G. LAZAR

Despite the fact that the solar eclipses can be considered as ionospheric disturbances the schedule of which is known in advance, the regular cases are rare. Consistent data can be obtained only from a considerable number of simultaneous ionospheric observations.

The study of the response of the *D-region* to the solar eclipse is of a particular interest. This region of the ionosphere is subject to the biggest diurnal variations of the electron concentration N in comparison with the rest of ionospheric regions. Thus, for a height $z_D = 85$ km the relation $N_{\text{day}}/N_{\text{night}}$ is approximative 100, as well as for $z_p = 110$ Km is only 20 and for $z_E = 300$ km is scarcely 2–3 [1]. The above value indicate the greater sensitivity of the D-region to the solar eclipses. On the other part the D-region co-operates by the absorption of the HF and MF electromagnetic waves crossing this region and by the propagation of the LF and VLF waves reflected from it.

Each method of *automatic recording of signal-strength* [2] suffers from difficulties associated with the rapid fading of the signal. By a simple consideration, the fading is caused by the permanent random rotations of the polarization ellipse of the skywave. These rotations are generally attributed to a turbulence and a drift in the electron concentration. As by the interpretation of the recordings only the fading-maximas are significant [3] these difficulties are usually overcome by using an apparatus which integrates the signal amplitude over a time interval long in comparison with the fading period [4]. After integration, the output signal is applied to a pen recorder and the recording represents the mean amplitude over the period of the integration, regardless of the momentary polarization

state of the downcoming wave. The *integrator circuit* is chosen to give the best compromise between the adequate output level from the integrator and the sufficiently long time constant of the integration [5]. Unfortunately the integration period is chosen arbitrarily, from 1—5 [6] to 15—20 [7] seconds, having as upper limit one minute [5]. (The mechanical inertia of

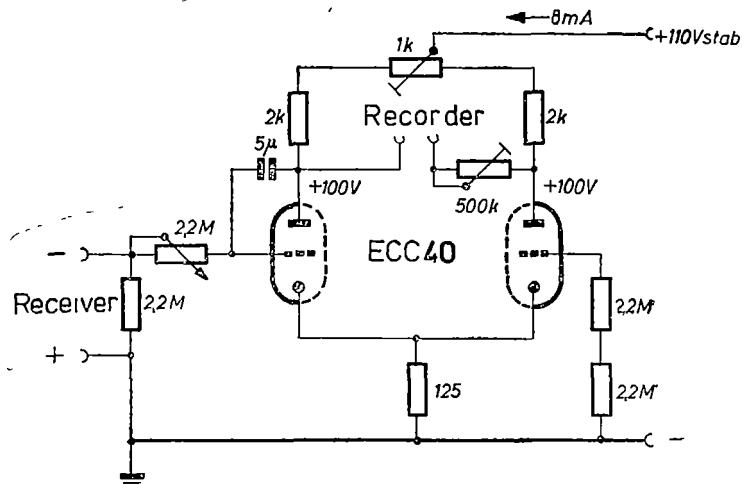


Fig 1 Differential d.c. amplifier with Miller-integrator

a recording pen produces of course an additional averaging effect of the time constant of the electrical system). The reproduction of the fading is conserved by a time constant having 1/16, or less from the value of the fading period [8]. The preferentially used RC-circuits contain great capacitors and furnishes small output signals. For this reason we attempt to use a differential d.c. amplifier provided with a Miller integrator (fig.1).

During the partial solar eclipse of February 25, 1971 the following programme was carried out in the Laboratory of Electronics, the Faculty of Physics on the Cluj University (46 N 45, 23 E37), Romania:

1. field-strength record on 15 060 kc/s;
2. " " 227 kc/s;
3. " " 185 kc/s.

These three paths have been observed by using the radiations from radio transmitters by *reflexion at oblique incidence*.

The equipment used for recording was:

1. a communication receiver connected to a 410 cm long vertical antenna and with disconnected automatic volume control, a recorder provided with a Miller-integrator which is operated by the d.c. voltage obtained from the a.v.c. system [9],

2. an ordinary receiver connected to a short vertical telescopic antenna and with disconnected a.v.c. system, a recorder provided with a simple

F

emisătoarelor la incidentă oblică în vederea studiului comportării regiunii ionosferice D în cazul eclipselor solare. Pentru înlăturarea fadingurilor rapide datorate rotației aleatoare a elipsei de polarizare a undelor spațiale, la unul din receptoare în locul integratoarelor uzuale RC s-a încercat aplicarea unui amplificator diferențial de curent continuu cu integrator Miller.

ИЗМЕРЕНИЯ НАПРЯЖЕННОСТИ ПОЛЯ, ПРОВЕДЕННЫЕ В КЛУЖЕ ВО ВРЕМЯ ЧАСТИЧНОГО СОЛНЕЧНОГО ЗАТМЕНИЯ 25 II 1971 г.

(Резюме)

Авторы провели в Клуже автоматические регистрации поля (46N45, 23E37) на трёх линиях измерения 15,060 мГц/1820 км (London BBC: 51N30, 00E00), 227 кГц/650 км (Warszawa 52 N04, 20E53) и 185 кГц/1000 км ((Deutschlandsender-Oranienburg: 52N48, 13E24). Зарегистрировано изменение напряжённости поля волн радиопередатчиков при косвенной инцидентности для изучения поведения ионосферной области D в случае солнечных затмений. Для устранения быстрых фейнгов, вызываемых случайным вращением поляризационного эллипса пространственных волн, у одного из приемников вместо обычных интеграторов RC авторы пытались применить дифференциальный усилитель постоянного тока с интегратором Миллера.

IN MEMORIAM

VICTOR MARIAN

Victor Marian, eminent profesor al Universității din Cluj, s-a stins din viață în ziua de 19 aprilie 1971.

Născut la Beldiu, jud. Alba, la 26 februarie 1896, a urmat școala primară (1902–1906) la Aiud și Blaj. Cursurile liceale le-a făcut la Blaj (1906–1914). La terminarea liceului se înscrise la Universitatea din București pe care o părăsește în 1915, din cauza războiului. Îa parte la primul război mondial și în anul 1920 își reia studiile la Facultatea de matematică-fizică a Universității din Cluj, funcționând în același timp ca preparator și asistent suplinitor la Institutul de fizică generală experimentală. În anul 1923 termină studiile universitare și își trece examenul de capacitate pentru învățămîntul secundar. Este însă numit la Universitatea din Cluj, unde își desfășoară activitatea pînă la sfîrșitul vieții. În anul 1932 pleacă în Franța, ca bursier la Universitatea din Strasbourg, unde sub conducerea profesorului P. Wiess elaboră teza de doctorat cu titlul *Punctele lui Curie feromagnetice și saturarea absolută a cîtorva aliaje de nichel*, obținind titlul de doctor în anul 1936. Revine la Facultatea de științe din Cluj, pe post de șef de lucrări, apoi conferențiar, profesor și profesor șef de catedră, pînă la pensionarea sa în anul 1966. După pensionare rămîne profesor consultant și continuă să lucreze zî de zî la catedră pînă la sfîrșitul vieții.

Victor Marian a depus o bogată activitate ca profesor, cercetător experimentator și ca istoriograf al științelor matematice și fizice. Ca profesor a ținut cursuri de fizică experimentală și de istoria fizicii și matematicii. Lecțiile profesorului Marian au rămas adînc întipărite în mintea studenților săi, datorită conținutului lor bogat, datorită măiestriei sale de a predă. Nu a precupețit nimic: nici muncă, nici timp și nici sănătate pentru a pune la dispoziția studenților bibliografia esențială, culeasă cu migălă din cele mai cunoscute trătate ale vremii,



sistematizată și expusă cu cea mai mare claritate. Datorită muncii sale, a perseverenței, el a elaborat, bătut la mașină, litografiat sau tipărit culegeri de probleme de mecanică, lucrări de laborator, cursuri de fizică, cursuri de istoria fizicii și altele.

Ca experimentator foarte priceput, V. Marian se impune pe plan național și mondial prin lucrările din domeniul magnetismului, publicate în reviste de mare circulație, ca „Annales Physique”, „Journal de Physique et de Radium”, etc. Ca urmare a acestor cercetări creează la Universitatea din Cluj o adevărată școală în domeniul magnetismului și este mereu citat în celebre trate contemporane de magnetism. În calitate de conducător de doctoranți a format cercetători care ocupă astăzi locuri de frunte în știința românească.

Om de rară erudiție, cunoșcător a 7 limbi, munind din zori pînă în seară, a citit în original pe cei mai mari savanți (Euclid, Galilei, Newton, Huygens, Laplace, Pascal, etc.) și-a studiat și comentat cu migală, le-a comparat ideile cu ale contemporanilor lor și ale urmașilor și a pus prima dată în fața cititorilor din România opere nemuritoare ca *Eлементele* lui Euclid, *Principiile matematice ale filozofiei naturale* și *Optica* ale marelui Isaac Newton, *Dialoguri asupra științelor noi* ale lui Galilei. A lăsat gata pentru tipar *Opera fizică și matematică* a lui Pascal, *Din corespondența lui Isaac Newton, Antologia Fizicii, Istoria matematicii și fizicii în sec XIX–XX, Dialog asupra celor două sisteme maxime ale lumii* (traducere din G. Galilei), un manuscris de peste 1700 de pagini din istoria fizicii și numeroase articole. Un virtuos al editării, a avut răbdarea să scoată și să scuture de colbul vremii și al uitării, descoperind și interpretind, prețioase documente de cultură, de matematică și fizică românească, manuscrise inedite, facsimile, colejate și tipărituri vechi, care pun în valoare adevăruri și fapte necunoscute nu numai de marele public dar și de specialiști în istoria științelor. Dintre lucrările de istoria științei românești și străine, amintim *Aritmetica matematică românească, geometria și trigonometria cea dreaptă* (G. h. L. a z à r), *Aritmetica* lui Grigore Orhenevici, prima *Trigonometrie* din Transilvania a lui Iacob Gooden (1737), *Aritmetica* lui Șincai, manuscrisele de geometrie, fizică și astronomie a lui J. H. Bisterfeld, etc.

Ca o înaltă apreciere a bogătiei și valoroasei sale activități a fost distins cu Ordinul Muncii și titlul de Profesor Emerit.

Figura luminoasă a profesorului, experimentatorului și neobositului cercetător al ineditului, o omului de o rară erudiție, bun și drept, rămîne un strălucitor exemplu în memoria tuturor celor care l-au cunoscut.

CRONICĂ

I. Participări la manifestări științifice internaționale

29 martie — 6 aprilie 1971 Arbeitsgemeinschaft Magnetismus, Salzburg — Austria A participat prof dr. Iuliu Pop. S-a prezentat comunicarea *Comportarea magnetica a unor aliaje de Ni—Cu cu Au, Zn, Si, Mn.*

5—9 iulie 1971 Al III-lea Congres Internațional de Creșteri de Monocristale, Marsilia-Franța Au participat asist P. Stețiu, cercet Al. Darabant

18—26 august 1971 7th International Congress on Acoustics, Budapest — Ungaria Au participat: conf D. Auslander, asist. I. Macavei, biolog E. Veress, asist E. Galiger, asist. C. Stețiu S-au prezentat comunicările: 1. D. Auslander, I. Lenart, I. Rus, L. Mirza *L'action des ultrasons sur le processus de cristallisation;* 2. D. Auslander, L. Onițiu, *La vitesse moléculaire dell'ultrason dans quelques liquides associés;* 3. D. Auslander, C. Serban, I. Macavei, *Mesures ultrasoniques dans les solutions aqueuses et organiques de LiCl*

24—31 august 1971 Fourth International Symposium on Magnetic Resonance Weizmann Institute of Science, Rehovot-Jerusalem, Israel A participat: conf dr Al. Nicula S-a prezentat comunicarea S. I. Farkas, Al. Darabant, Al Nicula, ESR of NaCl—Cu²⁺ System.

2—13 septembrie 1971. Ampère International Summer School II· Pulsed Magnetic and Optical Resonance Basko Pohe, Jugoslavia. Au participat: lector I. Barbu și asist D. Popescu, cercet L. Giurgiu, cercet V. Militaru

6—16 septembrie 1971 A IV-a Conferință Internațională asupra folosirii energiei atomice în scopuri pașnice, Geneva A participat prof dr doc V. Mercea.

II. Participări la manifestări științifice din țară

15—16 mai 1971. Simpozion organizat de Societatea de Științe Fizice și Chimice din R.S.R., Filiala Cluj, Univ. Babeș-Bolyai Cluj și Institutul de Izotopi Stabili Cluj, cu titlul „Probleme actuale în fizica atomului și a moleculei” Au prezentat referate și comunicări:

- 1 Prof. V. Mercea, *Interesul actual al cercetărilor din fizica atomului și a moleculei.*
 - 2 Conf. F. Koch, *Procese de extincție la scintilatori lichizi folosiți în spectrometria nucleară.*
 - 3 Prof. Al. Bădi, *Studiul structurii moleculelor cu ajutorul microundelor*
 - 4 Conf. Al. Nicula, *Studiul atomilor și moleculelor cu ajutorul rezonanței magnetice*
 - 5 Lect. Gh. Cristea, *Relaxarea spin-rea în prezența efectului de „bottleneck.”*
 - 6 Lect. V. Zamirovski, *Efecte izotopice de solvent ale apei*
 - 7 Prof. Iuliu Pop, *Deplasarea Knight în metale*
 - 8 Asist. Ana Farkas, *Efecte izotopice în apa hidratată*
 - 9 Prof. H. Tîntea, *Studiul atomilor și moleculelor cu ajutorul spectroscopiei optice*
- 15 mai 1971. Sesiunea de comunicări științifice a Institutului Pedagogic de 3 ani Tîrgu-Mureș Au prezentat comunicări:

1. Lect. Gh Cristea, *Efectul de „bottleneck” în relaxarea prin proces direct a ionilor Ce³⁺ și Na³⁺ în LMN.*
2. Lect I. Barbur, *Rezonanță electronică de spin în ferroelectrice iradiate*
3. Lect. Emilia Constantîn, *Observații privind dependența de temperatură a scăderii de permittivitate în cîmp ultrasonic.*
- 28–30 mai 1971 A VII-a sesiune de comunicări științifice a Institutului Pedagogic Oradea Au prezentat comunicări
 - 1 Conf dr. Francisc Koch, *Utilizarea unor scintilatori lichizi în spectroscopia nucleară*
 2. Prof dr Iuliu Pop, asist. Eva Galiger, *Proprietăți magnetice ale aliajelor Mg–Gd*
 - 3 Prof dr. Iuliu Pop, lect Stefan Vădeanu, *Unele proprietăți magnetice ale aliajelor Ni, Si, Ge*
 - 4 Prof dr Iuliu Pop, ing T Cherebetiu, *Proprietăți magnetice ale aliajelor Fe–V'*
 - 5 Asist Carmen Șteiu, *Viteza de propagare a ultrasunetelor în alcool și amestecuri*
 - 6 Conf dr Al Nicula, *Studiul structurii sitelor moleculare cu ajutorul rezonanței magnetice.*
 - 7 Asist. V. Niculescu, prof. dr. Iuliu Pop, lect Ioan Cosma, prof Mihai Rosenberg, RMN și susceptibilitate la soluții solide Cu–Pd, Cu–Ni și Cu–Ni–Si
 - 8 Conf dr F Kelemen, asist A Néda, *Un calorimetru adiabatic în urmă*
 - 9 Lect Gh Cristea, *Efectul de „bottleneck” în relaxarea Orbach a ionilor Md³⁺ în LMN*
 - 10 Lect Ion Barbur, *Studiul RES al efectelor ferroelectrice în compuși iradiati.*

III. Ședințe de comunicări

9–10 aprilie 1971 Sesiunea anuală de comunicări a corpului didactic de la Facultatea de Fizică a Univ. Babeș-Bolyai, închinată aniversării semicentenarului Partidului Comunist Român S-au prezentat următoarele comunicări

1. Prof Victor Mercea, fizician princ Ioan Mastan, *Asupra cinematici reacțiilor ion-moleculară în spectrometrele de masă*

2. Conf Francisc Koch, *Izotopii hidrogenului la scintilatorii lichizi.*
3. Lect Vladimir Znamirovski, asist. stag Oanuc Cozar, conf. Alexandru Nicula, *Studiul RES al unor efecte izotopice de solvent la ionul Cu (II)*
- 4 Lect Elena Fodor, *Schimb izotopic la H–alcool.*
- 5 Asist Anna Farkas, *Efecte izotopice la hidratarea sărurilor diamagnetice*
6. Cercetător șt Sorin Farcaș, conf. Alexandru Nicula, *Centri paramagnetică în halogenuri alcalone impurificate cu Cu²⁺*
- 7 Cercetător Alexandru Darabont, cercetător Petru Fitor, conf Alexandru Nicula, *Cercetarea monocristalelor de halogenuri alcalone impurificate cu ioni paramagnetic*
- 8 Cercetător Eleonoră Trif, doctorand Lavinia Cociu, conf Al. Nicula, *Forma liniei de absorbție paramagnetică a ionului Cu(II) și Cr(III) în zeoliți*
9. Lect Francisc Puskas, *Studiul proprietăților de suprafață cu ajutorul efectului Seebeck la ZnO polocristalin.*
- 10 Șef lucrări Liviu Stănescu, fizician Ion Ardeleanu, *Studiul structural, electric și magnetic al unor sisteme oxidice conținând ioni de vanadu tetravalent*
- 11 Conf. Adrian Moțiu, șef lucrări Liviu Stănescu, lect. Simion Gocan, fizician Ion Ardeleanu, *Studiul structural al sistemului semiconducтор NiO–CoO–CuO*
- 12 Șef lucrări Liviu Stănescu, lect. Simion Gocan, fizician Ion Ardeleanu, conf Adrian Moțiu, *Studiul unor proprietăți electrice a sistemului semiconducțior NiO–CoO–CuO*
13. Lect. Gheorghe Cristea, *Teoria microscopică a fenomenului de „bottleneck” pentru procesul de relaxare Orbach.*
14. Lect Ioan Barbur, *Rezonanță electronică de spin a defectelor gamma în ferroelectricul NH₄HSO₄*
- 15 Biolog Eva Veres, conf Dezideriu Auslander, *Acfunea ultrasunetului asupra germinației unor semințe.*
- 16 Conf Dezideriu Auslander, asist. Corina Șerban, asist Ioana Macavei, *Măsurători acustice în soluții apoase și organice de LiCl*

17. Conf. Dezideriu Auslander, asist. Ileana Lenart, asist Elena Rus, *Emulsionarea ultrasonică și aplicațiile industriale.*
- 18 Lect. Petre Poginceanu, metodician, *Structura, gradul și eficiența treptelor de pregătire în facultate a studentului fizician actualitate științifică, nivel, extindere și profunzime de cunoștințe fizicale, metode, rezultate finale*
19. Lect. Petru Cioară, prof. inv mediu Iuliu Berindeanu, ing Eugen Pascu, *Micromanometru diferențial de înaltă sensibilitate ($p = 10^{-6}$ torr)*
20. Asist. Traian Iliescu, *Efectul Spolski. Spectrele de cuasihunii*
21. Conf. Frideric Kelemen, asist. Árpád Néda, *Efectul absorbtiei de oxigen în cupru.*
22. Prof. Iuliu Pop, asist Vasile Niculescu, *Unele proprietăți magnetice și deplasarea Knight în compuși pseudobinari de tipul CeGdx_{1-x}Al₃*
- 23 Prof Iuliu Pop, prof Mihai Rosenberg, asist. V. Niculescu, *Aspecte ale comportării magnetice și rezonanței nucleare în compusul Ce_{0,98}La_{0,01}Al₃.*
24. Asist. Gheorghe Ilonca, *Comportarea magnetică a aliajului Mn₃GeAl.*
25. Prof Zoltán Gábos, *Polarizarea particulelor cu spin arbitrar*
- 26 Conf Mircea Vasiu, *Unele probleme ale teoriei instabilității magnetohidrodinamice a unor modele de plasma*
- 27 Lect Maria Cristea, *Rezonanța ciclotronică într-o plasma slab ionizată*
28. Asist. Vasile Niculescu, prof Iuliu Pop, prof. Mihai Rosenberg, *Rezonanța magnetică nucleară în compusul paramagnetic CeAl.*
29. Prof. Iuliu Pop, asist Vasile Niculescu, prof M. Rosenberg, *Deplasarea Knight și susceptibilitatea magnetică în compuși CeAl₂, CeAl₃, CeAl₄*
- 30 Asist. Vasile Niculescu, prof. Iuliu Pop, prof. M Rosenberg, *Înfluența elementelor slabe paramagnetic asupra rezonanței nucleare a compusului CeAl₂*
31. Cercet șt. Mircea Crișan, *Susceptibilitatea magnetică statică pentru modelul „s-d”.*
32. Cercet șt. Mircea Crișan, *Efectul Kondo ca tranziție de fază*
- 33 Cercet șt Gheorghe Gavril Pop, *Generarea de armonice într-un semiconducator nedegenerat.*
- 34 Cercet șt. Speranța Coldea, *O deducere a formulei de corelare pentru viscozitatea de volum.*
- 12 iunie 1971. Sustinerea publică a tezei de doctorat de către lector Gheorghe Cristea, cu titlul *Studiul efectului de „bottleneck” în relaxarea spin-rețea a ionului Nd³⁺ și Ce³⁺ în LMN la temperaturi joase.* Conducător științific prof dr. doc Ioan Ursu.
- IV. Vizite**
- 20 aprilie 1971 Prof dr S Gelman, Univ Colorado-SUA A prezentat comunicarea *Teoria ciocnirilor dintre electroni și atomi.*
- 11 mai 1971 Prof J Turkevich, Univ. Princeton - SUA.
- 18 mai 1971 Dr Neil Heiman, College of William and Mary, Williamsburg, Virginia - SUA A prezentat comunicarea *Mossbauer Studies of External Perturbations to Crystals.*
- 11 iunie 1971 Prof dr. de Stanley Pickart, SUA A prezentat referatul *Tendințe actuale în SUA în cercetările de difracție a neutronilor.*
- 15 iunie 1971 Prof. dr. V. Safarov, Institutul de Fizică Tehnică din Leningrad - URSS A prezentat comunicarea, *The orientation of Electron Spins and Interband Optical Transitions in Semiconductors.*
- sept 1970 - iunie 1971. Conf dr Emil Tătaru Vizită de documentare și specializare la Universitatea din California, Departamentul de Fizică, Berkeley - California.



Intreprinderea Poligrafică Cluj 682/1971



In cel de al XVII-lea an de apariție (1972) *Studia Universitatis Babeș–Bolyai* cuprinde seriile:

matematică—mecanică (2 fascicule);
fizică (2 fascicule);
chimie (2 fascicule);
geologie—mineralogie (2 fascicule);
geografie (2 fascicule);
biologie (2 fascicule);
filozofie;
sociologie;
științe economice (2 fascicule);
psihologie—pedagogie;
științe juridice;
istorie (2 fascicule);
lingvistică—literatură (2 fascicule).

На XVII году издания (1972) *Studia Universitatis Babeș–Bolyai* выходит следующими сериями:

математика—механика (2 выпуска);
физика (2 выпуска);
химия (2 выпуска);
геология—минералогия (2 выпуска);
география (2 выпуска);
биология (2 выпуска);
философия;
социология;
экономические науки (2 выпуска);
психология—педагогика;
юридические науки;
история (2 выпуска);
языкознание—литературоведение (2 выпуска).

Dans leur XVII-me année de publication (1972) les *Studia Universitatis Babeș–Bolyai* comportent les séries suivantes:

mathématiques—mécanique (2 fascicules);
physique (2 fascicules);
chimie (2 fascicules);
géologie-minéralogie (2 fascicules);
géographie (2 fascicules);
biologie (2 fascicules);
philosophie;
sociologie;
sciences économiques (2 fascicules);
psychologie—pédagogie;
sciences juridiques;
histoire (2 fascicules);
linguistique—littérature (2 fascicules).

43904